Лекция 13

Эвристические алгоритмы

План лекции

- Эвристические алгоритмы
- Жадные эвристики для задачи коммивояжёра
- Локальный поиск
  - Общий принцип
  - Варианты лок.поиска для ЗК и ВП
  - Алгоритм Метрополиса и имитация отжига
- Задание 7

Эвристические алгоритмы

Эвристический алгоритм — это алгоритм решения задачи, правильность которого для всех возможных случаев не доказана, но про который известно, что он даёт достаточно хорошее решение в большинстве случаев. (Википедия)

Иногда термин «эвристика» используется также для обозначения методов ускорения заведомо точных методов (например, полного перебора).

Наиболее частые эвристики:

- Жадный алгоритм
- Ограниченный перебор только перспективных вариантов
- Последовательное улучшение («локальный поиск»)
  - В т.ч. в сочетании с вероятностным выбором

Жадные алгоритмы

Жадный алгоритм — однопроходный итерационный алгоритм. Строит решение, добавляя на каждом шаге к текущему *частичному* решению новый элемент. Добавляемый элемент выбирается на основе локального оптимума («наилучший на текущем шаге»).

Жадные алгоритмы:

- Дают точное решение для задач на матроидах (с аддитивной целевой функцией)
- Для некоторых задач дают приближённое решение с гарантированной (не обязательно константной) оценкой приближения
- В общем случае используются как эвристики

Рассмотрим жадные эвристики для «Задачи коммивояжёра».

Жадные алгоритмы для ЗК

Метод ближайшего соседа

Последовательно строим маршрут, переходя из каждой вершины в ближайшую к ней новую вершину.

1. Выберем стартовую вершину (случайно или фиксированно).
2. Из текущей вершины переходим в ближайшую к ней ещё не посещённую вершину.
3. Если прошли по всем вершинам, то возвращаемся в стартовую, иначе — goto 2.

Временная сложность: O(n^2)

Обычная стоимость полученного решения: на 25% выше оптимального (т. е. R = 1.25)

Жадные алгоритмы для ЗК

Жадный выбор рёбер

Добавляем в цикл самое дешёвое из допустимых рёбер. Ребро допустимо, если при его добавлении к маршруту

- Не образуется цикл меньше чем из n вершин.
- Степень вершины в маршруте не становится > 2.

1. Упорядочить рёбра по неубыванию стоимостей.
2. Последовательно по порядку (п.1) перебираем рёбра.
3. Если ребро допустимо — добавляем его в цикл, иначе - пропускаем.

Временная сложность: $O(n^2 \log n)$

Обычная стоимость полученного решения: на 15-20% выше оптимального.

Жадные алгоритмы для ЗК

Жадные вставки

Последовательно вставляем в частичное решение (путь, цикл) новые вершины.

1. Построить начальный путь (ребро минимальной стоимости) или цикл («треугольник» минимальной стоимости).
2. Пока в решение входят не все вершины:
   - 2.1. Выбрать новую вершину — ближайшую к какой-либо вершине цикла/пути
   - 2.2. Выбрать пару смежных (в цикле/пути) вершин, между которыми лучше всего вставить новую вершину.
   - 2.3. Вставить новую вершину

Временная сложность: $O(n^2)$

Обычная стоимость полученного решения: на 25% выше оптимального.

Локальный поиск

Локальный поиск — итерационный метод (*метаэвристика*), при котором выбирается начальное решение и постепенно улучшается до тех пор, пока улучшения возможны. Варианты улучшения строятся с помощью семейства преобразований $F = \{f\}$, $f : S(x) \rightarrow S(x)$.

Множество $N(s) = \{s' = f(s) : f \in F\}$ называется *окрестностью* допустимого решения s.

Идея локального поиска: строим начальное решение и последовательно его улучшаем, выбирая новое решение из окрестности текущего. Когда улучшение невозможно — останавливаемся. Текущее решение — *локальный оптимум*.

Достоинства:

- Универсальность. Общая схема, легко обобщающаяся на различные, в т.ч. новые, оптимизационные задачи.
- Алгоритм с *отсечением по времени* (*anytime* algorithm). Быстро находит допустимое решение, а потом использует всё имеющееся время для его улучшения.

Локальный поиск

Общая схема (для задачи минимизации)

1. Выбрать $s \in S(x)$.
2. Среди $\{s' = f(s) : f \in F\}$ найти $s' : s' \in S(x)$ и $c(s') < c(s)$
   - Если найдено, то s := s'; перейти к п. 2
   - Иначе — остановиться и вернуть текущее s как решение

Для п.2 есть два варианта реализации:

(a) выбрать первое подходящее s'

(b) выбрать наилучшее s' (с наименьшей стоимостью).

Исследования показывают, что обычно варианты (a) и (b) примерно равны по качеству получаемого решения, при этом (a) работает быстрее.

На скорость и качество решения влияет также размер окрестности (чем меньше — тем выше скорость, но ниже качество).

Локальный поиск для ЗК

Рассмотрим симметричную ЗК. Допустимые решения: S(x) = множество гамильтоновых циклов на заданном графе.

Транспозиции

В качестве преобразований $F = \{f\}$ рассматриваются транспозиции элементов в последовательности вершин гамильтонова цикла.

Например, для s = (1,2,3,4,5,6,7) окрестность будет содержать циклы: (1,2,4,3,5,6,7), (5,2,3,4,1,6,7) и (1,7,3,4,5,6,2).

Всего $n(n-1)/2 = O(n^2)$ соседей.

Локальный поиск для ЗК

Пусть c_{max} и c_{ave} — соответственно максимальная и средняя стоимость гамильтонова цикла.

Пусть K — константа, такая что $c_{max} < K\, c_{ave}$.

<u>Теорема</u> (Gover, 1992). Локальный поиск на основе транспозиций, начиная со случайного гамильтонова цикла, достигает локального оптимума за время $O(nK)$

Аналогичное утверждение справедливо для локального поиска для задачи о разбиении. Окрестность допустимого решения состоит из всех вариантов, получаемых инверсией (переносом в другое подмножество) любого элемента.

Локальный поиск для ЗК

Эвристика k-opt (k-обмен)

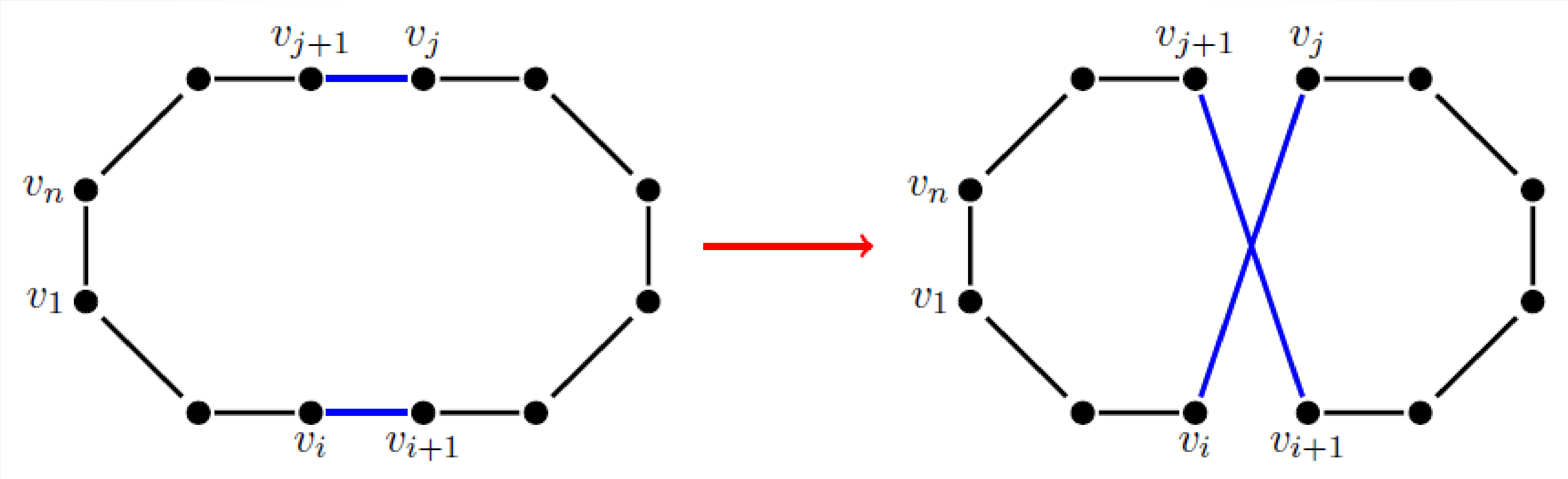
В качестве преобразований $F = \{f\}$ рассматриваются преобразования такого вида:

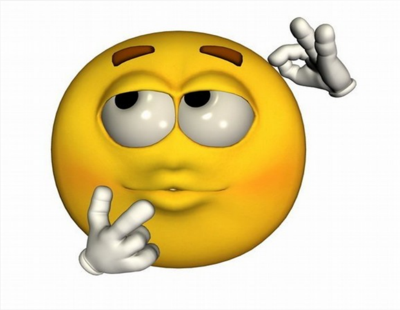
1) В текущем цикле выбрать k несмежных рёбер
2) Удалить выбранные рёбра из цикла
3) Концы рёбер соединить попарно другим способом.

Чаще всего используется 2-opt или 3-opt.

Локальный поиск для ЗК

Пример преобразования 2-opt





Как удобнее реализовать такое преобразование в программе?

Локальный поиск для VC

Алгоритм локального поиска для задачи о минимальном вершинном покрытии (Vertex Cover, VC).

Основные шаги:

1. Построить начальное решение. Например, с помощью жадного алгоритма.

2. Итерационно улучшать текущее решение, пока не будет достигнут локальный оптимум.

Локальный поиск для VC

Начальное решение построим жадным алгоритмом.

Жадный алгоритм для задачи «Вершинное покрытие»

1. $U := \varnothing$
2. Пока U не покрывает все e$\in E$:
   - Выбрать $v \in V \setminus U$, покрывающее наибольшее число ещё не покрытых элементов из E
   - U := U $\cup$ {v}

Локальный поиск для VC

Как выбрать окрестность текущего решения U?

Логичный вариант: включить в $N(U)$ покрытия, отличающиеся от U добавлением или удалением одной вершины (вариант — не более чем k вершин).

Локальный поиск для VC

Итерационное улучшение текущего решения U:

1. Пока возможны улучшения текущего решения:

   1.1. Выбрать $U' \in N(U)$.

   1.2. Если U' — покрытие и $|U'| < |U|$, то $U := U'$.

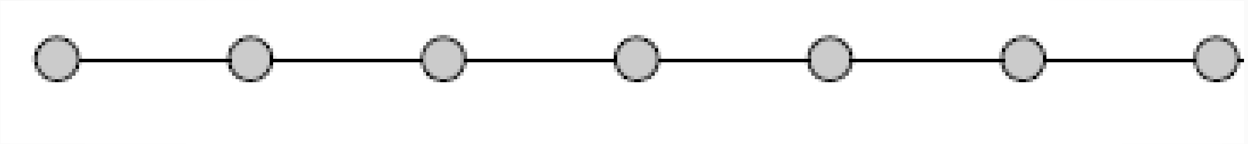
2. Вернуть U.

Такой вариант локального поиска может «двигаться» только в сторону улучшения и называется *градиентным спуском*.

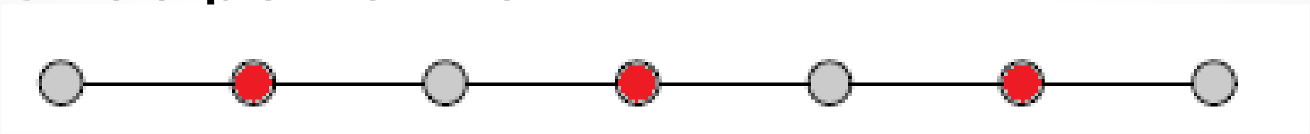
Локальный поиск для VC

Недостаток: может скатываться в локальные минимумы даже на простых ситуациях.

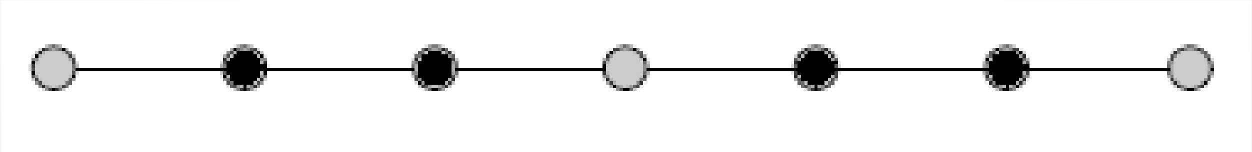
Граф:



Оптимальное решение:

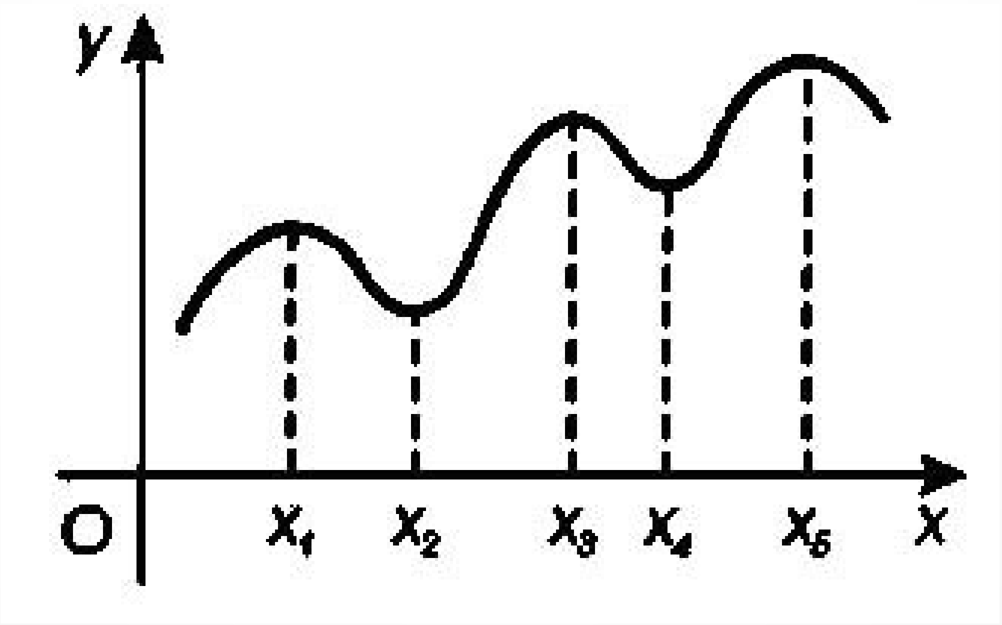


Локальный минимум:



Эвристические алгоритмы

Недостатки «жадных» алгоритмов и локального поиска: они могут «скатиться» в локальный оптимум.



Эвристические алгоритмы

Выход - разрешить алгоритму переходить к решению с худшей стоимостью, чем текущее решение.

- Детерминированный выбор — выбираем наилучшего соседа, даже если он хуже, чем текущий вариант.
- Добавляем в процедуру случайные шаги.

Эвристические алгоритмы

При детерминированном выборе логичным будет в качестве следующего значения s выбирать наилучшее по стоимости s' из *N*(s). Даже если c(s') > c(s) (для задачи минимизации).

Проблема: такой алгоритм может зацикливаться.

Решение: *поиск с запретами* (tabu search).

Эвристические алгоритмы

Поиск с запретами

Исключить (или уменьшить вероятность) зацикливания, запретив

- повторно переходить к s, в котором недавно были, либо
- повторно выполнять преобразования *f*, которые недавно выполнялись

Для реализации нужен список запретов (tabu list), содержащий *k* последних решениий или преобразований. Размер списка (*k*) обычно определяется эмпирически.

Эвристические алгоритмы

```
TabuSearch:
T := []
s := InitialSolution(x)
while (условие продолжения поиска):
        s' := наилучший из N(s) \ T
        Добавить s' в T
        s := s'
```

Эвристические алгоритмы

Случайный поиск

Варианты случайного локального поиска:

- Случайный выбор начального варианта
- Случайный (рандомизированный) выбор элемента из окрестности

Эвристические алгоритмы

Случайный выбор начального варианта

Начальный вариант (который будет потом итерационно улучшаться) выбираем с помощью случайного алгоритма.

```
RandomizedLocalSearch:
Record = NULL
for i=1 to IterCount:
    s := RandomSolution(x)
    s' := LocalSearch(s)
    if c(s') < c(Record)
      Record := s'
```

Эвристические алгоритмы

<u>Случайный выбор элемента из окрестности</u>

Для каждого $s' \in N(s)$ вероятность выбора зависит от $c(s')$.

Т.е. лучшие варианты выбираются из $N(s)$ с большей вероятностью, но и (локально) менее предпочтительные (но способные привести к глобальному оптимуму) варианты также могут быть выбраны с ненулевой вероятностью.

Алгоритм Метрополиса

Один из популярных вариантов — алгоритм Метрополиса.

Идея: разрешаем алгоритму ухудшать текущее состояние, но с вероятностью, зависящей от качества решения.

Метафора: переход физической стохастической системы из одного состояния в другое. Такая система «стремится» перейти в состояние минимальной потенциальной энергии.

Алгоритм Метрополиса

Вероятность перехода из состояния s в состояние s′:

$e^{-\Delta c/(kT)}$, где $\Delta c = c(s') - c(s)$

Параметры алгоритма: константы *k* и *T* («температура»).

Один шаг алгоритма Метрополиса:

1. Пусть s — текущее состояние.

   Случайно выбрать *s*' $\in$ N(s).

2. Если c(s') $\leq$ c(s), то s := s'.
3. Иначе: обновить s (s := s') с вероятностью $e^{-\Delta c/(kT)}$
4. При необходимости, обновить ***рекорд***.

Алгоритм Метрополиса

Теорема.

Пусть $f_s(t)$ -доля первых t шагов, в течение которых система пребывает в состоянии s. Тогда предел $f_s(t)$ при $t \to \infty$ с вероятностью 1 равен $\frac{1}{Z} \cdot e^{-c(s)/(kT)}$.

Здесь $Z = \sum_{s \in S(x)} e^{-c(s)/(kT)}$

Т.е. алгоритм «стремится» чаще переходить в состояния с небольшой стоимостью («энергией»).

Алгоритм Метрополиса

Проблема алгоритма Метрополиса: в состояниях, близких к оптимальному (текущее покрытие содержит мало вершин), большинство соседних состояний $s' \in N(s)$ ухудшают стоимость решения. Но алгоритм будет переходить в такие состояния с достаточно большой вероятностью (потому что их много).

Решение: по мере приближения к оптимуму (=с течением времени) снижать вероятность перехода в ухудшающие состояния. Эта вероятность определяется «температурой» - параметром T.

Имитация отжига

Алгоритм имитации отжига (simulated annealing)

1. Установим начальное значение T.
2. Выполняем алгоритм Метрополиса, на каждом шаге уменьшая температуру T в соответствии с *планом охлаждения*. Например: T := αT , где α – заданный коэффициент, $\alpha<1$.

Выполнение завершается после заданного количества итераций.

Задание 7

Реализовать алгоритм имитации отжига для задачи «Вершинное покрытие».

Параметры — как для задания 2, плюс — параметры метода. Параметры метода задаются в виде текстового файла с 3 строками:

1) Начальная температура T (вещественное число).

2) Коэффициент α (вещественное число).

3) Количество итераций (целое число).

Параметр *k* положить равным 1.

Программа должна выдавать в консоль трассировочные сообщения: каждые 100 итераций — номер итерации и стоимость текущего (не обязательно рекордного) значения.