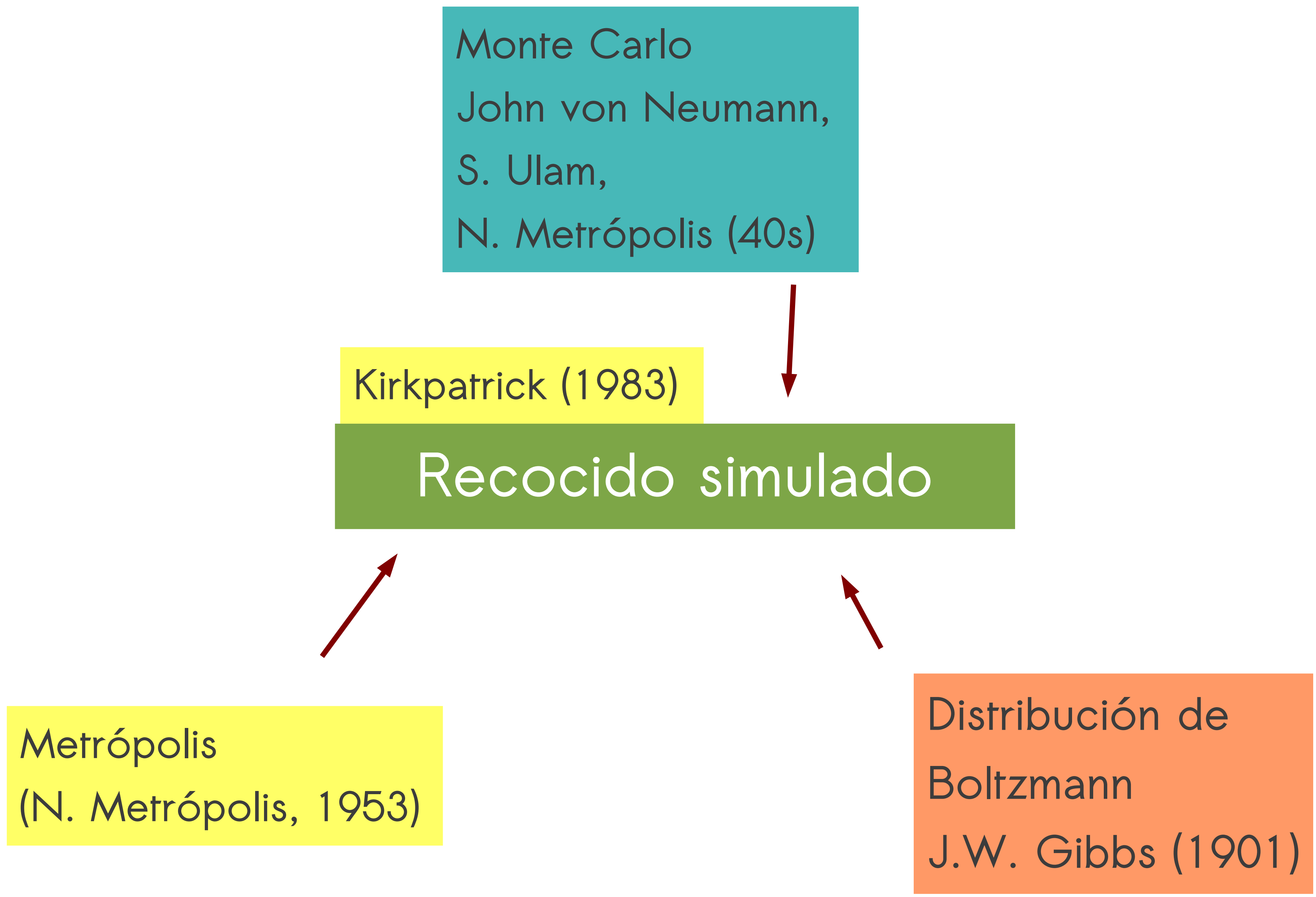
Inteligencia Computacional

Recocido simulado

☆

http://blancavg.com/tc3023/

Blanca A. Vargas Govea * vargasgovea@itesm.mx * Agosto 28, 2012


Monte Carlo
John von Neumann,
S. Ulam,
N. Metrópolis (40s)
Kirkpatrick (1983)
Recocido simulado
Metrópolis
(N. Metrópolis, 1953)
Distribución de
Boltzmann
J.W. Gibbs (1901)

Métodos basados en muestreo aleatorio

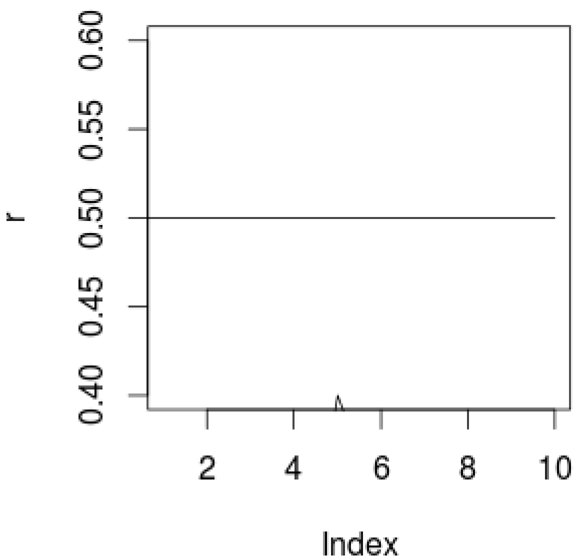
- Suele utilizarse en simulaciones.
- Se genera un gran número de intentos
- aleatorios.
- La información se obtiene tabulando los
- resultados.

Monte Carlo

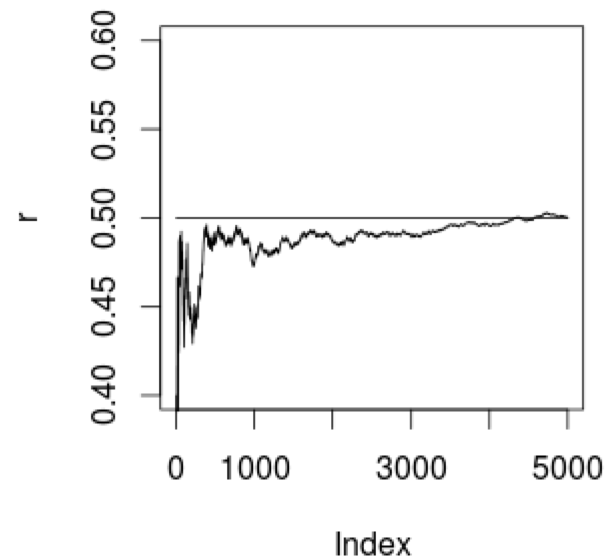
Lanzamiento de una moneda

- Se lanza la moneda un gran número de veces
- Se guarda la información de cada lanzamiento (si cayó en cara/cruz)
- La probabilidad de caer cara o cruz se calcularía por las veces que cayó cara o cruz dividida entre el número de lanzamientos

Lanzamiento de una moneda




```
      x s       r
 [1,] 0 0 0.00000
 [2,] 0 0 0.00000
 [3,] 1 1 0.33333
 [4,] 0 1 0.25000
 [5,] 1 2 0.40000
 [6,] 0 2 0.33333
 [7,] 0 2 0.28571
 [8,] 0 2 0.25000
 [9,] 1 3 0.33333
[10,] 0 3 0.30000
```



n = 10

ver ejemplo

n = 5000

Simulación Monte Carlo

Lanzamiento de una moneda

Las simulaciones Monte Carlo usan movimientos aleatorios para explorar en le espacio de búsqueda y buscar alguna información sobre el espacio.

Movimientos aleatorios

Simulación

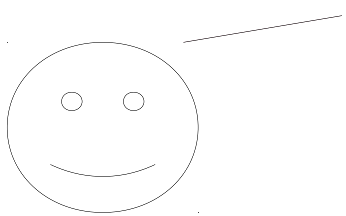
Monte Carlo

Búsqueda de información

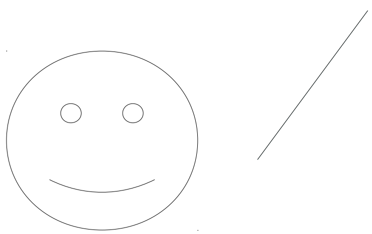
Simulación Monte Carlo

Lanzamiento de una moneda

En una simulación Monte Carlo simple, todos los movimientos aleatorios son aceptados de tal manera que una diferente región del espacio de búsqueda se muestree paso a paso.



¿Cómo se ve esto en el ejemplo de la moneda?



¿En qué consiste un método Monte Carlo simple?

Simulación Monte Carlo

Algoritmo de Metrópolis

☆

En 1953 Nicolás Metrópolis propuso un nuevo método de muestreo que incorpora la temperatura del sistema.

En contraste con la simulación de Monte Carlo, un nuevo punto es muestreado haciendo un ligero cambio al punto actual.

Algoritmo de Metrópolis

Dado un estado i con energía E_i,

genera un nuevo estado j mediante un mecanismo de perturbación (pequeña distorsión del estado i).

calcula la energía del nuevo estado E_j.

si $(E_j - E_i) \leq 0$

entonces acepta el estado j como estado nuevo

sino, acepta el estado con probabilidad: $exp(\frac{E_i - E_j}{k_B \cdot T})$

k_B — Constante de Boltzmann

T — Temperatura

Simula la forma en que se visitan los estados en el proceso termodinámico.

Algoritmo de Metrópolis

Dado un estado i con energía E_i,

genera un nuevo estado j mediante un mecanismo de perturbación (pequeña distorsión del estado i).

calcula la energía del nuevo estado E_j.

si $(E_j - E_i) \leq 0$

entonces acepta el estado j como estado nuevo

sino, acepta el estado con probabilidad: $exp(\frac{E_i - E_j}{k_B \cdot T})$

k_B — Constante de Boltzmann

T — Temperatura

Si se realiza este proceso (Metrópolis) durante muchas transiciones se puede llegar al equilibrio térmico.

Caracteriza el equilibrio térmico

La distribución de con la que se visitan los estados es conocida como la distribución de Boltzmann.

Distribución de Boltzmann

Dado un estado i con energía E_i,
genera un nuevo estado j mediante un mecanismo de perturbación (pequeña distorsión del estado i).
calcula la energía del nuevo estado E_j.
si $(E_j - E_i) \leq 0$
entonces acepta el estado j como estado nuevo
sino, acepta el estado con probabilidad: $exp(\frac{E_i - E_j}{k_B \cdot T})$

k_B

Constante de Boltzmann

Es el factor de conversión adecuado para pasar de temperatura (grados) a unidades de energía como Jules.

$k_B = 1.381 \times 10^{-23}$ JK^{-1}

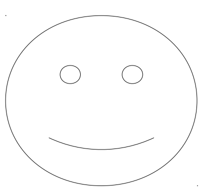
Distribución de Boltzmann

En equilibrio térmico, la distribución de probabilidad de que el sólido esté en el estado i con energía Ei a temperatura T está dada por:

$$P_T\{X = i\} = \frac{1}{Z(T)} exp(\frac{-E_i}{k_B T})$$

donde X es la variable estocástica que representa el estado actual del sólido. La suma se extiende a todos los estados.

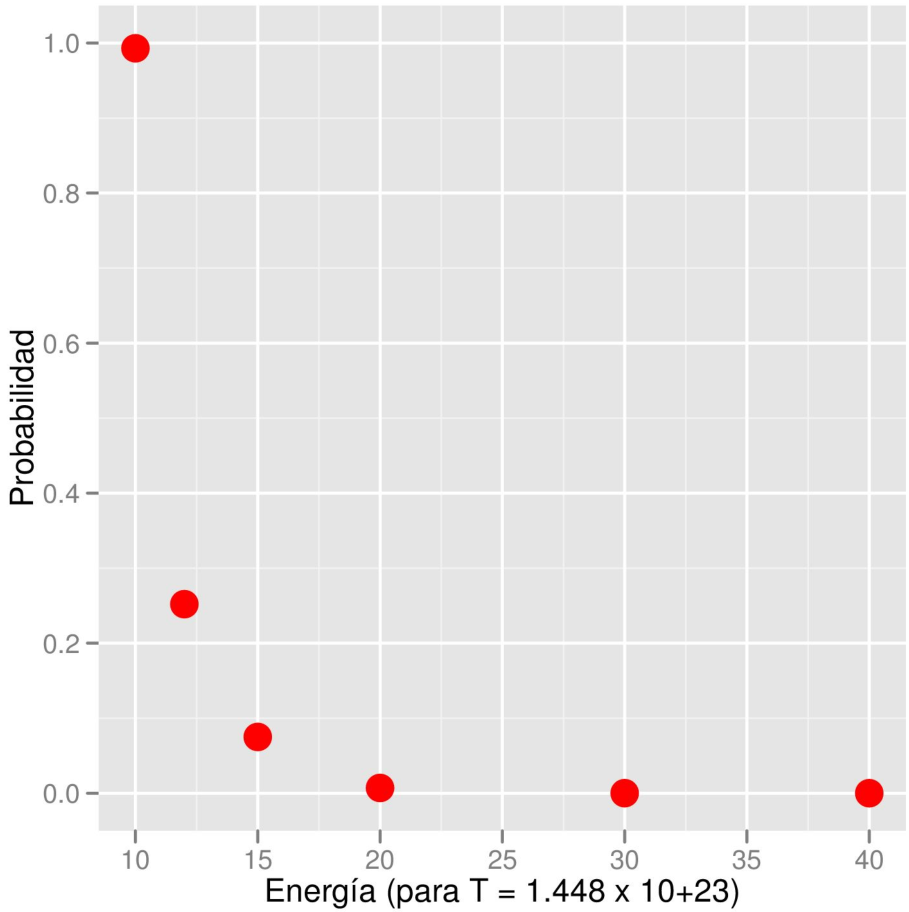
$$Z(T) = \sum_j exp(\frac{-E_j}{k_B T})$$

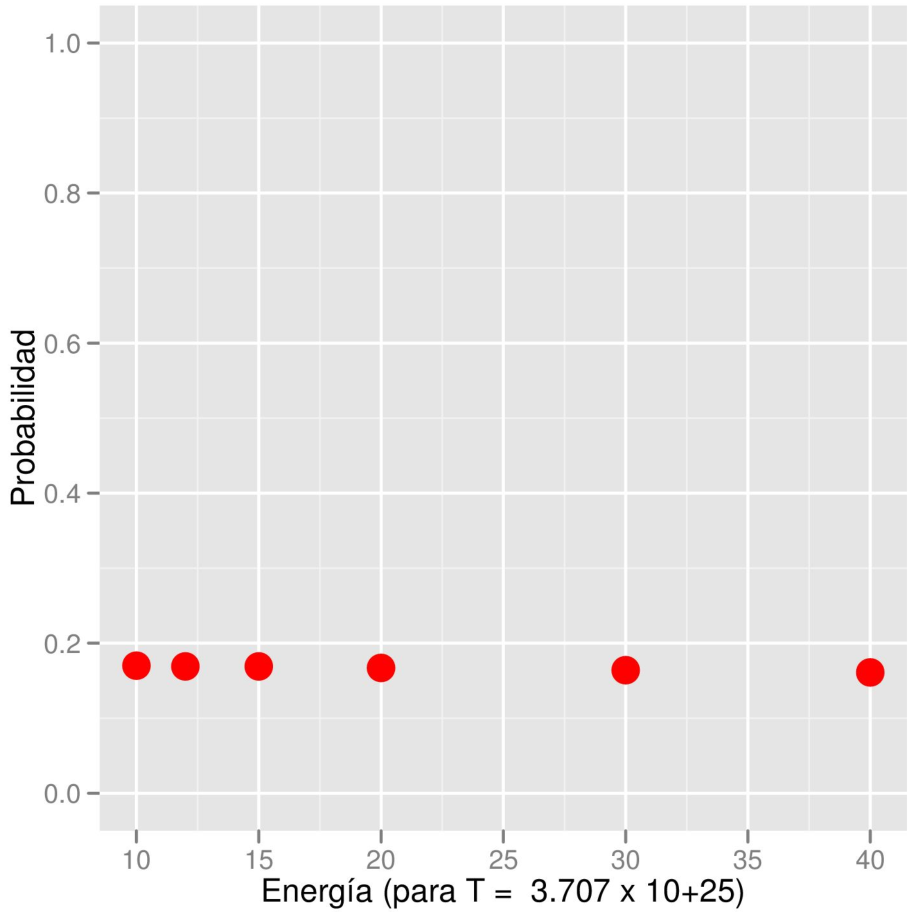


¿Cómo se ve esto en el ejemplo de la moneda?

Distribución de Boltzmann

ver ejemplo





Distribución de Boltzmann

Integrando

☆

En 1983 Kirkpatrick propuso un método para usar una simulación Metrópolis Monte Carlo para encontrar el punto más estable (el de menor energía) del sistema.

Recocido simulado (RS)

En optimización combinatoria:

- Las soluciones corresponden a estados del sistema físico
- El costo de solución corresponde a la energía del estado
- Se introduce un parámetro de control que corresponde a la temperatura (T)

Recocido simulado puede verse como una iteración de algoritmos de Metrópolis.

Recocido simulado (RS)

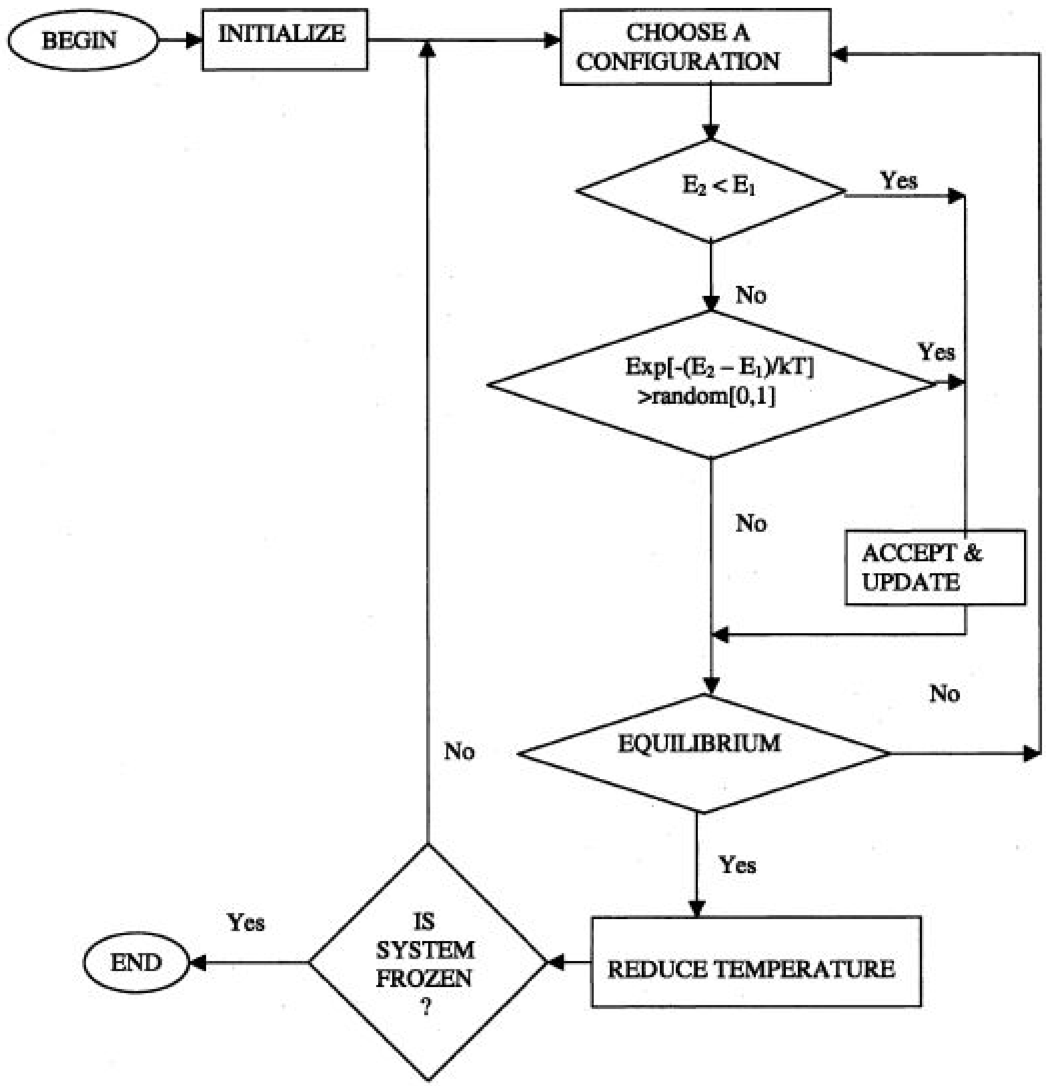
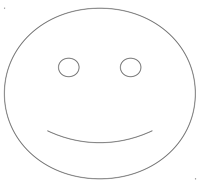


Diagrama de flujo (RS)

Lokupitiya R. et al., (2005)

Si se baja la temperatura lo suficientemente lento se puede alcanzar el equilibrio térmico en cada temperatura. Para ello, se generan varias transiciones en cada temperatura.



¿A qué correspondería el equilibrio térmico?

Bajando suficientemente lento el parámetro asociado a la temperatura y generando suficientes transiciones en cada temperatura se puede alcanzar la configuración óptima.

¿Cómo? (RS)

Siempre que el estado es mejor se acepta

La probabilidad de aceptación se expresa como:

$$P_c\{\text{acepta } j\} = \begin{cases} 1 & \text{si } f(j) \leq f(i) \\ exp(\frac{f(i)-f(j)}{c}) & \text{si } f(j) > f(i) \end{cases}$$

Si no es mejor, se acepta con cierta probabilidad

Probabilidad de aceptación (RS)

Algoritmo de recocido simulado

$k := 0, i := i_{inic}$

repite

  for $l := 1$ *to* L_k *do*

    genera $j \in S_j$

    si $f(j) \leq f(i)$ *entonces* $i := j$

    sino, si $\exp(\frac{f(i)-f(j)}{c_k}) > random[0,1)$

    entonces $i := j$

$k := k + 1$

actualiza L_k y c_k

hasta criterio de terminación

donde

c_k es el parámetro de control asociado a la temperatura y

L_k es el número de transiciones generadas en el ciclo k del algoritmo de Metrópolis

Transiciones

1) Aplicación del mecanismo de generación

2) Aplicación del mecanismo de aceptación

El algoritmo de Metrópolis define una cadena de Markov cuyo límite es la distribución de probabilidad deseada

Transiciones

Transiciones

1) Aplicación del mecanismo de generación

2) Aplicación del mecanismo de aceptación

El algoritmo de Metrópolis define una cadena de Markov cuyo límite es la distribución de probabilidad deseada

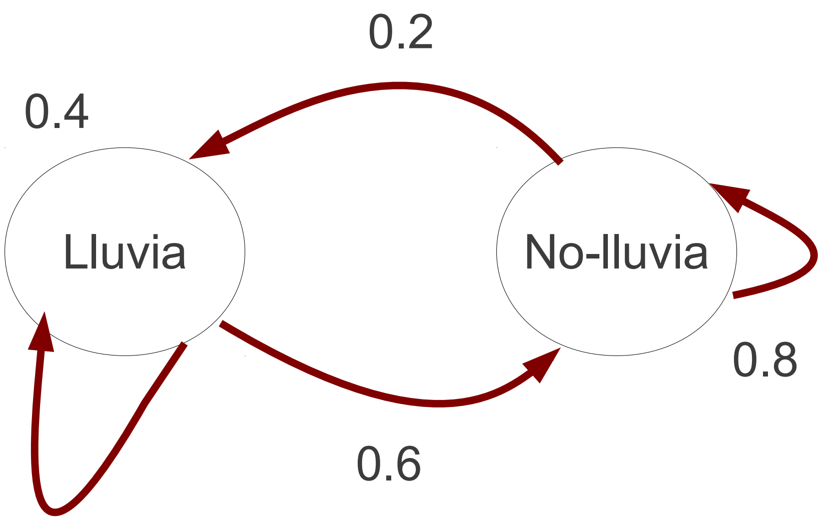
Cadena de Markov

Propiedad de Markov

El estado de un sistema en el tiempo t+1 depende solamente del estado del sistema en el tiempo t.

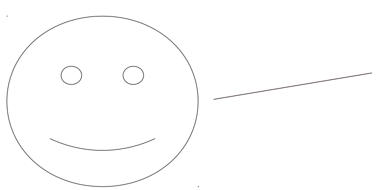
Una cadena de Markov es una secuencia de eventos donde la probabilidad del resultado de un evento depende solamente del resultado del evento anterior.

Cadena de Markov



Matriz de transición

$$\begin{pmatrix} 0.4 & 0.6 \\ 0.2 & 0.8 \end{pmatrix}$$



¿Qué relación le ves con lo visto anteriormente?

Cadena de Markov

1. En comparación con el algoritmo de Hill Climbing, ¿cuáles son las diferencias principales de recocido simulado?

2. Para el problema del agente viajero: formula el problema para resolver por recocido simulado.

Preguntas - resolver y entregar

Leer el artículo

The beginning of the Monte Carlo method. N. Metropolis

http://library.lanl.gov/cgi-bin/getfile?00326866.pdf

Elabora y entrega un breve reporte en el cual describas los tres puntos que te parecieron más importantes o que te hayan interesado más.

Tarea

Referencias

Grosan C., y Abraham A. (2011) Intelligent Systems: A Modern Approach. Intelligent Systems Reference Library, Volume 17. Springer.

Kirkpatrick, S.; Gelatt, C. D.; Vecchi, M. P. (1983). "Optimization by Simulated Annealing". Science 220 (4598): 671-680.

Lokupitiya R., Borgman, L., Anderson-Sprecher, R. (2005) Simulation of Storm Occurrences Using Simulated Annealing. Journal of Climate, vol. 18, Issue 21, pp.4394-4403. DOI: http://journals.ametsoc.org/doi/abs/10.1175/JCLI3546.1

Notas de clase: Búsqueda. Eduardo Morales.