



ΣΤΡΑΤΙΩΤΙΚΗ ΣΧΟΛΗ ΕΥΕΛΠΙΔΩΝ
Τμήμα Στρατιωτικών Επιστημών

ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
ΔΙΔΡΥΜΑΤΙΚΟ ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ
ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΟΥ ΕΤΟΥΣ 2017-18

ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΗ
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΗ ΕΡΕΥΝΑ & ΑΝΑΛΥΣΗ

(ΠΔ 97 /2015/ΦΕΚ 163Α'/20.08.2014)



ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ
Σχολή Μηχανικών Παραγωγής & Διοίκησης

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΟΙ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΜΑΘΗΣΗΣ

Διατριβή που υπεβλήθη για τη μερική ικανοποίηση των απαιτήσεων για την
απόκτηση Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης

Υπό:

ΑΝΑΣΤΑΣΙΑ ΓΡΑΜΜΑΤΕΑ

Α.Μ.: 2016018037

ΙΑΝΟΥΑΡΙΟΣ 2020

ΣΕΛΙΔΑ ΣΚΟΠΙΜΑ ΚΕΝΗ

Η Μεταπτυχιακή Διατριβή της κας Αναστασίας Γραμματέα εγκρίνεται:

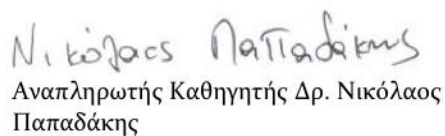
ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ

Καθηγητής Δρ. Νικόλαος Ιω. Δάρας



Καθηγητής Δρ. Νικόλαος Ιω. Δάρας

Αναπληρωτής Καθηγητής Δρ. Νικόλαος
Παπαδάκης



Αναπληρωτής Καθηγητής Δρ. Νικόλαος
Παπαδάκης

Αναπληρωτής Καθηγητής Δρ. Στέλιος Τσαφάρakis

**Stelios
Tsafarakis**

Digitally signed by Stelios Tsafarakis
DN: c=GR, l=Chania, o=Technical University of
Crete, ou=Class B - Private Key created and
stored in software CSP, sn=Tsafarakis,
givenName=Stelios,
serialNumber=3216942618, cn=Stelios
Tsafarakis, email=tsafarakis@dpem.tuc.gr
Date: 2021.01.24 11:36:20 +02'00'

ΣΕΛΙΔΑ ΣΚΟΠΙΜΑ ΚΕΝΗ

© Copyright υπό

Έτος 2020

ΠΕΡΙΛΗΨΗ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗΣ ΔΙΑΤΡΙΒΗΣ

Σκοπός της εργασίας είναι η εμπεριστατωμένη απόδοση της αλληλεπίδρασης που υφίσταται μεταξύ των τεχνικών οι οποίες αναπτύσσονται στα πλαίσια της μαθηματικής βελτιστοποίησης και των μεθόδων που διέπουν τη λειτουργία της μηχανικής μάθησης.

Προς αυτή την κατεύθυνση, αφού γίνει μια σύντομη αναφορά στα δύο ως άνω αντικείμενα, θα δοθούν κατ' αρχάς, οι κύριες εφαρμογές μεθόδων μαθηματικής βελτιστοποίησης για τις ανάγκες διεκπεραίωσης θεμάτων μηχανικής μάθησης. Ειδικότερα, θα συζητηθούν θέματα όπως ο μαθηματικός προγραμματισμός στη μηχανική μάθηση και οι αλγοριθμικές τεχνικές της βελτιστοποίησης που αξιοποιούνται για τις ανάγκες της μηχανικής μάθησης, με ιδιαίτερη έμφαση στις σχετικές μεθόδους του μεικτού ακέραιου προγραμματισμού και της μη-κυρτής βελτιστοποίησης, ως επίσης και τις τεχνικές της πολυδιάστατης βελτιστοποίησης σμήνους σωματιδίων που αναπτύσσονται για τη μηχανική μάθηση και την αναγνώριση προτύπου. Ακόμη, θα συζητηθούν οι μέθοδοι βελτιστοποίησης που χρησιμοποιούνται για τη μηχανική μάθηση μεγάλης κλίμακας, με έμφαση στη θεωρία της στοχαστικής κλίσης, καθώς και κάποιες μέθοδοι βελτιστοποίησης για εποπτευόμενη μάθηση μηχανών. Προσέτι, θα παρουσιασθούν κάποιες μέθοδοι μαθηματικής βελτιστοποίησης για μηχανική μάθηση χρησιμοποιώντας στοιχεία από τη Φυσική, δίνοντας ιδιαίτερη προσοχή στην περίπτωση της κβαντικής μηχανικής μάθησης.

Στη συνέχεια, θα γίνει αναφορά στην αντίστροφη προοπτική αλληλεπίδρασης των δύο υπό θεώρηση αντικειμένων, ήτοι στις εφαρμογές των μεθόδων μηχανικής μάθησης στη μαθηματική βελτιστοποίηση. Στα πλαίσια αυτής της αναφοράς, θα δοθούν μέθοδοι μηχανικής μάθησης που αξιοποιούνται για τους σκοπούς της ολικής βελτιστοποίησης και στρατηγικές μηχανικής μάθησης για την πρόβλεψη χρονοσειρών. Η εν προκειμένω αναφορά θα ολοκληρωθεί με μία προσέγγιση βασισμένη στο μαθηματικό προγραμματισμό για τον προσδιορισμό αντικειμενικών συναρτήσεων από ποιοτικές και υποκειμενικές συγκρίσεις.

Η Εργασία θα ολοκληρωθεί με την παράθεση ενδεικτικών εφαρμογών μαθηματικών θεωριών σε θέματα βελτιστοποίησης και μηχανικής μάθησης. Οι επιλεγείσες εφαρμογές θα αφορούν σε εξελικτικούς υπολογισμούς στα πεδία της βελτιστοποίησης και της μηχανικής μάθησης, σε γενετικούς αλγορίθμους στις θεωρίες αναζήτησης, βελτιστοποίησης και εκμάθησης μηχανής, σε αυτόματα εκμάθησης στις στρατηγικές σχεδιασμού ελέγχου και, τέλος, στη γενετική βελτιστοποίηση εκπαιδευτικών συνόλων για τη δημιουργία βελτιωμένων μοντέλων μηχανικής μάθησης των μοριακών ιδιοτήτων. □

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ.

Ευχαριστώ τους εμπνευστές και τα στελέχη του μεταπτυχιακού προγράμματος σπουδών Εφαρμοσμένη Επιχειρησιακή Έρευνα και Ανάλυση, για τη δημιουργία ενός εξαιρετικά υψηλού επιπέδου προγράμματος σπουδών, αντάξιο της Ελληνικής νόησης. Ευχαριστώ τον καθηγητή κ. Νικόλαο Ιω. Δάρα, κοσμήτορα της Στρατιωτικής Σχολής Ευελπίδων, για την τιμή να επιβλέψει την παρούσα διατριβή.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ Ι. ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

- 1.1. Περιγραφή12
- 1.2. Παραδείγματα.....13

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΙΙ. ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ

- 2.1 Τεχνικές Μαθηματικής Βελτιστοποίησης.....19
- 2.2 Τα μαθηματικά της μηχανικής μάθησης.....20
- 2.3 Η αλληλεπίδραση της έρευνας στη βελτιστοποίηση και τη μηχανική μάθηση.....20

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΙΙΙ. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΜΕΘΟΔΩΝ ΤΗΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗΣ

- 3.1 Μεικτός ακέραιος προγραμματισμός για μηχανική μάθηση.....23
- 3.2 Μη-κυρτή βελτιστοποίηση για μηχανική μάθηση.....24
- 3.3 Πολυδιάστατη βελτιστοποίηση σμήνους σωματιδίων για μηχανική μάθηση και αναγνώριση προτύπου.....26
- 3.4 Μέθοδοι βελτιστοποίησης για μηχανική μάθηση μεγάλης κλίμακας.....31
- 3.5 Μέθοδοι βελτιστοποίησης για μηχανική μάθηση. Μέρος ΙΙ – Η θεωρία της στοχαστικής κλίσης.....43.
- 3.6 Μέθοδοι βελτιστοποίησης για εποπτευόμενη μάθηση μηχανών: Από τα γραμμικά μοντέλα έως τη βαθιά μάθηση.....49.
- 3.7 Μαθηματική βελτιστοποίηση για μηχανική μάθηση χρησιμοποιώντας στοιχεία από τη Φυσική.....57
- 3.8 Κβαντική μηχανική μάθηση: μια κλασική προοπτική.....59

ΚΕΦΑΛΑΙΟ IV. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΜΕΘΟΔΩΝ ΤΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΜΑΘΗΣΗΣ ΣΤΗ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ.

- 4.1 Μια μηχανή ιεραρχίας: Μάθηση για Βελτιστοποίηση από τη φύση και τους ανθρώπους.....62.
- 4.2 Μηχανική μάθηση για ολική βελτιστοποίηση.....65
- 4.3 Στρατηγικές μηχανικής μάθησης για πρόβλεψη χρονοσειρών.....73.
- 4.4 Μια προσέγγιση βασισμένη στο μαθηματικό προγραμματισμό για τον προσδιορισμό αντικειμενικών συναρτήσεων από ποιοτικές και υποκειμενικές συγκρίσεις.....80.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ V. ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΘΕΩΡΙΩΝ ΣΕ ΘΕΜΑΤΑ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΜΑΘΗΣΗΣ

- 5.1 Εξελικτικοί Υπολογισμοί στη Βελτιστοποίηση και Μηχανική Μάθηση.....83.
- 5.2 Γενετικοί αλγόριθμοι στην αναζήτηση, βελτιστοποίηση και εκμάθηση μηχανής.....91
- 5.3 Αυτόματα εκμάθησης στις στρατηγικές σχεδιασμού ελέγχου (από «Ευφυής Υπολογιστική»)..... 123
- 5.4. Αυτόματη μάθησης.....127
- 5.5 Γενετική βελτιστοποίηση εκπαιδευτικών συνόλων για βελτιωμένα μοντέλα μηχανικής μάθησης των μοριακών ιδιοτήτων.....130.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....137

ΣΧΗΜΑΤΑ

Σχήμα 1 ποσοστό ικανοποίησης εργαζομένου ανάλογα με το ύψος του μισθού του –συνάρτηση πρόβλεψης.....	13
Σχήμα 2.ικανοποίηση εργαζομένων ανάλογα με το ύψος του μισθού τους με βάση την αρχική εξίσωση.....	14
Σχήμα 3. ποσοστό ικανοποίησης εργαζομένου στον μισθό του, με βάση την εξίσωση που παρήχθη με την μέθοδο παλινδρόμησης.....	14
σχήμα 4 ποσοστό ικανοποίησης εργαζομένου στο μισθό του μετά από 1500 επαναλήψεις.....	15
Σχήμα 5. Συνάρτηση σφάλματος ανάλογα με τις τιμές θ_0 και θ_1	16
Σχήμα 6.αριθμός επαναλήψεων και συνάρτηση κόστους	17
Σχήμα 7. Πεδία μαθηματικών που είναι απαραίτητα στην μηχανική μάθηση.....	20
Σχήμα 8. Κυρτός και μη κυρτός συνδυασμός	26
Σχήμα 9. Πορεία σωματιδίων στην βελτίωση σμήνους	30
Σχήμα 10. Αύξηση των επαναλήψεων που έχει να κάνει με την μείωση του μεγέθους βήματος.....	36
Σχήμα 11. Μέθοδοι που συνδυάζουν μείωση θορύβου	38.
Σχήμα 14. Δίκτυο DNN	55
Σχήμα 15. Επίλυση της $y=x^2$...με βάση τις εξισώσεις Αινστάιν	58
σχήμα 16. επίλυσης της $y=\exp(x)$ με βάση τις εξισώσεις Αινστάιν	58
σχήμα 17. αναπαράσταση καταστάσεων qubit	60.
Σχήμα 18 Ιεραρχικός αλγόριθμος bayesian.....	64
Σχήμα 19. Παράδειγμα δικτύου bayesian	65
Σχήμα 20. Διαδικασία με δοκιμή Rastrigin	69
Σχήμα 21. Δοκιμή Schwefel	69
Σχήμα 22. Αποσύνθεση χρονοσειρών σε επιμέρους συστατικά.....	74
Σχήμα 23.λευκός θόρυβος	76
Σχήμα 24. Πρόγνωση σφάλματος σε σχέση με τους βαθμούς ελευθερίας	80
Σχήμα 25.Στάδια αξιολόγησης γενετικών αλγορίθμων.....	86
Σχήμα 26. γενετικός προγραμματισμός στην εποπτευόμενη επίβλεψη.....	87
σχήμα 27 αναπαράσταση συνάρτησης στον τεχνητό νευρώνα.....	88
σχήμα 28. σιγμοειδή συνάρτηση μεταφοράς.....	89
σχήμα 29. FFNN.....	89.
σχήμα 30. παράδειγμα ανασυνδυασμού γονιδίων.....	95
σχήμα 31 ταυτότητα ατόμων γενετικών αλγορίθμων.....	97
σχήμα 32. σχηματική παράστασης μη αλληλοεπικαλυπτόμενων πληθυσμών στους απλούς γενετικούς αλγόριθμους	97
σχήμα 33. απόδοση με την ύπαρξη ταυτόχρονης αναστροφής, διπλοειδίας και ανασυνδυασμού.....	101
σχήμα 34. παράδειγμα εξελικτικού χειρισμού.....	103
σχήμα 35. παράδειγμα βελτίωσης απόδοσης στην συνάρτηση F_1	104

σχήμα 36. αναπαράσταση γονιδίου σε δύο παραλλαγές και φαινόμενα κυριαρχίας και μη.....	105
σχήμα 37. παραδείγματα αναστροφής	107
σχήμα 38 παράδειγμα πολυκριτηριακής βελτίωσης.....	109
σχήμα 39, σχηματική απεικόνιση υβριδοποιημένου γενετικού αλγορίθμου	110
σχήμα 40.επίλυση προβλήματος περιπλανώμενου πωλητή με την χρήση χειριστών crossover αυξανόμενης γνώσης	111
σχήμα 41. Ένα σύστημα ταξινόμησης που αλληλεπιδρά με το περιβάλλον του.....	113
Σχήμα 42. Σύστημα ταξινόμησης CS-1, του πρώτου συστήματος ταξινόμησης.....	114
σχήμα 43 Αλλα συστήματα ταξινόμησης	116
σχήμα 44. Το σύστημα ANIMAT απαιτεί μειούμενο αριθμό βημάτων για ανίχνευση τροφής σαν διαδικασία μάθησης σε πάνω από 8000 αριθμό προβλημάτων	120
σχήμα 45 το πρώτο πρόβλημα αυτού του συστήματος ταξινόμησης ήταν η μάθηση ενός αντικειμένου σε μονοδιάστατο χώρο, και χωρίς τριβή, να μείνει στο κέντρο.....	120
σχήμα 46 . Πλάνο εξωτερικών μηνυμάτων για το σύστημα ταξινόμησης του αγωγού	121
σχήμα 47. Κύκλοι διαρροών στο σύστημα ταξινόμησης του αγωγού , συγκρίνοντας το μέσο όρο των σκόρ στο χρόνο.....	121
σχήμα 48. Το ποσοστό των διαρροών που ειδοποίησαν σωστά σε ένα σύστημα ταξινόμησης ενός αγωγού	122
σχήμα 49 ποσοστό λανθασμενων ειδοποιήσεων	122
σχήμα 50. σύστημα προγραμματισμού κλειστού βρόγχου	125
σχήμα 51. παράδειγμα αυτόματης μάθησης.....	128
σχήμα 52. δεξαμενή υπερχειλίσσης	130
σχήμα.53.Διαδικασία βελτιστοποίησης μοριακών συνόλων για την εκπαίδευση μοντέλων.....	132
σχήμα 54 καμπύλες μάθησης για την μέτρηση σφάλματος που εξαρτάται από διάφορους παράγοντες όπως είναι το μέγεθος του πληθυσμού.....	133.

1.1. Περιγραφή

Η μηχανική μάθηση είναι ένα πεδίο της επιστήμης των υπολογιστών το οποίο συνίσταται σε μεθόδους που χρησιμοποιούνται για την επινόηση πολύπλοκων και δύσκολων μοντέλων και αλγορίθμων.

Ορισμός 1. Η *Μηχανική Μάθηση (Machine Learning)* μπορεί να οριστεί ως το διαδικαστικό φαινόμενο κατά το οποίο ένα σύστημα βελτιώνει την απόδοσή του κατά την εκτέλεση μιας συγκεκριμένης εργασίας, χωρίς να υπάρχει ανάγκη να προγραμματιστεί εκ νέου.

Παρατήρηση 1. Ένας σχετικός γενικός ορισμός Μηχανικής Μάθησης δίνεται επίσης από τον Mitchell (1997): «Ένα πρόγραμμα υπολογιστή λέμε ότι μαθαίνει από την εμπειρία E ως προς κάποια κλάση εργασιών T και μέτρο απόδοσης P , αν η απόδοσή του σε εργασίες από το T , όπως μετριέται από το P , βελτιώνεται μέσω της εμπειρίας E .»

Εν γένει, ο τομέας της Μηχανικής Μάθησης αναπτύσσει τρεις τρόπους μάθησης, ανάλογα με τους τρόπους κατά τους οποίους μαθαίνει ένας άνθρωπος:

- επιβλεπόμενη μάθηση,
- μη επιβλεπόμενη μάθηση και
- ενισχυτική μάθηση.

Πιο συγκεκριμένα:

Ορισμός 1.α.Επιβλεπόμενη Μάθηση (Supervised Learning) είναι η διαδικασία όπου ένας αλγόριθμος (:μία μηχανή) κατασκευάζει μια συνάρτηση και απεικονίζει δεδομένες εισόδους (σύνολο εκπαίδευσης) σε γνωστές επιθυμητές εξόδους, με απώτερο στόχο τη γενίκευση της συνάρτησης αυτής και για εισόδους με άγνωστη έξοδο. Χρησιμοποιείται σε προβλήματα:

1. Ταξινόμησης (Classification)
2. Πρόγνωσης (Prediction)
3. Διερμηνείας (Interpretation).

1.β.Μη Επιβλεπόμενη Μάθηση (Unsupervised Learning) είναι ένας αλγόριθμος (:μία μηχανή) που κατασκευάζει ένα μοντέλο για κάποιο σύνολο εισόδων υπό μορφή παρατηρήσεων χωρίς να γνωρίζει τις επιθυμητές εξόδους. Χρησιμοποιείται σε προβλήματα:

1. Ανάλυσης Συσχετισμών (Association Analysis)
2. Ομαδοποίησης (Clustering).

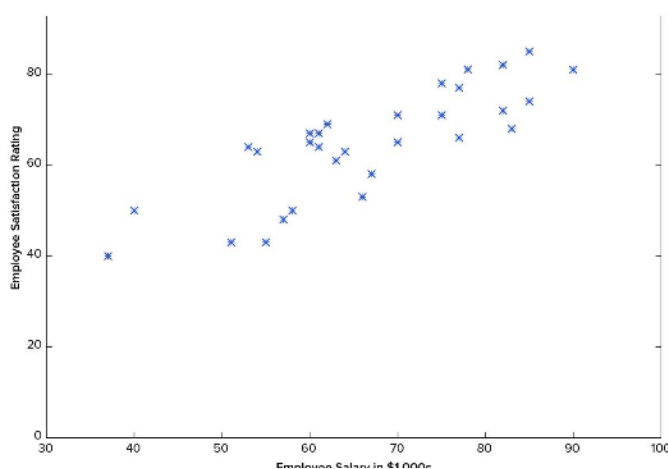
1.γ.Ενισχυτική Μάθηση (Reinforcement Learning) είναι ένας αλγόριθμος (:μία μηχανή) που μαθαίνει μια στρατηγική ενεργειών μέσα από άμεση αλληλεπίδραση με το περιβάλλον. Χρησιμοποιείται κυρίως σε προβλήματα Σχεδιασμού (Planning), όπως για παράδειγμα ο έλεγχος κίνησης ρομπότ και η βελτιστοποίηση εργασιών σε εργοστασιακούς χώρους.

Παρατήρηση 2. Η μηχανική μάθηση και η εξόρυξη δεδομένων, παρόλο που χρησιμοποιούν τις ίδιες μεθόδους, διακρίνονται στο ότι:

- Η μηχανική μάθηση εστιάζει στην πρόβλεψη, ενώ
- Η εξόρυξη δεδομένων εστιάζει στην ανακάλυψη.

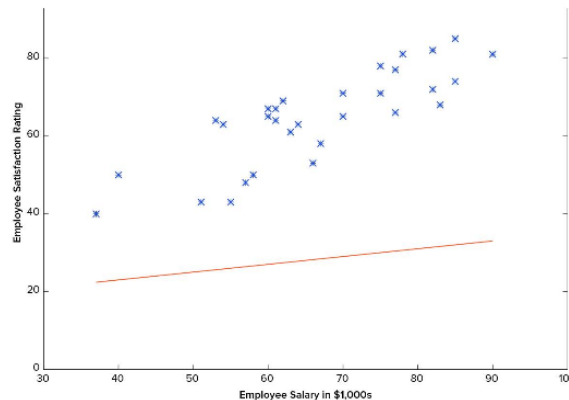
1.2. Παραδείγματα

Ας δώσουμε μερικά παραδείγματα. Στο πρώτο σχήμα, διαθέτουμε δεδομένα που αφορούν αριθμό εργαζομένων και την ικανοποίησή τους που μετρείται σε μία κλίμακα από το 1 έως το 100.



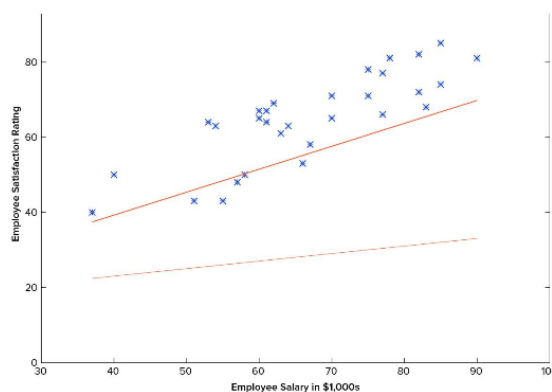
Σχήμα 1^ο. ποσοστό ικανοποίησης εργαζομένου ανάλογα με το ύψος του μισθού του –συνάρτηση πρόβλεψης

Δίνοντας στη μηχανή μας τα δεδομένα προσπαθούμε να “αρχικοποιήσουμε” την πρόβλεψή μας $h(x)$ για κάποιες λογικές τιμές παραμέτρων θ_0 και θ_1 με βάση τις οποίες θα μπορεί να κατασκευάζεται /η αλλιώς να προσδιορίζεται μια (γραμμική) εξίσωση πρόβλεψης. Η απλούστερη ζητούμενη εξίσωση πρόβλεψης μπορεί να λάβει αρχικώς μια γραμμική μορφή, όπως για παράδειγμα $h(x) = \theta_0 + \theta_1 x = 20.00 + 0.20x$:



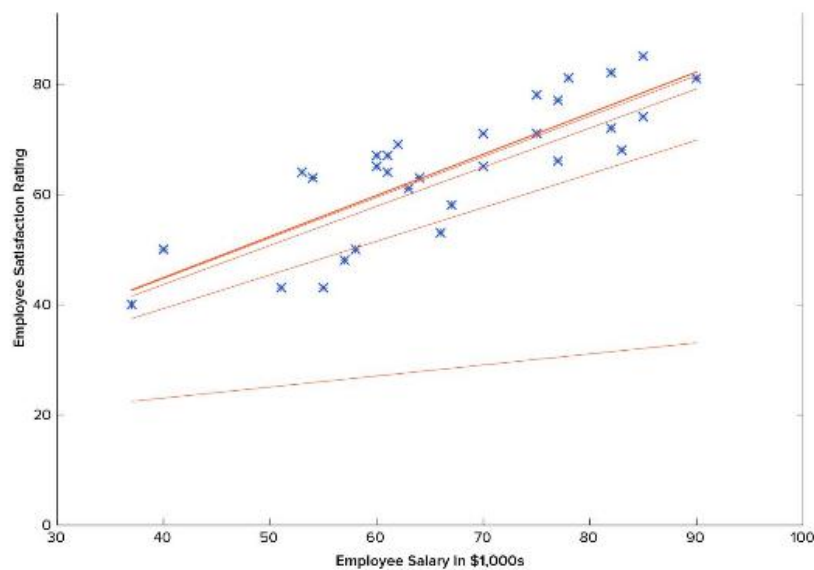
σχήμα 2^ο . ικανοποίηση εργαζομένων ανάλογα με το ύψος του μισθού τους με βάση την αρχική εξίσωση.

Αν προβούμε σ' αυτή την πρόβλεψη για όλους τους μισθούς από το δεδομένο “εκπαιδευτικό μας σετ” και θεωρήσουμε τις διαφορές ανάμεσα στις προκύπτουσες εκτιμώμενες βαθμολογίες ικανοποίησης και την πραγματική βαθμολογία ικανοποίησης των αντίστοιχων υπαλλήλων, τότε, χρησιμοποιώντας απλές μαθηματικές μεθόδους (όπως, για παράδειγμα, τη μέθοδο της γραμμικής παλινδρόμησης) μπορούμε να υπολογίσουμε με πολύ μεγάλη βεβαιότητα ότι οι τιμές **31,12** για το θ_0 και **0,61** για το θ_1 είναι κατάλληλες να μας δώσουν καλύτερη πρόβλεψη:



Σχήμα 3^ο . ποσοστό ικανοποίησης εργαζομένου στον μισθό του, με βάση την εξίσωση που παρήχθη με την μέθοδο παλινδρόμησης .

Εφόσον επαναλάβουμε την διαδικασία, ας πούμε 1500 φορές, τότε η εξίσωση πρόβλεψης που θα προκύψει θα είναι της μορφής $h(x) = 38.54 + 0.75x$.



Σχήμα 4°. ποσοστό ικανοποίησης εργαζομένου στο μισθό του μετά από 1500 επαναλήψεις.

Σε αυτό το σημείο, εάν επαναλάβουμε ακόμα μια φορά τη διαδικασία, θα διαπιστώσουμε ότι οι παράμετροι θ_0 και θ_1 δεν πρόκειται να μεταβληθούν περαιτέρω και έτσι μπορούμε να συμπεράνουμε ότι το σύστημα έχει ήδη συγκλίνει. Εάν δεν έχουμε κάνει σφάλματα, αυτό σημαίνει ότι έχουμε ήδη βρει έναν βέλτιστο **προγνωστικό παράγοντα παλινδρόμησης**, την καταληκτική συνάρτηση $h(x)$. Συνεπώς, εάν εμείς, βασιζόμενοι στο βέλτιστο αυτό προγνωστικό παράγοντα, ζητήσουμε ξανά από το μηχάνημα την αξιολόγηση ικανοποίησης ενός υπαλλήλου ο οποίος αμείβεται με \$ 60, τότε το μηχάνημα θα προβλέψει μια βαθμολογία ίση περίπου με 60.

Έχουμε λοιπόν οδηγηθεί στο χαρακτηρισμό μιας μεγάλης (και κεντρικής) κατηγορίας συστημάτων μηχανικής μάθησης που είναι αλληλένδετα με τη στοιχειωδέστερη διαδικασία της Επιβλεπόμενης Μάθησης (Supervised Learning)

Ι.2.1. Συστήματα παλινδρόμησης μηχανικής μάθησης

Το παραπάνω πρόβλημα είναι ένα απλό πρόβλημα διμεταβλητής γραμμικής παλινδρόμησης, το οποίο μπορεί εύκολα να λυθεί, αναζητώντας τη βέλτιστη έκφραση μίας απλής γραμμικής συνάρτησης. Ωστόσο, επιλέγοντας πιο πολύπλοκες συναρτήσεις από τις γραμμικές, όπως είναι για παράδειγμα η παρακάτω συνάρτηση:

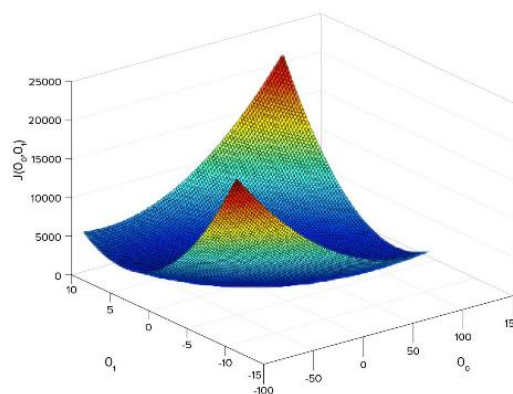
$$h(x_1, x_2, x_3, x_4) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_3^2 + \theta_3 x_3 x_4 + \theta_4 x_1^3 x_2^2 + \theta_5 x_2 x_3^4 x_4^2.$$

η δυνατότητα πρόβλεψης μπορεί να αποβεί εξαιρετικά δύσκολη, επειδή ο προσδιορισμός βέλτιστης επιλογής των παραμέτρων $\theta_0, \theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ και θ_5 ως προς ένα δοθέν σύστημα δεδομένων συνιστά ένα πραγματικά δύσκολο μαθηματικό/υπολογιστικό πρόβλημα, και έτσι τα συστήματα μηχανικής μάθησης χρησιμοποιώντας την (πολύ-μεταβλητή) γραμμική παλινδρόμηση αποτελούν (τουλάχιστον προς το παρόν) ίσως τη μόνη επιλογή. Αυτά τα συστήματα ονομάζονται **συστήματα (γραμμικής) παλινδρόμησης μηχανικής μάθησης**.

1.2.2. Καθοδική κλίση και μείωση του σφάλματος μηχανικής μάθησης

Μέτρο σφάλματος της μηχανικής μάθησης είναι η ονομαζόμενη, **συνάρτηση κόστους** ή, αλλιώς, **συνάρτηση σφάλματος** $J(\theta)$. Τα δεδομένα εισαγωγής συνοψίζονται σε ένα διάνυσμα $\theta = (\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_n) \in \mathbb{R}^n$ το οποίο πρέπει να προσδιορισθεί για να χρησιμοποιηθεί κατά βέλτιστο τρόπο στον προγνωστικό μας έλεγχο. Στην περίπτωση μας (δηλαδή στην περίπτωση ενός συστήματος παλινδρόμησης μηχανικής μάθησης), το διάνυσμα θ είναι απλώς ένα ζεύγος δεδομένων εισαγωγής (θ_0, θ_1) και η $J(\theta_0, \theta_1)$ δίνεται απλώς ως μία μαθηματική έκφραση η οποία αποδίδει το πόσο εσφαλμένος είναι ο επιλεγμένος προγνωστικός μας παράγοντας όταν χρησιμοποιεί τις δεδομένες τιμές θ_0 και θ_1 :

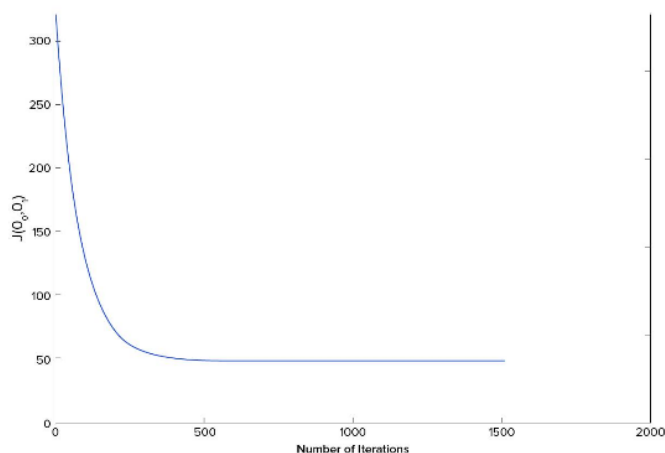
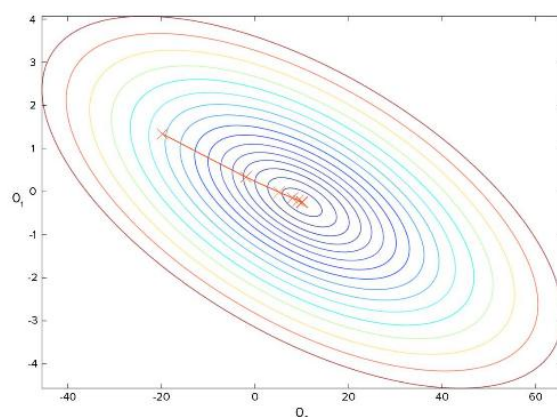
$$J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (h(x_{t,i}) - y)^2$$



Σχήμα 5. Συνάρτηση σφάλματος ανάλογα με τις τιμές θ_0 και θ_1 . Όσο πιο μικρότερη είναι η κλίση (πιο κοντά στην περιοχή της κοιλάδας, τόσο πιο ιδανικές είναι οι τιμές).

Αυτός ο υπολογισμός είναι η διαδικασία που γίνεται “εκπαιδευτική” για το σύστημα μας. Αυτό που κάνουμε είναι να πάρουμε την κλίση του $J(\theta_0, \theta_1)$, που προσδιορίζεται από το ζεύγος των μερικών παραγώγων του $J(\theta_0, \theta_1)$ ως προς θ_0 και θ_1 . Η διαβάθμιση της κλίσης $J(\theta_0, \theta_1)$ είναι διαφορετική σε κάθε διαφορετική τιμή των θ_0 και θ_1 , και υποδηλώνει την “κατευθυντήρια τάση” της μάθησης. Γενικά, οι τιμές

θ_0 και θ_1 που μας δίνουν κλίση μικρή, πράγμα το οποίο φαίνεται από το παραπάνω σχήμα, θεωρούνται ιδανικές για την εκπαιδευτική μας διαδικασία αφού το σφάλμα είναι μικρό. Κάθε αναπροσαρμογή επί των τρεχουσών τιμών θ της κλίσης, μπορεί να σημαίνει ότι η αύξηση της τιμής της θ_0 είτε η μείωση της τιμής της θ_1 , οδηγεί στην συνάρτηση κόστους προς το σημείο που εμφανίζεται ως “κοιλιάδα” (αποτελεί ουσιαστικά την σχεδόν κατώτερη επίπεδη επιφάνεια του παραπάνω σχήματος). Κατ’ αυτή την έννοια, κάθε φορά που αυξάνουμε λίγο την τιμή της θ_0 είτε μειώνουμε λίγο την τιμή της θ_1 , μπορούμε να λέμε ότι πραγματοποιούμε(ολοκληρώνουμε) ένα γύρο μηχανικής μάθησης και ο “ενημερωμένος” πλέον προγνωστικός μας παράγοντας $h(x) = +x$ μας επιστρέφει καλύτερες προβλέψεις από πριν: Ο αλγόριθμος (:η μηχανή) μας τώρα είναι λίγο πιο “έξυπνος”.



Σχήμα 6°. Αριθμός επαναλήψεων και συνάρτηση κόστους. Όσο πιο πολλές είναι οι επαναλήψεις, τόσο πιο μικρή είναι η συνάρτηση κόστους. Από ένα σημείο όμως και μετά, ο αριθμός των επαναλήψεων δεν επηρεάζει την κλίση.

Γενικά σκοπός μας είναι η συνάρτηση σφάλματος να είναι η ελάχιστη. Εφόσον, κατ’ αυτό τον τρόπο, καταλήξουμε σε ένα σημείο στο οποίο ο αριθμός των επαναλήψεων δεν αλλάζει σημαντικά την κλίση, αυτό σημαίνει ότι το σύστημα μας είναι πλέον αξιόπιστο και ότι η καταληκτική συνάρτηση $h(x)$ που δίνει τον **προγνωστικό παράγοντα παλινδρόμησης** είναι κατάλληλη.

1.2.3. Προβλήματα ταξινόμησης στην μηχανική μάθηση

Στην εποπτευόμενη μηχανική μάθηση υπάρχουν δύο μεγάλες υποκατηγορίες

- Τα **συστήματα παλινδρόμησης μηχανικής μάθησης**, για τα οποία έχουμε δώσει παράδειγμα ανωτέρω: τα συγκεκριμένα συστήματα μας βοηθούν να απαντήσουμε ερωτήματα όπως είναι πχ το πόσο ή πόσοι.
- Τα **συστήματα ταξινόμησης μηχανικής μάθησης**, τα οποία αφορούν σε συστήματα που αναζητούν μία πρόγνωση μέσω μιας απάντησης ναι ή όχι (: καταφατικής ή αρνητικής απάντησης).

Από τις πρώτες μέρες, η μηχανική μάθηση χρησιμοποίησε διατυπώσεις και αλγόριθμους βελτιστοποίησης. Αλλά και αντιστρόφως, η μηχανική μάθηση συνέβαλε στη βελτιστοποίηση, οδηγώντας στην ανάπτυξη νέων μεθόδων βελτιστοποίησης που αντιμετωπίζουν τις σημαντικές προκλήσεις που παρουσιάζονται από τις εφαρμογές μηχανικής επεξεργασίας.

Οι θεωρίες και οι μέθοδοι βελτιστοποίησης απολαμβάνουν εξέχουσα θέση στη μηχανική μάθηση λόγω της ευρείας εφαρμογής τους και των ελκυστικών θεωρητικών ιδιοτήτων τους. Ωστόσο, η αυξημένη πολυπλοκότητα, το μέγεθος και η ποικιλία των σημερινών μοντέλων μηχανικής μάθησης επιβάλλουν την επανεξέτάσή τους με βάση τις αρχές των υφιστάμενων υποθέσεων και τεχνικών.

Εκτός από την αναζωπύρωση του ενδιαφέροντος επί της καθ' αυτής ανάπτυξης των ήδη καθιερωμένων αλγοριθμικών πλαισίων, όπως οι **μέθοδοι πρώτης τάξης, στοχαστικές μέθοδοι**, ο κυρτός προγραμματισμός, οι **μέθοδοι εσωτερικών σημείων**, γίνεται πλέον αναφορά και σε άλλες μεθόδους βελτιστοποίησης, όπως τα **νευρωνικά δίκτυα** (:μέθοδοι GD (Gradient. Descent)), οι **γενετικοί αλγόριθμοι** (: *Background-Subtraction Algorithm*) και οι μέθοδοι δευτέρας τάξης

2.1. Τεχνικές της μαθηματικής βελτιστοποίησης

Το αυξανόμενο ενδιαφέρον για την εφαρμογή της τεχνολογίας της Τεχνητής Νοημοσύνης (AI), και την τεχνολογία συστημάτων έχει ενδυναμώσει τις δυνατότητες χρήσης των τεχνικών της μαθηματικής βελτιστοποίησης. Οι εν λόγω τεχνικές, σε αντίθεση με άλλες αυστηρές μαθηματικές μεθόδους, έχουν την ικανότητα να προσαρμόζονται στις μη γραμμικές και τις ασυνεχείς συναρτήσεις. Οι πιο γνωστοί αλγόριθμοι αυτής της κατηγορίας περιλαμβάνουν τον **εξελικτικό προγραμματισμό**, τους **γενετικούς αλγόριθμους**, τον **αλγόριθμο της προσομοιωμένης ανόπτησης** και τα **νευρωνικά δίκτυα**.

Εξελικτικός προγραμματισμός Ο εξελικτικός προγραμματισμός (EP) αναπτύχθηκε από τον Larry J. Fogel. Η ομάδα του Fogel επικεντρώθηκε σε μηχανές πεπερασμένων καταστάσεων (finite state machines) , ασχολήθηκε με τη μηχανική ευφυΐα (machine intelligence) και κατάφερε να λύσει προβλήματα με χρήση εξελικτικού προγραμματισμού, τα οποία δεν λυνόντουσαν εύκολα με γενετικούς αλγόριθμους.

Οι **γενετικοί αλγόριθμοι** είναι αλγόριθμοι που προσπαθούν να μιμηθούν διαδικασίες της βιολογικής εξέλιξης για να λύσουν ένα πρόβλημα. Για το σκοπό αυτό, δεν χρησιμοποιούν αναλυτικό / μαθηματικό τρόπο αλλά μηχανισμούς της Δαρβινικής θεωρίας της εξέλιξης. Στην ουσία είναι ευρετικοί αλγόριθμοι αναζήτησης (heuristics) .

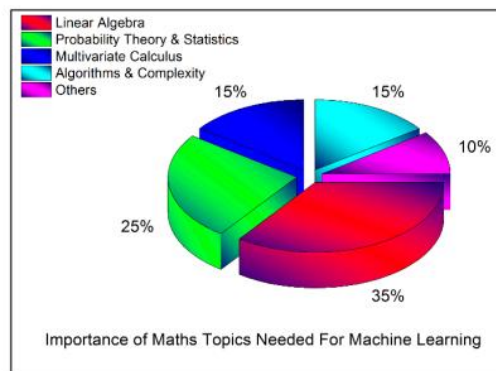
Ένας αλγόριθμος εκμάθησης **Τεχνητού νευρωνικού δικτύου**, που συνήθως ονομάζεται "νευρωνικό δίκτυο" (NN), είναι ένας αλγόριθμος μάθησης, που εμπνέεται από τη δομή και τις λειτουργικές πτυχές των βιολογικών νευρωνικών δικτύων. Η δομή των υπολογισμών βασίζεται σε μια ομάδα εσωτερικά διασυνδεδεμένων τεχνητών νευρώνων, οι οποίοι επεξεργάζονται την πληροφορία και εκτελούν υπολογισμούς επικοινωνώντας μεταξύ τους. Τα σύγχρονα νευρωνικά δίκτυα είναι εργαλεία μη γραμμικής στατιστικής μοντελοποίησης δεδομένων. Συνήθως χρησιμοποιούνται για τη μοντελοποίηση σύνθετων σχέσεων μεταξύ δεδομένων εισόδου και εξόδου, για την ανακάλυψη προτύπων στα δεδομένα, ή

για τον εντοπισμό στατιστικής δομής σε μία άγνωστη κοινή κατανομή πιθανότητας μεταξύ των παρατηρούμενων μεταβλητών.

2.2. Μαθηματικά της μηχανικής μάθησης

Η Μηχανική Μάθηση είναι ένα πεδίο που συνυπάρχουν πολλές επιστήμες όπως η στατιστική και η επιστήμη των υπολογιστών. Παρόλο που υπάρχουν πλέον πολλά έτοιμα, σχεδόν αυτοματοποιημένα, εργαλεία για Μηχανική και Βαθιά Μάθηση, η γνώση μαθηματικών είναι απαραίτητη για να καταλάβει κανείς πως ακριβώς δουλεύει ο κάθε αλγόριθμος. Έτσι, μπορεί κανείς να διαλέξει τον σωστό αλγόριθμο για κάθε περίπτωση συνεκτιμώντας πολλές παραμέτρους (ακρίβεια πρόβλεψης, χρόνος «εκπαίδευσης» αλγορίθμου, πολυπλοκότητα μοντέλου κλπ), να επιλέξει τις κατάλληλες στρατηγικές, να καταλάβει υπερεκτιμήσεις ή υποεκτιμήσεις και να εκτιμήσει σωστά το μέγεθος της αβεβαιότητας.

Στο παρακάτω διάγραμμα βλέπουμε ποια πεδία των μαθηματικών είναι πιο απαραίτητα για τη Μηχανική Μάθηση. Η απάντηση στο ερώτημα αυτό δεν είναι απλή οπότε ενδεικτικά αναφέρονται κάποιες ελάχιστες γνώσεις που χρειάζονται. Φαίνεται πως η γραμμική άλγεβρα, η θεωρία Πιθανοτήτων και η κατά Bayes προσέγγιση, η πολυμεταβλητή άλγεβρα, οι αλγόριθμοι και άλλες μαθηματικές θεωρίες είναι απαραίτητα για την κατανόηση πολλών τεχνικών Μηχανικής Μάθησης. Το καλό είναι ότι υπάρχουν πολλά μαθήματα και πηγές στο διαδίκτυο σχετικά με όλα αυτά τα θέματα.



Σχήμα 7. Πεδία μαθηματικών που είναι απαραίτητα για την μηχανική μάθηση

2.3. Η αλληλεπίδραση της έρευνας στη βελτιστοποίηση και τη μηχανική μάθηση

Η αλληλεπίδραση της Βελτιστοποίησης και της Εκμάθησης Μηχανών.

Η αλληλεπίδραση της βελτιστοποίησης και της μηχανικής μάθησης περιπλέκεται από το γεγονός ότι η μηχανική μάθηση συνδυάζει μοντελοποίηση και μεθόδους. Από την άποψη αυτή, η μηχανική μάθηση μοιάζει πολύ με την έρευνα των επιχειρήσεων (OR).

Ο μαθηματικός προγραμματισμός / βελτιστοποίηση είναι ιστορικά υποπεδίο της έρευνας των επιχειρήσεων. Ο μαθηματικός προγραμματισμός ασχολείται με την ανάλυση και την επίλυση αυτών. Οι αναλυτές και για την μηχανική μάθηση αλλά και για την έρευνα των επιχειρήσεων αντιμετωπίζουν προβλήματα του πραγματικού κόσμου διαμορφώνοντας ένα μοντέλο, αντλώντας το βασικό πρόβλημα βελτιστοποίησης και χρησιμοποιώντας το μαθηματικό προγραμματισμό για να το λύσουν. Έτσι, σε υψηλό επίπεδο, οι αναλυτές OR και ML αντιμετωπίζουν τα ίδια διλήμματα εγκυρότητας και ευκολίας και δεν αποτελεί έκπληξη ότι και οι δύο μπορούν να εκμεταλλευτούν την ίδια εργαλειοθήκη βελτιστοποίησης. Για ένα, πρακτικό πρόβλημα μηχανικής μάθησης, ο αναλυτής που ασχολείται με αυτό μπορεί να επιλέξει μία ή περισσότερες οικογένειες μοντελών μηχανικής μάθησης καθώς και μια κατάλληλη ή μη συνάρτηση σφάλματος ή και κατανομής και στη συνέχεια να αναζητήσει το κατάλληλο μοντέλο που αποδίδει καλά σύμφωνα με τα δεδομένα κατάρτισης. Αυτή η αναζήτηση δηλαδή περιλαμβάνει τυπικά έναν συνδυασμό προεπεξεργασίας δεδομένων και της βελτιστοποίησης. Ωστόσο, σε κάθε στάδιο της διαδικασίας μπορεί το σφάλμα να αυξηθεί από διάφορες πηγές που θα αναφερθούν παρακάτω και οι οποίες να υποβαθμίσουν την ποιότητα των επακόλουθων επαγωγικών συναρτήσεων. Επισημαίνουμε τρεις πηγές τέτοιων σφαλμάτων.

Η πρώτη πηγή σφάλματος είναι ότι η υποκείμενη αληθινή συνάρτηση καθώς και η συνάρτηση σφάλματος είναι άγνωστες, επομένως κάθε επιλογή εκπροσώπησης των δεδομένων, οικογένειας μοντέλων και συνάρτησης κόστους μπορεί να μην είναι κατάλληλη για το πρόβλημα.

Η δεύτερη πηγή σφάλματος πηγάζει από το γεγονός ότι μόνο ένα πεπερασμένο ποσό (ενδεχομένως θορυβώδες) δεδομένων είναι διαθέσιμο. Επομένως, ακόμη και αν επιλέξουμε κατάλληλες συναρτήσεις σφάλματος, μοντέλα και εκτιμήσεις, η μέθοδος ενδέχεται να παραγάγει αναξιόπιστα αποτελέσματα

Η τρίτη πηγή των σφαλμάτων έχει να κάνει με την δυσκολία του υπο αναζήτησης προβλήματος και του συγκεκριμένου προβλήματος μοντελοποίησης. Το πρόβλημα θα μπορούσε να μειωθεί με την επιλογή της κυρτής βελτιστοποίησης, των κατάλληλων συναρτήσεων σφάλματος και τους κατάλληλους περιορισμούς ή και χαλάρωσεων. Σε πολλές περιπτώσεις, τα μοντέλα μηχανικής μάθησης είναι κυρτά με ένα συγκεκριμένο καθορισμό των ορίων του συστήματος που ορίζουν τις παραμέτρους ως σταθερές.

Τόσο οι αλγόριθμοι της μηχανικής μάθησης καθώς και του μαθηματικού προγραμματισμού φαίνεται να υπολογίζουν αποτελεσματικά τις "κατάλληλες" λύσεις. Το πρότυπο που κάνει έναν αλγόριθμο αποτελεσματικό - πολυπλοκότητα, χρήση μνήμης κ.λπ. - είναι το ίδιο και για τις δύο. Αλλά υπάρχει ένα μεγάλο χάσμα μεταξύ αυτών, ως τι θεωρείται η κατάλληλη λύση. Στον μαθηματικό προγραμματισμό, οι "κατάλληλες" λύσεις είναι εκείνες που λύουν το μοντέλο με υψηλό βαθμό ακρίβειας και που μετράται από τις συνθήκες βέλτιστου.

Οι επιθυμητές ιδιότητες ενός αλγορίθμου βελτιστοποίησης της μηχανικής μάθησης είναι:

- καλή γενίκευση,
- δυνατότητα κλιμάκωσης σε μεγάλα προβλήματα,
- καλές επιδόσεις στην πράξη όσον αφορά τους χρόνους εκτέλεσης και των απαιτήσεων μνήμης,
- απλή και εύκολη εφαρμογή αλγορίθμου
- γρήγορη σύγκλιση προς μια κατά προσέγγιση λύση του μοντέλου,

- *ευρωστία και αριθμητική σταθερότητα για τις δοκιμασμένες κλάσεις μηχανικών μοντέλων μάθησης,*
- *θεωρητικά γνωστή σύγκλιση και πολυπλοκότητα.*

Μοντέλα μηχανικής μάθησης που χρησιμοποιούν τις υπάρχουσες μεθόδους βελτιστοποίησης.

Περιλαμβάνονται κυρίως καινοτόμα μοντέλα μηχανικής μάθησης βασισμένα σε υπάρχοντα μοντέλα όπως είναι διάφορα κυρτά προγράμματα πχ γραμμικό προγραμματισμό και προγραμματισμό κώνου δεύτερης τάξης αλλά και ημιορισμένος προγραμματισμός. Αναπτύσσονται νέες προσεγγίσεις μοντελοποίησης για την αβεβαιότητα, την επιλογή υποθέσεων, τους περιορισμούς και τα γραφήματα

Χρήση κωνικού προγραμματισμού δεύτερης τάξης

Στην προκειμένη περίπτωση η χρήση κωνικού προγραμματισμού δευτέρας τάξης αποτελεί μία επέκταση των στοχαστικών μεθόδων για παρατηρήσεις ελλειπείς ή αβέβαιες. (1)

Κυρτά μοντέλα για επιλογή υποθέσεων

Τα κυρτά μοντέλα απευθύνονται στην επιλογή υποθέσεων. Σκοπός είναι η απόδοση μίας μικρότερης ομάδας δεδομένων να είναι εξίσου αποτελεσματική με μία μεγαλύτερη. Το άρθρο “Ensemble Pruning Via Semi-Definite Programming” (Zhang et al., 2006), ακριβώς αποδεικνύει ,ότι μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε προβλήματα μεγάλης κλίμακας.

Μοντέλα με πλευρικούς περιορισμούς

Βελτιστοποίηση με περιορισμούς. Ο Niculescu et al. (2)(2006)–στο άρθρο μάθηση σε μπαγεσιανά δίκτυα και με παραμετρικούς περιορισμούς–“Bayesian Network Learning with Parameter Constraints” - χρησιμοποιεί περιορισμούς που τους ενσωματώνει στα μπαγεσιανά δίκτυα.

Ασχολούνται με τους υπάρχοντες αλγόριθμους βελτιστοποίησης για να λύσουν τα μοντέλα ενώ ταυτόχρονα βελτιώνουν και την γενίκευση.

Μέθοδοι κυρτου ημικαθορισμένου προγραμματισμού για συσσωμάτωση γραφημάτων.

Το άρθρο “Fast SDP Relaxations of Graph Cut Clustering, Transduction, and Other Combinatorial Problems” (3), προτείνει μια χαλάρωση της στοχαστικής μεθόδου SDP σε ένα κανονικοποιημένο πρόβλημα μείωσης. Ουσιαστικά η συνδυαστική βελτιστοποίηση οδηγεί από ένα πολυσύνθετο πρόβλημα σε ένα πιο απλό πρόβλημα αντλώντας δεδομένα από ένα μικρότερο υποσύνολο.

Εφαρμογή Μεθόδων της Μαθηματικής Βελτιστοποίησης στη Μηχανική Μάθηση

3.1 Μεικτός ακέραιος προγραμματισμός για μηχανική μάθηση

Αν γνωρίζουμε ότι όλες οι μεταβλητές ενός προβλήματος γραμμικού προγραμματισμού είναι ακέραιες τότε το πρόβλημα αναφέρεται ως πρόβλημα ακέραιου προγραμματισμού. Αν μόνο μερικές από τις μεταβλητές του προβλήματος είναι ακέραιες τότε το πρόβλημα λέγεται ότι είναι πρόβλημα μεικτού ακέραιου προγραμματισμού. Ο ακέραιος προγραμματισμός έχει καθιερωθεί ως ένας αποδοτικός τρόπος για την επίλυση δύσκολων προβλημάτων συνδυαστικής βελτιστοποίησης που παρουσιάζουν πρακτικό ενδιαφέρον. Ο αλγόριθμος branch and bound και οι τεχνικές cutting plane αποτελούν τις δύο κύριες ιδέες στις οποίες στηρίχθηκε η επιτυχής εφαρμογή του.

Περίληπτικά αναφέρουμε ότι ο Αλγόριθμος Branch and bound (BB, B & B ή BnB), είναι ένα παράδειγμα σχεδιασμού αλγορίθμου για διακριτά και συνδυαστικά προβλήματα βελτιστοποίησης καθώς και μαθηματικής βελτιστοποίησης. Η βασική ιδέα είναι η χρήση μιας στρατηγικής διαχωρισμού και επέκτασης με την οποία γεννώνται οι λύσεις του προβλήματος, ενώ ταυτόχρονα απομακρύνονται/διαγράφονται περιοχές του διαστήματος των λύσεων. Με αυτό τον τρόπο αποφεύγεται η ολοκληρωτική αξιολόγηση όλων των 0-1 συνδυασμών, ενώ εξασφαλίζεται η εύρεση μιας λύσης. Ο αλγόριθμος αποτελείται από μια συστηματική απαρίθμηση των υποψήφιων λύσεων μέσω της αναζήτησης χώρου και το σύνολο των υποψήφιων λύσεων θεωρείται ότι σχηματίζει ένα ριζωμένο δέντρο με το πλήρες σύνολο στη ρίζα. Ο αλγόριθμος διερευνά τους κλάδους αυτού του δέντρου, που αντιπροσωπεύουν υποσύνολα της σειράς λύσεων και εξαρτάται από την αποτελεσματική εκτίμηση των κατώτερων και ανώτερων ορίων των περιοχών / κλάδων του χώρου αναζήτησης. Αν δεν υπάρχουν όρια, ο αλγόριθμος εκφυλίζεται σε μια εξαντλητική αναζήτηση.

Στη μαθηματική βελτιστοποίηση, η μέθοδος cutting plane είναι οποιαδήποτε ποικιλία μεθόδων βελτιστοποίησης που εξειδικεύουν διαδοχικά μια εφικτή ομάδα ή μια αντικειμενική συνάρτηση μέσω γραμμικών ανισοτήτων, που ονομάζονται περικοπές. Τέτοιες διαδικασίες χρησιμοποιούνται συνήθως για την εξεύρεση λύσεων ακέραιων τύπων σε προβλήματα μικτού ακέραιου γραμμικού προγραμματισμού (MILP), καθώς και για την επίλυση γενικών, όχι απαραίτητα διαφοροποιήσιμων κυρτών προβλημάτων βελτιστοποίησης. Συχνά το ίδιο πρόβλημα μπορεί να διατυπωθεί με διαφορετικά εναλλακτικά μοντέλα ακεραίου προγραμματισμού. Ωστόσο παρατηρείται το φαινόμενο κάποιο μοντέλο να οδηγεί σε λύση μέσα σε αποδεκτά χρονικά πλαίσια ενώ κάποια άλλα μοντέλα να αδυνατούν να επιλύσουν το πρόβλημα ακόμα και για μικρά μεγέθη δεδομένων σε λογικό χρόνο. Συνεπώς η επιλογή του κατάλληλου μοντέλου ισοδυναμεί πολλές φορές και με την ύπαρξη πρακτικής λύσης για ένα πρόβλημα. Μια βασική αρχή δημιουργίας αποδοτικών μοντέλων είναι η χρήση γραμμικών χαλαρώσεων (linear relaxation)

Μεικτός ακέραιος γραμμικός προγραμματισμός

Τα πλεονεκτήματα που παρουσιάζονται σε αυτήν την κατηγορία είναι το γραμμικό κόστος, οι γραμμικοί περιορισμοί και οι ακέραιες και συνεχείς μεταβλητές. Η μορφή που παίρνει η συνάρτηση σε αυτήν την κατηγορία μαζί με τους περιορισμούς είναι η παρακάτω και ουσιαστικά φαίνεται καθαρά ότι σκοπός μας είναι η ελαχιστοποίηση κάποιας συνάρτησης λαμβάνοντας υπόψη τους περιορισμούς αυτούς.

$$\begin{aligned} \min_{w \in \mathbb{R}^p, z \in \mathbb{N}^q} f(w, z) &= c^t w + d^t z \quad (\text{γραμμική}) \\ A w + B z &< b \quad (\text{γραμμική}) \\ w &> 0 \\ \text{όπου } c &\in \mathbb{R}^p, D \in \mathbb{R}^m, A \in \mathbb{R}^{m \times p}, B \in \mathbb{R}^{m \times q}, \text{ και } d \in \mathbb{R}^q \end{aligned}$$

Παραλλαγή του παραπάνω είναι ο μεικτός δυαδικός γραμμικός προγραμματισμός όπου $z \in \{0,1\}^q$

Μεικτός ακέραιος τετραγωνικός προγραμματισμός

Πλεονεκτήματα εδώ είναι

1. τετραγωνικό κόστος,
2. γραμμικοί περιορισμοί
3. και ακέραιες-συνεχείς μεταβλητές.

$$\begin{aligned} \min_{x - (z, w) \in \mathbb{R}^p, z \in \mathbb{N}^q} f(x) \\ = 1/2 x^t Q x + c^t x \quad (\text{τετραγωνική μορφή}) \\ A x < b \quad (\text{γραμμική}) \\ x > 0 \\ \text{όπου } Q &\in \mathbb{R}^{(p+q)(p+q)} \end{aligned}$$

Λογισμικό εμπορικής κλίμακας που χρησιμοποιείται για την επίλυση προβλημάτων μεικτου ακέραιου προγραμματισμού και μεικτού ακέραιου τετραγωνικού προγραμματισμού είναι οι CPLEX, MATLAB, GUROBI, Xpress, SCIP.

3.2. Μη-κυρτή Βελτιστοποίηση

Η γενική μορφή ενός προβλήματος βελτιστοποίησης είναι της ακόλουθης μορφής

$$\min f(x) \quad x \in R_p$$

όπου $x \in C$, που αποτελεί μεταβλητή του προβλήματος,

$f: R_p \rightarrow R$ είναι η αντικειμενική συνάρτηση του προβλήματος και

$C \subseteq R_p$ είναι ομάδα περιορισμών του προβλήματος.

Όταν χρησιμοποιείται η συνάρτηση στην εκμάθησης μηχανής, αυτή επιτρέπει στον σχεδιαστή του αλγορίθμου να κωδικοποιεί την κατάλληλη και την λαμβάνουσα συμπεριφορά του μοντέλου εκμάθησης όπως πχ στο ταίριασμα των δεδομένων εκπαίδευσης σε σχέση με την συνάρτηση σφάλματος ενώ οι περιορισμοί επιτρέπουν την κωδικοποίηση περιορισμών στο μοντέλο, για παράδειγμα, περιορισμούς που αφορούν στο μέγεθος του μοντέλου. Ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης λέγεται ότι είναι κυρτό όταν ο στόχος είναι μια κυρτή συνάρτηση, καθώς και το σύνολο περιορισμού είναι ένα κυρτό σύνολο.

Κίνητρα για Μη Κυρτή Βελτιστοποίηση.

Οι σύγχρονες εφαρμογές απαιτούν συχνά τους αλγόριθμους μάθησης να λειτουργούν σε εξαιρετικά μεγάλες διαστάσεις. Παραδείγματα περιλαμβάνουν προβλήματα ταξινόμησης εγγράφων ιστού σε ηλεκτρονική μορφή, συστήματα με εκατομμύρια στοιχεία τα οποία να απευθύνονται σε εκατομμύρια χρήστες αλλά και καθήκοντα επεξεργασίας σήματος όπως εργασίες αναγνώρισης προσώπου και εικόνας σε προβλήματα βιοπληροφορικής ως ανίχνευση συγκόλλησης και γονιδίων, τα οποία παρουσιάζουν όμοια δεδομένα μεγάλων διαστάσεων. Η αντιμετώπιση τέτοιων προβλημάτων σε προβλήματα τέτοιων διαστάσεων απαιτεί την επιβολή διαρθρωτικών περιορισμών στα μαθησιακά μοντέλα που εκτιμώνται από δεδομένα. Σε άλλες εφαρμογές, ο φυσικός στόχος της μαθησιακής λειτουργίας είναι μια μη κυρτή λειτουργία. Οι βασικοί στόχοι και οι περιορισμοί, μας επιτρέπουν να διαμορφώνουμε με ακρίβεια μαθησιακά προβλήματα ενώ συχνά παρουσιάζουν μια τεράστια πρόκληση για τους σχεδιαστές αλγορίθμων. Αυτό συμβαίνει διότι, αντίθετα με τη βελτιστοποίηση, δεν διαθέτουμε ένα εύχρηστο σύνολο εργαλείων για την επίλυση μη κυρτών προβλημάτων. Πολλά μη κυρτά προβλήματα είναι δύσκολο να επιλυθούν.

Παραδείγματα μη κυρτών προβλημάτων βελτιστοποίησης

Παρακάτω παρουσιάζουμε μερικές περιπτώσεις όπου προκύπτουν μη κυρτά προβλήματα βελτιστοποίησης κατά την εκπόνηση μαθησιακών προβλημάτων.

Παλινδρόμηση (Sparse Regression). το κλασικό πρόβλημα της γραμμικής παλινδρόμησης επιδιώκει να ανακτήσει ένα γραμμικό μοντέλο που μπορεί να προβλέψει αποτελεσματικά μια μεταβλητή ως γραμμική συνάρτηση συνδιακυμάνσεων

Για παράδειγμα, ίσως να επιθυμούμε να προβλέψουμε τη μέση δαπάνη ενός νοικοκυριού ως συνάρτηση των επιπέδων εκπαίδευσης των μελών του νοικοκυριού, των ετήσιων μισθών τους και των άλλων σχετικών δεικτών (των ομοιοτήτων). Η ικανότητα να εφαρμόσουμε ένα μοντέλο μηχανικής μάθησης, μας

επιτρέπει την καλύτερη πληροφόρηση σε θέματα αποφάσεων οικονομικής πολιτικής, για παράδειγμα, πώς επηρεάζει το επίπεδο της εκπαίδευσης, την κατανάλωση και την οικονομική ευημερία. Περισσότερο τυπικά, μας παρέχεται ένα σύνολο μεταβλητών εισόδου και εξόδου $(x_i, y_i), \dots, (x_n, y_n)$ όπου $x_i \in \mathbb{R}_p$ και $y_i \in \mathbb{R}$. Η προσέγγιση γραμμικής παλινδρόμησης καθιστά την παραδοχή μοντελοποίησης

$$y_i = x_i^T w^* + \tau_k$$

όπου

$w^* \in \mathbb{R}^p$ είναι παράγοντας της γραμμικής παλινδρόμησης που εκφράζει την σχέση μεταξύ της μεταβλητής εισόδου και εξόδου ενώ ο παράγοντας τ_k εκφράζει τον θόρυβο.

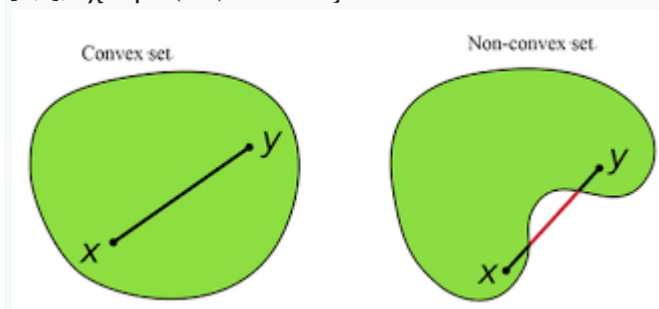
Χρησιμοποιώντας τα δεδομένα που παρέχονται $\{x_i, y_i\}$ όπου $i = 1, \dots, n$, θέλουμε να έχουμε ένα μοντέλο όσο πιο πιστά γίνεται. Ένας δημοφιλής τρόπος για να ανακτήσει το w^* είναι να χρησιμοποιηθεί η μέθοδος των ελάχιστων τετραγώνων όπου $w = \arg \min_{w \in \mathbb{R}^p} \sum_{i=1}^n (y_i - x_i^T w)^2$.

Το πρόβλημα γραμμικής παλινδρόμησης καθώς και ο εκτιμητής ελάχιστων τετραγώνων, είναι εξαιρετικά καλά μελετημένοι παράμετροι και η συμπεριφορά τους είναι γνωστή. Εδώ ωστόσο μπορούν να προκύψουν θέματα όσον αφορά την ψευδοτητα ή ακόμα και την μη επίδραση κάποιων μεταβλητών στο αποτέλεσμα.

Μαθηματικά εργαλεία για την μη κυρτή βελτιστοποίηση

Θεώρημα 1^ο. Ένας κυρτός συνδυασμός ενός συνόλου n παραγόντων $x_i \in \mathbb{R}^p$, $i = 1 \dots n$ σε έναν αυθαίρετα πραγματικό χώρο είναι ένας παράγοντας όπου $x_\theta := \sum_{i=1}^n \theta_i x_i$ όπου $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n)$, $\theta_i \geq 0$ και $\sum_{i=1}^n \theta_i = 1$.

Θεώρημα 2^ο. Ένα n -διάστατο σύνολο C καλείται κυρτό όταν το ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει οποιοδήποτε ζεύγος σημείων $(X, Y) \in C$ βρίσκεται ολόκληρο εντός του συνόλου. Σε κάθε άλλη περίπτωση το σύνολο λέγεται μη κυρτό. Δηλαδή ένα σύνολο $C \in \mathbb{R}_p$ θεωρείται κυρτό αν, για κάθε $x, y \in C$ και $\lambda \in [0, 1]$, έχουμε $(1-\lambda) \cdot x + \lambda \cdot y \in C$.



Σχήμα 8^ο. κυρτός και μη κυρτός συνδυασμός

Θεώρημα 3^ο. Μια συνεχής διαφοροποιήσιμη συνάρτηση $f: \mathbb{R}_p \rightarrow \mathbb{R}$ θεωρείται κυρτή εάν για κάθε $y \in \mathbb{R}_p$ έχουμε

$$f(y) \geq f(x) + (\nabla f(x), y-x), \text{ όπου } \nabla f(x) \text{ είναι η κλίση της } f \text{ στο } x.$$

3.3. Πολυδιάστατη βελτιστοποίηση σμήνους

Ο όρος της νοημοσύνης σμήνους (swarm intelligence) εισήχθη από τους ειδικούς της τεχνητής νοημοσύνης (artificial intelligence). Ονόμασαν έτσι την συλλογική συμπεριφορά μη κατανοημένων, αυτο-οργανωμένων φυσικών ή τεχνητών συστημάτων. Η κύρια πηγή έμπνευσης της νοημοσύνης σμήνους εμφανίζεται στη φύση, στον τρόπο οργάνωσης φυσικών οργανισμών όπως οι αποικίες μυρμηγκιών, τα σμήνη πτηνών, η συμπεριφορά των μελισσών στις κυψέλες και πολλά άλλα τα οποία παρουσιάζουν μια οργανωμένη συλλογική συμπεριφορά χωρίς να παίρνουν οδηγίες από κανέναν. Παρατηρώντας για παράδειγμα τα μυρμηγκία κατά τη μεταφορά της τροφής τους, βλέπουμε ότι ξεκινούν όλα από το ίδιο σημείο και ενώ στην αρχή ακολουθεί το καθένα ξεχωριστές διαδρομές στη συνέχεια, χωρίς να τους έχουν δοθεί συγκεκριμένες οδηγίες για την πορεία που πρέπει να ακολουθήσουν, βρίσκουν τον βέλτιστο τρόπο (πιο γρήγορο γι' αυτά) έτσι ώστε να μεταφέρουν τρόφιμα στην αποικία τους και πραγματοποιούν όλα την ίδια διαδρομή. Ακόμα και τα σμήνη πτηνών κατά τη μετανάστευση τους παρ' ότι αποτελούνται από πολλές ανεξάρτητες οντότητες (πτηνά) κινούνται συλλογικά σαν ένα σώμα ακολουθώντας μια κοινή πορεία και σχηματισμό. Παρατηρούμε δηλαδή πως παρόλο που αυτοί οι οργανισμοί ατομικά διαθέτουν σχετικά περιορισμένες ικανότητες, σαν σύνολο μπορούν να πραγματοποιήσουν αρκετά σύνθετες ενέργειες. Καταλήγουμε έτσι ότι τα ευφυή αυτά συστήματα λειτουργούν σαν μια οντότητα, η οποία ανιχνεύει το άμεσο της περιβάλλον προκειμένου να διαλέξει τη βέλτιστη για το σύστημα ενέργεια. Χωρίς να παίρνουν οδηγίες από κάποιον η κάθε οντότητα λειτουργεί αυτόνομα και οδηγείται σε μια συλλογική συμπεριφορά. Σε ένα τυπικό σύστημα νοημοσύνης σμήνους παρατηρούμε κάποια γνωρίσματα. Αρχικά αποτελείται από πολλά άτομα.

Τα άτομα αυτά χαρακτηρίζονται από ομοιογένεια χωρίς να είναι απαραίτητα πανομοιότυπα. Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των μελών του συστήματος βασίζονται σε απλούς κανόνες συμπεριφοράς που χρησιμοποιούν μόνο τις πληροφορίες που τα μέλος ανταλλάσσουν άμεσα είτε μεταξύ τους είτε μέσω του περιβάλλοντος τους. Η συνολική συμπεριφορά του συστήματος απορρέει από τις αλληλεπιδράσεις των μεταξύ της μελών και με τα περιβάλλον τους (το σύστημα αυτόοργανώνεται).

Συχνά η συμπεριφορά των ατόμων/μελών του σμήνους μπορούν να περιγραφούν με πιθανολογικούς όρους. Κάθε άτομο έχει μια στοχαστική συμπεριφορά που εξαρτάται από την αντίληψη του εκάστοτε περιβάλλοντος του. Λόγω των παραπάνω ιδιοτήτων είναι δυνατό να σχεδιάσουμε ένα ευφυές σύστημα που θα μπορεί να είναι επεκτάσιμο, παράλληλο και με ανοχή σφαλμάτων. Τεχνικές που έχουν σαν βάση τη νοημοσύνη σμήνους χρησιμοποιούνται ευρέως σε πολλούς τομείς της επιστήμης, των μαθηματικών και της ιατρικής. Συγκεκριμένα ο στρατός ερευνά τεχνικές για τον έλεγχο επανδρωμένων τηλεκατευθυνόμενων οχημάτων. Η NASA ερευνά τη χρήση της νοημοσύνης σμήνους για χαρτογράφηση πλανητών.

Αλγόριθμος Βελτιστοποίησης Σμήνους Σωματιδίων (Particle Swarm Optimization) Ένας μεγάλος αριθμός αλγορίθμων αναπτύχθηκε με σκοπό την επίλυση των προβλημάτων βελτιστοποίησης. Διαχωρίστηκαν είτε σε αλγόριθμους που είναι καθαρά μαθηματικής μορφής, τους ονομαζόμενους μαθηματικούς αλγόριθμους είτε σε αλγόριθμους με πηγή έμπνευσης τη φύση. Οι παρατηρήσεις του ανθρώπου και της επιστημονικής κοινότητας σε συμπεριφορές που εμφανίζουν διάφοροι οργανισμοί στη φύση όπως είδαμε και παραπάνω (σμήνος πτηνών, αποικίες μυρμηγκιών κ.τ.λ.) στη νοημοσύνη σμήνους, αποτέλεσαν πηγή έμπνευσης για τη δημιουργία νέων αλγορίθμων. Κυρίως μετά το 2000 αναπτύχθηκαν ιδιαίτερα οι αλγόριθμοι οι οποίοι είναι εμπνευσμένοι από τη φύση.

Κύριο παράδειγμα αλγορίθμων εμπνευσμένων από τη φύση αποτελούν και οι Εξελικτικοί Αλγόριθμοι (Evolutionary Algorithms EA). Οι Γενετικοί Αλγόριθμοι (Genetic Algorithms GA) είναι από τα κυριότερα

παράγωγα των εξελικτικών αλγορίθμων και είναι εμπνευσμένοι από τη Δαρβινική θεωρία. Στη συνέχεια δημιουργήθηκαν οι αλγόριθμοι Νοημοσύνης Σμήνους (Swarm Intelligence SI) με γνωστότερους την Αποικία των Μυρμηγκιών (Ant Colony ACO), τη Βελτιστοποίηση σμήνους σωματιδίων (Particle Swarm Optimization PSO) και την Αποικία των Μελισσών (Bee Colony BCA). Αυτό που διαφοροποιεί τους γενετικούς αλγορίθμους από τις υπόλοιπες μεθόδους βελτιστοποίησης είναι ότι χαρακτηρίζονται και ως μεθευρετικοί αλγόριθμοι. Αυτό σημαίνει ότι αναζητά τη βέλτιστη λύση σε ολόκληρο τον διαθέσιμο πληθυσμό και χαρακτηρίζονται από σχολαστικότητα. Ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης σμήνους σωματιδίων, particle swarm optimization (PSO), τον οποίο και θα μελετήσουμε, είναι μια έννοια που εισήχθη από τους James Kennedy και Russell Eberhart (4) το 1995 ως αλγόριθμος βελτιστοποίησης υπολογιστικής νοημοσύνης που αναπτύχθηκε ενώ παρατούσαν οι παραπάνω τη συμπεριφορά που παρουσίαζε ένα σμήνος πτηνών, και τελειοποιήθηκε από τους Kennedy, Eberhart και Shi το 2001(5). Σκοπός του αρχικά ήταν η προσομοίωση της κοινωνικής συμπεριφοράς διαφόρων έμβιων οργανισμών, αφού απλοποιήθηκε ο αλγόριθμος παρατηρήθηκε ότι επήλθε βελτιστοποίηση. Χαρακτηρίστηκε έτσι ως εξελικτικός μεθευρετικός αλγόριθμος βελτιστοποίησης. Στον αλγόριθμο βελτιστοποίησης σμήνους σωματιδίων παρατηρείται ένα σύνολο από σωματίδια τα οποία αναζητούν τη βέλτιστη λύση σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης που τους έχει δοθεί. Το κάθε ένα από αυτά τα σωματίδια αποτελεί και αυτόνομα λύση στο πρόβλημα βελτιστοποίησης αλλά με βάσει τα ερεθίσματα που δέχεται από τα γειτονικά του σωματίδια ή και ακόμα από την ίδια του την εμπειρία επιλέγει τον τρόπο με τον οποίο θα μπορεί να κινηθεί στο χώρο. Αυτό που τον ξεχωρίζει από τους υπόλοιπους γενετικούς αλγορίθμους είναι η ικανότητα του να “θυμάται” και να συγκρατεί λύσεις που έχει βρει στο παρελθόν και να τις αξιοποιεί όποτε εμφανιστεί παρόμοιο πρόβλημα. Για να δούμε και πρακτικά αυτό που συμβαίνει, κατά την φάση της προετοιμασίας κάθε ένα από τα σωματίδια του συστήματος μας διαθέτει μια τυχαία αρχική θέση και μια τυχαία ταχύτητα έτσι αντίστοιχα η θέση του αυτή αποτελεί μια πιθανή λύση στο πρόβλημα μας και έχει μια τιμή που ορίζεται στη συνάρτηση του συστήματος. Το σωματίδιο κινείται μέσα στο πολυδιάστατο χώρο που έχει οριστεί και αποθηκεύει κάθε 17 φορές τη βέλτιστη λύση.

Η ταχύτητα που κινείται το εκάστοτε σωματίδιο στην κάθε επανάληψη είναι ένα άθροισμα παραγόντων:

- Της προηγούμενης του ταχύτητας.
- Μιας συνιστώσας της προηγούμενης του ταχύτητας που το οδηγεί στην αναζήτηση της νέας καλύτερης τοποθεσίας που μπορεί να πετύχει σε σχέση με την προηγούμενη καλύτερη λύση που είχε πετύχει, το ατομικό βέλτιστο (pbest).
- Και τέλος μια συνιστώσα της ταχύτητας για την νέα του θέση, η οποία βασίζεται στη ανατροφοδότηση που λαμβάνει από τα γειτονικά του σωματίδια και την καλύτερη λύση που είχαν βρει αυτά, το λεγόμενο καθολικό βέλτιστο.
- Δυο από τις σημαντικές εκδοχές της μελέτης βελτίωσης του σμήνους είναι το ατομικό βέλτιστο (Br) και το καθολικό βέλτιστο (global best ή Bg). Στην πορεία μέσα από αποτελέσματα πειραμάτων προστέθηκε ακόμα και μια άλλη εκδοχή που είναι το τοπικό βέλτιστο (local best ή Bl). Στην εκδοχή αυτή τα σωματίδια επικοινωνούν μόνο με τα γειτονικά τους και αντλούν τις πληροφορίες τους από αυτά και όχι από το συνολικό σμήνος, σε αντίθεση με το καθολικό βέλτιστο. Έχει αποδειχθεί ότι σε περιπτώσεις όπου ο πληθυσμός του σμήνους δεν είναι αρκετά

μεγάλος η χρήση του τοπικού βέλτιστου είναι πιο αποδοτική καθώς χρησιμοποιεί μικρότερο αριθμό εντολών και πράξεων για να καταλήξει στο επιθυμητό αποτέλεσμα

Ο δε αλγόριθμος του σμήνους παρουσιάζεται στο παρακάτω σχήμα



Basic PSO algorithm

- **New Velocity**

$$v_i(k+1) = v_i(k) + \gamma_{1i}(p_i - x_i(k)) + \gamma_{2i}(G - x_i(k))$$
 - **New Position**

$$x_i(k+1) = x_i(k) + v_i(k+1)$$
- i – particle index
 k – discrete time index
 v_i – velocity of i th particle
 x_i – position of i th particle
 p_i – best position found by i th particle (personal best)
 G – best position found by swarm (global best, best of personal bests)
 $g_{(1,2)i}$ – random numbers on the interval $[0,1]$ applied to i th particle

Επεξηγήσεις.

I: ταυτοτητα σωματιδίου

K:χρονος

V_i :ταχύτητα σωματιδίου

X_i :θεση σωματιδίου

P_i :καλύτερη θέση του σωματιδίου

G :καλύτερη θέση του σμήνους

$G_{(1,2)i}$:τυχαία νουμερα στο διαστημα $[0,1]$

Με λίγα λόγια μπορούμε να πούμε ότι σκοπός του αλγορίθμου είναι να βρει τη βέλτιστη λύση χρησιμοποιώντας ένα «σμήνος από σωματίδια» για την αναζήτηση μέσα στον χώρο του προβλήματος. Τα σωματίδια αυτά δεν είναι άλλο παρά πολυδιάστατα διανύσματα που αναπαριστούν θέσεις/λύσεις. Ένα σωματίδιο λοιπόν λαμβάνει μια θέση η οποία αναπαριστά μια πιθανή λύση του προβλήματος. Η λύσεις αυτές αξιολογούνται από μια συνάρτηση προσαρμογής (fitness function) που έχει προκαθοριστεί, ώστε να προκύψει η βέλτιστη λύση. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται πολλές φορές ώστε να βρεθεί η βέλτιστη θέση/λύση ανάμεσα σε όλα τα σωματίδια, δηλαδή να βρεθεί το σωματίδιο εκείνο, του οποίου η θέση αναπαριστά την βέλτιστη λύση. Σε κάθε επανάληψη κάθε σωματίδιο υπολογίζει το «προσωπικό» του βέλτιστο (την καλύτερη λύση που βρήκε μέχρι τώρα) ενώ ανάμεσα στα σωματίδια υπολογίζεται το ολικό βέλτιστο (το βέλτιστο όλων των προσωπικών βέλτιστων μέχρι τώρα).

Κατά την πρώτη επανάληψη τα σωματίδια παίρνουν τυχαίες θέσεις στον χώρο ενώ στις επόμενες αλλάζουν θέση με βάση την συνάρτηση της «ταχύτητάς» τους. Η ταχύτητα δηλαδή είναι ένα άλλο

διάνυσμα που υπολογίζεται με βάση μια συνάρτηση η οποία εμπεριέχει στοιχεία τυχαιότητας και καθορίζει τη θέση ενός σωματιδίου στην επόμενη επανάληψη. Στην πρώτη επανάληψη η ταχύτητα παίρνει μια τυχαία τιμή μεταξύ μιας ελάχιστης και μιας μέγιστης τιμής. Η συνάρτηση αυτή λαμβάνοντας υπόψη τα προσωπικά και ολικά βέλτιστα επηρεάζει τη θέση του σωματιδίου στην επόμενη επανάληψη και «έλκεται» από το προσωπικό και το ολικό βέλτιστο σε διαφορετικό βαθμό.

Το διάνυσμα X υπολογίζεται με την παρακάτω συνάρτηση:

$$X^i(t+1) = X^i(t) + V^i(t+1)$$

Όπου i είναι ο αριθμός του σωματιδίου του σμήνους πχ αν το σμήνος αποτελείται από N σωματίδια τότε $i=1,2,\dots,N$ και t είναι η επανάληψη, άρα εάν E ο αριθμός των συνολικών επαναλήψεων τότε $t=0,2,\dots,E-1$.

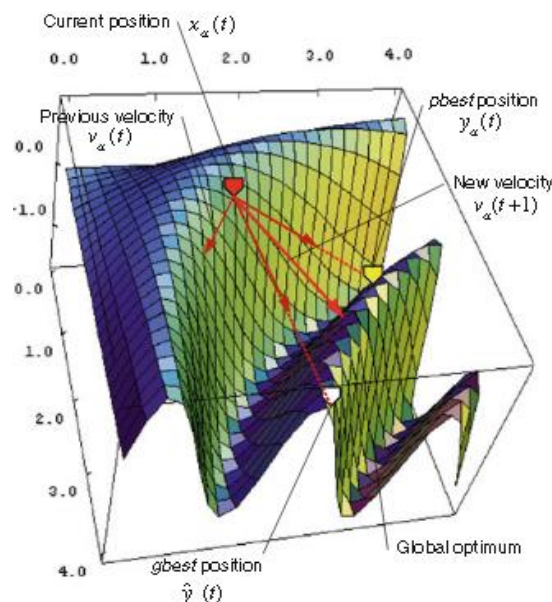
Το διάνυσμα V υπολογίζεται με την συνάρτηση:

$$V_i(t+1) = W \times V^i(t) + C_1 \times U(0,1) \otimes (pbest(t) - X^i(t)) + C_2 \times U(0,1) \otimes (pglobal(t) - X^i(t))$$

Όπου τα διανύσματα B_g και B_i είναι το ολικό και το προσωπικό βέλτιστο αντίστοιχα, C_1 ονομάζεται και εμπειρική παράμετρος και ορίζεται από τον χρήστη για να αντισταθμίσει την ταχύτητα ως προς το προσωπικό βέλτιστο. Αντίστοιχα C_2 ονομάζεται παράμετρος που αντισταθμίζει την ταχύτητα ως προς το ολικό βέλτιστο. $U(0,1)$ είναι μια συνάρτηση που επιστρέφει ένα τυχαίο διάνυσμα που παράγεται μέσω κανονικής κατανομής στο πεδίο $[0,1]$. Ο τελεστής \otimes δηλώνει το εσωτερικό γινόμενο των διανυσμάτων. Τέλος ο παράγοντας W αντισταθμίζει την ταχύτητα ως προς την προηγούμενη τιμή της ταχύτητας του σωματιδίου.

Επίσης η ταχύτητα παίρνει τιμές ανάμεσα σε ένα μέγιστο και ένα ελάχιστο όριο $[V_{max}, V_{min}]$.

Η πορεία των σωματιδίων φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 8°. Εξεύρεση του βέλτιστου σημείου και διαφορές με τρέχουσα θέση σωματιδίου αλλά και βέλτιστη θέση σημείου.

Όπως μπορεί να διαπιστωθεί, εάν η τιμή της ταχύτητας δεν υπόκειται σε κανέναν περιορισμό, η θέση του σωματιδίου μπορεί εύκολα να βγει εκτός ορίων του χώρου αναζήτησης, να ψάχνει για λύσεις δηλαδή που δεν ορίζονται στο πρόβλημα. Για την εξομάλυνση του προβλήματος αυτού, χρησιμοποιείται μια τεχνική περιορισμού της ταχύτητας που ονομάζεται "velocity clamping". Για έναν χώρο αναζήτησης με τιμές στο διάστημα $[x_{\min}, x_{\max}]$ όπου $x_{\min} = -x_{\max}$, η τεχνική αυτή περιορίζει την ταχύτητα σε ένα διάστημα $[v_{\min}, v_{\max}]$ με $v_{\max} = k \times x_{\max}$ και $v_{\min} = -v_{\max}$, όπου το k είναι μια σταθερά που ορίζεται από τον χρήστη και $0,1 \leq k \leq 1$.

Παρατηρώντας την εξίσωση της ταχύτητας βλέπουμε ότι αυτή επηρεάζεται από την απόσταση της τρέχουσας θέσης με το προσωπικό και το ολικό βέλτιστο ταυτόχρονα. Όσο πιο μακριά είναι η τρέχουσα θέση από τα βέλτιστα τόσο πιο πολύ μεγαλώνουν οι διαφορές $B - X$. Παράλληλα όμως οι διαφορές ρυθμίζονται από τους παράγοντες C και από την τυχαία τιμή της $U(0,1)$. Συνεπώς θεωρούμε πως κοντά στο τοπικό και ολικό βέλτιστο βρίσκεται πιθανώς η τελική βέλτιστη λύση, έτσι οι διαφορές $B - X$ μειώνονται ώστε να μειωθεί και η ταχύτητα με σκοπό τα σωματίδια να πάρουν τις επόμενες τιμές τους γύρω από αυτές τις περιοχές. Βλέπουμε επίσης ότι υπάρχουν παράγοντες (πχ διάνυσμα $U(0,1)$) που προσδίδουν μια τυχαιότητα στη συνάρτηση της ταχύτητας έτσι ώστε να υπάρχουν πιθανότητες διαφυγής από τοπικά βέλτιστα που μπορεί να «παγιδεύσουν» τα σωματίδια και να επηρεάσουν αρνητικά την τελική λύση.

Πλεονεκτήματα του αλγορίθμου PSO:

- Η ικανότητα του να "θυμάται" και να αποθηκεύει τις καλύτερες θέσεις των σωματιδίων, τόσο τα ατομικά βέλτιστα όσο και τα ολικά. Αυτό κάνει τη σύγκλιση πιο γρήγορη καθώς κατευθύνει τα σωματίδια προς τις περιοχές που είναι πιθανότερο να είναι κατάλληλες για τη βελτιστοποίηση.
- Η απλότητα του σαν κώδικας.
- Χρησιμοποιεί βασικές και απλές εξισώσεις για τις παραμέτρους του έτσι ο κώδικας του είναι απλός και χρειάζεται μόνο λίγες γραμμές κώδικα για την ολοκλήρωση του.
- Διαθέτει την ικανότητα να προσαρμόζεται άμεσα στις αλλαγές του περιβάλλοντος του και τις εναλλαγές από στατικά σε δυναμικά περιβάλλοντα παραμένοντας αποδοτικός.

Μειονεκτήματα του αλγορίθμου PSO:

- Αν στο δεδομένο προς βελτιστοποίηση πρόβλημα δεν μπορούν να οριστούν αρχικές θέσεις των σωματιδίων, ή να δοθεί ένας τρόπος εύρεσης της επόμενης τους θέσης στο χώρο ο αλγόριθμος δεν μπορεί να ανταπεξέλθει.
- Κάθε σωματίδιο στον αλγόριθμο χαρακτηρίζεται από ομοιογένεια.
- Υποθέτει πως όλα τα σωματίδια έχουν τα ίδια χαρακτηριστικά και τις ίδιες ικανότητες κίνησης, κάτι που στα πραγματικά προβλήματα δεν υφίσταται.
- Λόγω της φύσης του, αναζητά να βρει τη βέλτιστη λύση του προβλήματος αγνοώντας την πιθανότητα ύπαρξης παραπάνω από μιας σωστής και βέλτιστης λύσης

3.4.Μέθοδοι βελτιστοποίησης για μηχανική μάθηση μεγάλης κλίμακας.

Επισκόπηση των μεθόδων βελτιστοποίησης

Στρέφουμε την προσοχή μας σε αριθμητικούς αλγόριθμους για την λύση προβλημάτων βελτιστοποίησης που προκύπτουν στη μεγάλης κλίμακας μηχανική μάθηση δηλαδή με μεγάλο όγκο δεδομένων. Αρχίζουμε με την τυποποίηση των προβλημάτων μας με σκοπό την ελαχιστοποίηση των αναμενόμενων και εμπειρικών σφαλμάτων.

Προβλέψεις και συνάρτηση σφάλματος.

Η επιλογή της συνάρτησης πρόβλεψης θα πρέπει να γίνει λαμβάνοντας υπόψη τρεις παραμέτρους

1. Η συνάρτηση πρόβλεψης θα πρέπει να έχει χαμηλό εμπειρικό ρίσκο ή αλλιώς σφάλμα
2. Η διαφορά μεταξύ του αναμενόμενου και του εμπειρικού σφάλματος θα πρέπει να είναι μικρότερη από όλες τις τιμές που λαμβάνει η συνάρτηση πρόβλεψης κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης και για όλα τα ζεύγη εισόδου και εξόδου
3. Η επιλογή της συνάρτησης πρόβλεψης θα πρέπει να είναι τέτοια ώστε κάποιος να μπορεί να λύσει το συγκεκριμένο πρόβλημα βελτιστοποίησης η δυσκολία του οποίου μπορεί να αυξηθεί εάν υπάρχουν αρκετές συναρτήσεις πρόβλεψης ή πολλά ζεύγη δεδομένων

Γενικά μπορούμε να πούμε ότι η διαφορά μεταξύ αναμενόμενου και εμπειρικού σφάλματος είναι της μορφής

$$|R(h) - R_n(h)| \leq \sqrt{\frac{1}{2n} \log\left(\frac{2}{\eta}\right)} \text{ for a given } h \in \mathcal{H}.$$

Κανονικά, θεωρούμε την οικογένεια συναρτήσεων πρόβλεψης να είναι της παρακάτω μορφής

$$H = \{h(\cdot; \mathbf{w}) | \mathbf{w} \in \mathcal{R}\}$$

Άλλες παράμετροι που λαμβάνονται υπόψη είναι

-Αναμενόμενο σφάλμα

Ειδικά, η παράμετρος ω επιλέχθηκε για να ελαχιστοποιήσει την αναμενόμενη απώλεια που θα προέκυπτε από το ζεύγος τιμών εισόδου-εξόδου. Για να δηλώσουμε τυπικά αυτή την ιδέα, υποθέτουμε ότι οι απώλειες μετρούνται σε σχέση με μια κατανομή πιθανότητας $P(x, y)$ που αντιπροσωπεύει την πραγματική σχέση μεταξύ εισόδων και εξόδων. Η αντικειμενική συνάρτηση που θέλουμε να ελαχιστοποιήσουμε, και που αποτελεί και το αναμενόμενο σφάλμα είναι

$$R(\mathbf{w}) = \int_{\mathcal{R}d(x)x\mathcal{R}d(y)} l(\mathbf{h}(x; \mathbf{w}), y) dP(x, y) - E(l(x; \mathbf{w}), y)$$

-Εμπειρικό σφάλμα.

Ενώ μπορεί να είναι επιθυμητό να ελαχιστοποιηθεί το αναμενόμενο σφάλμα ένας τέτοιος στόχος είναι αδύνατος όταν δεν υπάρχει επαρκής πληροφόρηση σχετικά με την πιθανότητα P . Επομένως, στην πράξη, κάποιος επιδιώκει τη λύση ενός προβλήματος που περιλαμβάνει εκτίμηση του αναμενόμενου σφάλματος R (αναφερόμαστε έτσι στο εμπειρικό σφάλμα). Στην εποπτευόμενη μάθηση, η συνάρτηση εμπειρικού σφάλματος $R_n : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ δίνεται από τον τύπο

$$R_n(\mathbf{w}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(h(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}), \mathbf{y}_i).$$

Η ελαχιστοποίηση του οποίου αποτελεί το σκοπό του προβλήματος βελτιστοποίησης.

Στοχαστικές μέθοδοι εναντίον μεθόδων βελτιστοποίησης παρτίδας.

Υπάρχουν μέθοδοι μείωσης του σφάλματος οι οποίες βασίζονται σε αλγόριθμους βελτιστοποίησης είτε σε στοχαστικές μεθόδους βελτιστοποίησης είτε σε μεθόδους βελτιστοποίησης batch. (6) Πιο συγκεκριμένα, μία πρωτότυπη μέθοδος στοχαστικής βελτιστοποίησης είναι η στοχαστική μέθοδος κλίσης (SG) η οποία, στο πλαίσιο της ελαχιστοποίησης του εμπειρικού σφάλματος R_n και του $\mathbf{w}_i \in \mathbb{R}^d$ (παραμετροποιημένη συνάρτηση πρόβλεψης), ορίζεται ως

$$\mathbf{w}_{k+1} \leftarrow \mathbf{w}_k - \alpha \nabla f_{i_k}(\mathbf{w}_k)$$

Δηλαδή για όλα τα $k \in \mathbb{N} := \{1, 2, \dots\}$, το ζεύγος $(\mathbf{x}_{i_k}, \mathbf{y}_{i_k})$ επιλέγεται τυχαία από $\{1, \dots, n\}$ και το α_k είναι το μέγεθος του βήματος

Ωστόσο η προσέγγιση κατά παρτίδες αποτελεί μια πιο φυσική και γνωστή ιδέα βελτιστοποίησης. Η πιο απλή μέθοδος αυτής της κατηγορίας είναι ο αλγόριθμος απότομης κλίσης - ο οποίος αναφέρεται επίσης και ως μέθοδος γραμμικής βαθμιδωτής κλίσης ή πλήρους βαθμίδας - και ορίζεται από την επανάληψη

$$\mathbf{w}_{k+1} \leftarrow \mathbf{w}_k - \alpha_k \nabla R_n(\mathbf{w}_k) = \mathbf{w}_k - (\alpha_k/n) \sum_{i=1}^n \nabla f_i(\mathbf{w}_k)$$

Ο υπολογισμός $\alpha_k \nabla R_n(\mathbf{w}_k)$ σαν διαδικασία είναι πιο δύσκολη από τον υπολογισμό της $\alpha_k \nabla f_{i_k}(\mathbf{w}_k)$, δεδομένου ότι όλα τα δείγματα στην δεύτερη περίπτωση, λαμβάνονται υπόψη σε μία επανάληψη. Οι στοχαστικές μέθοδοι και οι προσεγγίσεις κατά παρτίδες, προσφέρουν διαφορετικά συμπεράσματα όσον την αναμενόμενη βελτίωση που προκύπτει από την μείωση του εμπειρικού σφάλματος. Γιατί, λοιπόν, ή μέθοδος της στοχαστικής κλίσης έχει αναδειχθεί σε τέτοια εξέχουσα θέση στο πλαίσιο της μεγάλης κλίμακας μηχανικής μάθησης; Η κατανόηση των λόγων πίσω από αυτό απαιτεί την προσεκτική εξέταση των υπολογιστικών σχέσεων μεταξύ των στοχαστικών μεθόδων και των μεθόδων σε παρτίδες καθώς και μια βαθύτερη ματιά στις ικανότητές τους για να εξασφαλιστεί η βελτίωση του υποκείμενου αναμενόμενου σφάλματος R . Επίσης οι στοχαστικές και οι προσεγγίσεις κατά παρτίδες που αναφέρονται εδώ, έχουν ανάλογες ιδιότητες όσον αφορά την προσομοίωση και στοχαστική βελτιστοποίηση, που αναφέρονται ως στοχαστική προσέγγιση (SA) και μέση προσέγγιση δείγματος (SAA), αντίστοιχα(10).

Πέρα από την στοχαστική κλίση έχουμε και άλλους παράγοντες οι οποίοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν ένας ικανός και αξιόπιστος τρόπος για την εύκολη μέθοδο βελτιστοποίησης και για όλες τις εφαρμογές. Τέτοιοι παράγοντες είναι η μείωση θορύβου και μέθοδοι δευτέρας τάξης.

Κοιτώντας μπροστά, ένα από τα κύρια ζητήματα που θέτουν οι ερευνητές και οι επαγγελματίες είναι στο τι βρίσκεται πέρα από την στοχαστική κλίση που μπορεί να χρησιμεύσει ως μια αποτελεσματική, αξιόπιστη και εύχρηστη μέθοδος βελτιστοποίησης για διάφορα είδη εφαρμογών. Στο πρώτο επίπεδο βρίσκεται η στοχαστική βαθμιδωτή μέθοδος και η κατά παρτίδες βαθμιδωτή μέθοδος, ενώ στο δεύτερο επίπεδο βρίσκονται οι μέθοδοι δεύτερης τάξης όπως είναι η στοχαστική μέθοδος Newton και η κατά παρτίδες μέθοδος Newton.

Ανάλυση των στοχαστικών βαθμιδωτών μεθόδων

Η μέθοδος της στοχαστικής κλίσης

Στην προκειμένη περίπτωση η αντικειμενική συνάρτηση η οποία είναι σε άμεση σχέση με το εμπειρικό και το αναμενόμενο σφάλμα δίνεται από τη παρακάτω σχέση.

$$F(w) = \begin{cases} R(w) = E[f(w; \xi)] \\ Rn(w) = 1/n \sum_{i=1}^n f_i(w) \end{cases}$$

Ο αλγόριθμος της στοχαστικής κλίσης παρουσιάζεται παρακάτω

```

1: Choose an initial iterate  $w_1$ .
2: for  $k = 1, 2, \dots$  do
3:   Generate a realization of the random variable  $\xi_k$ .
4:   Compute a stochastic vector  $g(w_k, \xi_k)$ .
5:   Choose a stepsize  $\alpha_k > 0$ .
6:   Set the new iterate as  $w_{k+1} \leftarrow w_k - \alpha_k g(w_k, \xi_k)$ .
7: end for
```

Στον παραπάνω αλγόριθμο φαίνονται κάποια υπολογιστικά εργαλεία. Πιο συγκεκριμένα είναι ο $g(w_k, \xi_k)$ που εκφράζει τον στοχαστικό παράγοντα και ο οποίος υπολογίζεται με βάση την τυχαία επιλογή ανεξάρτητης μεταβλητής $\xi(k)$, η επανάληψη w_k , και ο αριθμός των επαναλήψεων K που είναι σημαντικός για τον υπολογισμό του μεγέθους του βήματος $\alpha_k > 0$.

$$g(w_k, \xi_k) = \begin{cases} H_k - 1/n_k \sum_{i=1}^{n_k} \nabla f(w_k, \xi_k) \\ 1/n_k \sum_{i=1}^{n_k} \nabla f(w_k, \xi_k) \end{cases}$$

Βασικές προτάσεις που αφορούν την μέθοδο SG

Πρόταση 1. Αφορά τον αντικειμενικό βαθμό συνέχειας του lipschitz.

Η αντικειμενική συνάρτηση F είναι συνεχώς διαφορίσιμη και η συνάρτηση βαθμιδωτής κλίσης συνεχής όταν

$$\|\nabla F(w) - \nabla F(\bar{w})\|_2 \leq L \|w - \bar{w}\|_2 \text{ for all } \{w, \bar{w}\} \subset \mathbb{R}^d.$$

Επίσης η παραπάνω πρόταση διασφαλίζει ότι η κλίση της F δεν αλλάζει αυθαίρετα και γρήγορα.

Πρόταση 2°. Οι επαναλήψεις της στοχαστικής κλίσης ικανοποιούν την επόμενη ανισότητα για όλα τα k

$$E_{\xi_k}[F(W_k + 1)] - F(w_k) \leq -\alpha_k \nabla F(w_k)^T E_{\xi_k}[F(w_k, \xi_k)] + \frac{1}{2} \alpha_k^2 L E_{\xi_k}[\|F(w_k, \xi_k)\|_2^2]$$

Η παραπάνω πρόταση δείχνει ότι ανεξάρτητα από τον τρόπο που έφτασε η στοχαστική κλίση στο w_k , η αναμενόμενη μείωση της απόδοσης της αντικειμενικής συνάρτησης που προκύπτει από το βήμα αυτό είναι κατά ένα ποσοστό το οποίο και υπολογίζεται ως:

- (i) Την αναμενόμενη παράγωγο του F στο w_k κατά μήκος του $g(x_k, \xi_k)$
- (ii) τη δεύτερη στιγμή του $g(x_k, \xi_k)$.

Πολυπλοκότητα μεθόδων για μεγάλης κλίμακας μηχανική μάθηση

Ωστόσο, η έρευνά μας θα ήταν ελλιπής χωρίς να εξετάσουμε πώς αυτές οι ιδιότητες επηρεάζουν το υπολογιστικό φόρτο εργασίας που σχετίζεται με την επίλυση ενός υποκείμενου προβλήματος μηχανικής μάθησης. Υπάρχει το επιχείρημα ότι **ένας πιο αργός συγκλίνοντας αλγόριθμος, όπως αυτός της στοχαστικής κλίσης, είναι πιο αποτελεσματικός για μάθηση μεγάλης κλίμακας από μεθόδους βασιζόμενες σε κλίση που έχουν γραμμικό ρυθμό σύγκλισης**. Σκοπός αυτής της ενότητας είναι να παρουσιάσουμε αυτά τα επιχειρήματα με μεγαλύτερη λεπτομέρεια. Ως μια πρώτη προσπάθεια δημιουργίας ενός πλαισίου στο οποίο μπορούμε να συγκρίνουμε αλγόριθμους βελτιστοποίησης για μάθηση μεγάλης κλίμακας, μπορεί κανείς να μπει στον πειρασμό να εξετάσει την κατάσταση της ύπαρξης μιας συγκεκριμένης κατάρτισης. Ποιος τύπος αλγόριθμου - π.χ. μια απλή μέθοδος SG ή παρτίδας διακύμανσης - θα παρέχει τις καλύτερες εγγυήσεις όσον αφορά την επίτευξη ενός χαμηλού αναμενόμενου κινδύνου. Οι κυριότεροι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για την μηχανική μάθηση μεγάλης κλίμακας είναι η μέθοδος Newton, οι Quasi-Newton μέθοδοι, και οι περιορισμένης μνήμης Quasi Newton μέθοδοι. Οι αναφερόμενες τεχνικές ολικής σύγκλισης είναι οι μέθοδοι γραμμικής αναζήτησης καμπυλόγραμμης αναζήτησης και περιοχής εμπιστοσύνης

Στοχαστική κλίση για αντικειμενική κυρτότητα

Για έντονη κυρτότητα

Η μέθοδος της στοχαστικής κλίσης είναι ιδανική για την διαπίστωση της αντικειμενικής κυρτότητας μιας συνάρτησης. Πιο συγκεκριμένα η αντικειμενική συνάρτηση $F: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ είναι έντονα κυρτή δεδομένου της ύπαρξης μίας σταθερής $c > 0$ όταν

$$F(\bar{w}) \geq F(w) + \nabla F(w)^T (\bar{w} - w) + \frac{1}{2c} \|\bar{w} - w\|_2^2 \text{ για όλα τα } \bar{w}, w \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$$

Έτσι η F έχει έναν μόνο ελαχιστοποιητή ο οποίος είναι ίσος $w_* \in \mathbb{R}^d$ και $F_* := F(w_*)$.

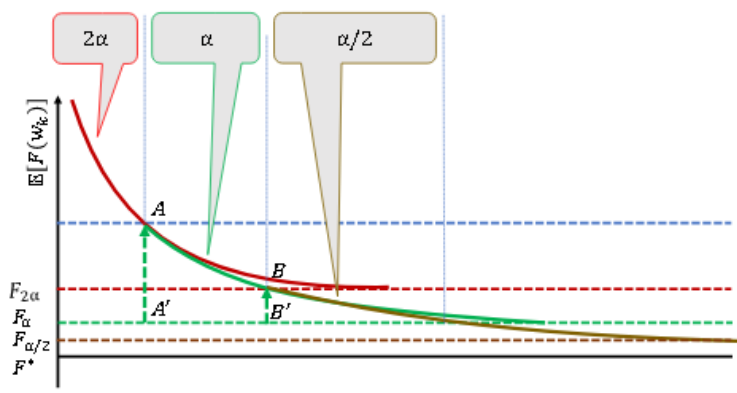
Ισχυρά κυρτές συναρτήσεις με σταθερό μέγεθος βήματος. Γενικά το μέγεθος βήματος έχει να κάνει με την ταχύτητα την οποία η αντικειμενική συνάρτηση βρίσκει την βέλτιστη τιμή του. Έστω ότι το μέγεθος βήματος είναι σταθερό για μία αντικειμενική συνάρτηση στην οποία εφαρμόζεται ο αλγόριθμος της στοχαστικής κλίσης. Έστω ότι το μέγεθος βήματος είναι ίσο με $\alpha_k = \bar{\alpha}$

Όπου $0 < \bar{\alpha} \leq (\mu |LM_G|)$. Τα μ και Mg είναι τιμές που έχουν να κάνουν με τις πρώτες και δεύτερες στιγμές και συνήθως είναι ίσες με 1. Η L είναι η σταθερά του lipschitz. Ο εμπειρικός κίνδυνος είναι ίσος με

$$E[F(wk) - F_*] \leq (\bar{\alpha} LM|2c\mu) + (1 - \bar{\alpha}\mu c)^{k-1} (f(w_1) - f_* - (\bar{\alpha} LM|2c\mu)) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} (\bar{\alpha} LM|2c\mu)$$

Συνήθως η καλύτερη τακτική είναι στην αρχή το μέγεθος του βήματος να είναι σταθερό και όσο αυξάνονται οι επαναλήψεις να βαίνει μειούμενο. Το πότε πρέπει να μειωθεί το μέγεθος του βήματος αυτό εξαρτάται από την τιμή του optimality gap ή αλλιώς από την τιμή της παραπάνω σχέσης. Αν αυτή μειωθεί περισσότερο από το μισό τότε είναι στιγμή να μειωθεί. Και αυτό γιατί δεν θέλουμε να χάσουμε την optima τιμή της συνάρτησης.

Με άλλα λόγια κάθε φορά που μειώνεται το μέγεθος του βήματος στο μισό, θα πρέπει να διπλασιάζουμε το αριθμό των επαναλήψεων



Σχήμα 10⁰ Αύξηση των επαναλήψεων που έχει να κάνει με την μείωση του μεγέθους βήματος

Θεώρημα. Όσον αφορά τις πολύ κυρτές συναρτήσεις και με μειούμενο μέγεθος βήματος που είναι ίσο με $\alpha_k = (\beta|\gamma + \kappa)$, $\beta > (1/\mu c)$, $\gamma > 0$, $\alpha_1 \leq (\mu |LMg|)$

Συνήθως το c , $\mu=1$.

Επίσης το χάσμα βελτιστοποίησης για μειούμενο μέγεθος βήματος δίνεται από την παρακάτω ισότητα $E[F(wk) - F_*] \leq (v|\gamma + \kappa)$ όπου $v := \max\{(\beta^2 LM|2(\beta\mu c - 1)), (\gamma + 1), (f(w_1) - f_*)\}$

Ρόλος της μεγάλης κυρτότητας.

Η έντονη κυρτότητα επηρεάζει το μέγεθος του βήματος με διαφορετικό τρόπο. Στην περίπτωση των σταθερών βημάτων οι πιθανές τιμές του $\bar{\alpha}$ περιορίζονται από ένα όριο το οποίο δεν εξαρτάται από το c . Στην περίπτωση των μειούμενων μεγεθών του βήματος, το αρχικό μέγεθος του βήματος α_1 εξαρτάται από το ανώτερο όριο ωστόσο η παράμετρος β θα πρέπει να είναι μεγαλύτερη από το $1/\mu c$. Αυτό θεωρείται απαραίτητο για τη σύγκλιση και την εύρεση του βέλτιστου σημείου. Επίσης σημαντικός θεωρείται ο παράγοντας του αρχικού σημείου. Το αρχικό σημείο καθορίζει το αρχικό optimality gap η αλλιώς όπως ορίζεται $F(w_1) - F_*$. Όταν χρησιμοποιείται το σταθερό μέγεθος βήματος το αρχικό χάσμα εμφανίζεται με ένα εκθετικό μειωτικό παράγοντα. Στην περίπτωση όμως του μειούμενου μεγέθους βήματος, το χάσμα εμφανίζεται στο δεύτερο όρο με την μορφή v . Ωστόσο με την σωστή έναρξη της φάσης, κάποιος μπορεί να μειώσει τον ρόλο που παίζει αυτός ο όρος.

Για μη κυρτές συναρτήσεις και σταθερό μέγεθος βήματος ισχύουν τα εξής

$$0 < \bar{\alpha} \leq (\mu |LM_G|)$$

$$E[\sum_{k=1}^K \|F(w_k)\|_2^2] \leq (\bar{\alpha} KLM|\mu) + \frac{2(f(w_1) - f_{\inf})}{\mu \bar{\alpha}} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} (\bar{\alpha} LM|\mu)$$

Για μη κυρτές συναρτήσεις και μειούμενο μέγεθος βήματος έχουμε την εξίσωση

$A_k := \sum_{k=1}^K \alpha_k$ όπου και ισχύει ότι

$$\lim_{K \rightarrow \infty} E \left[\sum_{k=1}^K \alpha_k \|\nabla F(w_k)\|_2^2 \right] \leq \infty$$

$$(E|A_K) \sum_{k=1}^K \alpha_k \|\nabla F(w_k)\|_2^2 \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 0$$

Μέθοδοι μείωσης θορύβου.

Η μέθοδος της στοχαστικής κλίσης παρουσιάζει το πρόβλημα της επίδρασης των μέσων υπολογισμών θορύβου. Για αυτό το λόγο οι διάφοροι μέθοδοι έχουν ενισχυθεί με διάφορες ικανότητες μείωσης του θορύβου. Ορισμένοι μέθοδοι που έχουν δημιουργηθεί για το σκοπό αυτό είναι οι μέθοδοι δυναμικής δειγματοληψίας, οι μέθοδοι βαθμιδωτής συσσώματωσης και τέλος οι μέθοδοι αυξανόμενου μέσου όρου.

Παρακάτω θα αναφερθούμε σε μεθόδους βαθμιδωτής συσσώματωσης, όπου και ανήκουν τρεις γνωστοί αλγόριθμοι, οι SVRG, ο SAG και ο SAGA.

Πολυπλοκότητα για την μεγάλης κλίμακας μηχανική μάθηση

Ας υποθέσουμε ότι τόσο το αναμενόμενο σφάλμα όσο και το εμπειρικό σφάλμα έχουν ελάχιστο σημείο με τους παραμετρικούς παράγοντες

$w^* \in \arg \min R(w)$ και

$w_n \in \arg \min R_n(w)$, αντίστοιχα.

Επιπλέον, ας είναι ο \bar{w}_n ο κατά προσέγγιση ελαχιστοποιητής του εμπειρικού σφάλματος που επιστρέφεται από έναν δεδομένο αλγόριθμο βελτιστοποίησης όταν εξαντληθεί ο προϋπολογισμένος χρόνος T_{\max} . Οι συμβιβασμοί που σχετίζονται με αυτό το σενάριο μπορούν να τυποποιηθούν επιλέγοντας την οικογένεια των συναρτήσεων πρόβλεψης H , τον αριθμό των επαναλήψεων n , και την ακρίβεια :

$$\varepsilon = E[R(w_n) - R(w^*)],$$

προκειμένου να ελαχιστοποιηθεί στο χρόνο T_{\max} , το συνολικό σφάλμα

$$E[R(\bar{w}_n)] = R(w_k) + E[R(w)_n - R(w_k)] + E[R(\bar{w}_n) - R(w)_n]$$

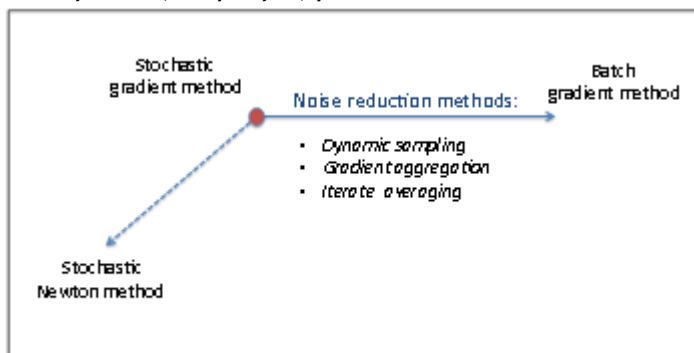
Ο πρώτος όρος είναι το κατά προσέγγιση σφάλμα, ο δεύτερος όρος αποτελεί το υπολογιστικό σφάλμα και ο τρίτος το σφάλμα βελτιστοποίησης

Για να ελαχιστοποιήσουμε αυτό το σφάλμα, πρέπει να εξισορροπήσουμε τις συνεισφορές από κάθε έναν από τους τρεις όρους στη δεξιά πλευρά. Για παράδειγμα, αν κάποιος αποφασίσει να κάνει την βελτιστοποίηση ακριβέστερη, πχ μειώνοντας την e με την ελπίδα ότι θα μειωθεί επίσης το σφάλμα βελτιστοποίησης $E_{\text{opt}}(H, n, e)$ (που αξιολογείται σε σχέση με το R από το R_n), μπορεί να χρειαστεί να επαναπροσδιοριστεί ο χρόνος είτε (i) μειώνοντας το δείγμα n , αυξάνοντας πιθανώς το σφάλμα προσδιορισμού $E_{\text{est}}(H, n)$. ή (ii) απλοποιώντας τη λειτουργία H , αυξάνοντας ενδεχομένως το σφάλμα προσέγγισης ($E_{\text{app}}(H)$).

Ο χρόνος υπολογισμού εξαρτάται από τον αλγόριθμο βελτιστοποίησης. Για παράδειγμα ο χρόνος υπολογισμού ενός αλγορίθμου παρτίδας αυξάνεται γραμμικά με τον αριθμό των η ενώ ο χρόνος σε έναν στοχαστικό αλγόριθμο είναι ανεξάρτητος από το η . Με τον αλγόριθμο της βελτιστοποίησης παρτίδας κάποιος μπορεί να θεωρήσει την αύξηση του e προκειμένου να αξιοποιηθεί ο χρόνος για περισσότερα εκπαιδευτικά παραδείγματα. Ωστόσο με τον στοχαστικό αλγόριθμο, κάποιος οφείλει να χρησιμοποιήσει όλο και περισσότερα παραδείγματα επειδή ο υπολογισμός των επαναλήψεων είναι ανεξάρτητος των η .(11)

Μέθοδοι μείωσης θορύβου

Επειδή ο θόρυβος αλλοιώνει τα αποτελέσματα κατά την διαδικασία ενός αλγορίθμου πολλές μέθοδοι έχουν ισχυροποιηθεί με κάποιες ιδιότητες οι οποίες μειώνουν τον θόρυβο. Αυτές οι μέθοδοι μειώνουν τα σφάλμα στους υπολογισμούς ή σε κάποια αλληλουχία επαναλήψεων και έχουν αποδειχθεί αποτελεσματικές στην πράξη



Σχήμα 11° Μέθοδοι όπου συνδυάζεται η μείωση του θορύβου

Οι δύο πρώτες μέθοδοι πετυχαίνουν μείωση θορύβου με έναν τρόπο όπου τις επιτρέπει να συγκλίνουν στην βέλτιστη λύση με σταθερό μέγεθος βήματος. Η πρώτη μέθοδος dynamic sampling ή αλλιώς δυναμική συσσώρευση, πετυχαίνει πιο ακριβείς σταδιακούς υπολογισμούς καθώς η διαδικασία της βελτιστοποίησης τρέχει. Οι μέθοδοι σταδιακής συσσώματωσης ή αλλιώς gradient aggregation, βελτιώνουν την ποιότητα της έρευνας απλώς αποθηκεύοντας σταδιακούς υπολογισμούς που ανταποκρίνονται σε δείγματα προηγούμενων επαναλήψεων. Η τρίτη κατηγορία μεθόδων, οι μέθοδοι **iterate averaging** ή αλλιώς ο **επαναλαμβανόμενος μέσος όρος** πετυχαίνει μείωση του θορύβου διατηρώντας έναν μέσο όρο όλων των επαναλήψεων κατά την διάρκεια της διαδικασίας βελτιστοποίησης. Μέθοδοι μείωσης του θορύβου που χρησιμοποιούν μεθόδους σταδιακής συσσώματωσης αναλύονται παρακάτω.

Μέθοδος SVGA

Η μέθοδος αυτή αποτελεί χαρακτηριστικό αλγόριθμο για την μείωση θορύβου σε προβλήματα στοχαστικής κλίσης μεγάλων ή και μη μεγάλης κλίμακας και δουλεύει κυρίως κυκλικά. Μία επανάληψη ω_k είναι διαθέσιμη και στην οποία ο αλγόριθμος υπολογίζει την κλίση

$$\nabla R_N(w_k) = 1/n \sum_{i=1}^n \nabla f_i(w_k).$$

Ο αλγόριθμος δίνεται παρακάτω

```

1: Choose an initial iterate  $w_1 \in \mathbb{R}^d$ , stepsize  $\alpha > 0$ , and positive integer  $m$ .
2: for  $k = 1, 2, \dots$  do
3:   Compute the batch gradient  $\nabla R_n(w_k)$ .
4:   Initialize  $\bar{w}_1 \leftarrow w_k$ .
5:   for  $j = 1, \dots, m$  do
6:     Choose  $i_j$  uniformly from  $\{1, \dots, n\}$ .
7:     Set  $\bar{g}_j \leftarrow \nabla f_{i_j}(\bar{w}_j) - \nabla f_{i_j}(w_k) + \nabla R_n(w_k)$ .
8:     Set  $\bar{w}_{j+1} \leftarrow \bar{w}_j - \alpha \bar{g}_j$ .
9:   end for
10:  Option (a): Set  $w_{k+1} = \bar{w}_{m+1}$ 
11:  Option (b): Set  $w_{k+1} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \bar{w}_{j+1}$ 
12:  Option (c): Choose  $j$  uniformly from  $\{1, \dots, m\}$  and set  $w_{k+1} = \bar{w}_{j+1}$ .
13: end for

```

. Γενικά θεωρείται ότι ο αλγόριθμος έχει φτάσει στο βέλτιστο σημείο (12), όταν

$$E[R_n(w_{k+1}) - R_n(w_*)] \leq \rho R_n(w_k) - R_n(w_*)$$

Όπου $\rho := (1/1 - 2\alpha L)(1/mc + 2La) \leq 1$

SAGA μέθοδος

Η δεύτερη αυτή μέθοδος υπολογίζει έναν στοχαστικό παράγοντα g_k σαν τον μέσο όρο των προηγούμενων επαναλήψεων. Γενικά στην περίπτωση αυτή θεωρούμε ότι η μέθοδος χρησιμοποιεί αμερόληπτες εκτιμήσεις κλίσης αλλά οι διακυμάνσεις σε αυτή την περίπτωση θεωρείται ότι θα είναι μικρότερες από τις αντίστοιχες της στοχαστικής κλίσης (7,8). Η μέθοδος φτάνει το επίπεδο σύγκλισης όταν ισχύει η παρακάτω σχέση

$$E[\|(w_k) - (w_*)\|_2^2] \leq [1 - c/2(cn + L)]^K (\|(w_1) - (w_*)\|_2^2 + nd/cn + L)$$

Όπου

$$d := R_n w_1 - \nabla R_n w_*^t [(w_1) - (w_*)] - R_n w_*$$

φυσικά, αυτό προϋποθέτει την γνώση που δηλώνει την ισχυρή κυρτότητα c αλλά και τη σταθερά Lipschitz L . Εάν η c δεν είναι γνωστή τότε το μέγεθος βήματος μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι ίσο με $\alpha=1/3$ (9). Ο υπολογιστικός χρόνος τόσο στην μέθοδο της στοχαστικής κλίσης όσο και στις μεθόδους SVRG, SAGA, SAG είναι ίσος με $T(n, \epsilon) \sim (k^2 |e|)$ και $T(n, \epsilon) \sim (n + k |\log(1/e)|)$ αντίστοιχα. Αυτό σημαίνει ότι όσο αυξάνεται ο αριθμός των δεδομένων τόσο αυξάνεται και ο υπολογιστικός χρόνος (10)

Μέθοδοι βασιζόμενοι στον μέσο όρο των επαναλήψεων

Αποτελεί μία άλλη κατηγορία μεθόδων που σκοπό έχουν την μείωση της επίδρασης των θορύβων στην εύρεση του βέλτιστου σημείου της διαδικασίας. Η βασική ιδέα ήταν των juditsky B. T. Polyak and A. B. Juditsky.(11), με κεντρικό άξονα την εφαρμογή συνεχώς μειούμενων επαναλήψεων $O(1/k^2)$ για $\alpha(1/2,1)$. Μάλιστα έχει χαρακτηριστεί ότι αυτή η μέθοδος έχει παρόμοια αποτελέσματα με μεθόδους δευτέρας τάξης όπως είναι η μέθοδος εσσιανής προσέγγισης B. T. Polyak.(12)

Μέθοδοι δευτέρας τάξεως.

Στις μεθόδους δευτέρας τάξης περιλαμβάνονται οι Quasi-Newton, οι Gauss-Newton, οι υποδειγματοληπτικές μέθοδοι χωρίς εσσιανούς πίνακες μέθοδοι Newton αλλά και οι μέθοδοι με διαγώνιες διαβαθμίσεις. Παρακάτω αναφέρουμε περιληπτικά κάποιες από αυτές τις μεθόδους.

Η μέθοδος Newton είναι ίσως η πιο γνωστή από όλες τις επαναληπτικές μεθόδους.

Χρησιμοποιείται στην επίλυση του προβλήματος

$$\min x \in \mathbb{R}^n f(x),$$

όπου η αντικειμενική συνάρτηση $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι δυο φορές συνεχώς διαφορίσιμη. Σε ότι ακολουθεί θα δηλώνουμε την πρώτη παράγωγο της f με $g(x) = \nabla f(x)$.

Η βασική ιδέα της Newton έχει ως εξής: αντί να ελαχιστοποιήσουμε την f , ελαχιστοποιούμε το τετραγωνικό μοντέλο της, το οποίο κατασκευάζεται στην τρέχουσα επανάληψη x_k . Έστω λοιπόν ότι η εσσιανή $\nabla^2 f(x_k)$ -πίνακας (μήτρα) όλων των μερικών παραγώγων δευτέρας τάξης μιας συνάρτησης υπολογισμένης σε ένα σημείο καλείται εσσιανή μήτρα της f - είναι θετικά ορισμένη στο x_k . Τότε, το παραγόμενο τετραγωνικό μοντέλο της f με κέντρο το σημείο x_k που είναι ίσο με την παρακάτω σχέση

$$m_k(x_k + s) = f(x_k) + g(x_k)^T s + \frac{1}{2} s^T \nabla^2 f(x_k) s,$$

είναι κυρτό, ενώ έχουμε θέσει $s = x - x_k$.

Οπότε το μοντέλο έχει μοναδικό ελαχιστοποιητή το σημείο στο οποίο η κλίση του μοντέλου μηδενίζεται. Αυτό το σημείο είναι προφανώς η λύση του συστήματος

$$\begin{aligned} \nabla m_k(x_k + s) &= 0, \\ \Delta \eta \lambda \alpha \delta \eta \\ g(x_k) + \nabla^2 f(x_k) s &= 0. \end{aligned}$$

Επομένως, ελαχιστοποιώντας το $m_k(x_k + s)$ στην τρέχουσα επανάληψη, βρίσκουμε ότι $s_k = -\nabla^2 f(x_k)^{-1} g(x_k)$ και έτσι προκύπτει το επαναληπτικό σχήμα $x_{k+1} = x_k - \nabla^2 f(x_k)^{-1} g(x_k)$ όπου το διάνυσμα $s_k = x_{k+1} - x_k$ είναι γνωστό ως κατεύθυνση Newton.

Μέθοδοι Newton απαλλαγμένοι από εσσιανές μήτρες.

Σε αυτήν την κατηγορία ουσιαστικά δεν χρησιμοποιούμε εσσιανές μήτρες αλλά παραμέτρους που σχετίζονται με αυτές. Σκοπός είναι και πάλι η ελαχιστοποίηση της δύο φορές διαφορίσιμης F , όπου η επανάληψη Newton δίνεται παρακάτω

$$W_{k+1} \leftarrow W_k + a_k S_k$$

$$(\nabla^2 F(W_k))^{-1} s_k := \nabla F W_k$$

Η μέθοδος έχει αρκετές απαιτήσεις όσον αφορά τους υπολογισμούς και τον αποθηκευτικό χώρο. Για αυτό το λόγο, αντί κάποιος να λύσει το παραπάνω σύστημα, μπορεί να λύσει εμμέσως, το πρόβλημα, χρησιμοποιώντας μία επαναληπτική προσέγγιση όπως η μέθοδος βαθμιδωτής σύζευξης (CG). (13). Η μέθοδος οδηγεί σε μεγάλο βαθμό σύγκλισης (14).

Υποδειγματοληπτικές μέθοδοι Newton χωρίς εσσιανούς πίνακες. Το κίνητρο για τη μέθοδο που περιγράφουμε τώρα πηγάζει από την παρατήρηση ότι, σε έμμεσες μεθόδους Newton, ο εσσιανός πίνακας δεν χρειάζεται να είναι τόσο ακριβής όσο η κλίση για να δώσει μια αποτελεσματική επανάληψη. Στην περίπτωση των προβλημάτων μεγάλης κλίμακας, αυτό σημαίνει ότι μία επανάληψη είναι πιο εύκολο να αυξήσει τον θόρυβο σε μία εκτίμηση του εσσιανού πίνακα παρά στον θόρυβο από την σταδιακή εκτίμηση. Με γνώμονα το παραπάνω, η τεχνική αυτή χρησιμοποιεί ένα μικρότερο δείγμα για τον καθορισμό του εσσιανού πίνακα από ότι για την εκτίμηση της στοχαστικής κλίσης.

Η εκτίμηση της στοχαστικής κλίσης είναι ίση με

$$\nabla F(s_k)(w_k; \xi_k) = 1/(|S_k|) \nabla f(w_k; \xi_{k,i})$$

Και η εκτίμηση του στοχαστικού εσσιανού πίνακα είναι

$$\nabla^2 F(s_k^H)(w_k; \xi_k^H) = 1/(|S_k^H|) \sum_{I \in S_k^H} \nabla^2 F(w_k, \xi_{k,i})$$

Το S_k^H φανερώνει το μέγεθος του δείγματος. Καλό είναι κάποιος να επιλέξει ένα σχετικά μεγάλο μέγεθος δείγματος προκειμένου η μέθοδος να είναι αποτελεσματική (15).

Ως συμπέρασμα μπορούμε να πούμε ότι οι μέθοδοι οι οποίες δεν χρησιμοποιούν εσσιανούς πίνακες είναι αποτελεσματικές για μη κυρτά προβλήματα.

Οι στοχαστικές Quasi-Newton μέθοδοι

Μία από τις πιο σημαντικές εξελίξεις στον τομέα της μη γραμμικής βελτιστοποίησης είναι ο ερχομός των μεθόδων **quasi-newton**. Αυτοί οι μέθοδοι εφαρμόζουν εκτιμήσεις του εσσιανού πίνακα χρησιμοποιώντας μόνο πληροφορίες κλίσης και είναι συμβατές για προβλήματα κυρτού και μη κυρτού προγραμματισμού. Εκδοχές αυτών των μεθόδων όπως είναι οι μέθοδοι περιορισμένης μνήμης έχουν αποδειχθεί ότι είναι εξίσου αποτελεσματικές ιδιαίτερα όταν έχουμε τεράστιο όγκο μεταβλητών. Το βασικό σχήμα αυτών των μεθόδων ονομάζεται BFGS (16), και η διαφορίσιμη μορφή της συνάρτησης είναι

$$W_{k+1} \leftarrow W_k - \alpha_k H_k \nabla f(w_k)$$

Όπου η H_k είναι η συμμετρική ορισμένη θετική προσέγγιση της $(\nabla^2 F(W_k))^{-1}$ και φαίνεται ότι ενημερώνεται από τον ίδιο τον αλγόριθμο και όχι από υπολογισμούς δευτέρας τάξης σε κάθε επανάληψη. Ειδικότερα η καινούρια εκτίμηση του ανεστραμμένου εσσιανού πίνακα ορίζεται παρακάτω ως

$$s_k := w_{k+1} - w_k \text{ και } v_k := \nabla F(W_{k+1}) - \nabla F(W_k) \text{ και εν συνεχεία}$$

$$H_{k+1} \leftarrow \left(I - (v_k s_k^T | s_k^T v_k) \right)^T, \quad H_k \leftarrow \left(I - (v_k s_k^T | s_k^T v_k) \right) + s_k s_k^T / s_k^T v_k,$$

Ενα σημαντικό γεγονός με την μέθοδο αυτή είναι ότι επιτυγχάνει μεγάλο βαθμό σύγκλισης (17) και αυτό μάλιστα με πληροφορίες πρώτης τάξης και χωρίς την ανάγκη κάποιου γραμμικού συστήματος επίλυσης.

Οι μέθοδοι gauss-newton

Η μέθοδος αυτή αποτελεί την κλασσική προσέγγιση της μεθόδου των μη γραμμικών ελάχιστων τετραγώνων όπου η αντικειμενική συνάρτηση είναι το άθροισμα τετραγώνων. Βασικό πλεονέκτημα είναι ότι δημιουργεί μία προσέγγιση εσσιανού πίνακα χρησιμοποιώντας πρώτης τάξης πληροφορίες και αυτή η προσέγγιση είναι εγγυημένη ότι θα είναι ημιορισμένη θετικά ακόμα και αν ο εσσιανός πίνακας δεν είναι ορισμένος. **Βέβαια το τίμημα είναι σε αυτήν την περίπτωση, ότι αγνοεί αλληλεπιδράσεις δεύτερης τάξης μεταξύ στοιχείων της παραμέτρου ω πράγμα που σημαίνει την έλλειψη κάποιων πληροφοριών που ενδεχομένως να ήταν σημαντικοί για την διαδικασία της βελτιστοποίησης.**

Εστω ότι έχουμε ένα ζευγάρι (x, y) , το σφάλμα που προκαλείται από τον παραμετρικό παράγοντα ω υπολογίζεται από την τετραγωνική διαφορά της νορμας

$F(w; \xi) = 1/2 \|h(\chi_\xi; \omega_k) - y_k\|^2$ όπου $h(\chi_\xi; \omega_k)$ είναι η συνάρτηση πρόβλεψης. Ωστόσο μια εκτίμηση της κλασσικής μεθόδου gauss Newton επιτυγχάνεται κάνοντας μία πρόβλεψη της συνάρτησης πρόβλεψης εντός μίας τετραγωνικής συνάρτησης πρόβλεψης.

Η εκτίμηση της συνάρτησης πρόβλεψης υπολογίζεται περιπου ως

$$h(\chi_\xi; \omega) \approx h(\chi_\xi; \omega_k) + J_h(\omega_k; \xi)(\omega - \omega_k)$$

όπου J_h είναι η Ιακωβιανή μήτρα της συνάρτησης πρόβλεψης σε σχέση με το ω , ενώ επίσης η βέλτιστη συνάρτηση ελαχιστοποίησης της f δίνεται από την παρακάτω

$$h(\chi_\xi; \omega) \approx 1/2 \|h(\chi_\xi; \omega_k) + J_h(\omega_k; \xi)(\omega - \omega_k) - y_\xi\|_2^2$$

Γενικευμένη μέθοδος Gauss-Newton

Η μέθοδος είναι μία κλασσική προσέγγιση των μη γραμμικών ελαχίστων τετραγώνων προβλημάτων ελαχιστοποίησης στην οποία η αντικειμενική συνάρτηση είναι άθροισμα τετραγώνων. Αυτή η μέθοδος εφαρμόζεται σε προβλήματα βελτιστοποίησης που περιλαμβάνουν συνάρτηση ελαχίστων τετραγώνων αλλά η ιδέα γενικεύεται και σε άλλες συναρτήσεις σφάλματος επίσης. Το βασικό πλεονέκτημα είναι ότι δημιουργεί μία προσέγγιση στον εσσιανό πίνακα χρησιμοποιώντας πληροφορίες πρώτου βαθμού.

Μέθοδος φυσικής κλίσης

Η μέθοδος αυτή τείνει να είναι αδιάφορη όσον αφορά τους διαφορίσιμους μετασχηματισμούς (ιακωβιανή μήτρα). Η βασική ιδέα περιλαμβάνει τον σχηματισμό του αλγορίθμου βαθμιδωτής κλίσης στο περιβάλλον των συναρτήσεων πρόβλεψης από ότι σε συγκεκριμένες παραμέτρους. Φυσικά, ο πραγματικός υπολογισμός λαμβάνει χώρα πάντα σε συνάρτηση με τις παραμέτρους αλλά επίσης υπολογίζει την ανισότροπη σχέση μεταξύ των παραμέτρων και της συνάρτησης. Δηλαδή, στο χώρο των

παραμέτρων, ο φυσικός αλγόριθμος κλίσης θα κινητοποιήσει τις παραμέτρους πιο γρήγορα σε διευθύνσεις που έχουν μικρή επίδραση στην συνάρτηση και πιο σιγά σε διευθύνσεις που έχουν μεγάλη επίδραση στην συνάρτηση. Πολλοί συγγραφείς (18), θεωρούν ότι οι μέθοδοι quasi-natural gradient είναι αρκετά όμοιοι με τις μεθόδους quasi-newton. Η προσέγγιση ως εκ τούτου της φυσικής κλίσης προσφέρει μία διαφορετική δικαίωση για αυτούς τους αλγόριθμους.

Λίγα λόγια για την μέθοδο.

Έστω ότι H είναι ο χώρος των συναρτήσεων πρόβλεψης. Ψάχνουμε ένα αλγόριθμο ο οποίος θα ελαχιστοποιεί την συνάρτηση $F: h_w \in H \rightarrow F(h_w) = F(w) \in \mathbb{R}$.

Κάθε επανάληψη είναι ένας τυπικός αλγόριθμος βελτιστοποίησης ο οποίος υπολογίζει κάθε καινούρια επανάληψη. Εφόσον περιμένουμε οι πληροφορίες μας να είναι σωστές σε μια περιοχή γύρω από την h_{wk} περιοριζόμαστε μόνο στους αλγόριθμους οι οποίοι κάνουν ένα βήμα από το h_{wk} στο h_{wk+1} με μέγεθος $\eta_k > 0$. Ο αριθμός των επαναλήψεων προκειμένου να φτάσουμε στο βέλτιστο σημείο εξαρτάται από το μέγεθος του βήματος του αλγορίθμου με επιθυμητό μέγεθος να είναι όσον το δυνατόν μικρότερο. Μετά από μία σειρά βημάτων, έχει βρεθεί ότι η βέλτιστη μεταξύ των επαναλήψεων τιμή φυσικής κλίσης δίνεται από

$$\omega_{k+1} = \omega_k - \alpha_k G^{-1}(w_k) \nabla F(w_k)$$

Όπου α_k είναι ο πολλαπλασιαστής Langrage και G^{-1} είναι ο αντίστροφος της μήτρας Fischer ο οποίος εξαρτάται από την συνάρτηση πρόβλεψης.

Μέθοδοι οι οποίοι χρησιμοποιούν διαγώνιες διαβαθμίσεις.

Οι μέθοδοι που έχουμε αναφέρει μέχρι στιγμής, είναι υποχρεωμένες να προσπεράσουν το γεγονός ότι όταν γίνεται μία επανάληψη, κάποιος θα πρέπει να διασφαλίσει ότι το η πρόοδος που συντελείται ανα επανάληψη, υπερβαίνει το κόστος ανα επανάληψη. Μία στρατηγική προκειμένου να μειώσουμε το κόστος αυτό ανα επανάληψη είναι να δώσουμε προσοχή στις μήτρες διαγώνιας διαβάθμισης. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί πολλαπλασιάζοντας κάθε συντελεστή του βαθμιδωτού παράγοντα με το ανάλογο διαγώνιο όρο της διαβαθμισμένης μήτρας ή όταν η συνάρτηση πρόβλεψης είναι γραμμική, κανονικοποιώντας τους εσωτερικούς συντελεστές.(19)

3.5. ΜΕΘΟΔΟΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΓΙΑ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ –ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΗ ΚΛΙΣΗ(20)

Ο αλγόριθμος της στοχαστικής κλίσης παράγει διαδοχικές επαναλήψεις με σκοπό να ελαχιστοποιήσει την συνάρτηση

$$F: \mathbb{R}_d \rightarrow \mathbb{R}$$

Στην προκειμένη περίπτωση έχουμε στην διάθεση μας τρεις μηχανισμούς

- Δεδομένου του αριθμού της επανάληψης K , έναν μηχανισμό ο οποίος θα οδηγεί στην δημιουργία τυχαίων μεταβλητών ξ_k . Το ξ_k δηλαδή πρόκειται για μια αλληλουχία κοινών ανεξάρτητων τυχαίων μεταβλητών

- Δεδομένου μίας επανάληψης w_k και των τυχαίων ανεξάρτητων μεταβλητών ξ_k , υπάρχει ένας μηχανισμός που θα υπολογίζει τον στοχαστικό παράγοντα $g(w_k, \xi_k) \in \mathbb{R}^d$.
- Δεδομένου ενός αριθμού επανάληψης, θέλουμε ο μηχανισμός αυτός να υπολογίζει το μέγεθος βήματος $\alpha_k > 0$

Πιο συγκεκριμένα

Η εξίσωση $F: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ θα μπορούσε να είναι

$$F(w) = \begin{cases} R(w) = E[f(w; \xi)] \\ Rn(w) = 1/n \sum_{\xi=1}^n f(w; \xi) \end{cases}$$

Όπου η πρώτη αφορά το αναμενόμενο σφάλμα ενώ η δεύτερη αφορά το εμπειρικό σφάλμα. Ο στοχαστικός παράγοντας θα μπορούσε να είναι

$$g(w_k, \xi_k) = \begin{cases} \nabla f(w_k; \xi_k) \\ \frac{1}{n_k} \sum_{i=1}^{n_k} \nabla f(w_k; \xi_{k,i}) \\ H_k \frac{1}{n_k} \sum_{i=1}^{n_k} \nabla f(w_k; \xi_{k,i}), \end{cases}$$

Η πρώτη αφορά τον στοχαστικό παράγοντα για την κλίση ενός παραδείγματος, η δεύτερη αφορά την κλίση για μία μικρή παρτίδα δεδομένων, ενώ η τρίτη αφορά τυχόν ανασκευασμένα παραδείγματα.

Βασικές προτάσεις

I) Χαλαρότητα. Η ανάλυσή μας βασίζεται στην υπόθεση χαλαρότητας. Αυτή η υπόθεση συμβαίνει και στην περίπτωση μη κυρτών παραδειγμάτων. Η αντικειμενική συνάρτηση $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ είναι συνεχώς διαφορίσιμη και η κλίση της $\nabla F: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ είναι συνεχής κατά Lipschitz με σταθερά Lipschitz $L > 0$ όταν

$$\|\nabla F(w) - \nabla F(\bar{w})\|_2 \leq L \|w - \bar{w}\|_2 \text{ για όλα τα } \{w, \bar{w}\} \subset \mathbb{R}^d$$

Ο αριθμός των επαναλήψεων στον αλγόριθμο της στοχαστικής κλίσης ικανοποιεί την επόμενη ανισότητα

$$E_{\xi_k}[F(w_k + 1)] - F(w_k) \leq -\alpha_k \nabla F(w_k)^T E_{\xi_k}[g(w_k, \xi_k)] + \frac{1}{2} \alpha_k^2 L E_{\xi_k}[\|g(w_k, \xi_k)\|_2^2]$$

Ο όρος $-\alpha_k \nabla F(w_k)^T E_{\xi_k}[g(w_k, \xi_k)]$ αποτελεί την αναμενόμενη μείωση των επαναλήψεων του αλγόριθμου και ο δεύτερος όρος $\frac{1}{2} \alpha_k^2 L E_{\xi_k}[\|g(w_k, \xi_k)\|_2^2]$ αποτελεί τον θόρυβο

II) Στιγμές

Η αντικειμενική συνάρτηση και ο αλγόριθμος της στοχαστικής κλίσης ικανοποιούν τις παρακάτω προϋποθέσεις

- Η αλληλουχία των επαναλήψεων φαίνεται ότι περιορίζεται από μία συνάρτηση F_{\inf}

- Υπάρχει κλιμάκωση $\mu_g \geq \mu \geq 0$ τέτοια ώστε για όλα τα k να ισχύει

$$\nabla F(wk)^T E\xi_k[g(w, \xi_k)] \geq \mu \|\nabla F(wk)\|_2^2$$

$$\|E\xi_k[g(wk, \xi_k)]\|_2 \leq \mu_g \|\nabla F(wk)\|$$

- Υπάρχει κλιμάκωση $M > 0$ και $M_v > 0$ ώστε για όλα τα k ώστε να ισχύει

$$V_{\xi_k}[g(wk, \xi_k)] \leq M + M_v \|\nabla F(wk)\|_2^2$$

Συνδυάζοντας τις

$$\|E\xi_k[g(wk, \xi_k)]\|_2 \leq \mu_g \|\nabla F(wk)\| \text{ και την } V_{\xi_k}[g(wk, \xi_k)] \leq M + M_v \|\nabla F(wk)\|_2^2$$

Εχουμε την παρακάτω

$$\|E\xi_k[g(wk, \xi_k)]\|_2^2 \leq M + M_v \|\nabla F(wk)\|_2^2$$

Επιπλέον η αναμενόμενη μείωση και ο θόρυβος δίνονται από τις παρακάτω ανισότητες που εκφράζουν

τις επαναλήψεις του αλγόριθμου στοχαστικής κλίσης $E_{\xi_k}[F(wk+1)] - F(wk) \leq -\mu \alpha_k \|\nabla F(wk)\|_2^2$

$$+ 1/2 \alpha_k^2 L E_{\xi_k} [\|g(wk, \xi_k)\|_2^2] \leq -(\mu - 1/2 \alpha_k L M_g) \alpha_k \|\nabla F(wk)\|_2^2 + 1/2 \alpha_k^2 L M$$

III) Δυνατή κυρτότητα

Η αντικειμενική συνάρτηση $F: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ είναι ισχυρά κυρτή εάν υπάρχει μία σταθερή τιμή $c > 0$ για όλα τα

$$(\bar{W}, W) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \text{ ισχύει}$$

$$F(\bar{W}) \geq F(W) + \nabla F(W)^T (\bar{W} - W) + 1/2c \|\bar{W} - W\|_2^2$$

Επιπλέον η F έχει μόνο έναν ελαχιστοποιητή

ο οποίος ορίζεται ως $w_* \in \mathbb{R}^D$ με $F_* := F(w_*)$

Από την παραπάνω ανισότητα προκύπτει και η σχέση

$$2c(F(w) - F_*) \leq \|\nabla F(w)\|_2^2 \text{ για όλα τα } w_* \in \mathbb{R}^D$$

Αλλά τελικά γιατί μας νοιάζει η κυρτότητα;

- Γιατί δίνει πιο αξιόπιστα αποτελέσματα
- Συνήθως συμβαίνει και στην πραγματικότητα
- Μπορεί και περιγράφει οποιαδήποτε χαλαρή συνάρτηση αρκεί να βρίσκεται σε ένα τοπικό ισχυρό ελάχιστο.

Στοχαστική κλίση με σταθερό βήμα

Εάν η μέθοδος του αλγόριθμου βελτιστοποίησης μπορεί να τρέχει με σταθερό βήμα ή να βαίνει μειούμενο όσο πλησιάζουμε στην βέλτιστη λύση. Είναι λογικό ότι όσο πιο μακριά βρισκόμαστε από την βέλτιστη

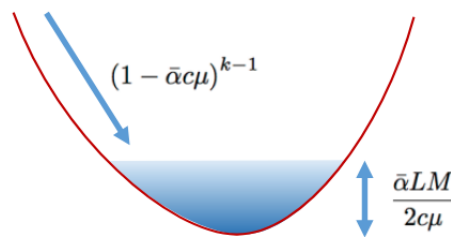
λύση, ο αλγόριθμος θα πρέπει να έχει ένα σταθερό μέγεθος βήματος το οποίο ωστόσο να μειώνεται. Στην περίπτωση σταθερού βήματος ως υποθέσουμε ότι το βήμα είναι ίσο με

$\alpha_k = \bar{\alpha}$ για όλα τα $k \in N$ ενώ ικανοποιείται η σχέση

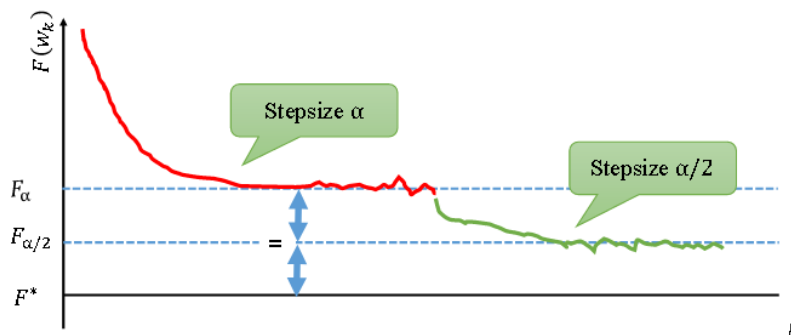
$$0 \leq \bar{\alpha} \leq \mu / LM_G$$

τότε η αναμενόμενη έλλειψη εμπιστοσύνης ικανοποιείται από την ανισότητα

$$E[F(w_k) - F_*] \leq \bar{\alpha} \frac{LM}{2c\mu} + (1 - \bar{\alpha} c \mu)^{k-1} \left(F(w_1) - F_* - \frac{\bar{\alpha} LM}{2c\mu} \right) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{\bar{\alpha} LM}{2c\mu}$$



Εάν μειωθεί το μέγεθος του βήματος τότε αντίστοιχα έχουμε

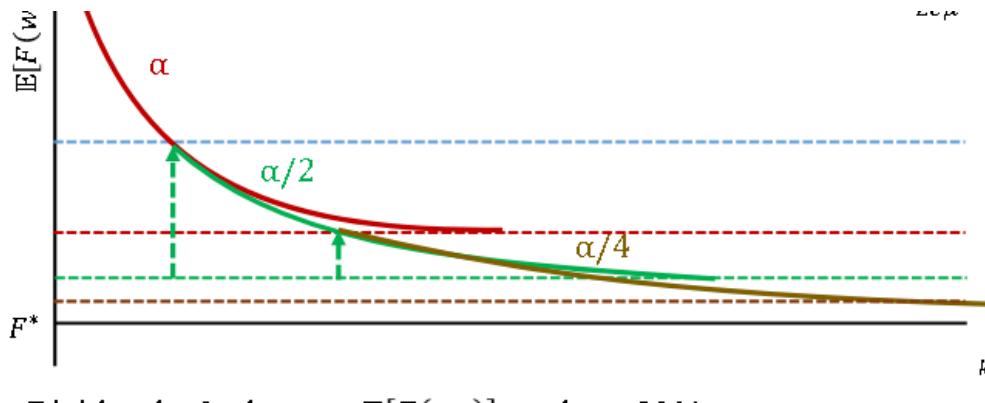


Σχήμα 12°. Μείωση σφάλματος με την μείωση του μεγέθους του βήματος

Δηλαδή εάν περιμένουμε αρκετά, το μέγεθος του βήματος μειώνεται σε $F(w_k) - F_*$ ενώ μπορούμε να υπολογίσουμε και το μέγεθος $F_* = 2F_{\alpha/2} - F_{\alpha}$

Εάν θέλουμε να μειώσουμε το μέγεθος του βήματος γρηγορότερα τότε διαιρούμε το $\alpha/2$ οπότε η

$E(F(w_k) - F_*)$ προσεγγίζει την τιμή του $2(\alpha LM / 2c\mu)$



Γενικά ότι αναφέρουμε παραπάνω έχουν να κάνουν με τον αλγόριθμο στοχαστικής κλίσης για κυρτή βελτιστοποίηση. Στην περίπτωση που έχουμε μη κυρτές συναρτήσεις τότε αντίστοιχα αλλάζουν τα παραπάνω. Γενικά ένα περιβάλλον μη κυρτών συναρτήσεων χαρακτηρίζεται από τα παρακάτω χαρακτηριστικά

- Κρίσιμα σημεία μπορεί να είναι τοπικά ελάχιστα ή ομάδα ελάχιστων
- Τα κρίσιμα σημεία μπορεί να είναι πρώτης τάξης ή και πιο υψηλής τάξης.
- Τα κρίσιμα σημεία μπορεί να είναι μαζί και οι δύο προηγούμενες ομάδες

Ουσιαστικά ο αλγόριθμος της στοχαστικής κλίσης αναφέρεται και αποσκοπεί στην εύρεση των κρίσιμων σημείων. Ο θόρυβος SG παίζει ωστόσο σημαντικό ρόλο στην πράξη διότι φαίνεται να βοηθά στην πλοήγηση των τοπικών ελάχιστων, ενώ έχει βρεθεί περισσότερος θόρυβος που βοηθά μερικές φορές τη βελτιστοποίηση. Αλλά η θεωρητική κατανόηση αυτών των γεγονότων είναι αδύναμη.

Εάν η μέθοδος της στοχαστικής κλίσης αφορά δεδομένο μέγεθος βήματος και μη κυρτό στόχο, και ισχύει $\alpha_k = \bar{\alpha}$ για όλα τα $k \in \mathbb{N}$ ενώ ικανοποιείται η σχέση $0 \leq \bar{\alpha} \leq \mu/LM_G$

Τότε το αναμενόμενο άθροισμα των τετραγώνων αλλά και το μέσο άθροισμα του F ακολουθούν τις παρακάτω ανισότητες και ορίζονται ως

$$E \sum_{k=1}^K [\|\nabla F(w_k)\|_2^2] \leq K \bar{\alpha} \frac{LM}{\mu} + 2 \left(\langle F(w_1) - F_{inf*} | \bar{\alpha} \mu \rangle \right)$$

$$E \sum_{k=1}^K [\|\nabla F(w_k)\|_2^2] \leq \bar{\alpha} \frac{LM}{\mu} + 2 \left(\langle F(w_1) - F_{inf*} | K \bar{\alpha} \mu \rangle \right)$$

Εάν ωστόσο το μέγεθος του βήματος μειωθεί τότε η αλληλουχία του βήματος θα πρέπει να ικανοποιείται

$$\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k = \infty$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k < \infty$$

$$\text{Και } E \sum_{k=1}^K \alpha_k [\|\nabla F(w_k)\|_2^2] < \infty$$

Μεγάλης κλίμακας μάθηση

Ας υποθέσουμε ότι είμαστε σε καθεστώς πολλών δεδομένων όπου

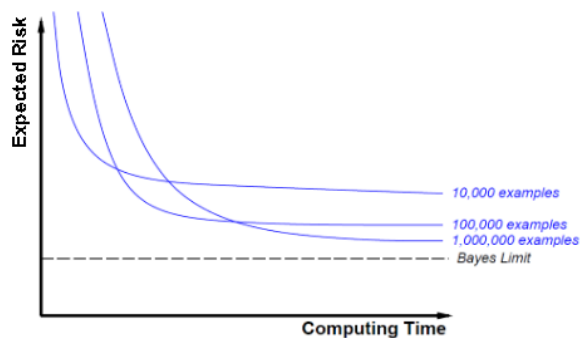
- Τα δεδομένα εκπαίδευσης είναι ουσιαστικά απεριόριστα
- Ο χρόνος υπολογισμού είναι περιορισμένος

Τα καλά

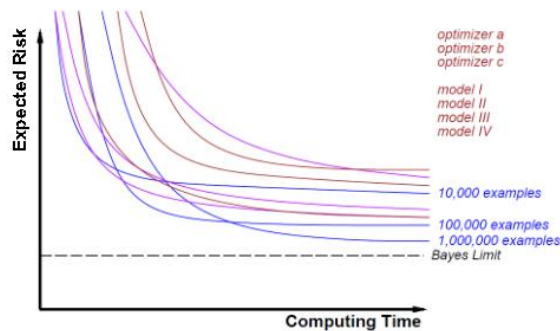
- Περισσότεροι βαθμοί κατάρτισης \Rightarrow μικρή υπερφόρτωση
- Λιγότερο υπερκατασκευές \Rightarrow περισσότερα μοντέλα.

Τα κακά

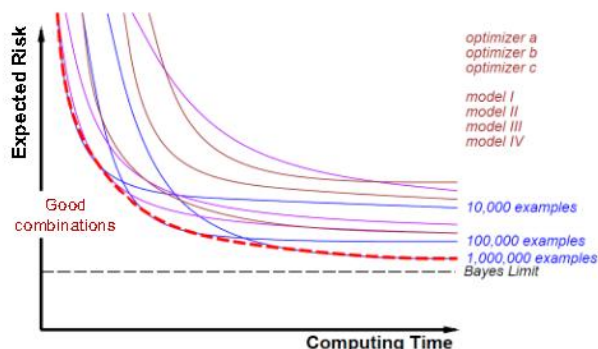
- Η χρήση περισσότερων δεδομένων εκπαίδευσης ή πλούσιων μοντέλων εξαντλεί γρήγορα το χρόνο του προϋπολογισμού. Η ελπίδα μας
- Πόσο λεπτομερώς χρειαζόμαστε για να βελτιστοποιήσουμε το $R_d(w)$ όταν θέλουμε πραγματικά να ελαχιστοποιήσουμε μια άλλη λειτουργία $R(w)$.



Όταν ο αριθμός των παραδειγμάτων ποικίλει



Όταν ποικίλουν τα παραδείγματα, ο βελτιστοποιητής και το μοντέλο



Σχήμα 11°. αναμενόμενος κίνδυνος όταν διαφέρουν τα μοντέλα, ο βελτιστοποιητής και ο αριθμός των παραδειγμάτων

3.6. Μέθοδοι Βελτιστοποίησης για Εποπτευόμενη Μηχανική Μάθηση: Από Γραμμικά Μοντέλα σε Βαθιά Μάθηση

Τις τελευταίες δύο δεκαετίες διαπιστώθηκε η σχεδόν πρωτοφανής άνοδος ενός ενδιαφέροντος αλγοριθμικού πεδίου, αυτός της μηχανικής μάθησης (ML).

Με ρίζες από την στατιστική και την επιστήμη των υπολογιστών, η μηχανική μάθηση αποτελεί τον κινητήριο μηχανισμό βελτιστοποίησης για ένα πρόβλημα. Στην πραγματικότητα, η μηχανική μάθηση με τα δεδομένα και τις αρχές που την διέπουν, έχει επηρεάσει πολλές από τις τελευταίες θεωρητικές και πρακτικές εξελίξεις στην βελτιστοποίηση. Παρόλα αυτά και παρά τις συνδέσεις αυτές, υπάρχουν πολλά εμπόδια μεταξύ της επιστήμης των υπολογιστών και του πεδίου της βελτιστοποίησης που ασχολούνται με την μηχανική μάθηση και τα σχετικά θέματα. Αυτοί οι φραγμοί - έχουν ως αποτέλεσμα την αλληλοεπικάλυψη προσπαθειών και καταλήγουν πολλές φορές στο να εμποδίζουν την αποτελεσματική ανταλλαγή ιδεών. Εδώ παρουσιάζονται ορισμένα βασικά θέματα και ερευνητικές ερωτήσεις που σχετίζονται με τη βελτιστοποίηση στο πεδίο του ML

Η ιδέα της μηχανικής μάθησης προκύπτει με το θεμελιώδες ερώτημα αν οι μηχανές (δηλ. οι υπολογιστές) μπορούν να «σκέφτονται» σαν τους ανθρώπους. Σε ένα πιο απτό επίπεδο, αυτό οδηγεί σε ερωτήσεις όπως εάν, με δεδομένη μια συγκεκριμένη εισροή, μια μηχανή μπορεί να παράγει ένα εύλογο και αποτελεσματικό αποτέλεσμα εξόδου, π.χ. με σκοπό την πρόβλεψη ή την απόφαση. Ας ξεκινήσουμε με μια απλή απεικόνιση του τρόπου με τον οποίο θα μπορούσε να γίνει αυτό πριν εισαγάγει την ιδέα της ενημέρωσης σχετικά με το πρόβλημα στην επόμενη υποδιαίρεση. Υποθέτουμε ότι μια εταιρεία σκοπεύει να προβλέψει εάν το προϊόν Α θα είναι κερδοφόρο (ναι ή όχι) σε ένα προσεχές τρίμηνο. Ένας άνθρωπος εμπειρογνώμονας μπορεί να προσπαθήσει να κάνει μια τέτοια πρόβλεψη εξετάζοντας διάφορους παράγοντες που μπορούν να βρεθούν στα ιστορικά δεδομένα, για παράδειγμα σχετικά με το Προϊόν Α, παραπλήσια προϊόντα και / ή άλλους παράγοντες. Για την απλότητα της απεικόνισης, ας υποθέσουμε ότι κάποιος θεωρεί δύο γνωστούς παράγοντες: η ζήτηση για Προϊόν και έναν άλλο παράγοντα, τον οποίο και ονομάζουμε παράγοντα Χ, και οι δύο προβάλλονται για το προσεχές τρίμηνο. Βέβαια, θα μπορούσε κανείς να αναμένει ότι η προβαλλόμενη υψηλή ζήτηση ενδέχεται να υποδηλώνει υψηλή πιθανή κερδοφορία στο προσεχές τρίμηνο, αλλά με την επιρροή του παράγοντα Χ θα μπορούσε να είναι λιγότερο προφανής. Για παράδειγμα, ο παράγοντας Χ ίσως αντανακλά το κόστος παραγωγής ή παράδοσης του Προϊόντος Α, το οποίο μπορεί να εξαρτηθεί από το κόστος των πρώτων υλών ή το κόστος εγκατάστασης (μείωση) των επιπέδων παραγωγής σε σχέση με τα προηγούμενα τρίμηνα. Συνολικά, η επίδραση του παράγοντα Χ θα μπορούσε να είναι πολύπλοκη και μη γραμμική. Η ιδέα είναι ότι, αν καθοριστεί ένα καλό εργαλείο πρόβλεψης (δηλαδή η διαχωριστική γραμμή / καμπύλη), τότε θα μπορούσε κανείς να πάρει ένα νέο

ζεύγος εισροών και να προβλέψει με ακρίβεια εάν το προϊόν θα είναι κερδοφόρο στο επόμενο τρίμηνο (σε αυτό το παράδειγμα, καθορίζοντας σε ποια πλευρά η διαχωριστική γραμμή είναι το νέο ζεύγος εισόδων)

Μαθησιακά προβλήματα και (υποκατάστατα) προβλήματα βελτιστοποίησης

Ας εξετάσουμε το πρόβλημα της προσπάθειας να προσδιορίσουμε μια αποτελεσματική διαδικασία όπου από μια μεταβλητή x σε ένα χώρο εισόδου $X \subseteq \mathbb{R}^{d_x}$ προβλέπουμε ποια είναι η σωστή έξοδος του σε ένα χώρο εξόδου $Y \subseteq \mathbb{R}^{d_y}$. Αυτό μπορεί να γίνει στην προσπάθεια να μάθουμε τη λειτουργία μίας εξίσωσης, $p: X \rightarrow Y$, που παίρνει τιμές εισόδου και παράγει τιμές εξόδου $p(x)$. Ο στόχος είναι να μεγιστοποιηθεί η συνάρτηση

$$\int_{X \times Y} 1[p(X) \approx Y] dP(x, y)$$

Εδώ, η παραπάνω σχέση είναι μία συνάρτηση που παίρνει την τιμή 1 αν το αποτέλεσμα είναι αληθές και 0 διαφορετικά. Όσο για τη σημείωση " \approx ", θα μπορούσε να σημαίνει κυριολεκτικά ότι οι δύο φορείς είναι ίσοι ή ίσοι με άλλο μέτρο ή κάποια άλλη συναφή έννοια. Η συνάρτηση πρόβλεψης μπορεί να είναι είτε γραμμικής είτε τετραγωνικής μορφής και μπορεί η έκφραση αυτής, να είναι δυαδικής ταξινόμησης δηλαδή να θέλει ως απάντηση ένα ναι ή όχι, είτε να μην είναι μεγαλύτερη από μία τιμή είτε τέλος σε μεγάλες ταξινομήσεις η τιμή της συνάρτησης πρόβλεψης να έχει την μεγαλύτερη πιθανότητα.

Παράδειγμα

Εστω το πρόβλημα

$$\max_{w \in \mathcal{W}} \int_{X \times Y} \mathbb{1}[yp(w, x) > 0] dP(x, y).$$

Το οποίο μπορεί να γραφτεί και ως

$$\min_{w \in \mathcal{W}} f(w), \quad f(w) := \int_{X \times Y} \mathbb{1}[yp(w, x) < 0] dP(x, y).$$

Ο στόχος είναι να βρεθεί ένας παράγοντας w όπου να ισχύει

$$yp(w, x) > 0 \iff \mathbb{P}(Y = y|x) > \frac{1}{2}$$

$$yp(w, x) < 0 \iff \mathbb{P}(Y = y|x) < \frac{1}{2}.$$

Μπορούμε να δημιουργήσουμε και κάποιο συσχετισμό εξισώνοντας

$$\ln \left(\frac{\mathbb{P}(Y = y|x)}{1 - \mathbb{P}(Y = y|x)} \right) = yp(w, x).$$

Μετά από κάποιους αλγεβρικούς μετασχηματισμούς ισχύει

$$\mathbb{P}(Y = y|x) = \frac{e^{yp(w, x)}}{1 + e^{yp(w, x)}} = \frac{1}{1 + e^{-yp(w, x)}},$$

Καποιος έτσι μπορεί να πεί ότι ένα λογικό υποκατάστατο του προβλήματος είναι

$$\min_{w \in \mathcal{W}} f(w), \quad f(w) := \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} \ell(p(w, x), y) dP(x, y) = \mathbb{E}[\ell(p(w, x), y)],$$

Και η συνάρτηση λογιστικού σφάλματος είναι

$$\ell(p(w, x), y) = \log(1 + e^{-yp(w, x)}).$$

Μέθοδοι για την επίλυση προβλημάτων λογιστικής παλινδρόμησης

Επιγραμματικά αναφέρουμε ότι τις μεθόδους πρώτης τάξης όπως είναι η κάθοδος με βάση την κλίση. πιο συγκεκριμένα ξεκινάμε από μια αρχική τιμή των βαρών w_i (ο) (συνήθως τυχαία). Σε κάθε επανάληψη t : υπολογίζουμε την κλίση και ενημερώνουμε τα w_i . Ελέγχουμε για τερματισμό της μεθόδου – Αν ναι, τερματίζουμε, αλλιώς συνεχίζουμε.

Μέθοδος στοχαστικής κλίσης

Η μέθοδος στοχαστικής κλίσης, γνωστή στην κοινότητα ως OR λόγω της χρήσης της για την ελαχιστοποίηση των στοχαστικών αντικειμενικών συναρτήσεων είναι ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης της μηχανικής μάθησης ML(21). Η μέθοδος είναι αξιοσημείωτη στο ότι μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την ελαχιστοποίηση μίας στοχαστικής αντικειμενικής συνάρτησης με ικανοποιητική σύγκλιση, ενώ το κόστος ανά επανάληψη είναι μικρό. Σε κάθε επανάληψη, ο αλγόριθμος της στοχαστικής κλίσης υπολογίζει έναν αμερόληπτο εκτιμητή G_k της πραγματικής κλίσης που είναι ίσος με $\nabla F(w_k)$. Αυτός ο εκτιμητής μπορεί να υπολογιστεί με πολύ χαμηλό κόστος. π.χ., για το παραπάνω πρόβλημα η στοχαστική κλίση μπορεί να υπολογιστεί ως

$$\nabla F(w_k) = -\frac{1}{|S^k| \sum_{i \in S^k} (1 + e^{y_i(w^T x_i)}) y_i x_i} + 2\lambda w$$

όπου το S_k , γνωστό ως mini-batch, έχει στοιχεία που έχουν επιλεγεί ομοιόμορφα τυχαία από το $\{1, \dots, n\}$. Το βήμα τότε λαμβάνεται παρόμοιο με τη καθοδική κλίση:

$$w_{k+1} \leftarrow w_k - \alpha_k \nabla_{S_k} F(w_k).$$

Απόλυτα κρίσιμος για τον αλγόριθμο είναι η επιλογή του μεγέθους βήματος $\{\alpha_k\}$. Σε αντίθεση με την καθοδική κλίση, μια σταθερή κλίμακα βημάτων (δηλ. Ρυθμός εκμάθησης) δεν εγγυάται τη σύγκλιση του αλγορίθμου με τον ελαχιστοποιητή μιας ισχυρώς κυρτής F . Στην πραγματικότητα όμως η μέθοδος της καθοδικής κλίσης δεν είναι και η πιο αποτελεσματική για την επίλυση προβλημάτων στην μηχανική μάθηση. Έχουν γίνει πολλές τροποποιήσεις και βελτιώσεις της μεθόδου προκειμένου να καλύψουν περισσότερες περιπτώσεις προβλημάτων. Ενδεικτικά αναφέρουμε την μείωση της διασποράς με τις μεθόδους δεύτερης τάξης. Υπάρχει μία ποικιλία προσεγγίσεων ακόμα και σε αυτές τις κατηγορίες. Πχ μία επέκταση της στοχαστικής βαθμιδωτής κλίσης που μπορεί να λειτουργήσει καλύτερα στην πράξη είναι η στοχαστική βαθμιδωτή κλίση με ορμή. Αυτός ο αλγόριθμος φαίνεται να λειτουργεί καλά στην βαθιά μάθηση(22)

Μέθοδοι μείωσης των διακυμάνσεων

Στις εφαρμογές μηχανικής μάθησης, το σύνολο δειγμάτων $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ συχνά δίνεται, και αν το μέγεθος n είναι αρκετά μεγάλο, τότε υπάρχει καλός λόγος να δούμε την διακριτή ομοιόμορφη κατανομή του δείγματος ως καλή προσέγγιση προς την κατανομή P .

Κάποιος μπορεί να διαπιστώσει ότι η μέθοδος της στοχαστικής κλίσης μπορεί να βελτιωθεί με την θεώρηση της δομής της αντικειμενικής συνάρτησης F σαν ένα πεπερασμένο άθροισμα η συναρτήσεων συν ένα απλό όρο κυρτότητας. Διάφορες μέθοδοι έχουν αναπτυχθεί σε αυτές τις κατευθύνσεις, όπως SAG(23)(24), (25), (26). Η SAG και η SAGA, για παράδειγμα, βασίζονται στον μέσο όρο των παρελθόντων στοχαστικών κλίσεων με ένα συγκεκριμένο τρόπο, σε μια προσπάθεια να συγκεντρώσουν ακριβέστερες εκτιμήσεις κλίσης καθώς ο αλγόριθμος για την βελτιστοποίηση προχωράει. Ως αποτέλεσμα, αποκτούν το ίδιο ποσοστό σύγκλισης με τις πλήρεις μεθόδους (με καλύτερους σταθερούς παράγοντες). Ωστόσο, αυτές οι μέθοδοι απαιτούν την αποθήκευση των η προηγούμενων στοχαστικών βαθμίδων έτσι ώστε τα μέρη αυτών να μπορούν να ενημερώνονται ξεχωριστά. Αντίθετα, το SVRG δεν απαιτεί τέτοια μεγάλη αποθήκευση, αν και απαιτεί υπολογισμό της πλήρους κλίσης για κάθε $O(n)$ επανάληψη. Το όνομα SVRG, το οποίο σημαίνει στοχαστική κλίση μειωμένης διακύμανσης, προέρχεται από το γεγονός ότι ο αλγόριθμος μπορεί να θεωρηθεί ως παραλλαγή μειωμένης διακύμανσης της προηγούμενης μεθόδου SGD (ειδικά για ελαχιστοποίηση πεπερασμένων ποσών). Για να το δούμε αυτό, παρατηρούμε πρώτον, ότι οι τυχαίες κατευθύνσεις που λαμβάνονται από τον αλγόριθμο είναι στην πραγματικότητα αμερόληπτες εκτιμήσεις κλίσης:

$$E V_T - \nabla F(W_t) - \nabla F(W_0) + u_0 - \nabla F(W_t)$$

Δεύτερον, παρατηρούμε ότι ο υπολογισμός της πλήρους κλίσης σε κάθε επανάληψη βοηθά στη μείωση της διακύμανσης των εκτιμήσεων στοχαστικής κλίσης που χρησιμοποιούνται στην SGD. Πράγματι, αν το w_t είναι "κοντά" στο w_0 , κανένας δεν έχει παρά να περιμένει ότι το v_t να είναι "πλησιέστερο" σε $\nabla F(w_t)$ από το $\nabla F(w_0)$ μόνο του. Στην πράξη, το SVRG είναι κάπως πιο ισχυρό από το SGD στην επιλογή του ρυθμού εκμάθησης.

Μέθοδοι δεύτερης τάξης και μέθοδος quasi-Newton. Με βάση δεκαετίες έρευνας στο τομέα της βελτιστοποίησης, ένας από τους πιο δραστήριους ερευνητικούς τομείς στη βελτιστοποίηση του ML είναι ο τρόπος με τον οποίο μπορεί κανείς να χρησιμοποιήσει πληροφορίες παραγώγου δεύτερης τάξης (δηλαδή καμπυλότητας) εκπαίδευσης. Η ιδέα είναι να υπολογιστεί το βήμα k με ελαχιστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης F ενός τετραγωνικού μοντέλου για το w_k της φόρμας

$$M_k(s) = F(w_k) + \nabla F(w_k)^T s + \frac{1}{2} s^T B_k s$$

Όπου B_k είναι θετικά ορισμένος, δηλ. $B_k > 0$. Υπάρχει μια ποικιλία αλγορίθμων αυτού του τύπου, που διακρίνονται από τον τρόπο με τον οποίο αποκτήθηκε το πλέγμα καμπυλότητας B_k , και τον τρόπο με τον οποίο υπολογίστηκε (κατά προσέγγιση ή ακριβώς) ο ελαχιστοποιητής s_k .

Το πρωτότυπο παράδειγμα της μεθόδου Newton όπου $B_k = \nabla^2 F(w_k)$, υποθέτει ότι αυτή η μήτρα είναι θετική. Για παράδειγμα, για την περίπτωση του προβλήματος ομαλής παλινδρόμησης, διαπιστώνουμε ότι ο

εσσιανός πίνακας, προέρχεται από το άθροισμα παρόμοιων όρων που ορίζονται πάνω στο σύνολο δεδομένων

$$\nabla^2 f(w) = \frac{1}{n \sum_{i=1}^n (e^{y_i^T w} x_i x_i^T + 2I^{d \times d} \lambda)}$$

Δυστυχώς, ο υπολογισμός και η αποθήκευση εσσιανού πίνακα γίνεται απαγορευτικά ακριβή για τις εφαρμογές της μηχανικής μάθησης όταν τα n , d είναι μεγάλα. Μια άλλη κατηγορία αλγορίθμων είναι οι νέες-μεθόδους quasi-Newton. Ενδιαφέρον είναι ότι αυτές οι προσεγγίσεις δεν υπολογίζουν συγκεκριμένες δεύτερης τάξης παραγώγους αλλά αντίθετα, κατασκευάζουν εσσιανούς πίνακες προσέγγισης από πρώτης τάξης παραγώγους.

Ο πιο δημοφιλής quasi-Newton αλγόριθμος είναι η μέθοδος Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS). Σε αυτήν την μέθοδο κάποιος αναγνωρίζει ότι ο ελαχιστοποιητής του

$$M_k(s) = F(w_k) + \nabla F(w_k)^T s + \frac{1}{2} s^T B_k s \text{ είναι ο } -B_k^{-1} \nabla F(w_k)^T$$

αποκαλύπτοντας ότι είναι πράγματι βολικό να υπολογίσει κανείς τον αντίστροφο εσσιανό πίνακα. Με το $-B_k^{-1}$ δεδομένο, με το βήμα $s_k = w_{k+1} - w_k$ και με την μετατόπιση $y_k = \nabla F(w_{k+1}) - \nabla F(w_k)$, κάποιος επιλέγει B_{k+1}^{-1} για να ελαχιστοποιήσει την μήτρα « $B^{-1} - B_k^{-1}$ » με την προϋπόθεση ότι ικανοποιεί αυτή την εξίσωση $s_k = B_{k+1}^{-1} y_k$. Χρησιμοποιώντας έναν προσεκτικά επιλεγμένο κανόνα, η λύση αυτού του προβλήματος μπορεί να γραφτεί ρητά ως

$$B_{k+1}^{-1} = (I - (s_k y_k^T | s_k^T y_k) B_k^{-1}) (I - (s_k^T y_k | s_k y_k^T)) + (s_k^T s_k | y_k y_k^T)$$

όπου η διαφορά μεταξύ των B_k^{-1} και B_{k+1}^{-1} μπορεί να αποδειχθεί ότι είναι μόνο μια μήτρα δεύτερης τάξης. Οι στοχαστικές μέθοδοι βελτιστοποίησης (χωρίς μείωση της διακύμανσης) δεν μπορούν να επιτύχουν ρυθμό σύγκλισης που είναι γρήγορος, ακόμη και αν χρησιμοποιούνται πληροφορίες δεύτερης τάξης. Εντούτοις, η χρήση πληροφοριών δεύτερης τάξης είναι μια καλή ιδέα, αφού εάν οι προσεγγίσεις του εσσιανού πίνακα, συγκλίνουν με το εσσιανό πίνακα στην λύση, τότε η σταθερά στο ρυθμό σύγκλισης μπορεί να μειωθεί καθώς οι επιπτώσεις της κακής προετοιμασίας μπορούν να μειωθούν. Δυστυχώς, παρά τις πρακτικές βελτιώσεις που έχουν παρατηρηθεί, δεν υπάρχει ακόμη μια πρακτική μέθοδος δεύτερης τάξης η οποία αποδεδειγμένα επιτυγχάνει τέτοιες βελτιώσεις θεωρητικά. Προς το παρόν, οι περισσότερες πρακτικές μέθοδοι επιτυγχάνουν αποδεδειγμένα τις ιδιότητες σύγκλισης (ρυθμού) των μεθόδων στοχαστικής κλίσης, και οι προσεγγιστικές εσσιανές μήτρες παραμένουν καλές.

Βαδιά μάθηση(αλγόριθμοι DNN).

Έχουμε δει ότι η μαθηματική βελτιστοποίηση παίζει έναν αναπόσπαστο ρόλο στη μηχανική μάθηση. Μάλιστα, θα πρέπει να γίνει μια προσεκτική σειρά επιλογών και πρακτικών προσεγγίσεων προτού φτάσει κανείς σε ένα πρόβλημα όπως το

$$\min_{w \in W} f(w) \text{ όπου } f(w) := -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(p(w, x_i), y_i)$$

Έχουμε επίσης δει πως, όπως και σε πολλά παραδοσιακά μοντέλα μηχανικής μάθησης, μπορεί κανείς να αντιμετωπίσει ένα κυρτό πρόβλημα βελτιστοποίησης όπως το

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d} F(w) \text{ όπου } F(w) := -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log(1 + e^{y_i(w^T x_i)}) + r(w)\lambda$$

για το οποίο μπορούν να εφαρμοστούν πολυάριθμοι τύποι αλγορίθμων με γνωστές ισχυρές εγγυήσεις σύγκλισης. Ωστόσο, για μια ποικιλία τύπων μαθησιακών προβλημάτων, οι ερευνητές έχουν διαπιστώσει ότι η κατάληξη σε ένα κυρτό πρόβλημα ταιριάζει από την άποψη της απλοποίησης της συνάρτησης που κάποιος προσπαθεί να μάθει για να κάνει ακριβείς προβλέψεις.

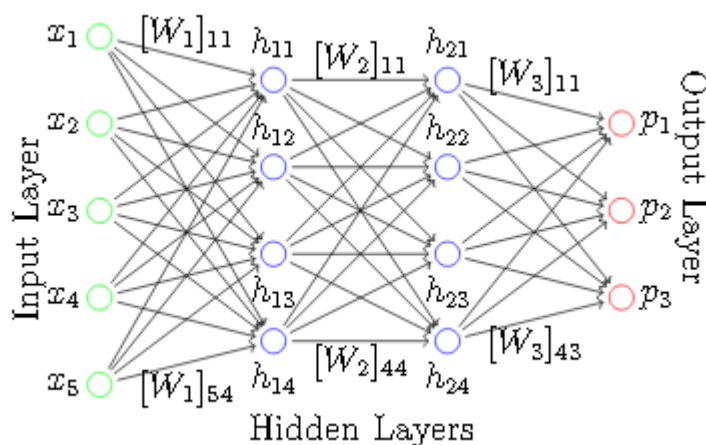
Αυτό που θα κάνουμε εδώ είναι να κάνουμε μία επισκόπηση των πρόσφατων εξελίξεων σε αυτόν τον τομέα βελτιστοποίησης για μηχανική μάθηση. Οι σημαντικότερες εξελίξεις που έγιναν σε αυτές τις κατευθύνσεις αφορούν τη χρήση νευρωνικών δικτύων (DNNs). Ο αντίστοιχος κλάδος της ML που είναι γνωστός ως βαθιά γνώση αντιπροσωπεύει τάξεις αλγορίθμων που προσπαθούν να κατασκευάσουν υψηλού επιπέδου δεδομένα χρησιμοποιώντας ένα βαθύ γράφημα με πολλαπλές στρώσεις που αφορούν διαδοχικούς γραμμικούς και μη γραμμικούς μετασχηματισμούς. Μια ποικιλία τύπων νευρωνικών δικτύων έχει μελετηθεί τα τελευταία χρόνια, συμπεριλαμβανομένων των πλήρως συνδεδεμένων δικτύων (FNN), των συμβατικών δικτύων (CNN) και των επαναλαμβανόμενων δικτύων.

Νευρωνικά δίκτυα

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (artificial neural networks) στην αρχή παρουσιάστηκαν ως ένα μαθηματικό μοντέλο το οποίο προσομοιώνει την πολύπλοκη λειτουργία εγκεφαλικών νευρώνων του ανθρώπινου εγκεφάλου. Η δομή και οι συνδέσεις του εγκεφάλου είναι τέτοιες ώστε να καθιστούν δυνατή την παράλληλη επεξεργασία δεδομένων και σημάτων και τη δυνατότητα συνεχούς μάθησης μέσω της αλληλεπίδρασης με το περιβάλλον. Αυτά τα δύο θεμελιώδη χαρακτηριστικά συμβάλλουν στην ικανότητα, αφενός, εκτέλεσης δύσκολων καθηκόντων, όπως η γρήγορη αναγνώριση μορφών, ταξινόμησης αντικειμένων με αφαιρετικά δεδομένα (π.χ. μακρινές λήψεις εικόνων) κ.ά., αφετέρου, στην συνεχή εξέλιξη και προσαρμογή, μαθαίνοντας από το περιβάλλον κατά την αλληλεπίδρασή του με αυτό. Η λειτουργία ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου μιμείται κατά το δυνατό εκείνη του αντίστοιχου βιολογικού νευρωνικού δικτύου, ώστε να εμφανίζονται παρόμοιες ιδιότητες και κατά την επεξεργασία δεδομένων. Κατ' αντιστοιχία επομένως με ένα δίκτυο νευρώνων εγκεφάλου, ένα τεχνητό δίκτυο δομείται από ένα σύνολο τεχνητών νευρώνων που επικοινωνούν και αλληλοεπιδρούν, συνδεδεμένοι μεταξύ τους με τις λεγόμενες συνάψεις (synapses). Κάθε συνάψη έχει διαφορετικό βαθμό αλληλεπίδρασης, ο οποίος καθορίζεται από τα συναπτικά βάρη (synaptic weights), τα οποία μεταβάλλονται ανάλογα κατά την εκπαίδευση. Το κύριο πλεονέκτημα των νευρωνικών δικτύων είναι ότι έχουν την δυνατότητα να αποθηκεύσουν γνώση και εμπειρία από το περιβάλλον, την οποία στη συνέχεια δύναται να ανακαλέσουν. Επιπλέον, ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο προσφέρει την δυνατότητα γενίκευσης μίας εισόδου, δηλαδή την εξαγωγή των βασικών χαρακτηριστικών ενός συστήματος, ακόμα και όταν αυτά είναι κρυμμένα σε θορυβώδη δεδομένα.

Σχηματισμός

Δομικά, ένα DNN παίρνει τη μορφή ενός γραφήματος με υποσύνολα κόμβων διατεταγμένων σε μια ακολουθία. Κάθε υποσύνολο κόμβων (ή νευρώνων) καλείται στρώση, όπου σε απλές περιπτώσεις, ακμές υπάρχουν μόνο μεταξύ των νευρώνων δύο διαδοχικών στρωμάτων. Ωστόσο, εκτός από τη δομή του, η βασική δομή ενός DNN είναι ο τρόπος με τον οποίο οι πληροφορίες "τροφοδοτούνται" μέσω αυτού. Στην απλή περίπτωση της απλής προώθησης δεδομένων, αυτό συμβαίνει ως εξής. Πρώτον, κάθε στοιχείο του διανύσματος εισόδου $x = (x_1, \dots, x_{dx})$ δίνεται σε ένα διαφορετικό νευρώνα στο πρώτο στρώμα, επίσης γνωστό ως το στρώμα εισόδου. Οι τιμές σε αυτό το στρώμα μετά περνούν η κάθε μία στους νευρώνες της επόμενης στρώσης αφού πρώτα έχουν πολλαπλασιαστεί με τα βάρη που συνδέονται με τις αντίστοιχες ακμές. Από τον δεύτερο κόμβο εν συνεχεία η τιμή μπορεί να μετατραπεί περαιτέρω μέσω της εφαρμογής μιας (γραμμικής ή μη γραμμικής) συνάρτησης ενεργοποίησης εισέρχεται στην τρίτη στρώση κ τλ. Το τελευταίο στρώμα του δικτύου, το οποίο προβλέπει την προβλεπόμενη έξοδο $p(x)$, είναι γνωστή και ως το στρώμα εξόδου, ενώ τα στρώματα μεταξύ της εισόδου και εξόδου καλούνται κρυμμένες στρώσεις. Όσο πιο πολλές κρυμμένες στρώσεις υπάρχουν τόσο πιο βαθύ είναι το δίκτυο.



Σχήμα 14° Δίκτυο DNN

Μαθηματικά, η εφαρμογή ενός DNN ξεκινά με τη ρύθμιση του $x^{(1)} \leftarrow x$ ως των επιμέρους τιμών εισόδου. Όταν εφαρμόζονται επαναλαμβανόμενοι μετασχηματισμοί (για κάθε ακολουθούμενο στρώμα) της φόρμας $x^{1+j} \leftarrow s_j(W_j X^j + W)_j$

όπου κάθε W_j είναι ένας πίνακας παραμέτρων βάρους, ω_j είναι ένας φορέας παραμέτρων μετατόπισης, και s_j είναι μια συνάρτηση ενεργοποίησης (οι κοινές επιλογές της οποίας είναι σιγμοειδείς, ή γραμμικές).

Άλλες δομές γραφημάτων είναι κοινές στη βαθιά εκμάθηση, όλες σχεδιασμένες, σε κάποιο βαθμό, για συγκεκριμένους σκοπούς. Για παράδειγμα, τα συνελκτικά νευρωνικά δίκτυα (CNNs) έχουν λάβει μεγάλη προσοχή στο πλαίσιο της αναγνώρισης εικόνων (και άλλων αντιληπτικών καθηκόντων). Αυτά τα δίκτυα

εκμεταλλεύονται το γεγονός ότι η είσοδος αποτελείται από μονάδες, όπως τα εικονοστοιχεία μιας εικόνας, τα οποία είναι εγγενώς συνδεδεμένα λόγω των χωρικών τους σχέσεων.

Τα Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα περιέχουν σίγουρα τουλάχιστον ένα ή περισσότερα επίπεδα Συνέλιξης (Convolutional Layers), . Επίσης, ένα επιπρόσθετο επίπεδο το οποίο συναντάται στα Συνελικτικά Νευρωνικά είναι το επίπεδο Συγκέντρωσης (Pooling), το επίπεδο απαλοιφής Γραμμικότητας (Nonlinear Layer) και τελικά το Πλήρως Συνδεδεμένο Επίπεδο (Fully Connected Layer). Το τελευταίο επίπεδο εμφανίζεται και στα τυπικά Νευρωνικά Δίκτυα. Το κύριο πλεονέκτημα των Συνελικτικών Νευρωνικών Δικτύων είναι πως με την αρχιτεκτονική τους δομή ευνοούν την επεξεργασία δισδιάστατων δεδομένων, όπως και στην εφαρμογή της παρούσας εργασίας με εικόνες, ήχους ή και άλλα. Αυτό συμβαίνει καθώς με τις τοπικές συνδέσεις και αλληλοεπιδράσεις των κόμβων και την εξαγωγή τοπικών χαρακτηριστικών, απαλείφεται η εξάρτηση από μετατοπίσεις, διαστρεβλώσεις και σημαντικό θόρυβο των εισόδων. Για παράδειγμα, μία εικόνα ($W \times H$) που έχει μετατοπιστεί ή έχει θόρυβο στα εικονοστοιχεία της, δίνει παρόμοια τοπικά αποτελέσματα με την μη διαστρεβλωμένη. Ένα επιπρόσθετο πλεονέκτημα των Νευρωνικών αυτών δικτύων είναι η ευκολότερη εκπαίδευση και οι λιγότερες παράμετροι σε σχέση με τα τυπικά Νευρωνικά Δίκτυα. Όλα αυτά, σε συνδυασμό με την αποδοτικότητά τους, τα καθιστούν ένα τουλάχιστον άξιο για μελέτη, μοντέλο Νευρωνικών Δικτύων. Για την βαθύτερη κατανόηση των Συνελικτικών Νευρωνικών, αξίζει να δούμε εποπτικά το επίπεδο συνέλιξης (convolutional Layer). Όπως έχει προαναφερθεί, τα δεδομένα είναι σε δισδιάστατη μορφή. Έτσι, στο επίπεδο αυτό, υπάρχουν αντίστοιχα δισδιάστατα φίλτρα, τα οποία είναι προφανώς μικρότερου μεγέθους από την ίδια την είσοδο (πχ ύψος επί πλάτος για μία εικόνα). Το κάθε φίλτρο συνελίσσεται με κάθε εικόνα και έχει ως έξοδο χάρτες χαρακτηριστικών (feature maps), τόσους όσους και τα φίλτρα. Στη συνέχεια, ο χάρτης αυτός υποδειγματοληπτείται στο επίπεδο Συγκέντρωσης, ώστε να μειωθούν τα δεδομένα χωρίς να χαθεί σημαντική πληροφορία. Η λειτουργία των CNN συνοψίζεται στα εξής τέσσερα βασικά βήματα, τα οποία χρησιμοποιούνται πάνω από μία φορά και με διαφορετική σειρά, ανάλογα με την εκάστοτε περίπτωση:

1. Συνέλιξη της εισόδου με φίλτρα που έχουν προκύψει απ' τη διαδικασία εκμάθησης
2. Εφαρμογή μη γραμμικότητας (Non linearity)
3. Επίπεδο Συγκέντρωσης (Pooling Layer)
4. Κανονικοποίηση (Normalization) Η διαδικασία προσαρμογής των φίλτρων αλλά και της τιμής των σταθμισμένων βάρων, γίνεται μέσω του αλγορίθμου backpropagation (οπισθοδιάδοσης).

Για τα DNNs γενικά, η δομή του γραφήματος και οι λειτουργίες ενεργοποίησης καθορίζονται συνήθως εκ των προτέρων, πράγμα που σημαίνει ότι πρέπει να λύσουμε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης για να ελαχιστοποιήσουμε τον αναμενόμενο (ή εμπειρικό) κίνδυνο πάνω στις παραμέτρους $w = (W_1, \omega_1, W_2, \omega_2, \dots)$. Ωστόσο, ένα τέτοιο πρόβλημα δεν μπορεί γενικά να περιοριστεί σε ένα κυρτό πρόβλημα βελτιστοποίησης. Πράγματι, τα προκύπτοντα προβλήματα είναι εξαιρετικά μη κυρτά με πολλά σημεία και τοπικά ελάχιστα. Λόγω αυτού, θα μπορούσε κανείς να αναμένει ότι η εκπαίδευση ενός DNN θα ήταν ένα αδύνατο έργο. Εντούτοις, με τα τεράστια ποσά δεδομένων και υπολογιστών υψηλής απόδοσης που είναι διαθέσιμα σήμερα, οι ερευνητές έχουν βρει ότι οι μέθοδοι βελτιστοποίησης μπορούν να προσφέρουν (κατά προσέγγιση) λύσεις που οδηγούν σε DNN με μεγάλες δυνατότητες πρόβλεψης. Το αυξημένο ενδιαφέρον των νευρωνικών δικτύων και η βαθιά μάθηση τα τελευταία χρόνια υπήρξε τόσο για θεωρητικούς όσο και πρακτικούς λόγους. Το θεώρημα καθολικής προσέγγισης που καθιερώθηκε το 1989 δείχνει ότι ένα νευρωνικό δίκτυο τροφοδοσίας προς τα εμπρός με μόνο ένα απλό κρυφό στρώμα θα μπορούσε, κάτω από ήπιες υποθέσεις για τη λειτουργία ενεργοποίησης, να προσεγγίσει οποιαδήποτε συνεχή συνάρτηση στο υποσύνολο του R^d . Από

την πρακτική πλευρά, οι πρόσφατες εξελίξεις στις τεχνικές βελτιστοποίησης και η χρήση υπολογιστικών πόρων βοήθησαν στην κατάρτιση DNN για εφαρμογές μεγάλης κλίμακας, όπως για την αναγνώριση ομιλίας(27), την ταξινόμηση εικόνων(28), την πρόβλεψη(29) τη μηχανική μετάφραση (30) και την μηχανική(31).

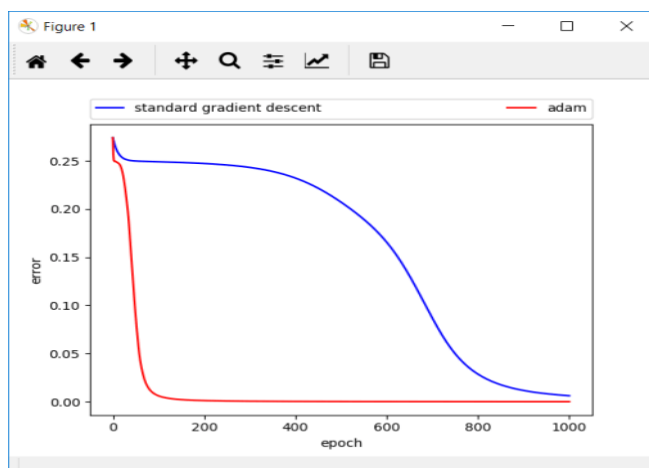
3.7.Μαθηματική βελτιστοποίηση για μηχανική μάθηση χρησιμοποιώντας στοιχεία από τη Φυσική.

ΤΕΧΝΙΚΕΣ.

Μελετώντας την διαδικασία της μηχανικής μάθησης, επικεντρωνόμαστε κυρίως στην τεχνική της σταδιακής καθόδου. Η μέθοδος περιγράφεται με πολλά ονόματα όπως συνάρτηση κόστους, ή αντικειμενική συνάρτηση ή με άλλες ονομασίες. Ο αλγόριθμος του adam(32) αποτελεί έναν καλό αλγόριθμο βελτιστοποίησης ο οποίος αποσκοπεί στην εξεύρεση βέλτιστων βαρών, στην ελαχιστοποίηση των σφαλμάτων και στην μεγιστοποίηση της ακρίβειας. Η μέθοδος της καθοδικής κλίσης αποτελεί και τον πιο κοινό αλγόριθμο βελτιστοποίησης για τα νευρωνικά δίκτυα. Βρήκαμε μερική παράγωγο του συνολικού σφάλματος σε σχέση με κάθε βάρος και χρησιμοποιήσαμε αυτόν τον υπολογισμό για την ενημέρωση των βαρών. Η μέθοδος αυτήν περιγράφεται με την παρακάτω σχέση

$$w_i = w_i - \alpha \cdot dw_i$$

Το α εκφράζει έναν ρυθμό μάθησης και ο όρος gradient είναι μία παράγωγος της αντικειμενικής συνάρτησης σε σχέση με τον w . Ουσιαστικά ο αλγόριθμος αυτός μπορεί να χρησιμοποιηθεί αντί της μεθόδου της στοχαστικής καθόδου προκειμένου να καθορίσει και να ενημερώσει τα βάρη ενός δικτύου όταν εισάγονται δεδομένα. θεωρείται μέθοδος που οδηγεί σε γρήγορα και ικανοποιητικά αποτελέσματα. Αυτό παρουσιάζεται καθαρά και στο παρακάτω σχεδιάγραμμα

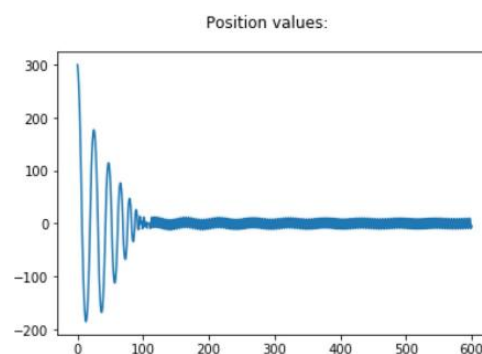


ΝΕΥΤΩΝΙΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ

Το βασικό βήμα προς την επίλυση ενός συγκεκριμένου κλασικού φυσικού (Νιούτον) προβλήματος είναι να βρούμε την εξίσωση της σχέσης μεταξύ της δύναμης και του χρόνου, που σημαίνει να λύσουμε

ακριβώς την εξίσωση $F = g(t)$. Στην πραγματικότητα, αυτό μπορεί επίσης να αξιολογηθεί με τις εξισώσεις $x = g(t)$ και $v = g(t)$ όσο αυτές βρίσκονται στο χώρο που σχηματίζεται από τις μαθηματικές βάσεις. Για να λύσουμε λοιπόν το πρόβλημα φυσικής του Νεύτωνα στα NNs, παίρνουμε πρώτα για παράδειγμα την τυπική μεθοδολογία του αλγόριθμου MLP (Multilayer perceptron). Αυτό είναι να χρησιμοποιήσουμε NNs (νευρωνικά δίκτυα) για να απεικονίσουμε μια συνάρτηση $x = f(t)$. Το πείραμα έγινε με συγκεκριμένες εξισώσεις μίας διάστασης. Ωστόσο η ίδια εξίσωση μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε περισσότερες διαστάσεις απλά χρησιμοποιώντας μερικές παραγώγους αντί για ολική παράγωγο

Εστω μία συνάρτηση $y = x^2$. Εάν αρχίσουμε από μία θέση και ακολουθήσουμε τους νόμους της κίνησης αποκτάμε το παρακάτω σχήμα. Παρατηρούμε ότι σε τιμές γύρω από το 0 η θέση αποκτά μία σταθερότητα και μία ελάχιστη ταλάντωση

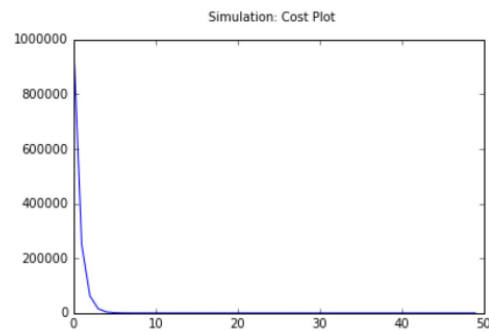
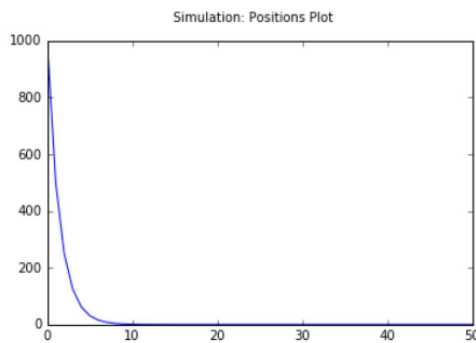


Εξισώσεις του Αϊνστάιν

Ο Αϊνστάιν είχε προτείνει ότι οι δύο παράμετροι, ο χώρος και ο χρόνος, δεν είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους και η κίνηση λαμβάνει χώρα και στις δύο με ένα μοναδικό τρόπο. Πιο συγκεκριμένα, ο χρόνος είναι σχετικός με τον χώρο. Η εξίσωση που σχηματίζεται χρησιμοποιώντας τις αρχές της σχετικότητας είναι η παρακάτω

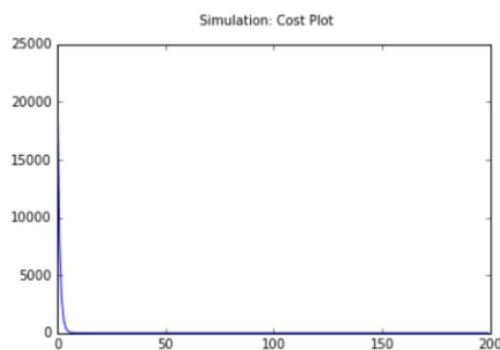
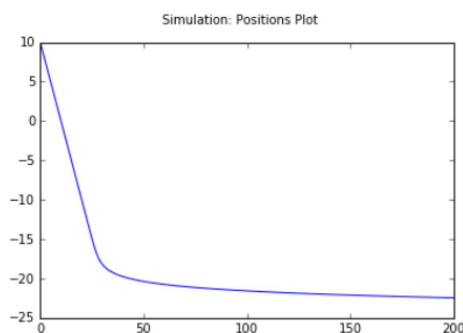
$$x = x - (y / (dy_dx + (y * epsilon)))$$

Ο όρος epsilon αναφέρεται στο αντίστροφο της ταχύτητας του φωτός ώστε ο όρος dy/dx να είναι 0 και η ταχύτητα να είναι σταθερή. Η εξίσωση είναι παρόμοια και πολύ επηρεασμένη από την μέθοδο του Newton-Rapson. Όταν χρησιμοποιούμε αυτήν την εξίσωση μαζί με την καμπύλη $y=x^2$ έχουμε τα παρακάτω σχήματα αρχίζοντας από $x=1000$. Ουσιαστικά δηλαδή, οι δύο διαστάσεις, ο χώρος και ο χρόνος υπεισέρχονται ως παράγοντες στην επίλυση μίας εξίσωσης



Σχήμα 15°. επίλυση της εξίσωσης $y=x^2$ με βάση τις εξισώσεις του Αινστάιν

Όσον αφορά την εκθετική συνάρτηση $y = \exp(x)$ τα αντίστοιχα σχέδια αλλάζουν όπως παρουσιάζονται παρακάτω



Σχήμα 16°. επίλυσης της εξίσωσης $y=\exp(x)$ με βάση τις εξισώσεις του Αινστάιν

3.8.ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Εισαγωγή. Εφοδιασμένες με την αύξηση της ισχύος του υπολογιστή και των αλγοριθμικών εξελίξεων, οι τεχνικές μηχανικής μάθησης έχουν καταστεί ισχυρά εργαλεία για την εύρεση μοτίβων σε δεδομένα. Αν αναλογιστούμε ότι τα κβαντικά συστήματα παράγουν αντιδιαδικαστικά μοτίβα (counter-intuitive patterns) που πιστεύεται ότι δεν παράγονται αποτελεσματικά από τα κλασικά συστήματα, είναι λογικό να υποθέσουμε ότι οι κβαντικοί υπολογιστές ενδέχεται να ξεπεράσουν τους κλασικούς υπολογιστές σε εργασίες μηχανικής μάθησης. Ο τομέας της κβαντικής μηχανικής μάθησης διερευνά τον τρόπο επινόησης και εφαρμογής συγκεκριμένου κβαντικού λογισμικού που προσφέρει τέτοια πλεονεκτήματα. Πρόσφατες έρευνες στον κλάδο κατέστησαν σαφές ότι οι προκλήσεις υλικού και λογισμικού εξακολουθούν να είναι σημαντικές, αλλά έχουν επίσης ανοίξει δρόμους προς ενδεχόμενες λύσεις. Με απλά λόγια, στην κβαντική μηχανική μάθηση, οι κβαντικοί αλγόριθμοι αναπτύσσονται έτσι ώστε να λύνουν βασικά προβλήματα μηχανικής μάθησης κάνοντας χρήση της πολύ μεγάλης απόδοσης των κβαντικών υπολογιστών. Κύριο εργαλείο της και υπεροχή της σε σχέση με τις κλασικές μεθόδους, είναι η διαχείριση και εκτέλεση πράξεων πινάκων με διανύσματα μεγάλων διανυσματικών 6 χρώων. Αυτό συνήθως γίνεται

αναπροσαρμόζοντας τους κλασικούς αλγόριθμους ή τις δαπανηρές υπορουτίνες τους, ώστε να μπορούν να εκτελεσθούν σε έναν κβαντικό υπολογιστή. Αναμένεται ότι στο κοντινό μέλλον τέτοιες μηχανές θα είναι ευρέως διαδεδομένες και θα βοηθήσουν στην επεξεργασία του αυξανόμενου όγκου δεδομένων. Υπάρχουν και προσεγγίσεις που ακολουθούν την αντίστροφη ιδέα, δηλαδή τη χρήση των βελτιωμένων μεθόδων μηχανικής μάθησης για την βελτίωση της ίδιας της θεωρίας κβαντικής πληροφορίας. Για να εκμεταλλευτούμε τις δυνατότητες της κβαντομηχανικής χωρίς να περιοριζόμαστε από τις κλασικές ιδέες που έχουμε για την κωδικοποίηση δεδομένων, η εύρεση καθαρά κβαντικών τρόπων αναπαράστασης και εξόρυξης πληροφορίας ίσως να γίνει ζωτικής σημασίας για το μέλλον της κβαντικής μηχανικής μάθησης. Πάντως, μέχρι σήμερα περιοριζόμαστε όπως προαναφέρθηκε, στην αναπροσαρμογή κλασικών αλγορίθμων σε μορφή διαχειρίσιμη από έναν κβαντικό υπολογιστή. Με αυτούς ακριβώς τους αλγόριθμους θα ασχοληθούμε στη συνέχεια.

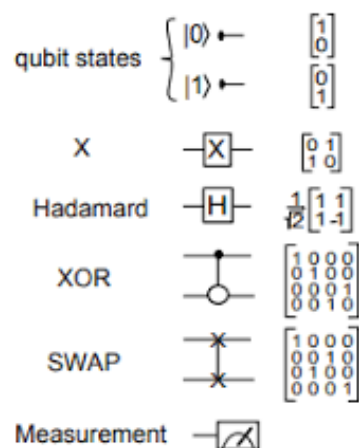
Βασικά στοιχεία της κβαντικής υπολογιστικής

Η βασική μονάδα ενός κβαντικού υπολογισμού είναι το qubit (quantum bit), όπου

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \text{ με } \alpha, \beta \in \mathbb{C} \text{ και } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

Το τετράγωνο του πλάτους μιας κβαντικής κατάστασης είναι η πιθανότητα να βρεθεί, μετά από μέτρηση, το qubit σε αυτή τη κατάσταση, και στην κβαντομηχανική διατηρείται πάντα η ιδιότητα της διατήρησης της πιθανότητας που δίνεται από την παρακάτω σχέση $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Στη γλώσσα των μαθηματικών, αυτό σημαίνει ότι οποιοσδήποτε μετασχηματισμός ενός qubit από μια κβαντική κατάσταση σε μια άλλη (κβαντικές πύλες) πρέπει να είναι ορθομοναδιαίος. Μέσα από κβαντικές πύλες ενός qubit μπορούμε να αλλάξουμε την βασική κατάσταση ενός qubit, το πλάτος του ή τη φάση του (όπως για παράδειγμα μέσα από την πύλη-X, πύλη-Z ή πύλη-Y), ή να θέσουμε σε υπερθέση ένα qubit με $\alpha = 0$, ($\beta = 0$) σε $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ ($\alpha = 1/\sqrt{2}$, $\beta = -1/\sqrt{2}$) μέσω της πύλης Hadamard. Μια από τις σημαντικότερες πύλες που δέχεται δύο qubits είναι η πύλη XOR, η οποία αντιμεταθέτει το δεύτερο qubit αν το πρώτο qubit βρίσκεται στην κατάσταση $|1\rangle$.



Σχεδ. 17. Αναπαράσταση των καταστάσεων qubit, ορθομοναδιαίων πυλών και μετρήσεων σε κβαντικά κυκλώματα και η αναπαράσταση των πινάκων. Οι κβαντικές πύλες αναπαρίστανται συνήθως ως ορθομοναδιαίοι πίνακες. Οι πίνακες ενεργούν σε 2^n -διάστατα διανύσματα τα οποία περιέχουν τα πλάτη των 2 βασικών κβαντικών καταστάσεων του n -διάστατου κβαντικού συστήματος.

Η τέχνη του να παράγουμε αλγορίθμους για έναν πιθανό κβαντικό υπολογιστή είναι πρακτικά η χρήση τέτοιων βασικών πυλών με σκοπό να δημιουργήσουμε μια κβαντική κατάσταση η οποία έχει σχετικά μεγάλα πλάτη για τις καταστάσεις που αποτελούν τις λύσεις σε κάποιο πρόβλημα. Μετά την μέτρηση του κβαντικού συστήματος, παράγεται ένα επιθυμητό αποτέλεσμα σε σχετικά μεγάλη πιθανότητα. Οι κβαντικοί αλγόριθμοι συνήθως επαναλαμβάνονται μερικές φορές αφού τα αποτελέσματα τους είναι αμφιταλαντευόμενα. Στην κβαντική μηχανική μάθηση, οι κβαντικοί αλγόριθμοι αναπτύσσονται έτσι ώστε να λύνουν βασικά προβλήματα μηχανικής μάθησης κάνοντας χρήση της πολύ μεγάλης απόδοσης των κβαντικών υπολογιστών. Αυτό συνήθως γίνεται αναπροσαρμόζοντας τους κλασσικούς αλγορίθμους ώστε να μπορούν να τρέξουν σε έναν κβαντικό υπολογιστή. Οι προσδοκίες είναι ότι στο κοντινό μέλλον τέτοιες μηχανές θα είναι ευρέως διαδεδομένες και θα βοηθήσουν στην επεξεργασία του αυξανόμενου όγκου δεδομένων. Υπάρχουν και προσεγγίσεις που ακολουθούν την αντίστροφη ιδέα, δηλαδή την χρήση των βελτιωμένων μεθόδων μηχανικής μάθησης για την βελτίωση της ίδιας της θεωρίας κβαντικής πληροφορίας.

Όπως προαναφέρθηκε, δεν υπάρχει μια πλήρης θεωρία για την κβαντική μάθηση ακόμη. Μια θεωρία κβαντικής μάθησης θα μπορούσε να αναφέρεται σε μεθόδους επεξεργασίας κβαντικής πληροφορίας οι οποίες μαθαίνουν τις συσχετίσεις εισόδου -εξόδου από ένα σύνολο εκμάθησης, είτε για την βελτιστοποίηση κβαντικών παραμέτρων είτε για την εύρεση μιας «κβαντικής συνάρτησης απόφασης» ή μια «κβαντική στρατηγική». Πως μπορούμε να υλοποιήσουμε αποδοτικά ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης (το οποίο συνήθως λύνεται επαναληπτικά με μεθόδους όπως τη μέθοδο της επικλινούς καθόδου) σε έναν κβαντικό υπολογιστή; Πώς μπορούμε να μεταφράσουμε και να επεξεργαστούμε σημαντική δομική πληροφορία, όπως μετρικές αποστάσεις, χρησιμοποιώντας κβαντικές καταστάσεις; Πώς μπορούμε να ορίσουμε μια στρατηγική απόφασης μέσα από τη κβαντική φυσική; Και η γενική ερώτηση, υπάρχει ένας γενικός και καθολικός τρόπος του πώς η κβαντική φυσική μπορεί επιταχύνει και να βελτιώσει την επίλυση συγκεκριμένων προβλημάτων στη μηχανική μάθηση; Μια ακόμη έμμεση ερώτηση είναι η αναπαράσταση κλασσικών δεδομένων από ένα κβαντικό σύστημα. Η συνηθέστερη προσέγγιση στην κβαντική υπολογιστική είναι η αναπαράσταση της κλασσικής πληροφορίας ως δυαδική συμβολοσειρά

(x_1, \dots, x_n) με $x_i \in \{0,1\}$, $i = 1 \dots n$, οι οποίες μεταφράζονται κατευθείαν σε n -qubit κβαντικές καταστάσεις $|x_1 \dots x_n\rangle$ στον 2^n -διάστατο χώρο Hilbert με βάση $\{|0 \dots 0\rangle, |0 \dots 01\rangle, \dots |1 \dots 1\rangle\}$ και να διαβάζονται οι πληροφορίες μέσω μετρήσεων.

Ωστόσο, ήδη υπάρχοντες αλγόριθμοι μηχανικής μάθησης βασίζονται συχνά σε μια εσωτερική δομή αυτών των δεδομένων, όπως είναι η χρήση της Ευκλείδειας απόστασης ως μια μονάδα μέτρησης ομοιότητας μεταξύ δύο δεδομένων.

Για να εκμεταλλευτούμε τις δυνατότητες της κβαντομηχανικής χωρίς να περιοριζόμαστε από τις κλασσικές ιδέες που έχουμε για την κωδικοποίηση δεδομένων, η εύρεση «καθαρά κβαντικών» τρόπων αναπαράστασης και εξόρυξης πληροφορίας ίσως να γίνει ζωτικής σημασίας για το μέλλον της κβαντικής μηχανικής μάθησης.

Γραμμική άλγεβρα με χρήση της κβαντικής μηχανικής.

Η επίλυση γραμμικών συστημάτων εξισώσεων είναι ένα πρόβλημα για την , μηχανική μάθηση. Επίσης διάφορα προβλήματα μάθησης όπως είναι η διαδικασίες Gauss, ή SVM απαιτούν την αντιστροφή μήτρας. Ο αλγόριθμος QLSA (33)) επιλύει την αντιστροφή των μήτρων σε λογαριθμικό χρόνο.

Κβαντική βελτιστοποίηση. Ο ημιορισμένος προγραμματισμός είναι βασικός για την επίλυση συγκεκριμένων τύπων προβλημάτων κυρτής βελτιστοποίησης. Αλγόριθμος ο οποίος χρησιμοποιείται για

την επίλυση προβλημάτων με περιορισμούς είναι ο αλγόριθμος QAOA ο οποίος δημιουργήθηκε το 2014 από τους . Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann(34)

“Κβαντικά νευρωνικά δίκτυα. Αποδίδουν μια ποικιλία μοντέλων που έχουν εφαρμοστεί στην ταξινόμηση , παλινδρόμηση , στατιστική ανάλυση. Βασικό χαρακτηριστικό τους είναι η μετατροπή γραμμικών λειτουργιών με μη γραμμικές μορφές πχ σιγμοειδείς συναρτήσεις. Τα πρώτα άρθρα για τα κβαντικά νευρωνικά δίκτυα παρουσιάστηκαν αρχές του 90. Η φιλοσοφία της επιταχυνόμενης εκπαίδευσης των νευρωνικών δικτύων με την χρήση κβαντικών πηγών έχει επικεντρωθεί σε μοντέλα που είναι γνωστά ως restricted Boltzman machines(RBMs) (35). Πρόκειται για μοντέλα που επιτρέπουν την αναδημιουργία νέων δεδομένων βασιζόμενων στα προηγούμενα δεδομένα τα οποία ωστόσο μπορούν να μελετηθούν από την κβαντική μηχανική εξαιτίας της στενής σχέσης με το μοντέλο Ising.

Επίλυση δύσκολων προβλημάτων με την χρήση της κβαντικής μηχανικής.

Έχει παρατηρηθεί ότι η χρήση των κβαντικών αλγορίθμων επιταχύνουν λογαριθμικά τόσο πολυωνυμικές όσο και εκθετικές συναρτήσεις.

4.ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΜΕΘΟΔΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΜΑΘΗΣΗΣ ΣΤΗΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ

4.1.Μια μηχανή ιεραρχίας: Μάθηση για Βελτιστοποίηση από τη φύση και τους ανθρώπους

Βασικό χαρακτηριστικό πολλών σύνθετων συστημάτων που μας επιτρέπουν να αντιληφθούμε, να αναλύσουμε και να οικοδομήσουμε τέτοια συστήματα είναι αυτό της ιεραρχίας.(42).Με την ιεραρχία, εννοούμε ένα σύστημα που αποτελείται από υποσυστήματα, το καθένα από τα οποία είναι ιεραρχικό από μόνο του μέχρις ότου υπάρξει σε κάποιο επίπεδο παρακάτω οπότε θα δημιουργηθεί καινούρια τάξη πραγμάτων. Σε κάθε επίπεδο μιας ιεραρχίας, οι αλληλεπιδράσεις εντός κάθε υποσυστήματος είναι πολύ υψηλότερου μεγέθους από τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των υποσυστημάτων. Παραδείγματα ιεραρχικών συστημάτων μπορούν να βρεθούν παντού γύρω μας .

Στα κοινωνικά συστήματα, η ιεραρχία μπορεί να παρατηρηθεί σε οργανισμούς και σε κοινωνικά δίκτυα. Σε βιολογικά συστήματα, οι οργανισμοί αποτελούνται από όργανα, τα όργανα αποτελούνται από ιστούς, οι ιστοί αποτελούνται από κύτταρα, και ούτω καθεξής.

Η ιεραρχία όμως δεν είναι μόνο ένα χρήσιμο εργαλείο για να περιγράψουμε τα πολύπλοκα συστήματα. αλλά είναι επίσης ένα βασικό συστατικό της προσέγγισης που χρησιμοποιεί για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων της μηχανικής, της επιστήμης και του εμπορίου. Στη μηχανική λογισμικού, σύνθετα συστήματα λογισμικού είναι χτισμένα σε πολλαπλά επίπεδα. Σε κάθε επίπεδο, τα συστατικά μέρη (λειτουργίες, βιβλιοθήκες, αντικείμενα κ.λπ.) από χαμηλότερα επίπεδα χρησιμοποιούνται ως βασικά δομικά στοιχεία για την κατασκευή νέων εξαρτημάτων και τα συστατικά αυτά χρησιμοποιούνται σε ακόμη υψηλότερα επίπεδα. Ξεκινώντας από τη γλώσσα συσχέτισης με τη γλώσσα αλληλουχίας ερωτήσεων των συστημάτων βάσεων δεδομένων ή με "κλικ και πληκτρολόγηση" σε επεξεργαστή κειμένου, ο ιεραρχικός σχεδιασμός μας επιτρέπει να αναπτύξουμε πολύπλοκα συστήματα που δεν θα μπορούσαν να προσεγγιστούν σε ένα μόνο επίπεδο. Παρά την παρούσα φύση της ιεραρχίας τόσο στα φυσικά όσο και στα τεχνητά συστήματα και παρά την ευκολία με την οποία οι άνθρωποι φαίνεται να αντιλαμβάνονται και να χρησιμοποιούν την ιεραρχία στην καθημερινή επίλυση προβλημάτων, η εκτεταμένη και αποτελεσματική εκμετάλλευση της ιεραρχίας στις υπολογιστικές διαδικασίες αναζήτησης και βελτιστοποίησης δεν είναι ένα συνηθισμένο φαινόμενο.

Δεν θα ήταν ωραίο αν μπορούσαμε να επινοήσουμε γρήγορα και αξιόπιστα τις διαδικασίες της σύνθεσης για να λύσουμε με ακρίβεια όλες ή τις περισσότερες από τις σημαντικότερες ταξινομικές λύσεις του Simon(σχεδόν ιεραρχικά);

Γενικά προτείνεται μια μηχανή ιεραρχίας, μια μέθοδος που συνδυάζει ιδέες από εξελικτικές υπολογιστικές, στατιστικές και μηχανική μάθηση για να χρησιμοποιήσουν την ιεραρχία σε μια διαδικασία

βελτιστοποίησης της πληροφορικής. Ακριβώς όπως η αξιοποίηση της ιεραρχίας στην επίλυση προβλημάτων βοηθάει τον άνθρωπο να επιλύει προβλήματα που δεν μπορούν να προσεγγίσουν σε ένα ενιαίο επίπεδο, η ίδια ιδέα επιτρέπει μια διαδικασία υπολογιστικής βελτιστοποίησης να κάνει το ίδιο. Από τους εξελικτικούς υπολογισμούς, βιώνουμε τις ιδέες της βελτιστοποίησης με βάση τον πληθυσμό, την αποτελεσματική εξερεύνηση συνδυάζοντας τα κομμάτια των προτάσεων λύσεων και τη δημιουργία μιας σειράς τεχνητών διαφοροποιήσεων. Οι στατιστικές και η μηχανική μάθηση παρέχουν μεθόδους για την εκμάθηση πιθανολογικού γραφικού μοντέλου που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την καταγραφή και κωδικοποίηση της δομής του προβλήματος και των εγγενών κανονικοτήτων και για την καθοδήγηση της αποτελεσματικής έκφρασης του τομέα προβλημάτων. Επιπλέον, ορίζουμε μια τάξη δύσκολων ιεραρχικών προβλημάτων που συνδέουν μια ευρεία τάξη σύνθετων και απλών προβλημάτων - την τάξη των σχεδόν διασπασμένων και ιεραρχικών προβλημάτων. Τα εμπειρικά αποτελέσματα επιβεβαιώνουν ότι ο προτεινόμενος αλγόριθμος είναι ικανός να επιλύσει αποτελεσματικά, με ακρίβεια και αξιοπιστία αυτή τη σημαντική κατηγορία προβλημάτων.

Πρωταρχικά μπορούμε να αναφέρουμε την βελτιστοποίηση του μαύρου κουτιού που βασίζεται στις προδιαγραφές της μονάδας λογισμικού που πρόκειται να ελεγχθεί και οι οποίες θεωρούνται γνωστές, ενώ ο τρόπος κατασκευής της θεωρείται άγνωστος.

Αντιμετωπίζεται δηλαδή σαν ένα μαύρο κουτί του οποίου η συμπεριφορά μπορεί να μελετηθεί μόνο παρατηρώντας τις εισόδους και τα αποτελέσματα που αντιστοιχούν σε αυτές.

Για την αποκάλυψη όλων των σφαλμάτων αρκεί να δοκιμαστούν τα δεδομένα που ανήκουν στο σύνολο A, δηλαδή τα δοκιμαστικά δεδομένα που προκαλούν ανώμαλη συμπεριφορά του συστήματος. Στην ουσία όμως, για να γίνει κάτι τέτοιο θα πρέπει να δοκιμαστούν όλα τα δυνατά δεδομένα εισόδου, κάτι το οποίο είναι ανέφικτο. Θα πρέπει, λοιπόν, να γίνει επιλογή ενός συνόλου περιπτώσεων ελέγχου οι οποίες έχουν μεγάλη πιθανότητα να αποκαλύψουν σφάλματα στην ελεγχόμενη οντότητα, δηλαδή του μαύρου κουτιού. Η βελτιστοποίηση της θεωρίας του μαύρου κουτιού μπορεί να θεωρηθεί ως έργο καθορισμού των βέλτιστων τιμών των μεταβλητών, δεδομένου ενός μέτρου απόδοσης για κάθε διαμόρφωση των μεταβλητών. Κάθε διαμόρφωση των προβληματικών μεταβλητών αντιπροσωπεύει μια υποψήφια λύση σε ένα πρόβλημα. Υπάρχουν δύο σημαντικά χαρακτηριστικά των προβλημάτων βελτιστοποίησης του μαύρου κουτιού

- Το μέτρο απόδοσης είναι άγνωστο
- Η πραγματική σημασιολογία μιας υποψήφιας λύσης είναι άγνωστη.

Ο διαχωρισμός ενός βελτιστοποιητή από τις υποψήφιες λύσεις, και των μέτρων βελτιστοποίησης ενός προβλήματος με τη στρατηγική του μαύρου κουτιού είναι κατάλληλη για τη βελτιστοποίηση του φάσματος περιοχών από τη βελτιστοποίηση των παραμέτρων μέχρι το σχεδιασμό, τη μουσική σύνθεση, τη στατιστική και το εμπόριο. Από την άλλη μεριά, ο διαχωρισμός του βελτιστοποιητή σύμφωνα με τους περισσότερους ερευνητές βελτιστοποίησης, αφήνει στην μέθοδο αυτή, εξειδικευμένη γνώση με πολλές προκλήσεις. Ο πιο απλός τρόπος για την επίλυση ενός τέτοιου προβλήματος είναι όταν η καλύτερη λύση επιλέγεται αφού απαριθμηθούν όλες οι υποψήφιες λύσεις σε μια προκαθορισμένη ή τυχαία σειρά. Η χρονική πολυπλοκότητα της συνολικής απαρίθμησης είναι ανάλογη του συνολικού αριθμού των υποψηφίων λύσεων. Ωστόσο, επειδή ο αριθμός των λύσεων αυξάνεται τουλάχιστον εκθετικά με τον αριθμό των μεταβλητών απόφασης, η συνολική απαρίθμηση είναι ανυπόστατη για ομοιόμορφα μικρά προβλήματα. Τα καλά νέα είναι ότι τα αληθινά προβλήματα συχνά επιδεικνύουν παρατυπίες, οι οποίες μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την απλούστευση αυτών των προβλημάτων και την ταχεία λύση τους χωρίς την απαίτηση συνολικής απαρίθμησης. Για παράδειγμα, υπάρχουν πολλά προβλήματα που έχουν μόνο ένα τοπικό βέλτιστο. Πολλά προβλήματα μπορούν να λυθούν γρήγορα από μια παραλλαγή της αναζήτησης σταδιακής καθόδου. Οι συγκεκριμένες κανονικότητες που εκμεταλλεύονται μέσω της διαδικασίας βελτιστοποίησης καθορίζουν τις διεργασίες τους, οι οποίες περιορίζουν την τάξη των προβλημάτων που μπορεί να επιλύσει αποτελεσματικά η μέθοδος. Με την διάσπαση ενός προβλήματος σε έναν αριθμό υποπρογραμμάτων, ο αριθμός διαστάσεων του προβλήματος μπορεί να μειωθεί

σημαντικά, και αντί να επιλύσει ένα μεγάλο πρόβλημα, μπορεί να επιλυθούν μικρότερα. Λύσεις μικρότερης τάξης μπορούν να τοποθετηθούν μαζί για να σχηματίσουν τη λύση στο αρχικό πρόβλημα. Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, πολλά σύνθετα προβλήματα πραγματικού κόσμου είναι σχεδόν ικανά για διάσπαση. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο η διάσπαση είναι ένας καλός υποψήφιος για ευρέως εφαρμόσιμες διαδικασίες βελτιστοποίησης των προβλημάτων με την στρατηγική του μαύρου κουτιού.

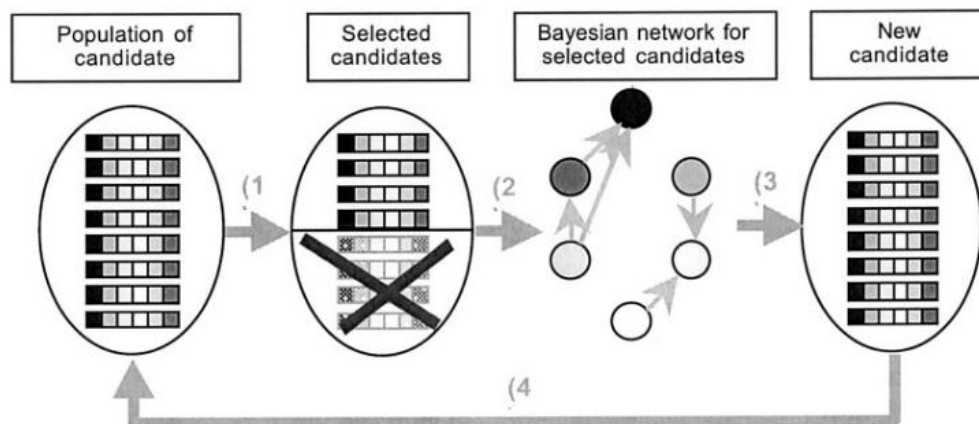
Τρία κλειδιά για να πετύχουμε την ιεραρχία.

1. *Σωστή αποσυναρμολόγηση*. Η μηχανή ιεραρχίας θα πρέπει να είναι ικανή να αποσυναρμολογεί ένα πρόβλημα σε κάποιον αριθμό επιπέδων. Σωστή αποσυναρμολόγηση θα επιτρέψει σε κάθε επίπεδο την σωστή εκμετάλλευση του χώρου έρευνας.
2. *Chunking*. Με τον όρο αυτό εννοούμε την εκμετάλλευση λύσεων σε υποπροβλήματα. Είναι προφανές ότι αυτό δεν είναι ανεξάρτητο με την προηγούμενη αποσυναρμολόγηση ωστόσο ο σκοπός της σωστής αποσυναρμολόγησης και του chunking είναι διαφορετικός.
3. *Επικράτηση των εναλλακτικών υποψήφιων λύσεων*. Η μηχανή ιεραρχίας θα πρέπει να διατηρεί αρκετές εναλλακτικές λύσεις για την επίλυση των υποπροβλημάτων σε κάθε επίπεδο ούτως ώστε να υπάρχει αρκετό υλικό για τα υψηλότερα επίπεδα.

Επίσης η μηχανή ιεραρχίας χρησιμοποιεί πολλές φορές, εκδοχές από τους εξελικτικούς και γενετικούς αλγόριθμους όπως είναι οι έννοιες πληθυσμός, επιλογή, ανασυνδυασμός και εξειδίκευση. Πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιεί έναν πληθυσμό υποψήφιων λύσεων και όχι μεμονωμένες λύσεις πράγμα που επιτρέπει στον αλγόριθμο να έχει αρκετές εναλλακτικές στο πεδίο των λύσεων και να ελίσσεται στο θέμα των θορύβων που οφείλονται στις ελλείψεις πληροφορίες, ή ακόμα και στο γεγονός ότι επιτρέπει στον αλγόριθμο να αξιολογεί μεγάλο αριθμό λύσεων ή ακόμα και συμπλεγμάτων λύσεων(36)

Μηχανισμός ιεραρχίας- Ο ιεραρχικός αλγόριθμος της Bayesian βελτιστοποίησης.

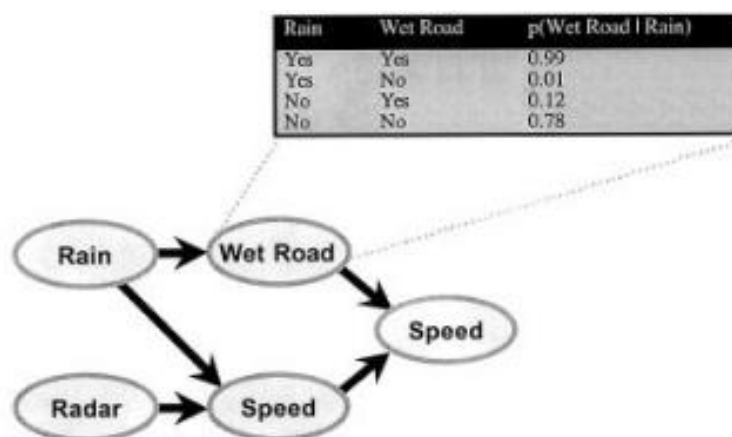
Ο αλγόριθμος αυτός περιλαμβάνει έναν αριθμό από υποψήφιες λύσεις. Ο αρχικός πληθυσμός συνήθως παράγεται τυχαία αλλά μπορούν να διαχωριστούν και σε περιοχές που πιστεύεται ότι περιλαμβάνουν καλές λύσεις. Ο πληθυσμός εξελίσσεται μέσω τριών φάσεων, της επιλογής, του ανασυνδυασμού και της αντικατάστασης. Στην επιλογή αναφερόμαστε στην έρευνα περιοχών με υποσχόμενες λύσεις κάνοντας πολλές φορές και αρκετά αντίγραφα από αυτές ενώ ταυτόχρονα απορρίπτουμε τις περιοχές εκείνες χωρίς υποσχόμενες λύσεις. Η δεύτερη φάση αφορά τον ανασυνδυασμό και περιλαμβάνει περιοχές λύσεων μετά την επιλογή. Η τρίτη φάση αφορά την αντικατάσταση και περιλαμβάνει νέες λύσεις στον αρχικό πληθυσμό. Η απλούστερη στρατηγική είναι να αντικαταστήσει κάποιος όλες τις υποψήφιες λύσεις του αρχικού πληθυσμού με τις καινούριες.



Σχήμα 18°. Ο ιεραρχικός αλγόριθμος Bayesian .

Τα δίκτυα Bayesian (37) είναι αποτελεσματικά για την αποκάλυψη και παρουσίαση κατανομών συνδυαστικής πιθανότητας αφού συνήθως παρουσιάζεται και ως κυκλικό γράφημα με τις κορυφές να αντιπροσωπεύουν τις διάφορες μεταβλητές και τις ζεύξεις μεταξύ τους να αντιπροσωπεύουν την εξάρτηση της μίας μεταβλητής από την άλλη.

Στο παρακάτω σχήμα που αποτελεί και ένα τυπικό Bayesian δίκτυο, φαίνεται πως ο παράγοντας ταχύτητα ενός αυτοκινήτου επηρεάζεται από διάφορους άλλους παράγοντες. Επίσης στον πίνακα που τον συνοδεύει, φαίνεται η κατανομή πιθανοτήτων που αφορά την ταχύτητα και τον υγρό δρόμο.



Σχήμα 19°. Παράδειγμα Bayesian δικτύου

Συμπεράσματα. Κυρίως η μηχανή ιεραρχίας είναι αποτελεσματική για προβλήματα που συνήθως καθορίζονται από συγκεκριμένους παράγοντες διακριτών μεταβλητών

4.2. μηχανική μάθηση για ολική βελτιστοποίηση

Πολλές περιπτώσεις αλγορίθμων βελτιστοποίησης απαιτούν την εκτέλεση μιας διαδικασίας εκκίνησης από τυχαία επιλεγμένα σημεία σε έναν τομέα ή απαιτούν την επιλογή κατάλληλων αρχικών τιμών για ένα πεπερασμένο αριθμό παραμέτρων. Όταν ασχολούμαστε με πολυδιάστατα προβλήματα, δηλ. με προβλήματα βελτιστοποίησης με πολλά ακρότατα, είναι τυπική διαδικασία να «τρέχουμε» αρκετές περιπτώσεις τον ίδιο αλγόριθμο ξεκινώντας από διαφορετικά σημεία ή χρησιμοποιώντας διαφορετικό σύνολο παραμέτρων. Συνήθως η μεγάλη ποσότητα δεδομένων που δημιουργούνται κατά τη διάρκεια αυτών των δοκιμών χάνεται, καθώς ο χρήστης συνήθως ενδιαφέρεται μόνο για την καλύτερη εκτέλεση, δηλαδή για εκείνη που να παράγει το καλύτερο συνολικό αποτέλεσμα. Σε μια νέα προσέγγιση, την οποία ονομάζουμε **LeGO** (Learning for Global Optimization), χρησιμοποιούνται εργαλεία μηχανικής μάθησης για να μάθουν την άγνωστη σχέση μεταξύ της αρχικής κατάστασης (αρχικό σημείο ή παράμετρος) και της τελικής τιμής. Η ιδέα που βασίζεται στο LeGO είναι πράγματι πολύ απλή: πρώτα προβαίνουμε στην εκτέλεση μερικών περιπτώσεων-παραδειγμάτων του αλγορίθμου που απαιτούν μια αρχικοποίηση.

Από τα αποτελέσματα αυτών των δοκιμών, και σύμφωνα με το εργαλείο εκμάθησης είμαστε σε θέση να εκτιμήσουμε το αποτέλεσμα των μελλοντικών δοκιμών. Ως πολύ γνωστές μέθοδοι δοκιμών, (38) χρησιμοποιήθηκαν μέθοδοι ομαδοποίησης για να επιλεγούν διάφορα καλά σημεία εκκίνησης. Σε αυτές τις προσεγγίσεις χρησιμοποιήθηκε κάποια μορφή στατιστικής μάθησης για να μπορέσουμε να επιλέξουμε τυχαία παραγόμενα σημεία ως υποψήφια σημεία εκκίνησης για τοπικές αναζητήσεις. Οι

μέθοδοι βασίζονται στη χρήση ενός πρώτου συνόλου παραμέτρων (39). Χρησιμοποιώντας αυτές τις πληροφορίες, επιλέγονται νέα, υποψήφια σημεία για την αξιολόγηση της λειτουργίας. Επισημαίνουμε ότι ενώ σε πολλές περιπτώσεις στη βιβλιογραφία η μάθηση χρησιμοποιείται για να οικοδομηθεί μια κατάλληλη προσέγγιση της αντικειμενικής συνάρτησης, εδώ η θεμελιώδης διαφορά είναι ότι η μάθηση χρησιμοποιείται για να καταλήξει σε συμπεράσματα σχετικά με την σχέση των σημείων εκκίνησης και την ποιότητα του τελικού αποτελέσματος μιας βελτιστοποίησης, δηλαδή η μάθηση εφαρμόζεται άμεσα στον εφικτό τομέα. Αυτό που παρουσιάζεται σε αυτή την εργασία δεν είναι ένας νέος αλγόριθμος, αλλά ένα πλαίσιο που μπορεί να υιοθετηθεί σε πολλά υπολογιστικά συστήματα και φυσικά, αυτό δεν θα αντικαταστήσει τις τυποποιημένες μεθόδους βελτιστοποίησης.

Γενικό πλαίσιο

Με βάση ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης ισχύει

$$\min_{x \in S \subseteq \mathbb{R}^n} f(x)$$

όπου ισχύουν οι εξής παράμετροι

- $G()$ είναι μια διαδικασία καθορισμού των σημείων εκκίνησης (συνήθως ενσωματώνοντας μια τυχαία συνιστώσα),

- $R(x)$ είναι μια διαδικασία "τελειοποίησης" όπου το σημείο εισόδου x εισάγεται στην διαδικασία και καταλήγει στο $y \in \mathbb{R}^n$ (ελπίζουμε στο S), δηλαδή αποτελεί μια τυπική διαδικασία τοπικής αναζήτησης. Επιπλέον, το υπολογιστικό κόστος του G είναι σημαντικά χαμηλότερο από το κόστος λειτουργίας του R . Πολλές ευρετικές τεχνικές για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης βασίζονται σε πολλαπλές διαδικασίες που ξεκινούν από σημεία που παράγονται από τη διαδικασία G .

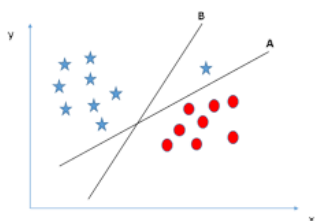
Ένα σημείο εκκίνησης x_k με τη σχετική ετικέτα $dk = +1$ αντιπροσωπεύει ένα "καλό" σημείο εκκίνησης. Δίνουμε δηλαδή, ένα σταθερό αριθμό διαδρομών για να δημιουργήσουμε ζεύγη αποτελούμενα από αρχικά σημεία και τις τελικές τιμές λειτουργίας $(x_k, f(y_k))$ μέσω της εκτέλεσης του $G(x_k, dk)$, όπου η ετικέτα $dk \in \{-1, 1\}$ υποδεικνύει ότι, με δεδομένο το σημείο εκκίνησης x_k , η διαδικασία οδηγεί σε ένα τελικό σημείο y_k της οποίας η τιμή της συνάρτησης είναι, αντιστοίχως, υψηλότερη ή χαμηλότερη από το κατώφλι, η τιμή του οποίου επιλέγεται είτε από προηγούμενη εμπειρία και γνώση είτε μέσω της διαδικασίας cross validation (μέθοδος η οποία εκτιμάει τις άγνωστες τιμές ενός μοντέλου). Το σύνολο εκπαίδευσης που λαμβάνεται με τον τρόπο αυτό μπορεί στη συνέχεια να χρησιμοποιηθεί για την εκπαίδευση ενός CLS ταξινομητή ο οποίος, δεδομένου ότι εισάγεται ένα σημείο X , επιστρέφει "ναι" (+1) ή όχι (-1).

Μια σύντομη εισαγωγή στην ταξινόμηση μέσω SVM

Η μηχανή διανύσματος στήριξης (SVM) εμφανίστηκε για πρώτη φορά το 1992 και παρουσιάστηκε από τους Boser, Guyon και Vapnik στο COLT-92. Οι μηχανές διανυσμάτων υποστήριξης (SVM) αποτελούν ένα σύνολο συναφών μεθόδων μάθησης υπό επίβλεψη (supervised learning) που χρησιμοποιούνται για ταξινόμηση (classification) και παλινδρόμηση (regression). Ανήκουν σε μια οικογένεια γενικευμένων γραμμικών ταξινομητών. Το Support Vector Machine (SVM) δηλαδή είναι ένα εργαλείο πρόβλεψης ταξινόμησης και παλινδρόμησης που χρησιμοποιεί τη θεωρία μάθησης μηχανών για να μεγιστοποιήσει την ακρίβεια πρόβλεψης ενώ αποφεύγει αυτόματα την υπερβολική προσαρμογή (overfitting) στα δεδομένα. Οι μηχανές διανυσμάτων στήριξης μπορούν να οριστούν και ως συστήματα που χρησιμοποιούν χώρο υποθέσεων γραμμικών συναρτήσεων σε έναν χώρο χαρακτηριστικών (feature space) υψηλής διάστασης. Τα συστήματα αυτά εκπαιδεύονται με έναν αλγόριθμο μάθησης από τη θεωρία βελτιστοποίησης που υλοποιεί μια μαθησιακή -bias, η οποία προέρχεται από τη θεωρία της στατιστικής μάθησης. Η μηχανή φορέα υποστήριξης ήταν αρχικά δημοφιλής στην κοινότητα NIPS και τώρα αποτελεί

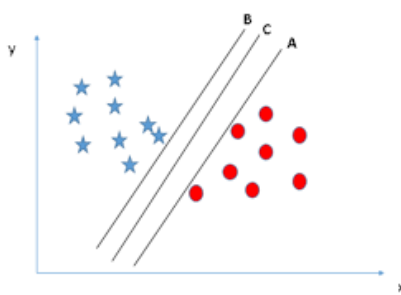
ένα ενεργό κομμάτι της έρευνας μηχανών μάθησης σε όλο τον κόσμο. Επίσης, τα SVM έχουν γίνει διάσημα λόγω της χρήσης χαρτών εικονοστοιχείων (pixel maps) ως εισροή (input). Για παράδειγμα, σε μια εργασία αναγνώρισης χειρογράφου, μπορεί να επιτύχει ποσοστό ακρίβειας συγκρίσιμο με αντίστοιχο από εξελιγμένα νευρωνικά δίκτυα προεπεξεργασμένων χαρακτηριστικών. Χρησιμοποιείται επίσης για πολλές εφαρμογές, όπως ανάλυση χειρονομιών, ανάλυση προσώπου και ούτω καθεξής, ειδικά για εφαρμογές ταξινόμησης προτύπων και παλινδρόμησης. Τα θεμέλια των μηχανισμών διανύσματος υποστήριξης (SVM) τέθηκαν από τον Vapnik και έχουν κερδίσει σε δημοτικότητα, λόγω του μεγάλου αριθμού των πολλά υποσχόμενων χαρακτηριστικών, όπως η καλύτερη εμπειρική απόδοση τους. Η συγκεκριμένη φόρμουλα χρησιμοποιεί την αρχή του Minimizing Structure Risk (SRM), η οποία έχει αποδειχθεί ότι είναι ανώτερη της παραδοσιακής αρχής Empirical Risk Minimization (ERM) που χρησιμοποιείται από τα συμβατικά νευρωνικά δίκτυα. Η SRM ελαχιστοποιεί το ανώτερο όριο του αναμενόμενου κινδύνου, όπου η ERM ελαχιστοποιεί το σφάλμα στα δεδομένα εκπαίδευσης. Αυτή είναι η διαφορά που παρέχει στα SVM μεγαλύτερη δυνατότητα γενίκευσης, που είναι ο στόχος της στατιστικής μάθησης. Τα SVM υλοποιήθηκαν για την επίλυση του προβλήματος ταξινόμησης, αλλά έχουν επεκταθεί και στην επίλυση προβλημάτων παλινδρόμησης. Παρακάτω παραθέτουμε παραδείγματα για να εξηγήσουμε πως λειτουργούν τα SVM

Παράδειγμα-1: Προσδιορισμός του σωστού hyperplane. Εδώ, έχουμε 3 hyperplanes (A, B και C). Θα προσδιορίσουμε το σωστό hyperplane για να ταξινομήσουμε το αστέρι και τον κύκλο.



Το hyperplane B κάνει πολύ καλά αυτό που θέλουμε.

Προσδιορισμός του σωστού hyperplane. Εδώ, έχουμε 3 hyperplanes (A, B και C) και όλα διαχωρίζουν καλά τις κλάσεις.



η μεγιστοποίηση των αποστάσεων μεταξύ του πλησιέστερου σημείου δεδομένων (ή κλάσης) και του hyperplane θα μας βοηθήσει να αποφασίσουμε το σωστό hyperplane. Αυτή η απόσταση ονομάζεται margin.

Αριθμητικά πειράματα

Αν και η προτεινόμενη προσέγγιση μπορεί να εφαρμοστεί σε διαφορετικά προβλήματα βελτιστοποίησης και αλγορίθμους, εστιάζουμε την προσοχή μας στα προβλήματα ολικής βελτιστοποίησης (GO). Εδώ

εντάσσουμε δύο προσεγγίσεις, το πρότυπο πολλαπλής έναρξης και (MS) και την μόνιμη (MBH)ελεγχόμενη τοπική αναζήτηση. (40).

Η βασική δομή αυτών των αλγορίθμων είναι η ακόλουθη:

Πολλαπλής έναρξης (MS) αποτελεί μία ομοιόμορφη δειγματοληπτικά τοπική αναζήτηση από το εφικτό σύνολο (χρησιμοποιώντας τον αρμόδιο χειριστή G).

Επιπροσθέτως ως μονοτονική βάση (MBH) είναι αυτή η οποία και παράγει τυχαία έναν αρχικό τοπικό ελαχιστοποιητή (operator G) και σε κάθε επανάληψη «διαταράσσει» τον τρέχων τοπικό ελαχιστοποιητή x.

Αρχικά ξεκινά μια τυπική τοπική αναζήτηση. Αν ο προκύπτων τοπικός ελαχιστοποιητής βελτιώνει την αντικειμενική συνάρτηση στο x, τότε αντικαθίσταται η πρότερη τιμή του x, διαφορετικά παραμένει αμετάβλητη. Το MBH τερματίζεται συνήθως όταν για ένα ορισμένο αριθμό επαναλήψεων δεν παρατηρείται καμία βελτίωση. Σε αυτή την περίπτωση, η διαδικασία βελτίωσης ολοκληρώνεται. Μπορούμε να εφαρμόσουμε αυτή την προσέγγιση σε οποιοδήποτε καθολικό πρόβλημα βελτιστοποίησης, υπό την προϋπόθεση ότι είναι διαθέσιμη μια τυχαία γεννήτρια εφικτών σημείων εκκίνησης καθώς και μεθοδολογία βελτιστοποίησης όλων των αλγορίθμων. Ωστόσο, για να δώσουμε περισσότερες αποδείξεις στην προτεινόμενη προσέγγιση, επιλέγουμε να εφαρμόσουμε τη LeGO για το πρόβλημα της βελτιστοποίησης.

Το LeGO μπορεί να εφαρμοστεί σε ένα ζεύγος γνωστών δοκιμαστικών συναρτήσεων. Τα πειράματα πραγματοποιήθηκαν με τις λειτουργίες δοκιμών Rastrigin και Schwefel. Ο σκοπός αυτών των πειραμάτων είναι για να διαπιστώσουμε εάν η κατανομή των τιμών μετά την εκπαίδευση είναι καλύτερη από τις αντίστοιχες τιμές κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης. Πρόκειται ουσιαστικά για μία μη κυρτή συνάρτηση που μας επιτρέπει να δούμε την απόδοση των μαθηματικών αλγορίθμων

Πειράματα με τη λειτουργία δοκιμής Rastrigin

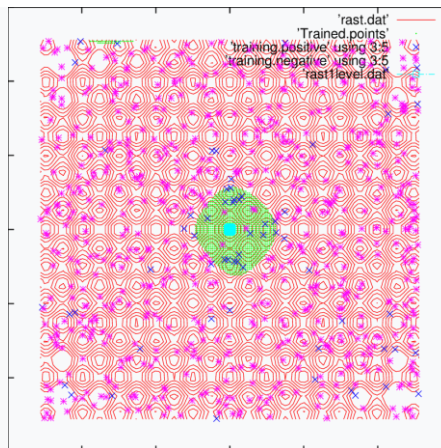
Έστω

$$\min_{W \in H, \delta \in IR, \xi \in IR^n} 10n + \sum_{i=1}^N (\xi x_i^{2^i} - 10,0 \cos(2\pi x_i))$$

Με $X_i \in [-5,12 - 5,12] \forall i \in 1, \dots, n$

Αυτή έχει καθολικό ελάχιστο στην τιμή $x_0=0$ όπου $f(x)=0$

Ο πολύ μεγάλος αριθμός τοπικών ελαχιστοποιητών αυτής της λειτουργίας αντιπροσωπεύει μια σοβαρή πρόκληση για την κλασσική προσέγγιση πολλαπλής έναρξης, ενώ το πρόβλημα είναι μειωμένης σημασίας όταν έχει ακολουθηθεί η διαδικασία μέσω MBH. Οι σταυροί (x) αντιπροσωπεύουν θετικά σημεία (δηλ. σημεία εκκίνησης που οδηγούν σε ένα τοπικό βέλτιστο), ενώ τα αστέρια (*) είναι αρνητικά σημεία. Η σκοτεινότερη περιοχή γύρω από το κέντρο της εικόνας αντιπροσωπεύει το σύνολο των σημείων εκκίνησης που γίνονται αποδεκτά από τον εκπαιδευμένο SVM.



Σχήμα 20° πειράματα με την δοκιμή Rastrigin

Πειράματα με τη λειτουργία δοκιμής Schwefel

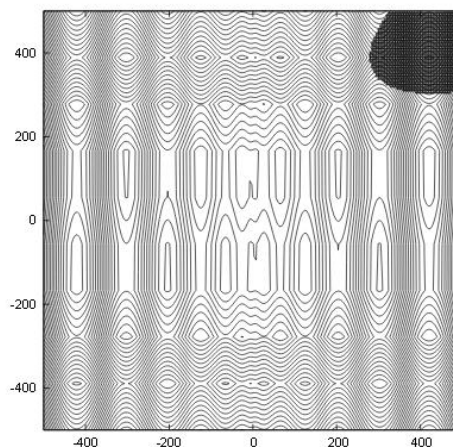
Ας θεωρήσουμε τώρα το τότε διαστασιακό πρόβλημα **δοκιμής Schwefel**:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^n -x_i \sin(\sqrt{|x_i|})$$

$$x_i \in [-500, 500], \forall i \in 1, \dots, n$$

Αυτή είναι μια κλασική συνάρτηση δοκιμής της οποίας η συνολική βέλτιστη τιμή είναι από -418.982 έως και 420.9687, $i \in 1, \dots, n$. Από τη σκοπιά της βελτιστοποίησης, αυτό το πρόβλημα είναι αρκετά ασήμαντο, καθώς είναι διαχωρίσιμο και έτσι αρκεί να το λύσουμε για $n=1$ και να αναπαράστήσουμε το μονοδιάστατο βέλτιστο για να βρούμε το ολικό βέλτιστο.

Η δοκιμή αποτελεί ένα πολύ δύσκολο σημείο αναφοράς για τις μεθόδους που δεν είναι σε θέση να εκμεταλλευτούν τη δυνατότητα διαχωρισμού.



Σχήμα 21° . Πειράματα με τη λειτουργία δοκιμής Schwefel

Έχει επισημανθεί σε αρκετά άρθρα, ότι η μέθοδος μόνιμης τοπικής αναζήτησης έχει σοβαρές δυσκολίες στην επίλυση αυτού του προβλήματος, ιδιαίτερα όταν η διάσταση n αυξάνεται. Η εξέταση των γραφημάτων της συνάρτησης Schwefel για $n=1$ ή $n=2$ αποκαλύπτει ότι το πρόβλημα αυτό έχει

λειτουργική δομή, ώστε οι απλές επαναλαμβανόμενες εκτελέσεις των αναζητήσεων MBH που ξεκίνησαν από τυχαία επιλεγμένα σημεία να είναι καταδικασμένες να αποτύχουν καθώς το n αυξάνεται, εκτός εάν ο αριθμός των σημείων επανεκκίνησης είναι απαγορευτικά μεγάλος. Αυτό που θέλουμε να δείξουμε είναι ότι μετά την εκτέλεση της μεθόδου μόνιμης τοπικής αναζήτησης, ένα εργαλείο μάθησης όπως το LeGO θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί με επιτυχία για να δημιουργήσει πολλά υποσχόμενα σημεία εκκίνησης για το MBH. Ως επεξηγηματικό παράδειγμα, δείχνουμε στην παραπάνω εικόνα, την περιοχή αποδεκτών σημείων εκκίνησης για LeGO (σκοτεινή περιοχή) μετά από κατάλληλη εκπαίδευση.

Για ό,τι αφορά την εκπαίδευση, επιλέγουμε να χρησιμοποιήσουμε την ακόλουθη διαδικασία, την οποία υιοθετήσαμε με συνέπεια για 8 δύσκολες περιπτώσεις και με την βοήθεια ορισμένων τέστ (όπως είναι και οι δοκιμές *rastrigin & schwefel*). Μόνο που στην περίπτωση αυτή χρησιμοποιήθηκαν συνολικά 25 τέστ (επιλέχθηκαν αυτά που δεν είναι διαφοροποιήσιμα και αυτά που δεν έχουν πολύ λίγες ή πάρα πολλές μεταβλητές)

problem	n	% succ	problem	n	% succ
ack	10	0.00	em_10	10	0.00
exp	10	100.00	fx_10	10	0.00
gw_20	20	8.69	h6	6	68.58
lm2_10	10	3.79	mgw_10	10	1.00
mgw_20	20	0.14	ml_10	10	0.00
nf3_10	10	100.00	nf3_15	15	100.00
nf3_20	20	100.00	nf3_25	25	100.00
nf3_30	30	100.00	pp	10	100.00
ptm	9	1.99	rb	10	83.80
rg_10	10	0.00	sal_10	10	0.03
sin_10	10	15.98	sin_20	20	4.98
xor	9	60.87	zkn_10	10	100.00
zkn_20	20	100.00			

Η διαδικασία που ακολουθούμε με τα δεδομένα είναι η εξής

1. δημιουργούμε το σύνολο από 10 000 πολλαπλές εκκινήσεις χρησιμοποιώντας το (ομοιόμορφο τυχαίο) σημείο εκκίνησης που σχετίζεται με την τοπική βέλτιστη τιμή που προκύπτει από την τοπική βελτιστοποίηση
2. κανονικοποιούμε τα δεδομένα, με τη βοήθεια του εργαλείου *svm-scale*
3. χωρίζουμε το σύνολο δεδομένων ως 75% / 25%
4. για κάθε πιθανή επιλογή της παραμέτρου κατωφλίου T από 70% έως το 90% και για κάθε επιλογή του βάρους για θετικές τιμές (όπως έχει ήδη δείχθει για τη λειτουργία δοκιμής *Schwefel*), που κυμαίνεται από 2 έως 10, η εκπαίδευση με το *svm* τρέχει με προεπιλεγμένες παραμέτρους.
5. μετά από αυτήν την αναζήτηση στο δίκτυο παραμέτρων, το σφάλμα ταξινόμησης υπολογίστηκε. Η βαθμολογία που προέκυψε από ένα σταθμισμένο άθροισμα ψευδών θετικών και ψευδών αρνητικών, με βάρος 1 για ψευδώς θετικά και βάρος 2 για ψευδώς αρνητικά. Χρησιμοποιώντας αυτό το σκορ, διατηρήθηκε το καλύτερο ζεύγος τιμών για το όριο και το βάρος.

Μετά από εκπαίδευση, για κάθε μία από τις 8 λειτουργίες δοκιμής αποκτήσαμε 5.000 σημεία εκκίνησης που έγιναν δεκτά από την SVM-πρόβλεψη ενώ 5.000 απορρίφθηκαν. Μετά από αυτή τη δειγματοληψία, εκτελέσαμε το *Multistart* από τα δύο σύνολα και συλλέξαμε τα αποτελέσματα. Ορισμένα στατιστικά στοιχεία σχετικά με τα αποτελέσματα αυτά αναφέρονται στον παρακάτω Πίνακα.

Problem	set	Min.	1 st Quartile	Median	Mean	3 rd Quartile	Max
ack	Accepted	2.04	4.54	4.85	4.74	5.04	5.36
ack	Refused	4.59	5.66	6.03	6.06	6.41	7.97
em_10	Accepted	-8.88	-6.13	-5.24	-5.16	-4.25	-0.488
em_10	Refused	-8.68	-4.96	-4.18	-4.12	-3.31	0.002
fx_10	Accepted	-10.21	-2.13	-1.48	-1.97	-1.43	-1.28
fx_10	Refused	-10.21	-1.48	-1.48	-1.58	-1.48	-1.15
mgw_10	Accepted	4.4e-16	3.9e-03	8.9e-03	1.9e-02	1.8e-02	3.63
mgw_10	Refused	4.4e-16	1.7e-02	3.2e-02	4.0e-02	5.0e-02	3.63
mgw_20	Accepted	-1.3e-15	7.9e-03	2.5e-02	7.4e-02	9.7e-02	7.80
mgw_20	Refused	-1.3e-15	2.2e-02	4.4e-02	8.4e-02	1.1e-01	9.42
ml_10	Accepted	-1.7e-22	-3.8e-86	-1.0e-132	1.7e-22	3.6e-94	8.6e-19
ml_10	Refused	-8.3e-81	-1.2e-160	1.9e-279	1.6e-74	1.2e-152	8.2e-71
rg_10	Accepted	6.96	44.77	57.71	57.54	68.65	127.40
rg_10	Refused	9.95	64.67	80.59	81.15	96.51	224.90
sal_10	Accepted	2.1e-16	13.80	15.10	14.47	16.10	20.90
sal_10	Refused	1.2e-14	17.60	18.90	18.65	20.40	26.60

Για να επιβεβαιώσουμε την εντύπωση που έχουμε σχετικά με το σαφές πλεονέκτημα στη χρήση εκπαιδευμένων σημείων εκκίνησης, πραγματοποιήσαμε μια δοκιμασία μονόπλευρης δοκιμασίας Kolmogorov-Smirnov σχετικά με την εμπειρική διανομή των 5 000 αποτελεσμάτων που προέκυψαν ξεκινώντας από την αποδοχή και από την άρνηση.

Οι μηδενικές υποθέσεις που δοκιμάσαμε ήταν ότι το βέλτιστο που ελήφθη από αποδεκτά σημεία είναι στοχαστικά μικρότερο από εκείνο που προέκυψε από ένα σημείο που έχει απορριφθεί σύμφωνα με το παραπάνω πίνακα ή ισοδύναμα ότι η σωρευτική λειτουργία κατανομής του βέλτιστου που λαμβάνεται από τις αποδεκτές τιμές είναι κατά πολύ μεγαλύτερη από εκείνη του βέλτιστου που λαμβάνεται από τις αντίστοιχες απορριφθέντες. Η δοκιμή βασίζεται στα στατιστικά στοιχεία

$$D^+ = \max_u (F_{ACC}(U) - F_{REF}(U))$$

όπου το $F(\cdot)$ υποδεικνύει τη συνάρτηση εμπειρικής κατανομής και οι δείκτες Acc και Ref αναφέρονται σε σημεία που γίνονται δεκτά ή απορρίπτονται αντίστοιχα από το LeGO. Το αποτέλεσμα της δοκιμής είναι το ακόλουθο:

problem	ack	em_10	fx_10	mgw_10	mgw_20	ml_10	rg_10	sal_10
D^+	0.9564	0.3338	0.433	0.4928	0.2762	0.423	0.4486	0.741

Σε όλες τις 8 περιπτώσεις η τιμή p ήταν αμελητέα ($< 2.2e-16$) έτσι ώστε τα αποτελέσματα να είναι διαφορετικά με πολύ υψηλό επίπεδο σπουδαιότητας.

Συμπεράσματα και περαιτέρω εξελίξεις

Προτείνεται ένα καινοτόμο πλαίσιο (LeGO) να συνδυάζεται με τις τυποποιημένες μεθόδους ολικής βελτιστοποίησης προκειμένου να αυξηθεί η ικανότητά τους να διερευνούν γρήγορα τις υποσχόμενες περιοχές. Αν και η ιδέα είναι πράγματι πολύ απλή, η επιτυχία της δεν ήταν εύκολο να προβλεφθεί. Η ύπαρξη μιας αρκετά ισχυρής σχέσης μεταξύ του σημείου έναρξης μιας πολύπλοκης διαδικασίας βελτιστοποίησης όπως η MBH και η τελική βέλτιστη τιμή ήρθε ως έκπληξη. Σε απλές προσεγγίσεις όπως το Multistart αυτό μπορεί να υποστηρίχθηκε, καθώς, τουλάχιστον σε μια ιδανική

περίπτωση, μια τοπική αναζήτηση είναι μια αιτιοκρατική διαδικασία που θα πρέπει να οδηγήσει σε μια τοπική βέλτιστη ένταξη στην ίδια περιοχή έλξης με την αφετηρία.

Επομένως, υπάρχει εξάρτηση μεταξύ των σημείων εκκίνησης και των τοπικών βέλτιστων τιμών και η μάθηση μέσω μηχανής μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την προσέγγιση αυτής της εξάρτησης. Αντίθετα, σε πιο εξευγενισμένες μεθόδους όπως το MBH, όχι μόνο το μονοπάτι που ακολουθείται από τη μέθοδο είναι γενικά "μη τοπικό", αλλά και η σχέση μεταξύ εκκίνησης και το τελικό σημείο είναι μη προσδιοριστική καθώς εκτελούνται τυχαίες κινήσεις κατά τη διάρκεια του αλγορίθμου. Επομένως, το ίδιο σημείο εκκίνησης μπορεί να οδηγήσει σε ριζικά διαφορετικό βέλτιστο σημείο. Αυτή η συμπεριφορά θα μπορούσε θεωρητικά να αναλυθεί, εξετάζοντας το MBH ως την πραγματοποίηση μιας αλυσίδας Markov στον (ενδεχομένως πεπερασμένο) χώρο των τοπικών βέλτιστων. Η μάθηση μπορεί επομένως να θεωρηθεί ως μια μέθοδος για την προσέγγιση της πιθανότητας ότι το σύστημα, που ξεκίνησε σε ένα συγκεκριμένο τοπικό βέλτιστο, τελικά θα απορροφηθεί σε μια κατάσταση που αντιστοιχεί σε ένα τοπικό άριστο του οποίου η τιμή είναι κάτω από ένα όριο. Παρατηρούμε επίσης ότι μια προσέγγιση LeGO μπορεί να εφαρμοστεί με σημαντική επιτυχία ακόμη και σε αυτό το δύσκολο πιθανολογικό πλαίσιο.

Αν και τα πειράματα που αναφέρθηκαν εδώ δείχνουν, ότι η προτεινόμενη προσέγγιση έχει μεγάλες δυνατότητες, πολλά θέματα παραμένουν προς επίλυση και θα αναλυθούν μελλοντικά. Το ένα ασχολείται με την εκπαίδευση LeGO: όπως είδαμε, η εκπαίδευση συνήθως έχει αμελητέο κόστος σε σχέση με τη βελτιστοποίηση. Ωστόσο, καθώς εκτελούνται διαδικασίες βελτιστοποίησης, το μέγεθος των διαθέσιμων δεδομένων αυξάνεται, έτσι ώστε κάποιος να πρέπει να επανεκπαιδεύσει το SVM. Ωστόσο, σε αυτή την περίπτωση, το κόστος της κατάρτισης μπορεί σύντομα ή αργά να γίνει πολύ σημαντικό. Θα ήταν ίσως ενδιαφέρον να αναπτυχθούν επαυξητικές τεχνικές οι οποίες θα επαναπροσανατολίσουν ένα ήδη εκπαιδευμένο SVM μετά τη διάθεση νέων παρατηρήσεων. Εάν η επανακατάρτιση είναι αρκετά αποτελεσματική, μπορεί να σκεφτούμε μια συνολική διαδικασία βελτιστοποίησης με δύο παράλληλες διαδικασίες, μία από την αρχική μέθοδο βελτιστοποίησης και μία άλλη που παράλληλα εκπαιδεύει το SVM και δημιουργεί νέες διαδρομές βελτιστοποίησης από εκπαιδευμένα σημεία. Στη δημιουργία σημείων εκκίνησης από εκπαιδευμένο SVM: χρησιμοποιούμε μια απλή μέθοδο αποδοχής / απόρριψης, αλλά, χάρη στο γεγονός ότι η SVM έχει μια γνωστή αναλυτική έκφραση, θα μπορούσαν να αναπτυχθούν μέθοδοι άμεσης τυχαίας παραγωγής. Μια άλλη κατεύθυνση έρευνας ασχολείται με την επέκταση αυτής της προσέγγισης σε προβλήματα με περιορισμούς διαφορετικούς από τα απλά όρια των μεταβλητών: κατ'αρχήν, τίποτα δεν αλλάζει στην προσέγγιση, αλλά οι αριθμητικές δυσκολίες στην παραγωγή καλών σημείων εκκίνησης ενδέχεται να είναι σημαντικά μεγαλύτερες. Ακόμα ένα άλλο ερευνητικό ζήτημα ασχολείται με την ανάπτυξη κατάλληλων μεθόδων για την επιλογή των παραμέτρων του SVM - στην πραγματικότητα χρησιμοποιήσαμε μια αναζήτηση τυφλού πλέγματος, αλλά σε ορισμένες εφαρμογές η γνώση του προβλήματος μας επιτρέπει να μαντέψουμε λογικές τιμές, τουλάχιστον για κάποιες από τις παραμέτρους. Τέλος, όσον αφορά στην εφαρμογή του σχεδιασμού τροχιάς χώρου, πρόκειται για μια επιτυχή μέθοδο LeGO, μαθαίνοντας από την 100η επανάληψη του MBH. Η επιλογή αυτών των πρώτων 100 τοπικών αναζητήσεων ήταν εντελώς αυθαίρετη και έπρεπε να διεξαχθεί περισσότερη έρευνα προκειμένου να υπάρξει μια λογική κατευθυντήρια γραμμή για περαιτέρω εφαρμογή. Μια δυνατότητα που μπορούμε να εκμεταλλευτούμε επί του παρόντος είναι η εισαγωγή στο εκπαιδευτικό σετ όχι μόνο του σημείου εκκίνησης του MBH, αλλά και πολλά σημεία που υπήρξαν κατά τη διάρκεια της εκτέλεσης (π.χ. οδηγούν σε βελτίωση) - με αυτόν τον τρόπο η ομάδα εκπαίδευσης μπορεί να διευρυνθεί χωρίς καμία

προσπάθεια, εκτός από την αποθήκευση και την εκμάθηση της δομής της MBH, μπορεί να γίνει πολύ πιο εύκολη, χωρίς να χρειάζεται τροποποίηση της πρότυπης προσέγγισης LeGO. Συμπερασματικά, θεωρούμε ότι τα παραπάνω αποτελούν αφετηρία για την ανάπτυξη νέων μεθόδων που, σε συνδυασμό με ολικούς αλγόριθμους βελτιστοποίησης, μπορεί να αυξήσουν σημαντικά την αποτελεσματικότητά τους.

4.3. ΣΤΡΑΤΗΓΙΚΕΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΜΑΘΗΣΗΣ ΓΙΑ ΠΡΟΒΛΕΨΗ ΧΡΟΝΟΣΕΙΡΩΝ

Μια χρονική σειρά είναι μία ακολουθία παρατηρήσεων $s(t) \in \mathbb{R}$, συνήθως διορθωμένη στο χρόνο. Παραδείγματα χρονοσειρών σε κάθε επιστημονικό και εφαρμοσμένο τομέα:

- Μετεωρολογία: μεταβλητές του καιρού, όπως η θερμοκρασία, η πίεση, ο αέρας
 - Οικονομία και χρηματοδότηση: οικονομικοί παράγοντες (ΑΕΠ)
 - Βιομηχανία: ηλεκτρικό φορτίο, κατανάλωση ρεύματος, τάση, αισθητήρες
 - Βιοϊατρική: φυσιολογικά σήματα (EEG), καρδιακή συχνότητα, θερμοκρασία ασθενούς
 - Web: κλικ, ημερολόγια
 - Γονιδιωματική: χρονολογικές σειρές γονιδιακής έκφρασης κατά τη διάρκεια κυτταρικού κύκλου
- Γιατί να μελετήσουμε τις χρονοσειρές;

- Πρόβλεψη του μέλλοντος με βάση το παρελθόν.
- Έλεγχος της διαδικασίας παραγωγής της σειράς.
- Κατανόηση του μηχανισμού που δημιουργεί τη σειρά.
- Περιγραφή των κυριότερων χαρακτηριστικών της σειράς.

Μονομεταβλητές διακριτές χρονολογικές σειρές είναι:

- Οι ποσότητες, όπως η θερμοκρασία και η τάση, αλλάζουν συνεχώς
- Στην πράξη, ωστόσο, η ψηφιακή καταγραφή γίνεται διακριτά εγκαίρως
- Χρονικές σειρές, όπου ένας τύπος μέτρησης γίνεται επανειλημμένα στο ίδιο αντικείμενο ή άτομο
- Πολλαπλασιασμένες χρονολογικές σειρές αντιπροσωπεύουν ένα σημαντικό θέμα στον τομέα.

ΓΕΝΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ

Μπορεί να γραφτεί ένα γενικό μοντέλο για τις χρονολογικές σειρές

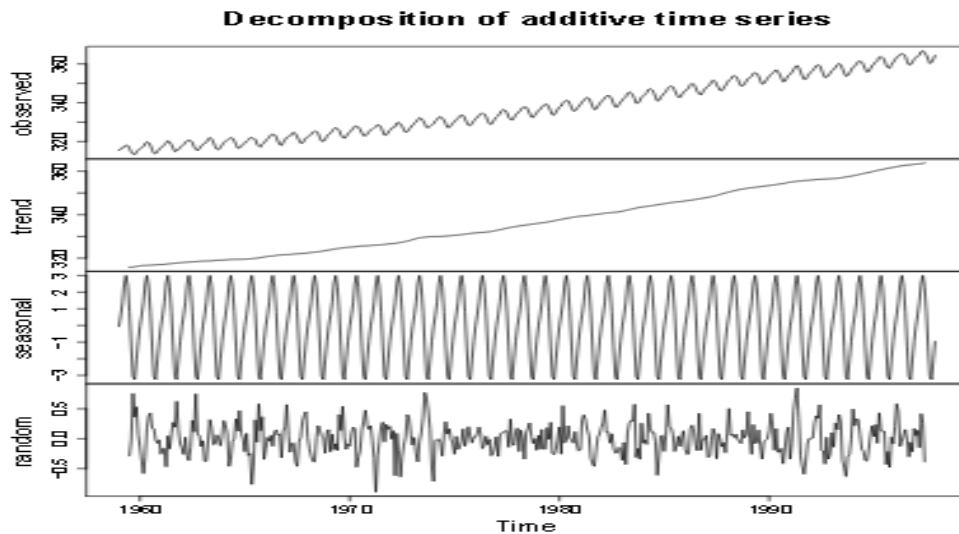
$$S_T = g(t) + \varphi_t$$

Όπου $G(t)$ που ονομάζεται επίσης σήμα ή τάση, είναι μια αποφασιστική συνάρτηση του χρόνου
Στοχαστική ακολουθία: ένας υπολειπόμενος όρος $\phi(t)$, που ονομάζεται επίσης θόρυβος, και ακολουθεί έναν νόμο των πιθανοτήτων.

Εποχιακή επίδραση: Πολλές χρονολογικές σειρές (αριθμοί πώλησης, μετρήσεις θερμοκρασίας) παρουσιάζουν διακύμανση εποχιακή (π.χ. ετήσια) κατά την περίοδο. Το μέτρο και η απομάκρυνση μιας τέτοιας διακύμανσης οδηγεί σε αποεποχοποιημένα δεδομένα.

Παράτυπες διακυμάνσεις: Αφού η τάση και οι κυκλικές μεταβολές έχουν αφαιρεθεί από ένα σύνολο δεδομένων, υπάρχει μία σειρά καταλοίπων, τα οποία μπορεί ή όχι να είναι εντελώς τυχαία. Αν έχει αποσαφηνιστεί η σειρά, μπορούμε ακόμα να αντλήσουμε πληροφορίες για την εξάρτηση μεταξύ του

παρελθόντος και του μέλλοντος. Ως εκ τούτου, $\phi(t)$ θα υποδηλώσει την αποσταθεροποιημένη σειρά. Στο παρακάτω σχήμα οι παρατηρήσεις μας με την επίδραση της τάσης, των εποχιακών διακυμάνσεων αλλά και των τυχαίων γεγονότων.



Σχήμα 22. Αποσύνθεση των χρονοσειρών στα επιμέρους συστατικά. Πώς διάφοροι άλλοι παράγοντες συνεισφέρουν στο τελικό αποτέλεσμα

ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑ ΚΑΙ ΕΞΑΡΤΗΣΗ. Εξετάζουμε δύο συνεχείς τυχαίες μεταβλητές $\phi(1)$ και $\phi(2)$ που αντιπροσωπεύουν για παράδειγμα τη θερμοκρασία σήμερα (χρόνος t_1) και αύριο (t_2). Έχουμε την τάση να πιστεύουμε ότι το $\phi(1)$ θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί ως πρόβλεψη του $\phi(2)$ με κάποιο βαθμό αβεβαιότητας

Η στοχαστική εξάρτηση μεταξύ $\phi(1)$ και $\phi(2)$ επαναλαμβάνεται από την συνδυασμένη πυκνότητα $p(\phi_1, \phi_2)$ ή ισοδύναμα με την πιθανότητα υπό όρους

$$p(\phi_2|\phi_1) = \frac{p(\phi_1, \phi_2)}{p(\phi_1)}$$

Εάν $p(\phi_2|\phi_1) \neq p(\phi_2)$ τότε δεν είναι ανεξάρτητες οι $\phi(1)$, $\phi(2)$, οπότε η γνώση της μίας μεταβλητής, μειώνει την αβεβαιότητα της άλλης μεταβλητής.

Αυστηρά στάσιμες διαδικασίες

- Η πρόβλεψη μιας χρονοσειράς είναι δυνατή μόνο και μόνο εάν η εξάρτηση μεταξύ τιμών που υπήρχαν στο παρελθόν διατηρούνται και στο μέλλον
- Με άλλα λόγια, αν αλλάξουν τα μέτρα, ο στοχαστικός κανόνας που βασίζεται στην υλοποίησή τους δεν αλλάζει. Αυτή η άποψη τυποποιείται ως ακινησία
- Ορισμός . Μια στοχαστική διαδικασία λέγεται ότι είναι αυστηρά ακίνητη εάν η κοινή κατανομή των $\phi(t_1), \phi(t_2), \dots, \phi(t_n)$ είναι η ίδια με την κοινή κατανομή των $\phi(t_{1+k}), \phi(t_{2+k}), \dots, \phi(t_{n+k})$ για όλα τα $n, t_1, \dots, t_n, t_{n+k}$.
- Με άλλα λόγια, η μετατόπιση της χρονικής προέλευσης κατά ένα ποσό k δεν έχει καμία επίδραση στην κατανομή, η οποία εξαρτάται μόνο από τα διαστήματα μεταξύ t_1, \dots, t_n
- Αυτό σημαίνει ότι η (οριακή) κατανομή του $\phi(t)$ είναι η ίδια για όλα τα t

- Ο ορισμός ισχύει για οποιαδήποτε τιμή του n

Αδύναμη ακινησία

- Ένας λιγότερο περιορισμένος ορισμός της ακινητοποίησης αφορά μόνο τις δύο πρώτες στιγμές του $\phi(t)$.

Ορισμός. Μια διαδικασία ονομάζεται σταθερή δευτέρας τάξης ή ασθενώς στάσιμη δεύτερης τάξης εάν ο μέσος όρος της είναι σταθερός και η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης εξαρτάται μόνο από την υστέρηση.

- Η αυστηρή ακινησία υποδηλώνει αδύναμη στάσιμη κατάσταση, αλλά όχι αντίστροφα γενικά. Η διαδικασία ονομάζεται κανονική και είναι η κοινή κατανομή των $\phi(t_1), \phi(t_2), \dots, \phi(t_n)$ είναι πολυμεταβλητή κανονική για όλα τα t_1, \dots, t_n

• Στην ειδική περίπτωση των κανονικών διαδικασιών, η ασθενής στάση συνεπάγεται αυστηρή ακινησία. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι μια κανονική διαδικασία καθορίζεται εξ ολοκλήρου από τη λειτουργία του μέσου και από την αυτοσυσχέτιση

Εκτιμητές πρώτων στιγμών

Εμπειρικός μέσος όρος

$$\bar{M} = \left(\sum_{t=1}^T \Phi_T | T \right)$$

Εμπειρική συνάρτηση Αυτοσυσχέτισης

$$\hat{\gamma}(k) = \left(\sum_{t=1}^{T-k} (\varphi_t - \hat{\mu})(\varphi_{t+k} - \hat{\mu}) \right) / (T - k - 1)$$

Συνάρτηση αλληλοσυσχέτισης

$$\hat{P}(K) = (\hat{F}_K | \hat{F}_0)$$

Παραδείγματα στοχαστικών διαδικασιών

Παράδειγμα αυστηρώς τυχαίας διαδικασίας περιλαμβάνει μία αλληλουχία τυχαίων μεταβλητών $\phi(t)$, τα οποία είναι αμοιβαία ανεξάρτητα μεταξύ τους και για κάθε t & k ισχύει

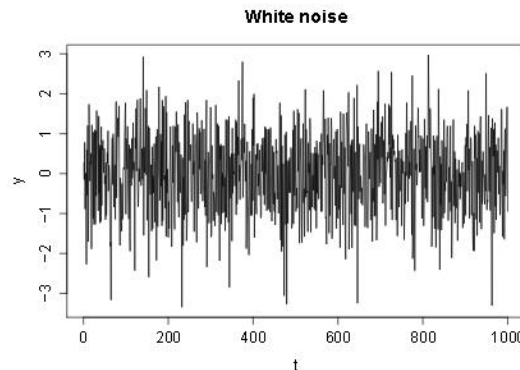
$$p(\varphi_{t+k} | \varphi_t) = p(\varphi_{t+k})$$

ενώ επίσης αυτή η διαδικασία έχει σταθερό μέσο και διακύμανση όπου

$$\gamma(k) = \text{Cov}[\varphi_t, \varphi_{t+k}] = 0 \quad \text{για κάθε } k = +1, +2, \dots$$

είναι η αυστηρώς τυχαία διαδικασία ή αλλιώς ο Λευκός θόρυβος όπως ονομάζεται από τους μηχανικούς μία αυστηρή τυχαία διαδικασία ενώ παράδειγμα αυστηρώς τυχαίας διαδικασίας είναι πχ η σειρά των αριθμών σε μία ρουλέτα στο καζίνο. Στο παρακάτω σχήμα αναπαριστάται ο λευκός θόρυβος σε σχέση με τον χρόνο

Example: Gaussian purely random



Σχήμα 23. Λευκός θόρυβος

Ο λευκός θόρυβος είναι μια θεμελιώδης τυχαία διαδικασία διακριτού χρόνου και εμφανίζεται σε τους περιπτώσεις. Μια WSS διαδικασία, καλείται λευκή (white) αν η αυτοσυνδιασπορά τους είναι μηδενική για όλα τα lags εκτός του $k = 0$.

Επομένως, λευκός θόρυβος είναι μια ακολουθία ασυσχέτιστων τυχαίων μεταβλητών, καθεμιά από τους οποίες έχει διασπορά σ^2_v . Εφόσον ο λευκός θόρυβος ορίζεται μόνο ως τους τα στατιστικά δεύτερης τάξης, υπάρχει μια μεγάλη ποικιλία τέτοιων διαδικασιών. Για παράδειγμα, μια τυχαία διαδικασία που αποτελεί ακολουθία ασυσχέτιστων, Gaussian τυχαίων μεταβλητών πραγματικής τιμής λέγεται λευκός Gaussian θόρυβος (WGN). Μια άλλη λευκή διαδικασία είναι η διαδικασία Bernoulli.

Συνάρτηση αυτοσυσχέτισης

Η μέση τιμή και η αυτοσυσχέτιση μιας τυχαίας διαδικασίας αποτελούν στατιστικούς μέσους όρους που αναφέρονται σε όλα τα σήματα διακριτού χρόνου (υλοποιήσεις) που αποτελούν τη διαδικασία. Ωστόσο, σε πολλά προβλήματα, αν και χρειαζόμαστε τα παραπάνω στατιστικά, δεν τα γνωρίζουμε εξαρχής, για αυτό και θα πρέπει να τα εκτιμήσουμε από τα δεδομένα. Η εκτίμηση των στατιστικών αυτών από την υλοποίηση τους τυχαίας διαδικασίας είναι ένα σημαντικό πρόβλημα. Στην υποενότητα αυτή ασχολούμαστε με την εκτίμηση τους μέσης τιμής και τους αυτοσυσχέτισης μια τυχαίας διαδικασίας και παραθέτουμε κάποιες συνθήκες που τους επιτρέπουν να εκτιμήσουμε τους τους στατιστικούς μέσους όρους από τους χρονικούς μέσους όρους

Τυχαίος περιπατος

Ισχύει γενικά σε αυτήν την περίπτωση

$$\varphi_t = \varphi_{t-1} + \omega_t$$

Αν $\varphi(0)=0$ τότε

$$\varphi_t = \sum_{i=1}^t \omega_i$$

$$E[\varphi_t] = \tau_\mu \text{ και } \text{VAR}[\varphi_T] = t \sigma_w^2$$

Παραδείγματα χρονοσειρών που συμπεριφέρονται ως τυχαίος περίπατος είναι πχ

- Οι τιμές στόκ σε διαδοχικές μέρες
- Η πορεία ενός μορίου όταν αυτό βρίσκεται σε υγρό ή αέριο μέσο και το μονοπάτι αναζήτησης τροφής ενός ζώου. Καθώς ο μέσος και η διακύμανση αλλάζει με το χρόνο, η διαδικασία θεωρείται μη στατική.

Αυτορρυθμιζόμενες διαδικασίες (Autoregressive processes). Μία διαδικασία θεωρείται αυτορρυθμιζόμενη τάξεως n Εφαρμόζεται κατά κάποιον τρόπο η γραμμική παλινδρόμηση για τις μεταβλητές και ανάλογα με τον αριθμό n εάν ισχύει

$$\varphi_t = \alpha_1 \varphi_{t-1} + \dots + \alpha_n \varphi_{t-n} + w_t$$

Αυτό σημαίνει ότι η επόμενη τιμή αποτελεί γραμμικό άθροισμα των προηγούμενων τιμών σύν ένα τυχαίο θόρυβο.

Εάν $n=1$ η οποία είναι γνωστή και ως διαδικασία Markov AR(1) έχουμε

$$\varphi_t = \alpha \varphi_{t-1} + w_t$$

$$\begin{aligned} \varphi_t &= \alpha(\alpha \varphi_{t-2} + w_{t-1}) + w_t = \alpha^2(\alpha \varphi_{t-3} + w_{t-2}) + \alpha w_{t-1} + w_t = \\ &= w_t + \alpha w_{t-1} + \alpha^2 w_{t-2} + \dots \end{aligned}$$

Τότε

$$E[\varphi_t] = 0 \quad \text{Var}[\varphi_t] = \sigma_w^2 (1 + \alpha^2 + \alpha^4 + \dots)$$

Εκτίμηση των παραμέτρων AR (n)

Γενικά η εκτίμηση και ο υπολογισμός μίας αυτορρυθμιζόμενης διαδικασίας σε μία ομάδα δεδομένων απαιτεί την επίλυση της τάξης της διαδικασίας αλλά και τον υπολογισμό των παραμέτρων $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$

$$\varphi_t = \alpha_1 \varphi_{t-1} + \dots + \alpha_n \varphi_{t-n} + w_t$$

Για T παρατηρήσεις, οι παράμετροι μπορούν να υπολογιστούν με την μέθοδο των ελάχιστων τετραγώνων μειώνοντας

$$\hat{a} = \arg \min_a \sum_{t=n+1}^T [\varphi_t - \alpha_1 \varphi_{t-1} - \dots - \alpha_n \varphi_{t-n}]^2$$

Σε μορφή πινάκων γίνεται η επίλυση $Y = Xa$, όπου

$$X = \begin{bmatrix} \varphi_{T-1} & \varphi_{T-2} & \dots & \varphi_{T-n-1} \\ \varphi_{T-2} & \varphi_{T-3} & \dots & \varphi_{T-n-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_n & \varphi_{n-1} & \dots & \varphi_1 \end{bmatrix} \quad Y = \begin{bmatrix} \varphi_T \\ \varphi_{T-1} \\ \vdots \\ \varphi_{n+1} \end{bmatrix}$$

$$\hat{a} = \arg \min_a \sum_{i=1}^T [y_i - a x_i^T]^2 = \arg \min_a \sum_{i=1}^T [Y - Xa]^T [Y - Xa]$$

$$\hat{a} = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

Η παρουσίαση NAR (μη γραμμική αυτορυθμιζόμενη διαδικασία)

Εάν υποθέσουμε ότι η γραμμική υπόθεση δεν υφίσταται, μπορούμε να προεκτείνουμε την τυποποιημένη μέθοδο AR σε μια πιο πολύπλοκη μέθοδο μη γραμμικής αυτορυθμιζόμενης μορφής (NAR)

$$\varphi_t = f(\varphi_{t-1}, \varphi_{t-2}, \dots, \varphi_{t-n}) + w(t)$$

Όπου w είναι ο αποκλίνων παράγοντας ή αλλιώς θόρυβος σε σχέση με την γραμμικής μορφής συνάρτηση.

Μη γραμμικές vs. γραμμικές χρονοσειρές

Τα πλεονεκτήματα των γραμμικών μοντέλων χρονοσειρών είναι πολυάριθμα:

- η εκτίμηση των ελαχίστων τετραγώνων μπορεί να εκφράζεται σε αναλυτική μορφή
- η εκτίμηση ελαχίστων τετραγώνων μπορεί εύκολα να υπολογιστεί μέσω υπολογισμού μήτρας
- οι στατιστικές ιδιότητες του εκτιμητή μπορούν εύκολα να καθοριστούν
- η επαναληπτική διατύπωση για διαδοχική ενημέρωση είναι διαθέσιμη
- η σχέση μεταξύ εμπειρικού και γενικευμένου σφάλματος είναι γνωστή,

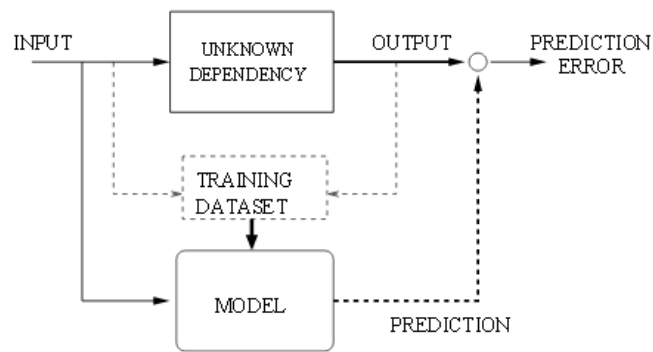
Αλλά,

Μη γραμμικές και γραμμικές χρονολογικές σειρές

- οι γραμμικές μέθοδοι ερμηνεύουν όλη τη δομή σε μια χρονοσειρά μέσω γραμμικής συσχέτισης
- η ντετερμινιστική γραμμική δυναμική μπορεί να οδηγήσει μόνο σε απλή εκθετική ή περιοδικά ταλαντευόμενη συμπεριφορά, επομένως όλες οι ακανόνιστες συμπεριφορές αποδίδονται στον εξωτερικό θόρυβο ενώ οι ντετερμινιστικές μη γραμμικές εξισώσεις σε πολύ ακανόνιστα δεδομένα
- σε πραγματικά προβλήματα είναι εξαιρετικά απίθανο οι μεταβλητές να συνδέονται με σχέση γραμμική. Στην πράξη, η μορφή της σχέσης είναι συχνά άγνωστη και μόνο μια περιορισμένη ποσότητα δειγμάτων είναι διαθέσιμη.

ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ ΓΙΑ ΠΡΟΒΛΕΨΗ.

Εστω ότι έχουμε ένα πρόβλημα επιβλεπόμενης μάθησης όπου από ιστορικά δεδομένα πρέπει να βρούμε την μη γραμμική εξάρτηση των δεδομένων και των μελλοντικών τιμών μίας συνάρτησης.



Ένας τυπικός τρόπος για να παρουσιάσουμε την σχέση δεδομένων εισόδου και εξόδου είναι ο τύπος παλινδρόμησης σύν τον θόρυβο

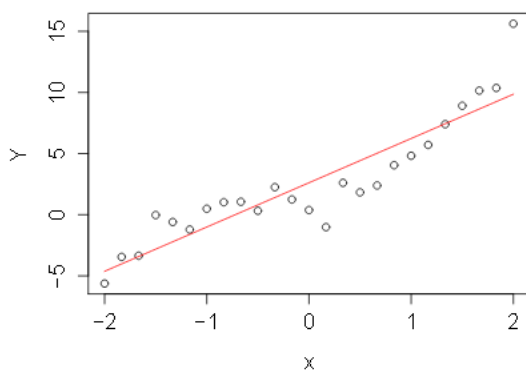
$$y = f(x) + w$$

Όπου $f(x)$ είναι η συνάρτηση και ο όρος w ουσιαστικά δηλώνει το τυχαίο σφάλμα ή αλλιώς το θόρυβο, είναι δε, ανεξάρτητο από το x

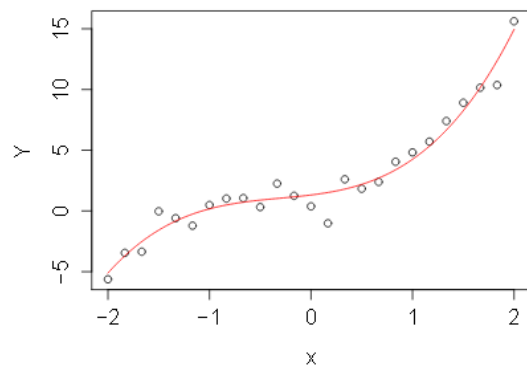
Εστω ότι έχουμε ένα σέτ εκπαίδευσης όπου $(x_i, y_i := i = 1, 2, \dots, N)$

Ο σκοπός μας είναι να υπολογίσουμε την συνάρτηση f η οποία θα δώσει μια καλή εκτίμηση της συνάρτησης

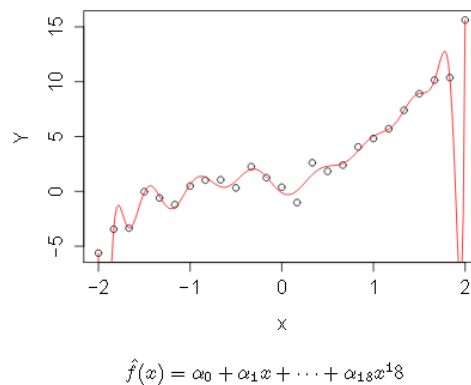
Στα παρακάτω σχήματα παρατηρούμε πως μειώνεται το σφάλμα εκπαίδευσης όταν αυξάνονται οι βαθμοί ελευθερίας. Πιο συγκεκριμένα, το σφάλμα εκπαίδευσης στο πρώτο σχήμα είναι ίσο με 0,92 για 3 βαθμούς ελευθερίας και 0,4 για 18 βαθμούς ελευθερίας. Αυτό σημαίνει ότι όσο αυξάνονται οι βαθμοί ελευθερίας, τόσο πιο μικρό θα είναι το σφάλμα εκπαίδευσης.



$$\hat{f}(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x$$



$$\hat{f}(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \dots + \alpha_3 x^3$$



Σχήμα 24. Μείωση του σφάλματος εκπαίδευσης με την αύξηση των βαθμών ελευθερίας

Στην ερώτηση για την ποιότητα και την αποτελεσματικότητα ενός μοντέλου, ο σκοπός είναι το συγκεκριμένο μοντέλο να μπορεί να γενικεύει δηλαδή να μπορεί να δίνει ικανοποιητικές προγνώσεις για τις τιμές εισόδου. Και φυσικά αυτό δεν σημαίνει ότι ένα μη γραμμικό μοντέλο δίνει πιο ικανοποιητικές προβλέψεις από ένα γραμμικό. Μπορεί επιπλέον, μία ομάδα εκπαίδευσης να δίνει μηδενικά σφάλματα κατά την εκπαίδευση και να έχει κακή επίδοση με την εισαγωγή καινούριων δεδομένων.

Πάντως το μέσο τετραγωνικό σφάλμα μπορεί να θεωρηθεί ως δείκτης απόδοσης μίας διαδικασίας. Υπάρχουν διάφορες διαδικασίες για την μέτρηση αυτού όπως είναι η testing sequence, the holdout method και τέλος η k-fold Cross-validation.

4.4. Μαθηματική προσέγγιση βασιζόμενη στον προγραμματισμό

Οι λύσεις ή οι καταστάσεις των προβλημάτων βελτιστοποίησης ή των προσομοιώσεων αξιολογούνται χρησιμοποιώντας αντικειμενικές συναρτήσεις. Οι συντελεστές στάθμισης για αυτές τις αντικειμενικές συναρτήσεις πρέπει συνήθως να εκτιμηθούν από αξιολογήσεις εμπειρογνομόνων, οι οποίες είναι πιθανόν να είναι ποιοτικές αλλά και κάπως υποκειμενικές. Αν και αυτά τα καθήκοντα εκτίμησης θεωρούνται αρκετά κατάλληλα για την μηχανική μάθηση, προτείνεται μια μέθοδος βασισμένη στον μαθηματικό προγραμματισμό για καλύτερη εκτίμηση. Η βασική ιδέα της μεθόδου μας είναι να χρησιμοποιήσουμε μια κανονική κλίμακα για τη μέτρηση των ζευγών διαφορών των αντικειμενικών τιμών καθώς και τα ζεύγη των αντικειμενικών τιμών. Χρησιμοποιώντας μια κανονική κλίμακα, οι ποιοτικές και υποκειμενικές αξιολογήσεις των εμπειρογνομόνων μπορούν να εκφραστούν κατάλληλα με ταυτόχρονες γραμμικές ανισότητες και οι οποίες μπορούν να αντιμετωπιστούν με έναν μαθηματικό προγραμματιστή. Αυτό μας επιτρέπει να εξαγάγουμε περισσότερες πληροφορίες από τις αξιολογήσεις των εμπειρογνομόνων σε σχέση με τους αλγόριθμους που βασίζονται στη μηχανική μάθηση, γεγονός που αυξάνει την ακρίβεια της εκτίμησής μας. Η μέθοδος ξεπερνά τους αλγόριθμους που βασίζονται στην εκμάθηση της μηχανής σε μια δοκιμή εύρεσης κατάλληλων βαρών για μια αντικειμενική συνάρτηση.

Ρύθμιση προβλημάτων

Στόχος μας είναι να καθορίσουμε μια αντικειμενική συνάρτηση από τις αξιολογήσεις των εμπειρογνομόνων. Υποθέτουμε ότι μια λύση έχει μετρήσεις K , και αντιπροσωπεύεται από ένα x -διαστάσεων διανύσμα x .

$$F_W(X) = \sum_{1 \leq k \leq K} W_k x_k$$

Όπου w_k είναι το αντικειμενικό βάρος του X_k .

Υποθέτουμε ότι η κλίμακα μέτρησης για τις αξιολογήσεις των εμπειρογνομόνων είναι μια κανονική κλίμακα με αρκετούς βαθμούς. Αυτή η κλίμακα μέτρησης μπορεί να θεωρηθεί ως ένα είδος κλίμακας βαθμολόγησης ή κλίμακας Likert (Likert 1932). Για παράδειγμα, ένας εμπειρογνώμονας συγκρίνει δύο λύσεις i και j και δίνει μια ποιοτική αξιολόγηση, η οποία μπορεί να είναι μία από τις τρεις επιλογές:

- η λύση i είναι παρόμοια με την λύση j ,
- η λύση i είναι καλύτερη από τη λύση j , ή
- η λύση i είναι πολύ καλύτερη από την λύση j .

Σύνταξη προβλημάτων μάθησης μηχανών σε μαθηματικά προβλήματα προγραμματισμού.

Σε ορισμένες περιπτώσεις, τα προβλήματα μηχανικής μάθησης θα επισημανθούν τελικά σε μαθηματικά προβλήματα προγραμματισμού. Ο LP (Linear Programming) είναι μία από τις πιο θεμελιώδεις κλάσεις του μαθηματικού προγραμματισμού, όπου οι μεταβλητές απόφασης είναι πραγματικοί αριθμοί και η αντικειμενική λειτουργία και οι περιορισμοί γράφονται σε γραμμική μορφή. Η κλάση του LP με ακέραιες μεταβλητές ονομάζεται MIP (Mixed Integer Programming). Εάν ένα πρόβλημα μπορεί να διατυπωθεί ως πρόβλημα LP ή MIP, μπορούμε να το επιλύσουμε αποτελεσματικά με λύτη LP / MIP όπως το CPLEX. Σε LP και MIP, η αντικειμενική λειτουργία και όλοι οι περιορισμοί πρέπει να γραφτούν σε γραμμική μορφή, η οποία φαίνεται να αποτελεί ισχυρό περιορισμό. Σε αυτή τη συνάρτηση, χρησιμοποιώντας συγκεκριμένα παραδείγματα, θα δείξουμε ότι ακόμη και τα LP και τα MIP έχουν ακόμα μεγάλες δυνατότητες για να περιγράψουν τα προβλήματα

Θεωρούμε ότι μια εργασία μάθησης μηχανής που αποκτά τη σχέση εισόδου-εξόδου $y = f w(x)$ ένα σύνολο εκπαίδευσης.

$$F_W(X) = \sum_{1 \leq k \leq K} w_k x_k$$

Όπου $w = (w_1, w_2, \dots, w_K)$ είναι παράγοντες βαρύτητας.

Εκμάθηση βασισμένη στην μηχανική μάθηση.

Πρώτον, θα αντιμετωπίσουμε αυτό το πρόβλημα ως πρόβλημα μάθησης μηχανής.

Εάν η συνάρτηση απώλειας είναι να ελαχιστοποιήσουμε το τετραγωνικό σφάλμα, τότε μπορούμε να θεωρήσουμε αυτό το πρόβλημα ως πρότυπο, μηχανικής μάθησης, και μια φυσική διατύπωση είναι

$$\min_w \sum_{1 \leq l \leq N} \|F_W(X^l) - Y^l\|^2$$

όπου w είναι ίσο με $(X^T X)^{-1} X^T Y$

$$X = \begin{bmatrix} x_1^{(1)} & \dots & x_K^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^{(n)} & \dots & x_K^{(n)} \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ \vdots \\ y^{(n)} \end{bmatrix}.$$

και

το πρόβλημα αναφέρεται σε ένα πρόβλημα όπου μια αντικειμενική συνάρτηση ελαχιστοποιείται (ή μεγιστοποιείται) κάτω από ορισμένους περιορισμούς που ορίζονται είτε ως ισότητα ή ανισότητα. Εάν η συνάρτηση σφάλματος δεν είναι να ελαχιστοποιηθεί από το τετραγωνικό σφάλμα, αλλά να ελαχιστοποιηθεί το απόλυτο σφάλμα, αυτό το πρόβλημα μπορεί να γραφτεί ως πρόβλημα LP

Στον LP, η ελαχιστοποίηση του τετραγωνικού σφάλματος δεν είναι κατ' αρχήν δυνατή, επειδή η αντικειμενική συνάρτηση και όλοι οι περιορισμοί πρέπει να γράφονται σε γραμμική μορφή. Ωστόσο, μπορούμε να αντιμετωπίσουμε κατά προσέγγιση το τετραγωνικό σφάλμα χρησιμοποιώντας τυπικές τεχνικές για πιο πολύπλοκες μορφές του γραμμικού προγραμματισμού LP (Dantzig 1998). Για παράδειγμα, μπορούμε να ενσωματώσουμε το τετραγωνικό σφάλμα περίπου προσεγγίζοντας μια τετραγωνική συνάρτηση με μια γραμμική συνάρτηση.

Η βελτίωση της ικανότητας γενίκευσης στον μαθηματικό προγραμματισμό.

Η βελτίωση της ικανότητας γενίκευσης (ή η αποφυγή υπερφόρτωσης) είναι ένα συνεχώς αυξανόμενο πρόβλημα στον τομέα της μηχανικής μάθησης. Με την προσθήκη ενός όρου τακτοποίησης στη συνάρτηση σφάλματος η δυνατότητα γενίκευσης μπορεί να βελτιωθεί ή να αποφευχθεί. Το παράδειγμα της εξίσωσης χρησιμοποιεί έναν όρο κανονικοποίηση του προτύπου L2.

$$\min_w \sum_l \|F_W(X^l - Y^l)\|^2 + \lambda \|w\|^2$$

Το w δίνεται ως εξής

$$W = (\lambda I + X^T X)^{-1} X^T Y$$

όπου το I είναι η μήτρα μονάδας και το λ είναι ένα υπερπαραμετρικό στοιχείο που ελέγχει την ισορροπία μεταξύ του όρου σφάλματος και του όρου νομιμοποίησης. Αντίθετα, στο πεδίο μαθηματικού προγραμματισμού, η νομιμοποίηση μπορεί να υλοποιηθεί χρησιμοποιώντας τυποποιημένες τεχνικές MIP (41). Ορισμένα προβλήματα μαθηματικού προγραμματισμού που έχουν ακέραιες μεταβλητές καθώς και μεταβλητές πραγματικού αριθμού ονομάζονται προβλήματα MIP. Ενώ τα προβλήματα MIP είναι πιο δύσκολα να επιλυθούν σε σύγκριση με τα προβλήματα LP, μπορούν να επιλυθούν με ακρίβεια από μια υπερσύγχρονη μέθοδο επίλυσης MIP όπως το CPLEX. .

Η προτεινόμενη μέθοδος

Προτείνουμε μια νέα μέθοδο που καθορίζει μια αντικειμενική συνάρτηση από τις αξιολογήσεις των εμπειρογνομόνων χρησιμοποιώντας μια μαθηματική προσέγγιση προγραμματισμού. Η βασική ιδέα της μεθόδου μας είναι να χρησιμοποιήσουμε μια κανονική κλίμακα για τη μέτρηση όχι μόνο των ζευγών αντικειμενικών τιμών αλλά και των ζευγών διαφορών των αντικειμενικών τιμών. Ας υποθέσουμε ότι οι εκτιμήσεις ενός εμπειρογνώμονα είναι "Λύση i είναι καλύτερη από τη λύση j" και "λύση S είναι πολύ καλύτερα από λύση t". Υποθέτουμε ότι οι αξιολογήσεις ενός εμπειρογνώμονα είναι "Η λύση i είναι

καλύτερη από τη λύση j ", και "Η λύση s είναι πολύ καλύτερη από τη λύση t ". Στην περίπτωση αυτή, οι ακόλουθες ανισότητες ισχύουν αντιστοίχως

$$f_w(x^i) > f_w(x^j)$$

$$f_w(x^s) > f_w$$

Κατά κάποιον τρόπο δηλαδή έχουμε μία μαθητικοποίηση μη αριθμητικών εκτιμήσεων για το ποια λύση είναι καλύτερη ή όχι.

5. ΕΞΕΛΙΞΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΜΑΘΗΣΗΣ

5.1. Εξελικτικοί αλγόριθμοι

Οι εξελικτικοί αλγόριθμοι ασχολούνται με την έννοια των πληθυσμών. Ο πληθυσμός είναι ένα σύνολο ατόμων που στην περίπτωση των προβλημάτων βελτιστοποίησης περιέχει έναν φορέα παραμέτρων και το μοντέλο που επιθυμούμε να βελτιστοποιήσουμε μπορεί να δεχθεί και να μετατραπεί σε μια έξοδο. Ο πληθυσμός αρχικοποιείται με κάποια διαδικασία που να περιέχει τυχαία σειρά παραμέτρων διανυσμάτων, τα οποία θα πρέπει να καλύπτουν ομοιόμορφα ολόκληρη την περιοχή παραμέτρων του μοντέλου. Ο αρχικός πληθυσμός αξιολογείται και ξεκινάει μια επαναληπτική διαδικασία η οποία συνεχίζεται εφόσον δεν βρεθεί κατάλληλη λύση. Κατά τη διάρκεια αυτής της επαναληπτικής διαδικασίας, ο σημερινός πληθυσμός επιλέγεται, μεταβάλλεται και αξιολογείται. Κατά την επιλογή, ένα σύνολο ατόμων που εμφανίζουν πολλά υποσχόμενα χαρακτηριστικά επιλέγονται για να ζήσουν στην επόμενη γενιά του πληθυσμού. Στη συνέχεια μεταβάλλονται τυχαία για να δημιουργηθεί ποικιλία στον πληθυσμό και να αξιολογηθούν. Αυτή η διαδικασία δημιουργεί μια νέα γενιά του πληθυσμού σε κάθε επανάληψη και συνεχίζει μέχρι να βρεθεί μια λύση ή κάποια άλλη περιορισμός (42).

Το πρώτο βήμα στη χρήση εξελικτικών αλγορίθμων δημιουργεί μια αναπαράσταση που μπορεί να κωδικοποιήσει όλες τις πιθανές λύσεις στο πρόβλημα. Ο όρος φαινότυπος υποδηλώνει την αναπαράσταση που μπορεί να εφαρμοστεί απευθείας στο πρόβλημα και ο γονότυπος υποδηλώνει την ειδική κωδικοποίηση του φαινοτύπου που χειρίζεται μέσα στον εξελικτικό αλγόριθμο. Στις εργασίες βελτιστοποίησης ένας έγκυρος φαινότυπος μπορεί να είναι ένας φορέας αριθμών που λειτουργούν ως παράμετροι σε μια συνάρτηση, ενώ ο γονότυπος θα είναι μια δυαδική αναπαράσταση των αριθμών που μπορούν να μεταβληθούν με το χειρισμό των ατόμων bits. Οι όροι φαινότυπος, υποψήφια λύση και ατομική χρήση χρησιμοποιούνται εναλλακτικά για να υποδηλώσουν την αναπαράσταση όπως χρησιμοποιείται από το μοντέλο ενώ το χρωμόσωμα, ο γονότυπος και το άτομο χρησιμοποιούνται για να αναφερθούν στην αναπαράσταση μέσα στον εξελικτικό αλγόριθμο.

Δυαδική αναπαράσταση

Οι γενετικοί αλγόριθμοι (GA) χρησιμοποιούν παραδοσιακά μια δυαδική αναπαράσταση για την αποθήκευση μεμονωμένων γονότυπων. Η παράσταση είναι μια σειρά σταθερού μήκους πάνω από το αλφάβητο $\{0,1\}$. (50)

010000	101001	010001	101101
--------	--------	--------	--------

Διαδική αναπαράσταση του χρωμοσώματος με τέσσερα γονίδια

1511	542	52	115
------	-----	----	-----

Ακέραια αναπαράσταση του χρωμοσώματος με τέσσερα γονίδια (51).

1.254	45.789	4.25	0.00142
-------	--------	------	---------

Αναπαράσταση με πραγματική αποτίμηση. Οι αναπαραστάσεις πραγματικού ή μεταβλητού σημείου χρησιμοποιήθηκαν αρχικά σε στρατηγικές εξελικτικής προγραμματισμού και εξέλιξης και λειτουργούσαν καλά για προβλήματα που εντοπίζονται σε συνεχείς ερευνητικές περιοχές.

Παράμετροι εξελικτικών αλγορίθμων

Συνάρτηση αξιολόγησης. Η συνάρτηση αξιολόγησης είναι υπεύθυνη για τη βελτίωση του πληθυσμού. Είναι μια συνάρτηση που αποδίδει μια μορφή ή αξία κόστους σε κάθε γονότυπο και έτσι μας επιτρέπει να συγκρίνουμε την ποιότητα των γονότυπων στον πληθυσμό.

Πληθυσμός. Ο πληθυσμός είναι ένα σύνολο γονότυπων που περιέχουν τις τρέχουσες καλύτερες λύσεις σε ένα πρόβλημα. Ενώ οι γονότυποι παραμένουν σταθεροί και αμετάβλητοι, ο πληθυσμός αλλάζει συνεχώς με την εφαρμογή μηχανισμών επιλογής που αποφασίζουν ποιοι γονότυποι επιτρέπονται στην επόμενη γενιά του πληθυσμού.

Μοντέλο σταθερής κατάστασης. Στο μοντέλο σταθερής κατάστασης ολόκληρος ο πληθυσμός δεν αντικαθίσταται ταυτόχρονα. Μόνο ένα κλάσμα του πληθυσμού αντικαθίσταται ταυτόχρονα.

Γενετικό μοντέλο. Στο μοντέλο γενεάς ολόκληρος ο πληθυσμός αντικαθίσταται αμέσως

Μηχανισμός επιλογής γονέων. Η επιλογή γονέων συμβάλλει στη βελτίωση της ποιότητας ενός πληθυσμού επιλέγοντας τα άτομα που θα επιβιώσουν στην επόμενη γενιά. (43)

Αναλογική φυσική επιλογή. Η αναλογική φυσική επιλογή (Fitness Proportional Selection - FPS) αποδίδει μια δυνατότητα επιλογής σε ένα άτομο με βάση την απόλυτη φυσική του ικανότητα. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα πολύ καλά άτομα να ξεπερνούν τον πληθυσμό γρήγορα και πρόωρα τη σύγκλιση. Εάν τα άτομα έχουν παρόμοιες φυσικές τιμές, η πίεση επιλογής γίνεται χαμηλή.

Επιλογή κατάταξης. Στην επιλογή κατάταξης ο πληθυσμός ταξινομείται ανάλογα με τις φυσικές τιμές του ατόμου και η πίεση επιλογής διατηρείται σταθερή. Στη συνέχεια επιλέγεται ένας σταθερός αριθμός από τα καλύτερα άτομα της λίστα που έχει ταξινομηθεί.

Επιλογή μετά από αγώνα. Η επιλογή του αγώνα επιτρέπει την επιλογή χωρίς την γνώση της φυσικής κατάστασης του πληθυσμού. Ένας αριθμός ατόμων επιλέγεται τυχαία και επιλέγεται το καλύτερο. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι να επιλεγεί ο επιθυμητός αριθμός ατόμων.

Διαφορετικοί χειρισμοί. Οι χειριστές μεταβλητών εισάγουν νέα χαρακτηριστικά στους γονότυπους ενός πληθυσμού τροποποιώντας ή αναμειγνύοντας τους υπάρχοντες γονότυπους.

Μπορούν να χωριστούν σε δύο τύπους: οιοσδήποτε χειριστές που παίρνουν έναν γονότυπο και τον μεταβάλλουν στοχαστικά για να εισαγάγουν τυχαίες μεταβολές και νευρωνικοί χειριστές που συγχέουν χαρακτηριστικά 2 ή περισσότερων γενοτύπων. Αντίστοιχα έχουμε με βάση τους παραπάνω χειριστές, τους χειριστές μετάλλαξης και χειριστές ανασυνδυασμού.

Διαδική μετάλλαξη Το πιο συχνά χρησιμοποιούμενο σχήμα μετάλλαξης για δυαδικές αναπαραστάσεις συνίσταται στην τυχαία μετακίνηση δυαδικών ψηφίων (γονιδίων) σε ένα χρωμόσωμα με μια ορισμένη πιθανότητα.

Διαδικός ανασυνδυασμός. Τρεις προσεγγίσεις χρησιμοποιούνται κανονικά για την ανασυνδυασμό δυαδικών χρωμοσωμάτων. Η διασταύρωση ενός σημείου διαιρεί το χρωμόσωμα σε δύο τμήματα, επιλέγοντας ένα τυχαίο σημείο τομής. Η διασταύρωση N-σημείων γενικεύει αυτή τη συμπεριφορά με τη λήψη n τυχαίων σημείων διάσπασης και τη συναρμολόγηση νέων χρωμοσωμάτων με τη λήψη εναλλακτικών τμημάτων των γονικών χρωμοσωμάτων. Η ομοιόμορφη διασταύρωση δημιουργεί μια σειρά ομοιόμορφων αριθμών από μια κατανομή πιθανοτήτων και επιλέγει τον γονέα.

ακέραιη μετάλλαξη Τυχαία επαναφορά και μετατόπιση ερπυσμού χρησιμοποιούνται για να μεταλλάξουν ακέραια χρωμοσώματα. Στην τυχαία επαναφορά, οι ακέραιες τιμές αλλάζουν με κάποια πιθανότητα.

Ακέραια αναπαράσταση. Για τις ακέραιες αναπαραστάσεις, ισχύουν οι ίδιες τεχνικές που χρησιμοποιούνται για τις δυαδικές αναπαραστάσεις (44)

Μεταλλάξεις με πραγματική αξία.

Για πραγματικές εκτιμήσεις, η μετάλλαξη είναι παρόμοια με την ακέραιη μετάλλαξη, με την εξαίρεση νέες τυχαίες τιμές από συνεχείς κατανομές ή αυτές που προκύπτουν από Gaussian κατανομή. Ένα κατώτερο και το ανώτερο όριο χρησιμοποιούνται για τον περιορισμό του εύρους των παραγόμενων τυχαίων αριθμών.

Ανασυνδυασμός πραγματικής αξίας. Υπάρχουν τρεις συνήθεις τρόποι ανασυνδυασμού των πραγματικών χρωμοσωμάτων. Ο διακριτικός ανασυνδυασμός λειτουργεί σαν σημείο ανασυνδυασμού και έτσι δεν μεταβάλλει τις τιμές στα χρωμοσώματα των απογόνων. Ο αριθμητικός ανασυνδυασμός επιλέγει τιμές που βρίσκονται μεταξύ των τιμών των γονικών χρωμοσωμάτων για των απογόνων τους. Ο συνδυασμός μίξης οι οποίοι λειτουργεί όπως ο αριθμητικός συνδυασμός αλλά επιτρέπει τις τιμές που βρίσκονται ελαφρά εκτός του διαστήματος που ορίζεται από τα γονικά γονίδια.

Μετάλλαξη διακλάδωσης. Οι διακλαδώσεις μεταβάλλονται συνήθως επιλέγοντας έναν κόμβο τυχαία

Ανασυνδυασμός διακλάδωσης.

Μηχανισμός επιλογής επιζώντων Η επιλογή επιζώντων λαμβάνει χώρα μετά την παραγωγή νέων απογόνων και καθορίζει ποια άτομα επιτρέπεται να ζήσουν στην επόμενη γενιά.

Αρχειοποίηση. Αρχειοποίηση είναι η διαδικασία κατά την οποία δημιουργείται ο αρχικός πληθυσμός. Οι γενοτύποι παράγονται συνήθως τυχαία από ομοιόμορφη κατανομή βασισμένη σε κάποιο εύρος αποδεκτών τιμών. (45).

Κατάσταση τερματισμού. Η συνθήκη τερματισμού καθορίζει για πόσο καιρό τρέχει ο αλγόριθμος. (46)

Χρησιμοποιούνται τέσσερα κριτήρια για να καθοριστεί πότε θα σταματήσει

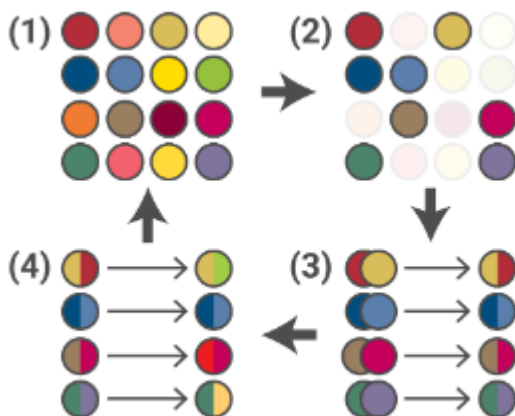
1. Αν επιτευχθεί μέγιστος αριθμός κύκλων CPU ή επαναλήψεων

2. Εάν επιτευχθεί γνωστό βέλτιστο επίπεδο
3. Εάν η αξία της φυσικής κατάστασης δεν έχει βελτιωθεί για μεγάλο χρονικό διάστημα
4. Εάν η ποικιλία του πληθυσμού πέσει κάτω από ένα δεδομένο όριο.

Παραδοσιακοί εξελικτικοί αλγόριθμοι. Περιλαμβάνουν γενετικούς αλγόριθμους, στρατηγική εξέλιξης, εξελικτικό προγραμματισμό και γενετικό προγραμματισμό.

ΓΕΝΕΤΙΚΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ(GA)

Τα GA είναι πολυδιάστατοι αλγόριθμοι αναζήτησης που χρησιμοποιούν πληθυσμούς δυαδικών συμβολοσειρών που ονομάζονται χρωμοσώματα για να βελτιώσουν την λύση σε ένα πρόβλημα. Οι GA χρησιμοποιούν έναν χειριστή επιλογής, έναν χειριστή μετάλλαξης και έναν χειριστή διασταύρωσης. Ο χειριστής επιλογής αυτό που κάνει είναι να επιλέγει άτομα τα οποία υπόκεινται σε αναδιασταυρώσεις γονιδίων και μεταλλάξεις προκειμένου να δημιουργηθούν με αυτό τον τρόπο καινούρια άτομα.(47)

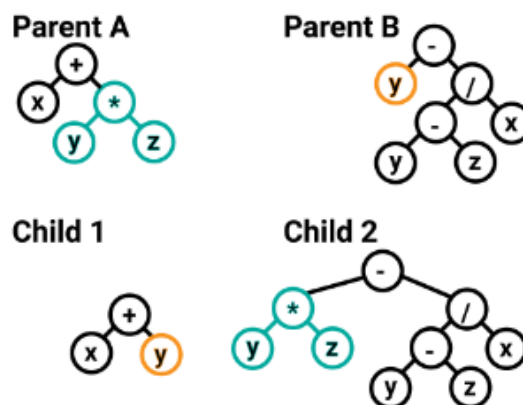


Σχήμα 25°.Στάδια της εξέλιξης των γενετικών αλγορίθμων είναι η (1) Αξιολόγηση (2) Επιλογή (3) Αναδιασταύρωση (4) Μετάλλαξη

Ο εξελικτικός προγραμματισμός (EP) δημιουργήθηκε ως εναλλακτική προσέγγιση στην τεχνητή νοημοσύνη. Η ιδέα ήταν να αναπτυχθούν μηχανές πεπερασμένων καταστάσεων (FSM) που παρατηρούν το περιβάλλον και δίνουν τις κατάλληλες απαντήσεις(48) . Το περιβάλλον διαμορφώνεται ως μια ακολουθία χαρακτήρων εισόδου που επιλέγονται από ένα ευρετήριο και ο ρόλος της FSM είναι να παραγάγει τον επόμενο χαρακτήρα διαδοχικά. Η καταλληλότητα μιας μηχανής FSM μετράται από μια συνάρτηση η οποία και δοκιμάζει την FSM με μια ακολουθία χαρακτήρων εισόδου ξεκινώντας από τον πρώτο χαρακτήρα και έπειτα προχωρώντας για να συμπεριλάβει μία επιπλέον επανάληψη ενός χαρακτήρα. Η συνάρτηση μετράει τον σωστό ρυθμό πρόβλεψης των FSM και καθορίζει την σκόρ του. (49)

Κάθε σύστημα FSM, δημιουργεί μόνο έναν απόγονο και μεταλλάσσεται από έναν η περισσότερους χειριστές.

Γενετικός προγραμματισμός. Ο γενετικός προγραμματισμός (GP) διαφέρει από τους παραδοσιακούς γενετικούς αλγόριθμους, στο ότι εξελίσσουν τα διάφορα προγράμματα ηλεκτρονικών υπολογιστών στο να επιλύουν διάφορα προβλήματα αντί να βρουν απευθείας τη λύση σε ένα πρόβλημα. **Τα άτομα του πληθυσμού είναι επομένως δομές δεδομένων που κωδικοποιούν προγράμματα υπολογιστών(50).**



Σχήμα 26^ο . Γενετικός προγραμματισμός που αποτελείται από δομές δεδομένων

Η διαδικασία εξέλιξης από την άλλη μεριά , είναι παρόμοια με τους γενετικούς αλγόριθμους στο ότι τα προγράμματα αξιολογούνται χρησιμοποιώντας μια συνάρτηση που τρέχει ένα σύνολο δοκιμαστικών περιπτώσεων όπου τα προγράμματα διεξάγουν μαζί ανασυνδιασμούς και μεταλλάξεις. Η διασταύρωση ορίζεται ως η ανταλλαγή υποομάδων μεταξύ προγραμμάτων και παράγει δύο απογόνους από δύο γονείς. (51)

Διαφορική εξέλιξη(52). Η διαφορική εξέλιξη είναι ένας στοχαστικός αλγόριθμος βελτιστοποίησης ο οποίος λειτουργεί σε πληθυσμούς παραμέτρων διανυσμάτων.

Το πρώτο βήμα του αλγορίθμου είναι να δημιουργηθεί ένας αρχικός πληθυσμός, το μέγεθος του οποίου είναι N και θα αντιπροσωπεύεται από μια μήτρα x και όπου η g η οποία ορίζεται ως εκθέτης, είναι η γενιά και

$n = 1, 2, 3, \dots, N$:

$$\chi_{n,1}^g = [\chi_{n,1}^g, \chi_{n,1}^g \chi_{n,2}^g \dots \dots \chi_{n,d}^g]$$

Η μετάλλαξη είναι το πρώτο βήμα κατά τη δημιουργία μιας νέας γενιάς από τον πληθυσμό. Η μετάλλαξη εκτελείται μεμονωμένα για κάθε φορέα x στον πληθυσμό. Η διαδικασία μετάλλαξης έχει ως εξής: επιλέγουμε τρεις τυχαίους φορείς για κάθε φορέα παραμέτρων (αυτό απαιτεί ότι ο πληθυσμός έχει μέγεθος $N > 3$) και δημιουργούμε ένα σύνολο νέων φορέων u που ονομάζονται μεταλλαγμένοι φορείς και ο οποίος ορίζεται σύμφωνα με τον παρακάτω τύπο όπου

$n = 1, 2, 3, \dots, N$.

$$u_n^{g+1} = [\chi_{nr1}^g + F(\chi_{n2r}^g - \chi_{n3r}^g)]$$

Η τιμή F δηλώνει την επίδραση του διαφορικού βάρους στον υπό μετάλλαξη παράγοντα. Δηλαδή με λίγα λόγια ο καινούριος παράγοντας δημιουργείται από τον μεταλλαγμένο παράγοντα u και τον αρχικό παράγοντα χ .

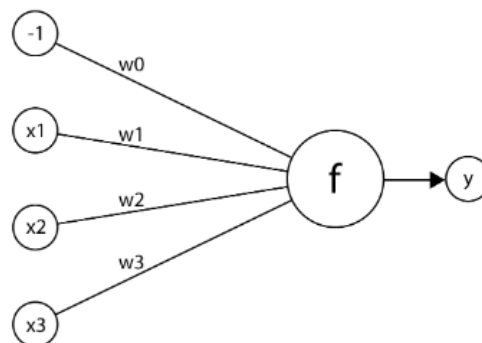
Η επιλογή είναι το τελευταίο βήμα για τη δημιουργία μιας νέας γενιάς. Ο δοκιμαστικός φορέας u συγκρίνεται με τον αρχικό φορέα x για καταλληλότητα και ο φορέας με το μικρότερο κόστος επιλέγεται για τη δημιουργία σύμφωνα με τον παρακάτω τύπο όπου

$$n = 1, 2, 3, \dots, N.$$

$$\chi_{n,}^{g+1} \begin{cases} u_n^{g+1} & \text{εάν } f(u_n^{g+1}) < \chi_{n,}^g \\ \chi_{n,1}^g & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

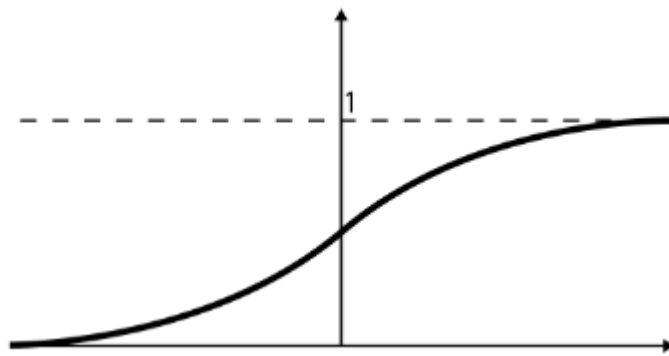
Τεχνητός νευρώνας. Ένας τεχνητός νευρώνας είναι μια μη γραμμική λειτουργία με περιορισμένη περιοχή εξόδου. Η μονάδα μπορεί να λαμβάνει πολλαπλά σήματα εισόδου, ένα σημείο κατώφλι και να παράγει ένα σήμα εξόδου (53). Κάθε σήμα εισόδου έχει το αντίστοιχο βάρος που συνδέεται με αυτό το οποίο ρυθμίζει την κρούση των σημάτων εισόδου πολλαπλασιάζοντας με αυτό πριν από την είσοδο στη μονάδα. Το κατώφλι αντιπροσωπεύεται επίσης ως σήμα με κάποιο βάρος, αλλά η τιμή του σήματος είναι πάντα 1 ή -1. Αυτό σημαίνει ότι το όριο βάρους του κατώτατου σήματος καθορίζει το όριο. Ο νευρώνας απεικονίζεται στο παρακάτω σχήμα ενώ η αντίστοιχη εξίσωση η οποία καθορίζει την τιμή εξόδου παρουσιάζεται από τον παρακάτω τύπο για τον υπολογισμό της τιμής του.

$$y = f\left(1 * w_0 + \sum_{i=1}^{n-1} w_i x_i\right)$$



Σχήμα 27°. αναπαράσταση συνάρτησης στον τεχνητό νευρώνα

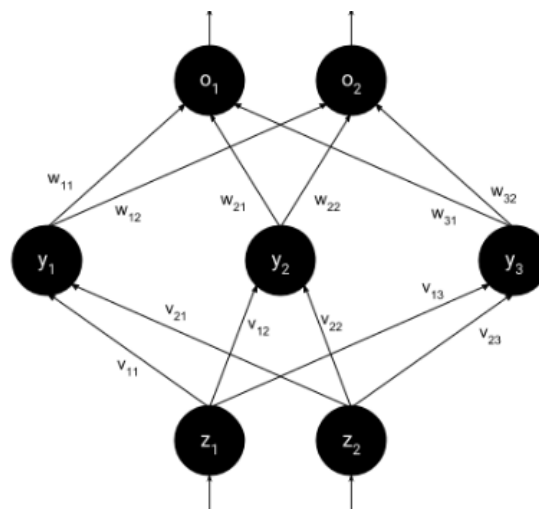
Η συνάρτηση f είναι η λεγόμενη συνάρτηση μεταφοράς, η οποία λαμβάνει ευρέως μεγάλες τιμές εισόδου και τις χαρτογραφεί σε μια προκαθορισμένη περιοχή εξόδου. Η σιγμοειδή συνάρτηση είναι μια από τις πιο επιτυχημένες επιλογές ως συνάρτηση μεταφοράς επειδή δημιουργεί μία ομαλή μεταφορά από μία μη ενεργή κατάσταση σε μία ενεργή νευρωνική δραστηριότητα.



Σχήμα 28°. Σιγμοειδή συνάρτηση μεταφοράς

Τεχνητά νευρωνικά δίκτυα. Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (ANN) αποτελούνται από πολλαπλούς νευρώνες ομαδοποιημένους. Στην ευρέως χρησιμοποιούμενη έκδοση που ονομάζεται Feed Forward Neural Network (FFNN)(54) και το δίκτυο ομαδοποιείται σε τρία βασικά επίπεδα:

1. Ένα στρώμα εισόδου, το οποίο λαμβάνει ένα διάνυσμα εισόδων
2. Ένα ή περισσότερα κρυφά στρώματα, τα οποία επεξεργάζονται τα δεδομένα.
3. Ένα στρώμα εξόδου, το οποίο παράγει χρήσιμα δεδομένα εξόδου



Σχήμα 29°. Feed Forward Neural Network (FFNN)

Αντίστροφη αναπαράγωγή. (55). Πρόκειται για έναν αλγόριθμο κατάρτισης νευρωνικού δικτύου ο οποίος χρησιμοποιεί σύνολα δεδομένων κατάρτισης και διδάσκει ένα νευρωνικό δίκτυο διαφορετικά πρότυπα. Τα δεδομένα κατάρτισης αποτελούνται από ένα σύνολο εισόδων και αντιστοιχούν σε κάποιο σύνολο εξόδων. Αρχικά το δίκτυο θα έχει τυχαία βάρη και το δίκτυο δεν θα αποδώσει τη σωστή έξοδο για τις περισσότερες εισόδους εκπαίδευσης. Η λειτουργία αναπαράγωγής γίνεται με ελαφριά ρύθμιση των βαρών για κάθε δείγμα εκπαίδευσης. Αυτό γίνεται επανειλημμένα διενεργώντας διάφορους κύκλους ο καθένας από τους οποίους θα αναφέρονται ως εποχή.

Οι αλγόριθμοι βαθμιδωτής κλίσης χρησιμοποιούνται για να επιτευχθεί αυτό βελτιστοποιώντας τη συνάρτηση σφάλματος του δικτύου που είναι το άθροισμα τετραγώνων αυτών, το σφάλμα δε, που είναι η διαφορά μεταξύ των πραγματικών εξόδων δικτύων (o_k) και των εξόδων κατάρτισης (t_k)

$$E = 1/2 \sum_{k \in \text{outputs}} t_k - s_k^2.$$

Οι εξισώσεις για την ρύθμιση των βαρών εξαρτώνται από την παράγωγο της συνάρτησης μεταφοράς

Βελτίωση υπολογισμού των αλγόριθμων κατανομής. Ο υπολογισμός των αλγόριθμων κατανομής (EDA) χρησιμοποιούν πιθανολογικά μοντέλα προκειμένου να λύσουν πολύπλοκα προβλήματα βελτιστοποίησης. Έχουν βοηθήσει σε διάφορα μηχανολογικά προβλήματα άλλα και σε ποικίλα θέματα (από την πρόγνωση της δομής μίας πρωτεΐνης έως την βελτίωση της χημειοθεραπείας). Πολλές τεχνικές έχουν χρησιμοποιηθεί για να κάνουν την μέθοδο πιο λειτουργική. Διάφορες τεχνικές τοπικής βελτιστοποίησης (DHC) έχουν κάνει την μέθοδο ταχύτερη.

Βελτιστοποίηση σμήνους σωματιδίων

Η μέθοδος αυτή (γνωστή και ως PSO, (56)) παρουσιάζεται ως πολυδιάστατη συνάρτηση δηλαδή

$$F(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = f(\vec{x})$$

Όπου \vec{x} είναι ένας παράγοντας ο οποίος αναπαριστά τις πραγματικές παραμέτρους που δίνονται στην συνάρτηση.

Ο σκοπός είναι να βρεθεί εκείνο το σημείο το οποίο ελαχιστοποιεί την συνάρτηση. Σύμφωνα με την μέθοδο, τα σωματίδια πετάνε στον χώρο και δοκιμάζουν λύσεις. Κάθε σωματίδιο έχει μία τωρινή θέση $\vec{x}(t)$, μία δεδομένη ταχύτητα $\vec{v}(t)$ και μία ατομική καλύτερη θέση ($\vec{p}(t)$) αλλά και μία καλύτερη θέση σε σχέση με τα γειτονικά σωματίδια $\vec{g}(t)$. Μία γειτονιά σωματιδίων είναι μία συλλογή από σωματίδια τα οποία συμπεριφέρονται ως σμήνος. Οι γειτονιές μπορεί να είναι είτε κοινωνικές είτε και γεωγραφικές. Οι κοινωνικές γειτονιές δεν αλλάζουν και περιέχουν τα ίδια σωματίδια σε όλη την διάρκεια της βελτιστοποίησης ενώ οι γεωγραφικές περιοχές είναι δυναμικές και περιλαμβάνουν μόνο γειτονιές που είναι μαζεμένα το ένα κοντά στο άλλο, σωματίδια. Ο αλγόριθμος έχει κάποιες ιδιότητες όπως την μέγιστη ταχύτητα v_{max} , έναν εσωτερικό παράγοντα ω , δύο τυχαία νούμερα ϕ_1 και ϕ_2 τα οποία επηρεάζουν την ταχύτητα και με την σειρά τους επηρεάζουν την καλύτερη τοπική θέση του σωματιδίου αλλά και την καλύτερη θέση αυτού σε σχέση με τα υπόλοιπα γειτονικά σωματίδια και τέλος δύο σταθερές c^1 c^2 τα οποία ονομάζονται εμπιστοσύνη σωματιδίου και εμπιστοσύνη σμήνους.

Εξελικτικοί αλγόριθμοι και μηχανική μάθηση. Οι εξελεγκτικοί αλγόριθμοι και η μηχανική μάθηση είναι δύο πολλά υποσχόμενα πεδία στην επιστήμη των υπολογιστών και πολλές προσπάθειες έχουν γίνει προκειμένου να συνδυαστούν και οι δύο. Η μηχανική μάθηση έχει χρησιμοποιηθεί για την βελτιστοποίηση των εξελικτικών αλγορίθμων οι λεγόμενοι MLEC- Αλγόριθμοι με διάφορες τεχνικές όπως είναι τα νευρωνικά δίκτυα, η ανάλυση ομάδων, η μηχανή υποστήριξης παραγόντων κτλ. Έχει ωστόσο προταθεί και το αντίστροφο δηλαδή η χρήση των εξελικτικών αλγορίθμων για την βελτίωση της μηχανικής μάθησης με χαρακτηριστικό παράδειγμα τα νευρωνικά δίκτυα FFNN.

Ο προτεινόμενος αλγόριθμος.

Εφαρμόζοντας τις αρχές της διαφορικής εξέλιξης, οι οποίες μεταβάλλουν μόνο ένα χρωμόσωμα εάν η αλλοίωση βελτιώνει το άτομο, ο εν λόγω πληθυσμός μπορεί να βελτιωθεί περαιτέρω πριν εισέλθει στην επόμενη γενιά χωρίς να διακινδυνεύσει άλλες επιβλαβείς συνέπειες. Επιπλέον, ο νέος αλγόριθμος θα είναι σε θέση να προσεγγίσει τα προβλήματα και ενδεχομένως να διευρύνει την περιοχή εφαρμογής του.

Ο προτεινόμενος βελτιωμένος αλγόριθμος, *Differential Estimation of Distribution (DEDA)*, βασίζεται στην γενετική εξέλιξη (DE) και τον υπολογισμό της κατανομής (EDA), εφαρμόζοντας διαφορική μετάλλαξη στον επιλεγμένο πληθυσμό του αλγορίθμου EDA.

5.2. Γενετικοί αλγόριθμοι στην μηχανική εκμάθηση

Γενικά περί Γενετικών αλγορίθμων

Οι Γενετικοί Αλγόριθμοι στηρίζονται στην Δαρβινική Θεωρία και πιο συγκεκριμένα στην αρχή της εξέλιξης των ειδών. Ένα βασικό συστατικό στη Δαρβινική θεωρία είναι ότι ανάμεσα σε οργανισμούς που ανήκουν στο ίδιο είδος, δεν υπάρχει κάποιος διαχωρισμός σε κατώτερους ή ανώτερους. Οι απόγονοι ενός πληθυσμού καθορίζονται από το περιβάλλον, έτσι η βελτίωση των συνθηκών διαβίωσης αυξάνει την πιθανότητα οι απόγονοι να κληρονομήσουν κάποια χαρακτηριστικά των γονιών τους. Ένα ακόμη βασικό στοιχείο της θεωρίας είναι η δομή των ατόμων ενός είδους. Μία βασική δομή είναι τα χρωμοσώματα τα οποία κωδικοποιούν τα χαρακτηριστικά των ατόμων ενός είδους. Τα χρωμοσώματα αποτελούνται από κάποιες μικρότερες δομικές μονάδες τα γονίδια (gene). Το σύνολο της πληροφορίας που αποθηκεύεται στα γονίδια ονομάζεται γενότυπος (genotype). Τα χαρακτηριστικά ενός οργανισμού δημιουργούνται με αποκωδικοποίηση του γενότυπου. Το σύνολο των χαρακτηριστικών που βλέπουμε με αυτή την αποκωδικοποίηση είναι ο φαινότυπος. Οι βασικές λειτουργίες των οργανισμών είναι η αναπαραγωγή και η μετάλλαξη. Στη διαδικασία της αναπαραγωγής δύο μέλη του οργανισμού ανταλλάσσουν γενετικό υλικό με στόχο την αναπαραγωγή. Η μετάλλαξη στα είδη λαμβάνει χώρα σε πολύ αραιά χρονικά διαστήματα που προκαλείται είτε από γενετικούς παράγοντες είτε από παράγοντες του περιβάλλοντος. Οι Γενετικοί Αλγόριθμοι δημιουργήθηκαν ως μια διαδικασία ευρεστικής αναζήτησης που μιμείται την διαδικασία της φυσικής εξέλιξης όπως αυτή έχει διατυπωθεί από την Δαρβινική θεωρία.

Οι Γενετικοί Αλγόριθμοι, ανήκουν στον τομέα των εξελικτικών αλγορίθμων και αποτελούν μία κατηγορία συστημάτων επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης χρησιμοποιώντας τεχνικές εμπνευσμένες από την φυσική εξέλιξη όπως την κληρονομικότητα (inheritance), την μετάλλαξη (mutation), την επιλογή (selection), την διασταύρωση (crossover). Η πρώτη εμφάνιση των εξελικτικών συστημάτων, χρονολογείται στην περίοδο 1950 και 1960, όταν διάφοροι επιστήμονες προσπάθησαν να αναπτύξουν εξελικτικά συστήματα με την ιδέα ότι η εξέλιξη μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν εργαλείο βελτιστοποίησης. Η βασική ιδέα ήταν η δημιουργία ενός πληθυσμού από υποψήφιας λύσεις για ένα πρόβλημα, χρησιμοποιώντας την φυσική επιλογή και την φυσική γενετική μετάλλαξη. Το 1960 ο Rechenberg εισήγαγε τις “Εξελικτικές στρατηγικές” (“evolution strategies”) μία μέθοδο για βελτιστοποίηση παραμέτρων. Στη συνέχεια το 1966 ο Fogel, Owens και Walsh δημιούργησαν τον “Εξελικτικό προγραμματισμό” (“evolutionary programming”) μία μέθοδο με την οποία οι υποψήφιας λύσεις ενός δεδομένου προβλήματος αναπαρίστανται ως πεπερασμένα αυτόματα τα οποία μετέλλασαν τυχαία τα διαγράμματα μετάβασης καταστάσεων επιλέγοντας το καλύτερο. Οι Γενετικοί Αλγόριθμοι

εφευρέθηκαν από τον John Holland το 1960 και αναπτύχθηκαν από αυτόν και τους φοιτητές του στο Πανεπιστήμιο του Michigan το 1960 και 1970. Ο κύριος στόχος του Holland ήταν να μελετήσει το φαινόμενο της εξελικτικής προσαρμογής όπως αυτή παρουσιάζεται στη φύση και να δημιουργήσει μηχανισμούς φυσικής προσαρμογής που να μπορούν να εισαχθούν στα υπολογιστικά συστήματα. Ο Γενετικός Αλγόριθμος του Holland ήταν μία μέθοδος δημιουργίας πληθυσμών χρωμοσωμάτων (συμβολοσειρές από 0 και 1, δηλαδή bits) μέσα από τη διαδικασία της φυσικής επιλογής, της διασταύρωσης και της μετάλλαξης. Κάθε χρωμόσωμα αποτελείται από γονίδια (bits) και κάθε γονίδιο είναι μία παράσταση από αλληλόμορφα (0 και 1). Η διαδικασία της επιλογής διαλέγει τα καλύτερα χρωμοσώματα του πληθυσμού για να παράγει απογόνους. Η διαδικασία της διασταύρωσης ανταλλάσσει υποσύνολα των δύο χρωμοσωμάτων ενώ η διαδικασία της μετάλλαξης αλλάζει τυχαία τα αλληλόμορφα των χρωμοσωμάτων σε κάποιες τυχαίες θέσεις. Η εισαγωγή ενός πληθυσμού που υπόκειται σε διαδικασίες επιλογής διασταύρωσης και μετάλλαξης ήταν μία πρωτοποριακή μέθοδος και ήταν μία πρώτη προσπάθεια εισαγωγής της έννοιας του εξελικτικού υπολογισμού σε ένα αυστηρό θεωρητικό υπόβαθρο.

Διαδικασία Γενετικών Αλγορίθμων

Οι Γενετικοί Αλγόριθμοι διατηρούν έναν πληθυσμό πιθανών λύσεων, του προβλήματος που μας ενδιαφέρει, πάνω στον οποίο δουλεύουν. Έτσι ένας Γενετικός Αλγόριθμος πραγματοποιεί αναζήτηση σε πολλές κατευθύνσεις και υποστηρίζει καταγραφή και ανταλλαγή πληροφοριών μεταξύ αυτών των κατευθύνσεων. Ο πληθυσμός υφίσταται μια προσομοιωμένη γενετική εξέλιξη. Σε κάθε γενιά, οι σχετικά “καλές” λύσεις αναπαράγονται, ενώ οι σχετικά “κακές” απομακρύνονται. Ο διαχωρισμός και η αποτίμηση των διαφόρων λύσεων γίνεται με την βοήθεια μιας αντικειμενικής συνάρτησης, η οποία παίζει το ρόλο του περιβάλλοντος μέσα στο οποίο εξελίσσεται ο πληθυσμός. Πιο συγκεκριμένα μπορούμε να πούμε ότι ένας Γενετικός Αλγόριθμος για ένα συγκεκριμένο πρόβλημα πρέπει να αποτελείται από τα παρακάτω συστατικά:

- Μια γενετική αναπαράσταση των πιθανών λύσεων του προβλήματος Για την αναζήτηση πιθανών λύσεων ενός προβλήματος από ένα γενετικό αλγόριθμο, είναι αναγκαία η κωδικοποίηση των πιθανών λύσεων σε μία ακολουθία από χαρακτήρες που ανήκουν σε ένα αλφάβητο

$A = a_1, a_2, \dots, a_L$.

Οι χαρακτήρες αυτοί συχνά είναι δυαδικοί αλλά και πραγματικοί αριθμοί. Η ακολουθία χαρακτήρων (string) a_1, \dots, a_i ονομάζεται χρωμόσωμα ενώ οι χαρακτήρες a_i ονομάζονται γονίδια. Το σύνολο των τιμών που ένα γονίδιο μπορεί να λάβει ονομάζεται αλληλόμορφο. Στην πιο απλή περίπτωση όταν οι χαρακτήρες είναι δυαδικοί, τα δύο πιθανά αλληλόμορφα είναι το 0 και το 1. Έτσι στο χρωμόσωμα $A=11110000$ τα τέσσερα πρώτα γονίδια έχουν αλληλόμορφο 1 και τα τέσσερα τελευταία έχουν αλληλόμορφο 0.

- Μια αντικειμενική συνάρτηση αξιολόγησης των μελών του πληθυσμού Στόχος ενός γενετικού αλγορίθμου είναι να εντοπίσει την καλύτερη λύση σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης δηλαδή να εντοπίσει την καλύτερη ακολουθία χαρακτήρων (χρωμόσωμα). Το πόσο καλή είναι η ακολουθία χαρακτήρων (χρωμόσωμα) το υποδεικνύει η αντικειμενική συνάρτηση.

- Έναν τρόπο δημιουργίας ενός αρχικού πληθυσμού από πιθανές λύσεις Ένας γενετικός αλγόριθμος δημιουργεί ένα αρχικό πληθυσμό χρωμοσωμάτων και στη συνέχεια τον εξελίσσει σε έναν με καλύτερα χαρακτηριστικά. Για την εξέλιξη αυτή λαμβάνουν μέρος ορισμένες διαδικασίες, οι οποίες λαμβάνουν τον

πληθυσμό σε μία συγκεκριμένη γενιά και από αυτόν παράγουν τον επόμενο με τέτοιο τρόπο έτσι ώστε ο μέσος όρος όλου του πληθυσμού να είναι καλύτερος από αυτόν του προηγούμενου. Αυτές οι διαδικασίες επαναλαμβάνονται μέχρι ένα κριτήριο τερματισμού να εκπληρωθεί. Οι διαδικασίες αυτές είναι η επιλογή, η διασταύρωση, η μετάλλαξη.

► Γενετικούς τελεστές για τη δημιουργία νέων μελών.

Οι γενετικοί τελεστές είναι οι εξής:

1. *Επιλογή*: Αυτός ο τελεστής επιλέγει χρωμοσώματα από έναν πληθυσμό με τέτοιο τρόπο έτσι ώστε να επιλεχθούν τα καλύτερα χρωμοσώματα. Η διαδικασία αυτή δεν προσθέτει καινούργια χρωμοσώματα στον πληθυσμό αλλά τον ανακατασκευάζει έτσι ώστε οι επόμενοι πληθυσμοί να περιέχουν όλο και καλύτερα χρωμοσώματα.

2. *Διασταύρωση*: Αυτός ο τελεστής παράγει δύο απογόνους από ένα ζευγάρι γονέων διασταυρώνοντας τα γονίδια τους. Έτσι κάθε απόγονος περιέχει γονίδια και από τους δύο γονείς. Για παράδειγμα αν έχουμε τις δυαδικές συμβολοσειρές 10000100 και 111111 μία πιθανή διασταύρωση στην τρίτη θέση θα δημιουργούσε τους εξής δύο απογόνους τον 1001111 και τον 11100100

3. *Μετάλλαξη*: Αυτός ο τελεστής αλλάζει σε τυχαίες θέσεις τα γονίδια ενός απογόνου. Κάθε γονίδιο αλλάζει ή όχι ανάλογα με μία πιθανότητα. Για παράδειγμα η δυαδική συμβολοσειρά 00000100 έπειτα από μετάλλαξη στην δεύτερη θέση γίνεται 01000100

Η χρήση των Γενετικών Αλγορίθμων (ΓΑ) αποβλέπει στη δημιουργία απλών τρόπων αναζήτησης λύσεων σε προβλήματα, κυρίως βελτιστοποίησης και χρονοδρομολόγησης, τα οποία κατεχοχίν εξαρτώνται από μεγάλο πλήθος παραμέτρων, με πολλές αλληλεξαρτήσεις ή πολύ περίπλοκα ώστε δεν εφαρμόζονται η βελτιστοποίηση ή χρονοδρομολόγηση με άλλες πιο άμεσες μεθόδους. Για να μπορέσει να τρέξει ένας γενετικός αλγόριθμος, απαιτείται να έχουν ικανοποιηθεί 2 προϋποθέσεις επιτυχώς:

- μια συνάρτηση καταλληλότητας που να αξιολογεί το χώρο επίλυσης και
- μια κωδικοποίηση του χώρου επίλυσης

Μόλις επιτευχθούν τα δυο παραπάνω, τότε μπορεί να εφαρμοστεί ο ΓΑ, για να δημιουργήσει και να αξιολογήσει τις υποψήφιες λύσεις μέσω μιας προσομοίωσης της εξελικτικής διαδικασίας.

Οι συμβατικές μέθοδοι βελτιστοποίησης, εντοπίζουν το πλησιέστερο τοπικό βέλτιστο μιας συνάρτησης, αλλά συνήθως αποτυγχάνουν στη εύρεση καθολικής λύσης. Από την άλλη, οι στατιστικές τεχνικές απαιτούν μεγάλο υπολογιστικό χρόνο, ενώ οι υπολογιστικές μέθοδοι απαιτούν την ύπαρξη παραγώγων, η χρήση των οποίων δεν συνιστάται σε μεγάλα πολυεπίπεδα συστήματα με αυξανόμενη πολυπλοκότητα και ασυνέχεια. Αντίθετα, η χρήση των ΓΑ είναι αποτελεσματική τεχνική τυχαίας αναζήτησης για την εύρεση της βέλτιστης λύσης σε συγκεκριμένο χρόνο. Η τεχνική αυτή βασίζεται στην ανακάλυψη πρώτα πολλών τμηματικών λύσεων για τη δημιουργία του αρχικού πληθυσμού και μετά στο συνδυασμό των καλύτερων λύσεων μέχρι την επίτευξη της βέλτιστης εξ αυτών. Η όλη δυσκολία εντοπίζεται στην ορθή εκτίμηση της απόδοσης των τμηματικών λύσεων, διότι λανθασμένη εκτίμηση μπορεί να οδηγήσει σε λύσεις που θα απέχουν πολύ από τη ζητούμενη βέλτιστη. Η λειτουργία των ΓΑ βασίζεται στη δυνατότητά τους να αναπαράγουν τον πληθυσμό σε γενεές. Κάθε γενεά προκύπτει από την προηγούμενη, αφού επιλεγούν οι γονείς και εφαρμοστούν οι γενετικοί τελεστές της διασταύρωσης και της μετάλλαξης. Τα κυριότερα χαρακτηριστικά των ΓΑ είναι τα ακόλουθα:

- Είναι ένας νέος τρόπος προγραμματισμού, κατάλληλος για επίλυση προβλημάτων σε χώρους αναζήτησης ιδιαίτερα πολύπλοκους, προσαρμόσιμος σε ποικίλα και ευμετάβλητα περιβάλλοντα.

- Περιλαμβάνουν ένα σύνολο μεθόδων εμπνευσμένων από τη θεωρία της εξέλιξης. Αρχίζουν από έναν συνήθως επιλεγμένο πληθυσμό και επιδιώκουν την παραγωγή ατόμων με υψηλή απόδοση.
- Η προοδευτική βελτίωση του πληθυσμού επιτυγχάνεται με τις ενέργειες των γενετικών τελεστών που επιδρούν στην αναπαραγωγή, σύμφωνα με την ικανότητα των ατόμων, με εφαρμογή των τεχνικών της διασταύρωσης και της μετάλλαξης.
- Οι είσοδοι και οι έξοδοι του προβλήματος αναπαρίστανται ως συμβολοσειρές (strings) σταθερού μήκους, ενός συγκεκριμένου αλφαβήτου (συνήθως δυαδικού), με ρόλο αντίστοιχο του χρωμοσώματος στη Γενετική. Κάθε σημείο του χώρου επίλυσης του προβλήματος αντιπροσωπεύεται από μια συμβολοσειρά ή δομή, όπως αναφέρθηκε παραπάνω. Κάθε θέση στη συμβολοσειρά καταλαμβάνεται από ένα ή περισσότερα σύμβολα του αλφαβήτου, αντιπροσωπεύοντας μια μεταβλητή του προβλήματος και έχοντας ρόλο αντίστοιχο με αυτόν του γενετικού υλικού στους βιολογικούς μηχανισμούς, δηλαδή γονιδίου μέσα σε χρωμόσωμα.
- Απαιτείται η δυνατότητα πληροφόρησης για την ικανότητα των διάφορων συμβολοσειρών του πληθυσμού, σύμφωνα με τη συνάρτηση καταλληλότητας (fitness function), που καλείται επίσης και συνάρτηση απόδοσης, συνάρτηση προσαρμογής ή αντικειμενική συνάρτηση.

Ο χρόνος στην εξέλιξη της διαδικασίας υπολογίζεται σε διακριτά διαστήματα τα οποία καλούνται γενεές.

Η Ανατομία ενός Γενετικού Αλγόριθμου

Τρία είναι τα βασικά λειτουργικά τμήματα ενός ΓΑ:

- Τμήμα πληθυσμού, με τις δομές και τεχνικές για τη δημιουργία και τη διαχείρισή του,
- Τμήμα εκτίμησης της απόδοσης, με τη συνάρτηση καταλληλότητας,
- Τμήμα αναπαραγωγής, με τεχνικές για τη δημιουργία νέων δομών με την εφαρμογή των γενετικών τελεστών.

Στα παραπάνω, οι βασικοί μηχανισμοί που συνδέουν τον ΓΑ με το πρόβλημα που επιλύει είναι ο τρόπος κωδικοποίησης της δομής που αναπαριστά μια λύση του προβλήματος, καθώς και η συνάρτηση καταλληλότητας που επιστρέφει τη μέτρηση της απόδοσης της δομής. Επιπλέον, ο ΓΑ απαιτεί να οριστεί ένα όριο καταλληλότητας, το οποίο θα αντιστοιχεί στην επιθυμητή τιμή απόδοσης που πρέπει να επιτευχθεί από μια δομή, ώστε να τερματιστεί ο ΓΑ με τρεις επιπλέον παραμέτρους: το πλήθος N των δομών του αρχικού πληθυσμού, το ποσοστό r του πληθυσμού που θα αναπαραχθεί σε μια γενεά, το ποσοστό m των απογόνων που θα υποστούν μετάλλαξη.

Οι μηχανισμοί λειτουργίας του αλγορίθμου ποικίλλουν ως προς την εφαρμογή και τα αποτελέσματα. Στο βιβλίο του «Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning» (1989), ο Goldberg περιγράφει τι κάνει τους γενετικούς αλγόριθμους να λειτουργούν και εισάγει τον απλό γενετικό αλγόριθμο ή κανονικό γενετικό αλγόριθμο (canonical genetic algorithm): έναν εξελικτικό αλγόριθμο που εκτελεί ενέργειες σε μια συμβολοσειρά δυαδικών ψηφίων με τους ήδη προαναφερόμενους γενετικούς τελεστές:

- Αναπαραγωγή
- διασταύρωση
- μετάλλαξη

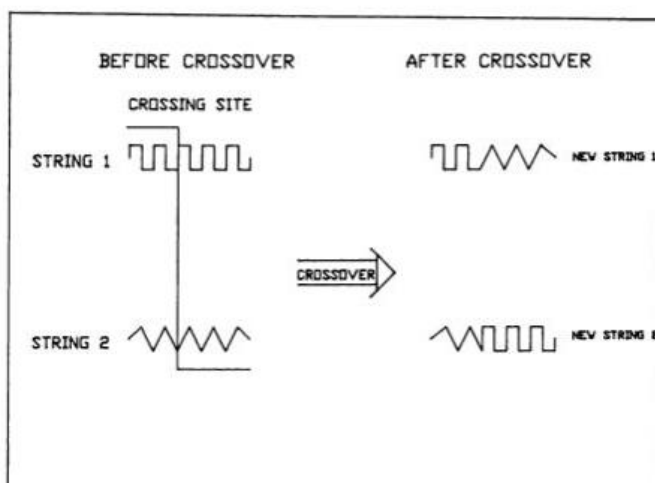
Οι γενετικοί αλγόριθμοι είναι διαφορετικοί σε σχέση με την τυπική βελτιστοποίηση και τις μεθόδους έρευνας με τέσσερις τρόπους:

- Οι γενετικοί αλγόριθμοι δουλεύουν με κωδικοποίηση της ομάδας παραμέτρων και όχι με τις ίδιες τις παραμέτρους από μόνες τους
- Αναζητούν από πληθυσμό σημείων και όχι από ένα μονό σημείο
- Χρησιμοποιούν αντικειμενικές συναρτήσεις και όχι παράγωγα και αυθαίρετη γνώση
- Τους διέπουν στοχαστικοί κανόνες.

Αναπαραγωγή είναι η διαδικασία όπου μεμονωμένες σειρές αναπαράγονται ακριβώς σύμφωνα με τις αντικειμενικές τιμές των συναρτήσεων τους. Άρα θα πρέπει να υπάρχει μία συνάρτηση f η οποία να δηλώνει κάποια ιδιότητα όπως είναι πχ το κέρδος, η χρησιμότητα ή κάποιο άλλο θετικό στοιχείο που θέλουμε να μεγιστοποιήσουμε. Η ακριβής επικόλληση των ταινιών σύμφωνα με κάποιες φυσικές τιμές σημαίνει ότι οι ταινίες με μεγαλύτερη αξία έχουν υψηλή πιθανότητα να συμβάλλουν σε απογόνους της επόμενης γενεάς. Στο επόμενο πίνακα βλέπουμε το ποσοστό που αντιπροσωπεύει κάθε σειρά στο συνολικό πληθυσμό καθώς και την καταλληλότητα κάθε σειράς ξεχωριστά.

No.	String	Fitness	% of Total
1	01101	169	14.4
2	11000	576	49.2
3	01000	64	5.5
4	10011	361	30.9
Total		1170	100.0

Εν συνεχεία τα γονίδια θα υποστούν ορισμένες διαδικασίες και συγκεκριμένα ανασυνδυασμούς που επίσης λαμβάνουν χώρα σε δύο στάδια όπως φαίνεται και στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 30°. διαδικασία ανασυνδυασμού σε γονίδια

Τα ποσοστά μεταλλάξεων είναι σχετικά μικρά σε φυσικούς πληθυσμούς θεωρώντας έτσι αυτόν σαν δευτερεύον μηχανισμό. Οι παραπάνω μηχανισμοί είναι και οι πιο απλοί και αποτελεσματικοί στην αντιμετώπιση πολλαπλών προβλημάτων βελτιστοποίησης. Μετά από τον ανασυνδυασμό των γονιδίων ο καινούριος πίνακας είναι ο παρακάτω όπου φαίνεται ότι αυξήθηκε η δύναμη των σειρών

Mating Pool after Reproduction (Cross Site Shown)	Mate (Randomly Selected)	Crossover Site (Randomly Selected)	New Population	x Value	$f(x)$ x^2
0 1 1 0 1	2	4	0 1 1 0 0	12	144
1 1 0 0 0	1	4	1 1 0 0 1	25	625
1 1 0 0 0	4	2	1 1 0 1 1	27	729
1 0 0 1 1	3	2	1 0 0 0 0	16	256
					1754
					439
					729

Τέλος καλό θα ήταν να αναφερθούμε λίγο στην ορολογία των γενετικών αλγορίθμων και πιο συγκεκριμένα στις διαφορές αυτού με την φυσική ορολογία κάποιων παραμέτρων.

Natural	Genetic Algorithm
chromosome	string
gene	feature, character, or detector
allele	feature value
locus	string position
genotype	structure
phenotype	parameter set, alternative solution, a decoded structure
epistasis	nonlinearity

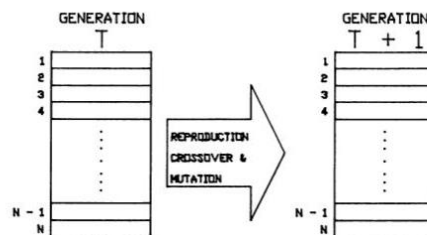
ΑΡΧΕΣ ΚΩΔΙΚΟΠΟΙΗΣΗΣ

Οι γενετικοί αλγόριθμοι δημιουργούν πληθυσμούς σε σειρές. Χρησιμοποιούμε απλούς γενετικούς αλγόριθμους SGA και δημιουργούμε έναν πληθυσμό σε σειρά μεμονομένων ατόμων όπου το κάθε άτομο περιλαμβάνει και κάποιον φαινότυπο, γονότυπο, τιμή καταλληλότητας όπως φαίνεται και στο παρακάτω σχήμα

INDIVIDUAL NUMBER	INDIVIDUALS			
	STRING	X	f(X)	OTHER
1	01111	15	225	
2	01001	9	81	
3
.
.
.
.
.
.
.
.
.
.
.
.
n	00111	7	49	

Σχήμα 31^ο . ταυτότητα ατόμων των γενετικών αλγορίθμων

Επιπλέον υπάρχουν και κάποιες σταθερές που δηλώνουν το μέγεθος του πληθυσμού αλλά και της τρεις βασικές λειτουργίες των GA που είναι η επιλογή, η μετάλλαξη και ο ανασυνδυασμός . Αυτές λαμβάνουν χώρα σε μη αλληλοεπικαλυπτούμενους πληθυσμούς απλώς για την διευκόλυνση της δημιουργίας απογόνων και της αντικατάστασης των γονέων.



Σχήμα 32. Σχηματική παράστασης μη αλληλοεπικαλυπτόμενων πληθυσμών στους απλούς γενετικούς αλγόριθμους

Πιο συγκεκριμένα ορισμένες λειτουργίες των GA έτρεξαν στην γλώσσα Pascal και παρουσιάζονται παρακάτω.

Η συνάρτηση επιλογή

```
function select(popsize:integer; sumfitness:real;
               var pop:population):integer;
( Select a single individual via roulette wheel selection )
var rand, partsum:real; ( Random point on wheel, partial sum )
    j:integer;          ( population index )
begin
    partsum := 0.0; j := 0;      ( Zero out counter and accumulator )
    rand := random * sumfitness; ( Wheel point calc. uses random number [0,1] )
    repeat ( Find wheel slot )
        j := j + 1;
        partsum := partsum + pop[j].fitness;
    until (partsum >= rand) or (j = popsize);
    ( Return individual number )
    select := j;
end;
```

Η συνάρτηση *αναδιασταύρωση*

```
procedure crossover(var parent1, parent2, child1, child2:chromosome;
                   var lchrom, ncross, nmutation, jcross:integer;
                   var pcross, pmutation:real);
{ Cross 2 parent strings, place in 2 child strings }
var j:integer;
begin
  if flip(pcross) then begin      { Do crossover with p(cross) }
    jcross := rnd(1,lchrom-1);    { Cross between 1 and 1-1 }
    ncross := ncross + 1;         { Increment crossover counter }
  end else                        { Otherwise set cross site to force mutation }
    jcross := lchrom;
  { 1st exchange, 1 to 1 and 2 to 2 }
  for j := 1 to jcross do begin
    child1[j] := mutation(parent1[j], pmutation, nmutation);
    child2[j] := mutation(parent2[j], pmutation, nmutation);
  end;
  { 2nd exchange, 1 to 2 and 2 to 1 }
  if jcross <> lchrom then { Skip if cross site is lchrom--no crossover }
  for j := jcross+1 to lchrom do begin
    child1[j] := mutation(parent2[j], pmutation, nmutation);
    child2[j] := mutation(parent1[j], pmutation, nmutation);
  end;
end;
```

Η συνάρτηση *mutation*

```
function mutation(alleleval:allele; pmutation:real;
                 var nmutation:integer):allele;
{ Mutate an allele w/ pmutation, count number of mutations }
var mutate:boolean;
begin
  mutate := flip(pmutation); { Flip the biased coin }
  if mutate then begin
    nmutation := nmutation + 1;
    mutation := not alleleval; { Change bit value }
  end else
    mutation := alleleval; { No change }
end;
```

Συνάρτηση *decode* αποκωδικοποιεί μία δυική σειρά σε ακέραια

```
function decode(chrom:chromosome; lbits:integer):real;
{ Decode string as unsigned binary integer - true=1, false=0 }
var j:integer;
    accum, powerof2:real;
begin
  accum := 0.0; powerof2 := 1;
  for j := 1 to lbits do begin
    if chrom[j] then accum := accum + powerof2;
    powerof2 := powerof2 * 2;
  end;
  decode := accum;
end;
```

Εκτός των παραπάνω, υπάρχουν επιπλέον οι διαδικασίες *generate* (δημιουργεί έναν καινούριο πληθυσμό από τον προηγούμενο), και η διαδικασία *objfunc*, η οποία και υπολογίζει την συνάρτηση καταλληλότητας από την αποκωδικοποιημένη παράμετρο *χ*.

ΜΕΡΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΩΝ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ*Βιολογική κυτταρική προσομοίωση*

Ο Rosenberg(57), προσομοίωσε έναν πληθυσμό μονοκύτταρων οργανισμών σε μία απλή βιοχημική μορφολογία. Αυτός προσομοίωσε μία πεπερασμένου μήκους ρίγα με ένα ζευγάρι χρωμοσώματων. Στις έρευνες του, το μήκος της ρίγας περιοριζόταν στα 20 γονίδια και με μέγιστο τους 16 αλληλόμορφους ανά γονίδιο. Επίσης όρισε ως χημική συγκέντρωση την ποσότητα x_j και ως επιθυμητή χημική συγκέντρωση την ποσότητα \hat{x}_j . Επίσης καθόρισε σαν ιδιότητα, μία ομάδα επιθυμητής χημικής συγκέντρωσης. Η σύζευξη και η επιλογή καθορίστηκε με βάση την παρακάτω συνάρτηση (antifitness function)

$$f_i = \sum_j (x_j - \hat{x}_j)^2$$

Αναγνωριστικό σχέδιο Cavicchio.

Ο Cavicchio χρησιμοποίησε τους γενετικούς αλγορίθμους σε δύο προβλήματα τεχνητής νοημοσύνης. Σε πρόβλημα αναγνώρισης και πρόβλημα επιλογής. Ουσιαστικά αυτός χρησιμοποίησε γενετικούς αλγορίθμους σε ένα πρόβλημα αναγνώρισης σχεδίου. Αρχίζοντας, υιοθέτησε το αναγνωριστικό σχέδιο του Bledsoe & Browning με 625 εικονοστοιχεία (πίξελ), όπου ένα πίξελ είναι δυαδικό και μπορεί να ξεχωρίσει μεταξύ μιάς φωτεινής και μίας σκοτεινής σκιάς. Ομάδα συγκεκριμένων μορφολογικών ανιχνευτών επιλέγονται όπου και κάθε ανιχνευτής είναι ο ίδιος μια υποομάδα πίξελ. Κατά την διάρκεια της εκπαιδευτικής φάσης, γνωστές εικόνες παρουσιάζονται στην αναγνωριστική μηχανή και λίστα από ανιχνευτές αποθηκεύονται και συνδεονται με τις εικόνες αυτές. Κατά την διάρκεια της αναγνωριστικής φάσης, κάποια άγνωστη εικόνα εισάγεται στην αναγνωριστική συσκευή και εν συνεχεία, μία λίστα τάξης βαθμολογημένων ονομάτων δημιουργείται για αυτήν την άγνωστη εικόνα. Ο Cavicchio επέτρεψε περίπου 110 ανιχνευτές ανα συσκευή με 2- 6 πίξελ ανα ανιχνευτή. Τα χρωμοσώματα (ταινίες), κωδικοποιήθηκαν ως εναλλακτικές ομάδες θετικών και αρνητικών αριθμών. Για παράδειγμα, στο σχήμα κωδικοποίησης, στο χρωμόσωμα

+5 +372 +9 -518 -213 -35 -76 +44 +348

τα 3 πρώτα πίξελ αφορούν τον πρώτο ανιχνευτή, τα 4 επόμενα τον δεύτερο ανιχνευτή κτλ. Τέλος θα πρέπει να αναφέρουμε ότι επέτρεψε να γίνεται αναστροφή, ανασυνδυασμός σε δύο σημεία καθώς και ενδοχρωμοσωμιακή διπλοειδία.

Ο Hollstien και η βελτιστοποίηση της συνάρτησης. (56)

Ο Hollstien ενδιαφέρονταν κυρίως για την βελτιστοποίηση συναρτήσεων με δύο μεταβλητές $z=f(x,y)$ χρησιμοποιώντας την κυριαρχία, την διασταύρωση, μετάλλαξη και πολυάριθμα άλλα σχήματα για την παραγωγή απογόνων.

Πιο συγκεκριμένα ασχολήθηκε

-τον έλεγχο των γονέων(και πιο συγκεκριμένα με το έλεγχο καταλληλότητας των απογόνων που προέρχονται από τους γονείς)

-την επιλογή των ατόμων δηλαδή την καταλληλότητα κάθε ατόμου ξεχωριστά προκειμένου να χρησιμοποιηθεί ως γονέας

-την επιλογή της οικογένειας δηλαδή τον έλεγχο της καταλληλότητας όλης της οικογένειας και για όλα τα μέλη της

-επιλογή εντός της οικογένειας (καταλληλότητα των ατόμων μέσα στην οικογένεια η οποία και ελέγχει την επιλογή των γονέων για παραγωγή απογόνων

-συνδυαστική επιλογή. Όταν χρησιμοποιούνται δύο ή και περισσότερες μέθοδοι

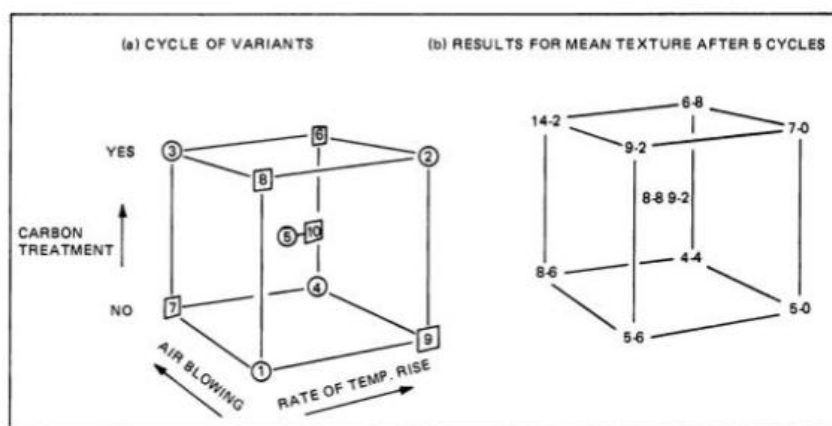
Για τον σκοπό αυτό υιοθέτησε 8 μεθόδους

1. Όλα τα ενήλικα είναι ικανά να προβούν σε σύζευξη με άλλα ενήλικα το ίδιο-random mating
2. Οι σχετιζόμενοι γονείς επιλέγονται από πρόθεση-inbreeding
3. Ένα «πολύτιμο» ενήλικο μαζί με απόγονο του επιλέγονται με την σειρά τους ως γονείς-line breeding
4. Άτομα με αξιοσημείωτα διαφορετικά φαινοτυπικά χαρακτηριστικά επιλέγονται ως γονείς-outbreeding
5. Ένα άτομο ζευγαρώνει με τον εαυτό του(self fertilization)
6. Μία κλωνοποίηση ατόμου συμβαίνει(clonal propagation)
7. Άτομα που μοιάζουν μεταξύ τους ζευγαρώνουν(positive assertive mating)
8. Άτομα που δεν ταιριάζουν μεταξύ τους ζευγαρώνουν(negative assertive mating)

Για να ερευνήσει τα αποτελέσματα, προσομοίωσε διαφορετικούς συνδυασμούς από τις 5 επιλογές και τις 8 στρατηγικές, σε 14 συναρτήσεις με δύο μεταβλητές. Σε όλες τις δοκιμές, οι ταινίες κωδικοποιήθηκαν ως 16-bit δυαδικές ταινίες.

Ο Βox και ο εξελικτικός χειρισμός.

Αυτή η μέθοδος αποτελεί λιγότερο έναν αλγόριθμο και περισσότερο μία τεχνική διαχείρισης. Ο σκοπός αφορά στην χρήση πειραμάτων προκειμένου να βελτιώσουμε ορισμένες λειτουργικές μετρήσεις. Για την ανάδειξη του σχήματος, παρατέθηκε ένα παράδειγμα μίας διαδικασίας που εξαρτάται από 3 μεταβλητές. Το ποσοστό της αύξησης της θερμοκρασίας, την επεξεργασία του άνθρακα και την πίεση του αέρα. Ένας υπερκύβος δημιουργήθηκε γύρω από το σημείο λειτουργίας και ένα συστηματικό σχέδιο επισκεψιμότητας των κορυφών του υπερκύβου. Εάν υπήρχε σημαντική βελτίωση από την επισκεψιμότητα κάποιων γειτονικών σημείων τότε κάποιος άλλος υπερκύβος δημιουργούνταν.



Σχήμα 33°. Παράδειγμα απόδοσης εξελικτικού χειρισμού

Βελτιστοποίηση της συνάρτησης

Η εργασία του DeJong(58), ενδιαφέρονταν ιδιαίτερα για την δομή του σχήματος δεδομένων, το σχήμα των αλγορίθμων και τον έλεγχο του συστήματος λειτουργίας των υπολογιστή. Επιπλέον αναγνώρισε την σημασία του ελεγχόμενου πειράματος. Ήταν αυτές οι απλοποιήσεις που επέτρεψαν την πραγματοποίηση των διάφορων πειραμάτων και τη βάση για την μελέτη και τις εφαρμογές των γενετικών αλγορίθμων. Ο DeJong δημιούργησε ένα ελεγχόμενο περιβάλλον πέντε προβλημάτων σε μία συνάρτηση ελαχιστοποίησης. Φρόντισε να δημιουργήσει συναρτήσεις με τα παρακάτω χαρακτηριστικά

- Συνεχής /ασυνεχής
- Κυρτές /μη κυρτές
- Μονοτροπικές/πολυτροπικές
- Τετραγωνικές/μη τετραγωνικές
- Μικρής και μεγάλης διάστασης
- Ντερτεμινιστικές/στοχαστικές

Για να εκτιμηθεί η αποτελεσματικότητα των διάφορων γενετικών αλγορίθμων, ο DeJong έθεσε δύο μέτρα ένα για την μέτρηση της σύγκλισης και ένα για την τρέχουσα μέτρηση της απόδοσης. Επίσης έθεσε τα ονόματα των on-line και off-line εφαρμογών με την έννοια ότι κάποιες μετρήσεις συναρτήσεων μπορούν να σωθούν και να χρησιμοποιηθούν μετά. Αντιθέτως σε εφαρμογές on-line δεν υπάρχει η πολυτέλεια και οι εκτιμήσεις συναρτήσεων αποκτώνται κατά την διάρκεια της εκτέλεσης του πειράματος. Στην μελέτη του, ο DeJong, όρισε την on-line απόδοση ως $\chi_e(S)$ της στρατηγικής s στο περιβάλλον e ως εξής

$$\chi_e(s) = 1/T \sum_t f_e(t)$$

Όπου $f_e(t)$ αποτελεί την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης e στην δοκιμή t . Με άλλα λόγια η

on-line απόδοση είναι ο μέσος όρος όλων των εκτιμήσεων των συναρτήσεων συμπεριλαμβανομένου και της τρέχουσας δοκιμής. Η off-line απόδοση δίνεται από την σχέση

$$\chi_e^*(s) = 1/T \sum_t^T f_e^*(t)$$

$$f_e^*(t) = \text{best} \{f_e(1), f_e(2) \dots \dots f_e(t), \}$$

Οι πέντε εξισώσεις του De Jong φαίνονται στον παρακάτω πίνακα

Function Number	Function	Limits
1	$f_1(x_i) = \sum_i^5 x_i^2$	$-5.12 \leq x_i \leq 5.12$
2	$f_2(x_i) = 100(x_1^2 - x_2)^2 + (1 - x_1)^2$	$-2.048 \leq x_i \leq 2.048$
3	$f_3(x_i) = \sum_i^5 \text{integer}(x_i)$	$-5.12 \leq x_i \leq 5.12$
4	$f_4(x_i) = \sum_i^{50} ix_i^4 + \text{Gauss}(0,1)$	$-1.28 \leq x_i \leq 1.28$
5	$f_5(x_i) = 0.002 + \sum_{j=1}^{25} \frac{1}{j + \sum_{i=1}^2 (x_i - a_{ij})^6}$	$-65.536 \leq x_i \leq 65.536$

Ο DeJong θέλησε να ερευνήσει και τις διακυμάνσεις σε αυτό που ονομάζουμε γενετικό αλγόριθμο. Άρχισε με το στάδιο R₁ το οποίο και περιλαμβάνει τους ανιχνευτές που είναι υπεύθυνοι για

1. Επιλογή με την μέθοδο της ρουλέτας
2. Απλή διασταύρωση
3. Απλή μετάλλαξη

Όλοι οι παράμετροι χρησιμοποιήθηκαν σε διαδοχικούς πληθυσμούς δυαδικών σειρών οι οποίες και κωδικοποιήθηκαν ως δυαδικοί ακέραιοι.

Ο DeJong θεωρούσε ότι το σχέδιο R₁ δεν ήταν ένα απλό σχέδιο αλλά μία ομάδα σχεδίων που εξαρτιόνταν από 4 παραμέτρους

N=μέγεθος πληθυσμού

P_c=πιθανότητα διασταύρωσης

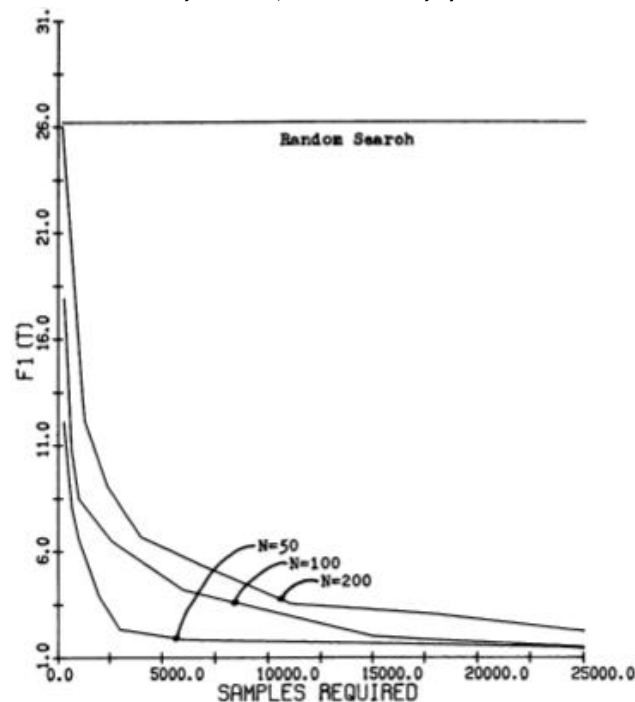
P_m=πιθανότητα μετάλλαξης

G=χάσμα γενεών.(Ορίζει τους αλληλοεπικαλύπτομενους πληθυσμούς)

G=1 μη αλληλοεπικαλύπτομενοι πληθυσμοί

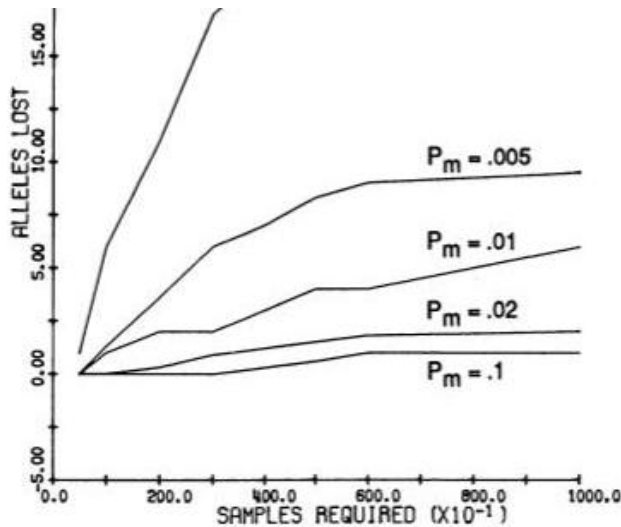
0<G<1 αλληλοεπικαλύπτομενοι πληθυσμοί.

Στα πρώτα στάδια της μελέτης του, αυτό που θεώρησε τη διακύμανση κάθε μίας από τις GA παραμέτρους πρώτα ατομικά και εν συνεχεία σε συνδυασμούς μεταξύ τους, σε μία πρώτη εξίσωση F_1 , μία χαλαρή τετραγωνική συνάρτηση με τρεις μεταβλητές. Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των πειραμάτων για το μέγεθος του πληθυσμού στην συνάρτηση F_1 . Όπως είναι αναμενόμενο, οι μεγάλοι πληθυσμοί οδηγούν σε καλύτερες αποδόσεις offline εξαιτίας των περισσότερων διαφοροποιημένων σχημάτων που είναι διαθέσιμα. Από την άλλη, οι μικρότεροι πληθυσμοί έχουν την ικανότητα να αλλάζουν πιο γρήγορα και ως εκ τούτου, να παρουσιάζουν καλύτερη online απόδοση.



Σχήμα 34°. επίδραση του μεγέθους πληθυσμού στην απόδοση on line του plan R1 της συνάρτησης F_1 (De Jong 1975).

Επίσης για να μειώσει την πιθανότητα πρόωρης απώλειας αλληλομόρφων, η αύξηση του ποσοστού μετάλλαξης προτείνεται ως μία μέθοδος προκειμένου να διατηρηθεί ικανή διαφορετικότητα για συνεχή βελτίωση. Ο De Jong βέβαια έδειξε ότι η αύξηση του ποσοστού των μεταλλάξεων δεν είναι πανάκεια για την αύξηση της ποικιλομορφίας όπως δείχνει και το παρακάτω σχήμα και ότι ακόμα με $n=50$, $pc=1.0$, $G=1.0$ η αύξηση του ποσοστού μετάλλαξης μειώνει τον αριθμό των αλληλομόρφων.



Σχήμα 35° . η επίδραση του ποσοστού μετάλλαξης στην απώλεια αλληλομόρφων του R₁ στην συνάρτηση F₁.

Για την βελτισιοση της απόδοσης του αλγορίθμου ο De Jong πρότεινε πέντε μοντέλα για το στάδιο R₁ όπου και επιγραμματικά τα αναφέρουμε

- R₂=ελιτιστικό μοντέλο
- R₃=μοντέλο αναμενόμενης τιμής
- R₄=μοντέλο ελιτιστικής αναμενόμενης τιμής
- R₅=μοντέλο παράγοντα συνωστισμού
- R₆=μοντέλο γενικευμένης διασταύρωσης

Εξειδικευμένες τεχνικές στην γενετική έρευνά

Θεωρούμε ορισμένα εργαλεία όπως είναι η κυριαρχία , η αντιστροφή, η ενδοχρωματοσωματική διπλοειδία , η απόρριψη, η μεταφορά και ο διαχωρισμός. Επίσης γίνεται εισαγωγή και της εξειδικευμένης εκμετάλλευσης και εξειδίκευσης , των περιορισμών σύζευξης, των συναρτήσεων διαχωρισμού και της μετανάστευσης.

Διπλοειδία. Η φύση περιλαμβάνει πολλούς απλοειδείς οργανισμούς και αποτελεί την απλούστερη μορφή ζωής. Ωστόσο όταν η φύση αποφάσισε να δημιουργήσει πιο πολύπλοκους οργανισμούς όπως τα φυτά και τα ζώα, θα έπρεπε να δημιουργήσει μία πιο σύνθετη χρωμοσωμική δομή, πχ το διπλοειδές ή πολυπλοειδές χρωμόσωμα, κάθε ένα από τα οποία περιείχε πληροφορίες για τις ίδιες λειτουργίες. Έτσι πχ έχουμε μία χρωμοσωμική δομή από διαφορετικούς αλληλόμορφους

AbCDe
aBCde

Κάθε θέση αναπαριστά και έναν αλληλόμορφο που στην φύση χαρακτηρίζει κάποιο φαινοτυπικό χαρακτηριστικό. Ένα χαρακτηριστικό ονομάζεται κυρίαρχο εάν κυριαρχεί και εκφράζεται σε σχέση με κάποιους άλλους αλληλόμορφους. Συνήθως σε ένα χρωμόσωμα, τα κεφαλαία γράμματα είναι κυρίαρχα και τα μικρά ονομάζονται υπολειπόμενα.

AbCDe → ABCDe
aBCde

Έτσι κατά κάποιον τρόπο, η διπλοειδία ή η πολυπλοειδία παρέχει έναν μηχανισμό για την επαναφορά των αλληλομόρφων και των συνδυασμών αυτών, οι οποίοι προηγουμένως υπήρξαν απαραίτητοι και η κυριαρχία παρέχει τα εργαλεία για την προστασία αυτών των αλληλομόρφων από την επιβλαβή επιλογή σε ένα εχθρικό περιβάλλον. Χαρακτηριστικό φυσικό παράδειγμα είναι η πληθυσμιακή ισορροπία της πράσινης κάμπιας στην Μεγάλη Βρετανία, κατά την διάρκεια της βιομηχανικής επανάστασης. Η άγρια μορφή αυτού του λεπιδόπτερου είχε άσπρα φτερά με μαύρες κηλίδες. Πρίν από τη βιομηχανική επανάσταση, αυτός ο χρωματισμός ήταν ένα τέλειο καμουφλάζ εναντίον των διάφορων εχθρών. Στα μέσα του 19^{ου} αιώνα, μαύρες μορφές της κάμπιας εμφανίστηκαν σε γειτονικές περιοχές και μελέτες έδειξαν ότι αυτές οι μορφές ήταν πιο κυρίαρχες στο καινούριο περιβάλλον. Αποδείχθηκε δε ότι οι καινούριες μορφές ήταν πιο επικρατές στο καινούριο περιβάλλον.

Η μελέτη του Hollstien(59), έδειξε την διπλοειδία ως ένα εξελικτικό κυριαρχικό μηχανισμό δηλαδή στην πραγματικότητα περιέγραψε δύο απλούς μηχανισμούς κυριαρχίας και εν συνεχεία χρησιμοποίησε τον απλούστερο από αυτούς στην βελτιστοποίηση. Στο πρώτο σχήμα, κάθε γονίδιο περιγράφεται από 2 παραλλαγές, ένα τροποποιητικό και ένα λειτουργικό. Το λειτουργικό γονίδιο παίρνει τιμές από 0 έως 1 ενώ το τροποποιητικό γονίδιο παρουσιάζεται με τα γράμματα M, m(modify). Στο παρακάτω σχήμα, οι αλληλόμορφοι ο ήταν κυρίαρχοι όταν υπήρχε τουλάχιστον ένας M αλληλόμορφος. Έτσι έχουμε το παρακάτω σχήμα.

	0M	0m	1M	1m
0M	0	0	0	0
0m	0	0	0	1
1M	0	0	1	1
1m	0	1	1	1

Σχήμα 36^ο. αναπαράσταση γονιδίου με την μορφή 2 παραλλαγών και με φαινόμενα κυριαρχίας

Ο Brindle(1981)(60), παρουσίασε πειράματα για την επίδραση αριθμών σχημάτων κυριαρχίας και της συνάρτησης βελτιστοποίησης. Ουσιαστικά αυτός θεώρησε τα παρακάτω σχήματα

- Τυχαία, προσαρμοσμένη και ολική κυριαρχία
- Συνολική κυριαρχία
- Επιλογή τυχαίου χρωμοσώματος
- Κυριαρχία του καλύτερου χρωμοσώματος
- Κυριαρχία ντετερμινιστική, μεταβλητή και συνολική
- Απλοειδείς έλεγχοι της διπλοειδούς κυριαρχίας

Τελευταίες έρευνες έχουν επικεντρωθεί στον ρόλο της κυριαρχίας και της διπλοειδίας σαν μηχανισμούς και σαν δομές αναστολής αλλά και στην σύγκριση της απόδοσης των απλοειδών και των διπλοειδών γενετικών αλγορίθμων.

Ανάλυση κυριαρχίας και διπλοειδίας στην έρευνα των γενετικών αλγορίθμων

Για να καταλάβουμε το αποτέλεσμα της διπλοειδίας και της κυριαρχίας, πρώτα θεωρούμε πώς αυτά αλλάζουν τις προσδοκίες. Ο αριθμός των σχημάτων H που θα βρίσκονται στην επόμενη γενεά σχετίζεται με τον αριθμό των ατόμων στον τωρινό πληθυσμό. Πιο συγκεκριμένα,

$$M(H, t+1) \geq m(H, t)(f(H)|f)[1 - p_c(d(H)|l - 1) - o(H)p_m]$$

Όπου p_c , p_m είναι οι πιθανότητες διασταύρωσης και μετάλλαξης αντιστοίχως, $f(H)$, είναι η συνάρτηση καταλληλότητας του σχήματος, f είναι η μέση τιμή των συναρτήσεων καταλληλότητας όλου του πληθυσμού, $d(H)$ είναι το καθορισμένο μήκος του σχήματος και $o(H)$, είναι η σειρά του σχήματος ή αλλιώς ο αριθμός των καθορισμένων θέσεων. Η εξίσωση αυτή αποτελεί μία ακριβή περιγραφή της ανάπτυξης ή της μείωσης των σχημάτων εάν αναγνωρίσουμε τη επίδραση της κυριαρχίας και της έκφρασης των αλληλομόρφων στο $f(H)$. Η διαφορά αυτή γίνεται πιο έντονη αν διαχωρίσουμε το φυσικό σχήμα H από το εκφραζόμενο σχήμα H_e . Με άλλα λόγια, ένα πραγματικό ή φυσικό σχήμα H μπορεί ή δεν μπορεί να εκφράζεται, εξαρτώμενο από την κατάσταση της κυριαρχίας και τον τωρινό ομόλογο του. Αυτό με την σειρά του απαιτεί την τροποποίηση του σχήματος ανάπτυξης σε

$$M(H, t+1) \geq m(H, t)(f(H_e)|f)[1 - p_c(d(H)|l - 1) - o(H)p_m]$$

Στην περίπτωση ενός πλήρως κυριαρχικού σχήματος H , η κατά μέσο όρο συνάρτηση καταλληλότητας του φυσικού σχήματος είναι ίση με την αναμενόμενη συνάρτηση καταλληλότητας στο εκφραζόμενο σχήμα

$$f(H) = f(H_e)$$

Φυσικά, σε ένα κυρίαρχο σχήμα H η ελπίδα είναι ο μέσος όρος της φυσικής έκφρασης του σχήματος να είναι ίσος ή μεγαλύτερος με τον μέσο όρο της κανονικής φυσικής κατάστασης του σχήματος.

$$f(H) \geq f(H_e)$$

Ας θεωρήσουμε την απλή περίπτωση όπου δύο εναλλακτικά σχήματα μπορούν να εκφραστούν, ένα κυρίαρχο και ένα υπολλειπόμενο. Φυσικά στην πιο απλή μορφή, αυτό παρουσιάζει δύο αλληλομόρφους σε μία θέση ή πολυθεσιακά σχήματα τα οποία μπορούν να κυριαρχούν μία συγκεκριμένη θέση. Όποια και να είναι η εναλλακτική, η κυρίαρχη εναλλακτική μπορεί να αφορά είτε ομοζυγικούς αλληλομόρφους είτε ετεροζυγικούς, ενώ η υπολλειπόμενη εναλλακτική εκφράζει μόνο ομοζυγικούς αλληλομόρφους. Η ανακατανομή της εξίσωσης ανάπτυξης του σχήματος επιτρέπει τον υπολογισμό του ποσοστού των υπολλειπόμενων αλληλομόρφων σε διαδοχικές γενεές P^t , οι διαδοχικές γενεές. Εάν υποθέσουμε ότι υπάρχουν μόνο δύο εναλλακτικές όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, και ισχύει f_d η τιμή της συνάρτησης καταλληλότητας της κυρίαρχης μορφής, ενώ για την υπολλειπόμενη ισχύει f_r , τότε το ποσοστό ή αλλιώς η πιθανότητα των αναμενόμενων υπολλειπόμενων στην επόμενη γενεά μπορεί να δοθεί από την παρακάτω σχέση

$$p^{t+1} = (p^t K [P^T + r(1 - p^t)]) / ((1 - r)p^t p^t + r)$$

Όπου $r=f_d/f_r$ και K =σταθερά απώλειας διασταύρωσης και μετάλλαξης.

Για την απλοειδή περίπτωση η αντίστοιχη εξίσωση εκφράζεται ως

$$P^{t+1} = P^t \frac{K}{P^t + r(1 - P^t)}$$

Αντιστροφή και άλλοι χειρισμοί αναδιοργάνωσης

Ήδη έχει αναφερθεί ο τρόπος λειτουργίας της αναστροφής με την βοήθεια ορισμένων χειριστών. Επίσης έχουμε ήδη αναφέρει ότι η χρήση αυτής της λειτουργίας μπορεί να οδηγήσει σε πληθυσμούς πολύ πιο δυναμικούς. Ο Bagley το 1967(61) στις προσομοιώσεις που έκανε χρησιμοποίησε χειριστές αναστροφής. Με αυτήν την μέθοδο, δύο σημεία επιλέγονται κατά μήκος του χρωμοσώματος, και αυτό κόβεται σε αυτά τα σημεία ούτως ώστε να γίνει αντιστροφή.

$$A = \begin{array}{c|cccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{array}$$

$$B = \begin{array}{c|cccc} 1 & 2 & 6 & 5 & 4 & 3 & 7 & 8 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array}$$

$$A' = \begin{array}{c|cccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 4 & 3 & 7 & 8 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array}$$

$$B' = \begin{array}{c|cccc} 1 & 2 & 6 & 5 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{array}$$

Σχήμα 37°. παραδείγματα αντιστροφής

Μετά τον Bangley φαίνεται ότι ασχολήθηκαν και άλλοι ερευνητές με το πρόβλημα της αναστροφής όπως είναι ο Cavicchio (1970)(62), ο οποίος χρησιμοποίησε χειριστή αναστροφής χωρίς όρους και διαδοχική διασταύρωση. Με αυτήν την τεχνική, πάντοτε υπάρχει ένα εφικτό χρωμόσωμα. Τα αποτελέσματα ήταν ικανοποιητικά και μάλιστα σε μία ομάδα πειραμάτων που έτρεξε, όπου υπήρχαν υψηλές τιμές αναδιασταυρώσεων και αναστροφών, παρουσιάστηκαν υψηλά ποσοστά αποδόσεων και σύγκλισης.

Εν συνεχεία ο Frantz (1972),(63) στην ερευνά του για την επίσταση στην τεχνητή γενετική, χρησιμοποίησε διάφορες παραλλαγές όσον αφορά τους χειριστές αναστροφής και τους κανόνες ζευγαρώματος με διάφορους βαθμούς ελεγχόμενης μη γραμμικότητας. Μάλιστα χρησιμοποίησε δύο παραλλαγές αναστροφής, την γραμμική και την γραμμική+τελική αναστροφή. Η γραμμική λάμβανε χώρα με ποσοστό 75% ενώ εάν δεν γίνονταν αυτή, τότε θα γίνονταν με γραμμική+τελική αναστροφή με ποσοστό 12,5% στις άκρες της λωρίδας. Η τελευταία αναστροφή, είχε την λογική, να μην διαταραχθούν οι αλληλόμορφοι που βρίσκονται κοντά στο κέντρο της σειράς δυσανάλογα σε σχέση με αυτούς που είναι τοποθετημένοι στο κέντρο. Η αναστροφή έγινε με δύο τρόπους, με συνεχόμενη αναστροφή και με μαζική αναστροφή. Μετά τον Frantz, το 1985 στο Διεθνές Συμπόσιο για τους γενετικούς αλγόριθμους και την εφαρμογή τους, πολλοί ερευνητές όπως πχ ο Davis L(75) περιέγραψαν την ύπαρξη χειριστών αναστροφής και αναδιασταύρωσης οι οποίες ενσωματώνονται σε έναν μόνο χειριστή. Ενώ δηλαδή αυτοί δρουν ανεξάρτητα, είναι παρόμοιοι. Διακρίνονται δε σε χειριστές PMX(μερικώς αντιστοιχισμένος χειριστής αναδιασταύρωσης), χειριστής αναδιασταύρωσης σειράς(OX), και χειριστής κυκλικής αναδιασταύρωσης(CX). Ο πρώτος χρησιμοποιήθηκε στην επίλυση του προβλήματος του πωλητή χωρίς συγκεκριμένο πρόγραμμα.

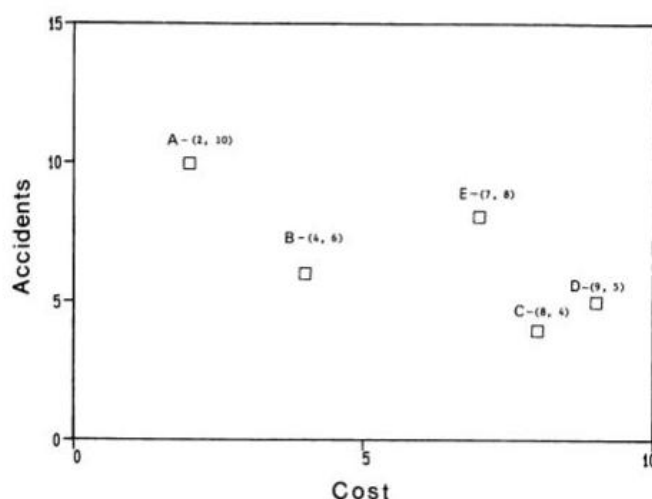
Διαχωρισμός και μετάθεση.

Ο Holland το 1975(64), προτείνει ότι οι πολλαπλοί χρωμοσωμικοί γενότυποι, ίσως είναι χρήσιμοι για την επέκταση των γενετικών αλγορίθμων όταν χρησιμοποιούνται σε συνδυασμό με δύο χειριστικούς μηχανισμούς, την μετάθεση και τον διαχωρισμό. Για να δούμε πώς λειτουργεί ο διαχωρισμός, απλά υποθέτουμε την διαδικασία του σχηματισμού γαμετών όταν έχουμε περισσότερα από ένα χρωμοσώμικά ζεύγη στον γονότυπο. Ωστόσο η διασταύρωση συμβαίνει όπως προηγουμένως. Όμως όταν θέλουμε να σχηματίσουμε έναν γαμέτη, απλά και τυχαία επιλέγουμε έναν από κάθε απλοειδές χρωμόσωμα. Αυτή η τυχαία διαδικασία επιλογής η οποία είναι γνωστή και ως διαχωρισμός, ικανοποιητικά εμποδίζει οποιαδήποτε σύζευξη που ενδεχομένως να υπάρχει μεταξύ των γονιδίων διαφορετικών χρωμοσωμάτων. Φυσικά τα γονίδια τα οποία είναι στο ίδιο χρωμόσωμα παρουσιάζουν μία στενή ή πιο χαλαρή σύζευξη μεταξύ τους η οποία και εξαρτάται από την απόσταση που τα χωρίζει. Ο διαχωρισμός μπορεί να είναι ένας χρήσιμος χειριστής εάν τα σχετικά ανεξάρτητα γονίδια συμβαίνει να είναι τοποθετημένα σε διαφορετικά χρωμοσώματα. Έτσι οποιαδήποτε σύζευξη διαλύεται.

Διπλοποίηση και απαλλαγή. Αποτελούν φορείς χαμηλού επιπέδου για τους τεχνητούς γενετικούς αλγόριθμους. Η ενδοχρωμοσωμική διπλοποίηση είναι μία διαδικασία διπλοποίησης ενός συγκεκριμένου γονιδίου και η τοποθέτηση του κατά μήκος του χρωμοσώματος. Απαλλαγή είναι η απομάκρυνση ενός διπλοειδούς γονιδίου από το χρωμόσωμα. Ο Holland επισήμανε το 1975 ότι αυτές οι μέθοδοι μπορούν να είναι αποτελεσματικοί για την αύξηση του ποσοστού μετάλλαξης. Εάν το ποσοστό μετάλλαξης παραμένει σταθερό και η διπλοποίηση προκαλεί αντίγραφα σε ένα συγκεκριμένο γονίδιο, τότε η πιθανότητα μετάλλαξης για αυτό το γονίδιο πολλαπλασιάζεται με το κ Αντιστρόφως, όταν η απαλλαγή συμβαίνει, το ποσοστό αυτό μειώνεται. Φυσικά αναρωτιέται κανείς εάν αυτή η διπλοποίηση ή η απαλλαγή χρησιμοποιούνται μόνο για την αύξηση του ρυθμού μετάλλαξης πράγμα το οποίο και συμβαίνει. Ωστόσο φαίνεται ότι η διπλοποίηση μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για άλλους σκοπούς όπως είναι η παραγωγή διάφορων μορφολογικών ανιχνευτών.

Πολυκριτηριακή βελτιστοποίηση.

Όλα τα προβλήματα βελτιστοποίησης μας που αναφέραμε προηγουμένως κυρίως εστιάζονται σε θέματα αύξησης της απόδοσης ή βελτίωση της δυναμικότητας. Ωστόσο παρόλο που αυτή η προσέγγιση λειτουργεί ικανοποιητικά σε πολλά προβλήματα, υπάρχουν φορές που πολλά κριτήρια υπάρχουν ταυτόχρονα και δεν θα ήταν σωστό να τα εντάξουμε σε έναν μόνο αριθμό. Ο Schaffer -1984, (65) αναφέρεται στην χρήση των γενετικών αλγορίθμων στην έρευνα του πολυκριτηριακού βέλτιστου. Στην βελτιστοποίηση με ένα μόνο κριτήριο απλώς ψάχνουμε να βρούμε την βέλτιστη τιμή κάποιας συνάρτησης(μέγιστο ή ελάχιστο) Στην πολυκριτηριακή βελτιστοποίηση, αυτό δεν είναι προφανές, δηλαδή αν αρνηθούμε να συσχετίσουμε κάποιες τιμές διαφορετικών κριτηρίων τότε το αποτέλεσμα δεν θα είναι αυτό που πρέπει. Για αυτό το λόγο θα πρέπει να υπολογίζουμε και την ακεραιότητα καθενός από τα κριτήρια μας ξεχωριστά. Πχ στο παρακάτω σχήμα φαίνεται η προσπάθεια μίας επιχείρησης να μειώσει ταυτόχρονα τόσο τον αριθμό των ατυχημάτων αλλά και το κόστος των μηχανημάτων. Πρόκειται για πολυκριτηριακή βελτιστοποίηση αφού θέλουμε να βελτιστοποιήσουμε δύο ιδιότητες. Εάν χρησιμοποιηθούν 5 σενάρια, καθένα από τα οποία περιλαμβάνει δύο τιμές-τον αριθμό των ατυχημάτων και τον κόστος των μηχανημάτων δηλαδή $A=2,10/B=4,6/\Gamma=8,4/\Delta=9,5/E=7,8$ έχουμε το παρακάτω σχήμα



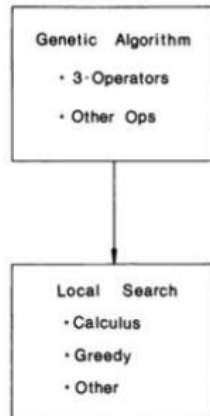
Σχήμα 38°. παράδειγμα πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης

Από το παραπάνω σχήμα φαίνεται ότι το σενάριο B είναι τα καλύτερο διότι και ο αριθμός των ατυχημάτων είναι χαμηλός αλλά και το κόστος των μηχανημάτων επίσης.

Υβριδικά σχήματα.

Η διαδικασία αυτή ουσιαστικά αναφέρεται στην διασταύρωση των γενετικών αλγόριθμων με ορισμένες τεχνικές έρευνας προκειμένου να δημιουργηθεί μία υβριδική ευρετική μηχανή που θα εκμεταλλεύεται το πλεονέκτημα των GA και ταυτόχρονα τα πλεονεκτήματα της άλλης τεχνικής. Δηλαδή για να αναπτύξουμε ένα GA υβρίδιο, απλά διασταυρώνουμε την επιθυμητή ευρετική τεχνική με τον γενετικό αλγόριθμο. Πολλοί ερευνητές έχουν προτείνει αυτόν τον υβριδισμό ωστόσο δεν έχουν δημοσιευτεί αρκετά άρθρα σε αυτόν τον τομέα. Μέθοδοι αναζήτησης που μπορούν να διασταυρωθούν με γενετικούς

αλγόριθμους είναι η ανάπτυξη G-bit improvement(66) αλλά και οι αλγόριθμοι Greedy . Υπάρχουν αρκετοί τρόποι προκειμένου να υβριδοποιηθούν οι γενετικοί αλγόριθμοι. Η προσέγγιση batch όπως φαίνεται και στο παρακάτω σχήμα είναι μία μέθοδος όπου απλώς επιτρέπουμε στον γενετικό αλγόριθμο να επιτύχει σημαντική σύγκλιση και εν συνεχεία η διαδικασία βελτιστοποίησης αναζητά το 5-10% των στοιχείων της τελευταίας γενιάς.

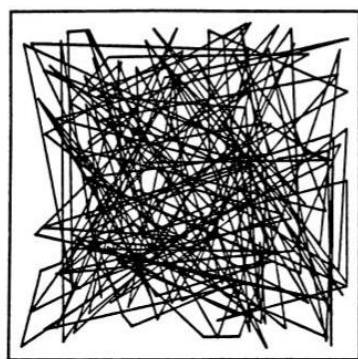


Σχήμα 39^ο . υβριδοποίηση γενετικών αλγορίθμων

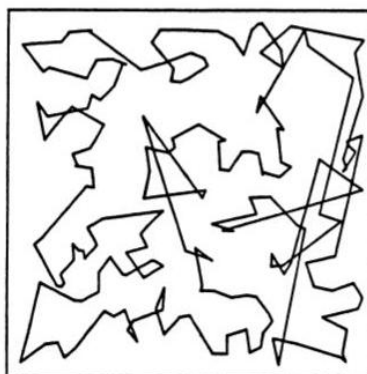
Χειριστές αυξανόμενης γνώσης

Οι υβριδικές τεχνικές είναι ένας τρόπος όπου πληροφορίες μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να επιταχύνουν την αναζήτηση του γενετικού αλγόριθμου. Αυτή η γνώση μπορεί να οδηγήσει τους γενετικούς χειριστές ευθεία σε καλύτερες strings. Δηλαδή κατά κάποιον τρόπο μπορεί να βελτιωθεί η δραστηριότητα χειριστών μετάλλαξης ή διασταύρωσης απλά χρησιμοποιώντας γνώση εξειδικευμένη σε κάποιο πρόβλημα.

Χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι η χρήση χειριστών διασταύρωσης crossover αυξανόμενης γνώσης η οποία και χρησιμοποιήθηκε για το πρόβλημα του περιπλανώμενου πωλητή(TSP –TRAVELLING SALESMAN PROBLEM). Οι Grefenstette, Gopal, Rosmaita, Van Gucht(1985) ανέπτυξαν ένα ευρετικό χειριστή διασταύρωσης για τον TSP. Το αποτέλεσμα είναι ότι για να διασχίσει ο πώλητης 200 πόλεις χωρίς την χρήση του χειριστή διασταύρωσης αυξανόμενης γνώσης έκανε 1475,68 χιλιόμετρα ενώ με την χρήση του συγκεκριμένου χειριστή έκανε 203,46χιλιομετρα.



200 CITIES
DISTANCE = 1475.68
INITIAL POPULATION



200 CITIES
DISTANCE = 283.46
GENERATION 493 24596 TRIALS

σχήμα 40°. επίλυση προβλήματος περιπλανώμενου πωλητή με την χρήση χειριστών crossover αυξανόμενης γνώσης

Γενετικοί αλγόριθμοι και παράλληλοι επεξεργαστές.

Ο Grefenstette(1981) ερευνήσε διάφορες παράλληλες λειτουργίες των γενετικών αλγόριθμων. Ειδικότερα επισήμανε τέσσερις τύπους.

1. Η σύγχρονη master slave
2. Η ημισύγχρονη master slave
3. Η κατανεμημένη ασύγχρονα ταυτόχρονη
4. Δίκτυο

Ο πρώτος τύπος αφορά μία διαδικασία η οποία συντονίζει k-slave επεξεργασίες. Η master διαδικασία ελέγχει την επιλογή, την σύζευξη και την αποτελεσματικότητα των γενετικών χειριστών και οι slaves απλά εκτελούν τις συναρτήσεις. Βασικά μειονεκτήματα είναι ότι σπαταλάτε αρκετός χρόνος και επίσης ο αλγόριθμος δεν είναι αξιόπιστος. Προκειμένου τουλάχιστον να μην σπαταλείται αρκετός χρόνος, υπάρχει και ο δεύτερος τύπος, ο ημισύγχρονος master slave ο οποίος και χαλαρώνει την απαίτηση για σύγχρονη λειτουργία. Στον ασύγχρονο ταυτόχρονο γενετικό αλγόριθμο, k επεξεργαστές εκτελούν μαζί υπολογισμούς λειτουργιών και γενετικές διαδικασίες. Τέλος ο τύπος network, k- ανεξάρτητοι γενετικοί αλγόριθμοι «τρέχουν», με διαφορετικές μνήμες, διαφορετικές γενετικές λειτουργίες και εκτιμήσεις συναρτήσεων.

Μηχανική μάθηση βασισμένη στην γενετική.

Η θεωρητική αναφορά στα συστήματα μηχανικής μάθησης έγινε από τον Holland -1962(80)_ .Λίγα χρόνια, και με την αναγνώριση του σημαντικού ρόλου του ανασυνδυασμού, πολλές προτάσεις ειπώθηκαν για την δημιουργία μιάς αλληλουχίας πολύπλοκων επεξεργαστών σχημάτων. Επίσης στην συνάντηση εκείνη για πρώτη φορά ειπώθηκε η χρήση ενός συστήματος ταξινόμησης. Σε αυτήν την αρχική πρόταση, ο Holland εισήγαγε 4 πρωτότυπα συστήματα. Το πρωτότυπο I (SR), συνέδεε τα διάφορα περιβαλλοντικά σχήματα- conditions με διάφορους action effectors. Το πρωτότυπο II σχεδιάστηκε

προκειμένου να επεκτείνει την δράση του πρωτοτύπου I και πιο συγκεκριμένα προσθέτοντας ορισμένους internal effectors, το πρωτότυπο III βασίστηκε πάνω στα προηγούμενα πρωτότυπα απλώς εισάγοντας πραγματικές προβλέψεις και τέλος το πρωτότυπο IV, δημιουργήθηκε προκειμένου να επεκτείνει τις δυνατότητες των υπολοίπων επιτρέποντας μεγαλύτερο φάσμα ανίχνευσης δεδομένων και μεγαλύτερο φάσμα συμπεριφορών.

Ωστόσο η πρώτη εφαρμογή συστήματος μηχανικής μάθησης βασισμένη στην γενετική έγινε το 1978 από τους Holland J H & Reitman. (67), όπου και δημιουργήθηκε το σύστημα CS-1-Cognitive system Level one. Το σύστημα αυτό μπορούσε να εκτελεί δύο λειτουργίες. Χρησιμοποιούσε ένα σύστημα απόδοσης με ταξινομητές, έναν γενετικό αλγόριθμο για αναπαραγωγή, αναδιασταύρωση, μετάλλαξη και έναν μηχανισμό μάθησης ο οποίος και αντικαταστάθηκε από τον μηχανισμό Bucket brigade.

Κανόνες-Γενετικοί αλγόριθμοι -Κατανομή του συστήματος

Σύστημα ταξινόμησης

Οι κανόνες και το σύστημα ταξινόμησης είναι ένα ιδιαίτερο είδος του συστήματος παραγωγής. Ένα σύστημα ταξινόμησης περιλαμβάνει τα εξής συστατικά, όπως είναι οι κανόνες και το σύστημα μηνυμάτων, η μεριδοποίηση του συστήματος ανταμοιβής και τέλος οι γενετικοί αλγόριθμοι. Οι κανόνες και το σύστημα μηνυμάτων του συστήματος ταξινόμησης είναι ένα ιδιαίτερο είδος του συστήματος παραγωγής. Κατ ουσία είναι ένα υπολογιστικό σχήμα που χρησιμοποιεί κανόνες. Οι κανόνες γενικά ακολουθούν την εξής μορφή

If <condition> then <action>

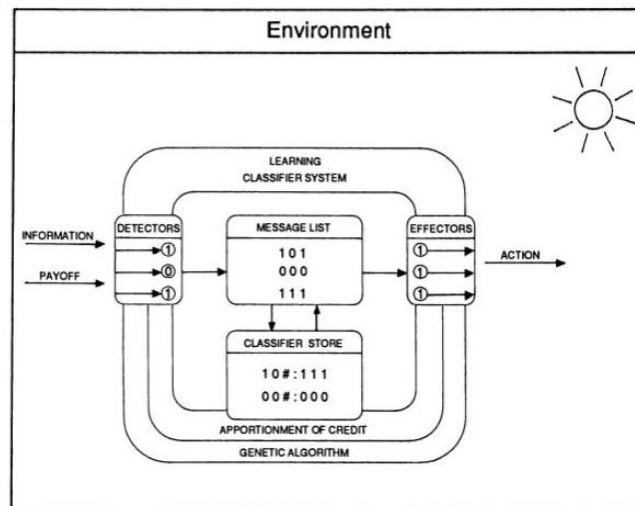
Το παραπάνω έχει την έννοια ότι ο κανόνας παραγωγής εξαρτάται από την ικανοποίηση κάποιων καταστάσεων. Τα συστήματα ταξινόμησης ενεργοποιούνται παράλληλα σε αντίθεση με τα παραδοσιακά εξειδικευμένα συστήματα όπου παρουσιάζουν μία σειριακή ενεργοποίηση ενώ αποτελούν συστήματα που βασίζονται σε κανόνες, που περνούν μηνύματα και μαθαίνουν μέσω των αλγόριθμων τάξης και των γενετικών αλγόριθμων. Συνήθως λειτουργούν σε περιβάλλοντα που παρουσιάζουν ένα ή περισσότερα από τα ακόλουθα χαρακτηριστικά:

- (1) τα περιβάλλοντα αυτά χαρακτηρίζονται συνεχώς από νέα γεγονότα που συνοδεύονται από μεγάλες ποσότητες θορυβωδών ή άσχετων δεδομένων,
- (2) είναι συνεχή και χαρακτηρίζονται, συχνά σε πραγματικό χρόνο, από μεγάλες απαιτήσεις
- (3) έχουν σιωπηρούς ή ανακριβώς καθορισμένους στόχους

Κανόνες και συστήματα μηνυμάτων

Τα συστήματα ταξινόμησης είναι σχεδιασμένα να απορροφούν συνεχώς νέες πληροφορίες από τέτοια περιβάλλοντα, επινοώντας σύνολα ανταγωνιστικών υποθέσεων (εκφρασμένα ως κανόνες) χωρίς να διαταράσσουν σημαντικά τις ήδη αποκτημένες δυνατότητες.

Γενικά στο παρακάτω σχήμα υπάρχει μία απεικόνιση ενός συστήματος ταξινόμησης. Οι κανόνες και το σύστημα μνημάτων αποτελεί την ραχοκοκκαλιά των υπολογισμών. Οι πληροφορίες εισάγονται μέσω των ανιχνευτών σε λίστα μνημάτων όπου και αυτά ενεργοποιούν τους λεγόμενους ταξινομητές. Όταν αυτοί ενεργοποιούνται, ο ταξινομητής στέλνει το μήνυμα στην λίστα μνημάτων. Αυτά τα μνήματα ή θα ενεργοποιήσουν άλλους ταξινομητές ή θα ενεργοποιήσουν τους λεγόμενους effectors. Με αυτό τον τρόπο οι ταξινομητές συνδυάζουν και περιβαλλοντικά στοιχεία αλλά και εσωτερικά στοιχεία τα οποία θα οδηγήσουν στην απόφαση τι θα κάνει το σύστημα. Δηλαδή μπορούμε να πούμε ότι συγχρονίζει την ροή πληροφορίας από το εξωτερικό περιβάλλον στο αποτέλεσμα.



Σχήμα 41°. Ένα σύστημα ταξινόμησης που αλληλεπιδρά με το περιβάλλον του.

Συνήθως το μήνυμα παρουσιάζει την μορφή μίας πεπερασμένου string. Εάν χρησιμοποιήσουμε το δυαδικό αλφάβητο τότε θα έχουμε $\langle \text{condition} \rangle ::= \{0, 1, \#\}^l$ με τον παρακάτω ορισμό

$$\langle \text{message} \rangle ::= \{0, 1\}^l.$$

Επίσης εκτός από το όρο message, έχουμε και τον όρο condition. Τα μνήματα στην message list ίσως ταιριάζουν με ένα ή περισσότερους ταξινομητές. Γενικά για τον ταξινομητή ισχύει

$$\langle \text{classifier} \rangle ::= \langle \text{condition} \rangle : \langle \text{message} \rangle.$$

Κατανομή πιστωτικού αλγορίθμου- ανταμοιβή (bucket brigade). Κάθε ταξινομητής έχει και μία συγκεκριμένη δυναμική. Στην αρχή όλοι οι ταξινομητές έχουν την ίδια δύναμη. Μπορεί να θεωρηθεί και σαν οικονομία πληροφορίας όπου το δικαίωμα να εμπορεύεται πληροφορίες είναι θέμα των ταξινομητών. Αποτελούν δε μία αλυσίδα ενδιαμέση μεταξύ του περιβάλλοντος και του αποτελέσματος. Θα μπορούσαμε να πούμε ότι για τους ταξινομητές ισχύει αυτό που λέμε δημοπρασία και εκκαθάριση.

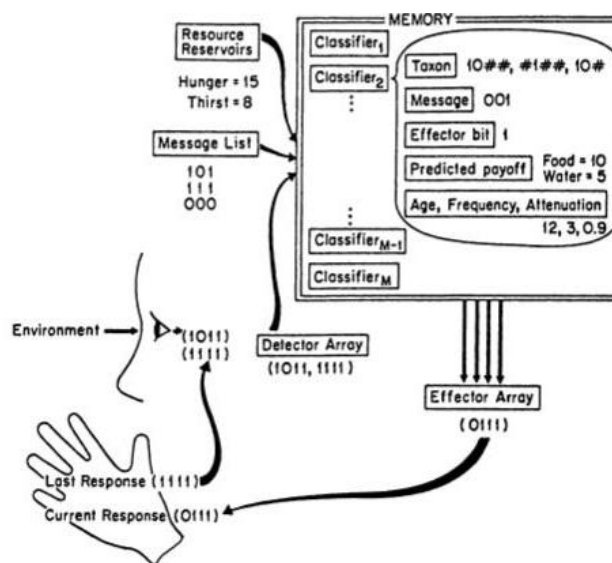
Κατά την διάρκεια ενός κύκλου, όλα τα μνήματα συνδυάζονται με τους ταξινομητές. Κάθε συνδυασμός μνήματος και ταξινομητή προσφέρει προσφέρει κάποιο κέρδος για το ταξινομητή που το λέμε Bid b, και ουσιαστικά ο ταξινομητής αυξάνει την εξειδίκευσή του και την δύναμή του. Οι ταξινομητές με τα

περισσότερα bid τοποθετούν το μήνυμα τους στην λίστα του επόμενου κύκλου αλλά δεν θα πρέπει να πληρώσουν και τα bid τα οποία και κατανέμονται στους ταξινομητές που είναι ενεργοί στον προηγούμενο κύκλο. Για να είμαστε ακόμα πιο αναλυτικοί με τον αλγόριθμο αυτό, ας θέωρησουμε το σχήμα δημοπρασία και εκκαθάριση. Οι ταξινομητές οι οποίοι ταιριάζουν με τα μηνύματα, αρχικά δίνουν τα bid τα οποία ωστόσο τους επιστρέφονται ως ανταμοιβή.

Όσον αφορά την υφή των δεδομένων και του συστήματος ταξινόμησης, αναφορικά για την γλώσσα pascal μιλάμε για μεταβλητές όπως είναι οι strength, bid & ebid, matchflag, classarray, population, porotype, matchlist κτλ

Η ανάπτυξη του CS-1 του πρώτου συστήματος ταξινόμησης

Οι προτάσεις για διάφορους επεξεργαστές σχήματος, της γλώσσας μετάδοσης μαζί με την επίδραση διάφορων σημαντικών στοιχείων από την θεωρία των γενετικών αλγορίθμων, οδήγησαν στην ανάπτυξη του πρώτου συστήματος ταξινόμησης που ακολούθησαν την έκδοση του ΑΝΑΣ. Μία περιγραφή του συστήματος δημοσιεύτηκε από τους Holland και Reitman(83), και ονομάστηκε γνωστικό σύστημα. Σύμφωνα με το σχήμα που ακολουθεί, το σύστημα στηρίζεται σε απλούς αυστηρούς κανόνες, μία πιστωτική κατανομή(περίπου σαν αυτή που είδαμε και με το σύστημα ταξινόμησης bucket brigade) του συστήματος και ενός γενετικού αλγόριθμου.



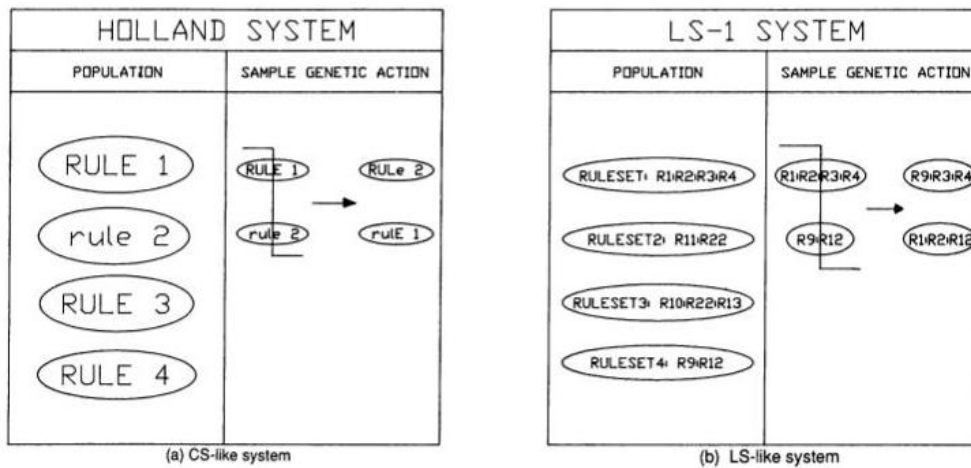
Σχήμα 42°. Η ανάπτυξη του CS-1 του πρώτου συστήματος ταξινόμησης

Η μνήμη ενός ταξινομητή περιλαμβάνει ένα πεπερασμένο αριθμό ταξινομητών. Οι συνθήκες ταξινόμησης στηρίζονται σε ένα τριμερές αλφάβητο {0,1, ≠} όπου το 0 και το 1 είναι τα βασικά σύμβολα και το ≠ είναι παράγοντας αδιαφορίας. Στο σύστημα αυτό ταξινόμησης, οι conditions είναι κατακερματισμένες έτσι ώστε κάθε τμήμα να δίνει προσοχή στα διάφορα εξωτερικά σήματα. Αυτό σημαίνει ότι ένα τμήμα δίνει βάρος στην τελευταία δραστηριότητα, άλλο τμήμα δίνει βάση σε εξωτερικά σήματα και τέλος ένα άλλο μέρος δίνει βάση σε κάθε εσωτερικό μήνυμα από την λίστα. Το σύστημα ταξινόμησης επιδιώκει την μεγαλύτερη απόδοση η οποία και κατανέμεται μέσω του αλγορίθμου bucket brigard, στους ταξινομητές.

Ωστόσο στο σύστημα αυτό ταξινόμησης, η ανταμοιβή και η κατανομή είναι λίγο διαφορετικές. Κατ'αρχήν το σύστημα διατηρεί ξεχωριστές αποθήκες για έναν πεπερασμένο αριθμό πηγών που ανταποκρίνονται με έναν αριθμό αναγκών του συστήματος. Επίσης δεν καταναίμει την ανταμοιβή όπως γίνεται με τον αλγόριθμο bucket brigade. Αντιθέτως η λεγόμενη εποχή, καθορίζεται σαν το χρονικό διάστημα μεταξύ των ανταμοιβών. Για να καταλάβουμε την λειτουργία του έστω οι τιμές της προβλεπόμενης ανταμοιβής του ταξινομητή. Το CS-1 διατηρεί μία ξεχωριστή τιμή για κάθε πηγή που σχετίζεται με το σύστημα. Για να αποφασιστεί ποιοι κανόνες θα ενεργοποιηθούν σε ένα κύκλο, το σύστημα ταξινόμησης παίρνει την τιμή u και τις τιμές d_i που εκφράζουν τις αυξανόμενες ανάγκες από το συνεχώς μειούμενο επίπεδο των πηγών του συστήματος. Ο όρος α ουσιαστικά εκφράζει την τιμή καταλληλότητας για κάθε ταξινομητή. Όσο το ταίριασμα και η ενεργοποίηση κανόνων προχωράει, η τιμή της προβλεπόμενης ανταμοιβής φαίνεται να εξαρτάται από τον χρόνο, την συχνότητα και την απόσβεση. Η παράμετρος χρόνος ουσιαστικά εκφράζει ότι όσο ο ταξινομητής λαμβάνει ανταμοιβή, ο χρόνος του μειώνεται κατά ένα ποσοστό που είναι ίδιο με το ποσό που αυξάνει η χρησιμότητα των κανόνων. Ο όρος συχνότητα αυξάνεται κάθε φορά που ένας κανόνας ενεργοποιείται. Ο όρος απόσβεση είναι ουσιαστικά ένας αριθμός ο α και μειώνεται κάθε φορά που ο κανόνας έχει μία προβλεπόμενη μεγάλη τιμή ανταμοιβής.

$$\alpha = \sum_i d_i \mu_i$$

Το σύστημα αυτό ταξινόμησης δημιούργησε μία πλειάδα απογόνων. Ένας από αυτούς ήταν το σύστημα LS-1 (Smith, 1989, 1983, 1984) (68). Αν και το σύστημα αυτό είχε αυστηρούς κανόνες με γενετικούς χειριστές, αυτός δεν θεωρείται κλώνος του προηγούμενου συστήματος. Η αρχιτεκτονική του συστήματος LS-1, ήταν εντελώς διαφορετική όσον αφορά τους αυστηρούς κανόνες, τις δομές αναζήτησης και τους γενετικούς χειριστές. Η βασική διαφορά τους φαίνεται στο παρακάτω σχήμα. Στο πρώτο διάγραμμα παρουσιάζεται μία αρχιτεκτονική παρόμοια με αυτή του συστήματος CS-1, όπου και φαίνεται πώς οι κανόνες είναι η βασική μονάδα της διαδικασίας και όπου κατά την διάρκεια του υπολογιστικού κύκλου, ο καταμερισμός του πιστωτικού αλγορίθμου είναι αυτός που καθορίζει τους κανόνες ενώ κατά την διάρκεια των κύκλων του γενετικού αλγορίθμου, οι ατομικοί κανόνες ενώνονται και διασταυρώνονται. Αντιθέτως, στη αρχιτεκτονική του LS-1, ομάδες κανόνων διασταυρώνονται, μεταλλάσσονται και διαφοροποιούνται γενετικά προκειμένου να δημιουργήσουν καινούριους, πιθανώς καλύτερους κανόνες σε μελλοντικές χρήσεις. Το σύστημα ταξινόμησης LS-1 είναι μία μίξη από ένα νορμάλ σύστημα παραγωγής και ενός συστήματος ταξινόμησης. Μάλιστα στο σύστημα ταξινόμησης Smith η λειτουργούσα μνήμη αποτελείται από ομάδα δυαδικών στοιχείων καθορισμένου μήκους. Η λειτουργούσα μνήμη υποδιαιρείται στο τμήμα αναγνώρισης και στο τμήμα δεδομένων. Η λειτουργούσα μνήμη αποτελείται από μία ομάδα κανόνων κάθενας από τους οποίους χαρακτηρίζεται ως ταινία πεπερασμένου μήκους.



Σχήμα 43°. Άλλα συστήματα ταξινόμησης

Ένα παράδειγμα του συστήματος ταξινόμησης και από τα μέρη που αποτελείται παρουσιάζεται παρακάτω

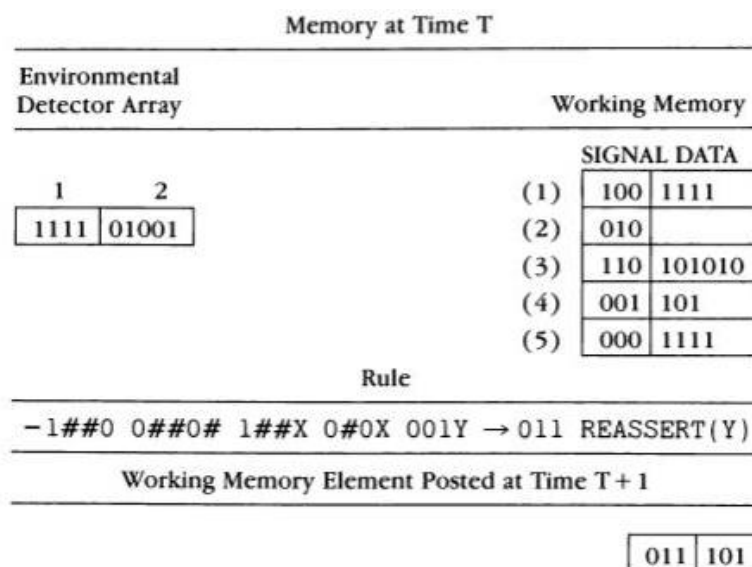
Εστω ότι έχουμε ζεύγη εξωτερικών ανιχνευτών και μία λειτουργούσα μνήμη όπως φαίνεται και στο παρακάτω σχήμα. Ο κανόνας παραγωγής είναι ο παρακάτω

`-1##0 0##0# 1##X 0#0X 001Y → 011 REASSERT(Y).`

Όπου το εξωτερικό τμήμα είναι το

`-1##0 0##0#`

Και το υπολοιπο της αριστερής πλευράς είναι το τμήμα της λειτουργούσας μνήμης.



Το σύστημα ταξινόμησης περιλαμβάνει και αυτό 4 λειτουργίες στον γενετικό αλγόριθμο του, την αναπαραγωγή, την μετάλλαξη, την τροποποιημένη αναδιασταύρωση και την αναστροφή.

Το σύστημα ταξινόμησης CS-1 δημιούργησε το LS -1 και μαζί και τα δύο δημιούργησαν μία μεγάλη οικογένεια άλλων συστημάτων μηχανικής μάθησης βασισμένων στους γενετικούς αλγορίθμους. Τέτοιες προσπάθειες είναι πχ το Booker food and poison learner, Wilson EYE-EYE, ANIMAT-system

Στο σύστημα seeking food and avoiding poisons , ο Booker- Booker L, B(1985)(69), ανακάλυψε τον σύνδεσμο μεταξύ των συστημάτων ταξινόμησης , της φυσικής ευφυΐας και της τεχνητής νοημοσύνης στην διδακτορική του διατριβή. Η μελέτη του αφορούσε έναν δρόμο για περισσότερες προσπάθειες πάνω στην μηχανική μάθηση βασισμένη στους αλγόριθμους και ερευνώντας τρία πράγματα

- Οι σύνδεσμοι μεταξύ των συστημάτων ταξινόμησης και της γνωστικής νοημοσύνης.
- Οι τροποποιήσεις των γενετικών αλγορίθμων
- Οι εφαρμογές των συστημάτων ταξινόμησης βρίσκοντας τροφή και αποφεύγοντας την δηλητηρίαση στο δισδιάστατο χώρο

Υιοθέτησε ένα σύστημα ταξινόμησης με απευθείας ρίζες του CS-1. Το σύστημα χρησιμοποιεί ταξινομητές του τύπου Holland , έναν επιμερισμό τύπου ανταμοιβής bucket brigade και έναν γενετικό αλγόριθμο. Η δομή είναι παρόμοια με αυτή του CS-1 όσον αφορά τους effectors, detectors, message list , classifier store. Ωστόσο το σύστημα Booker, περιλαμβάνει δύο classifier stores και 2 message lists.

Συντονισμός μάτι με μάτι.

Παράλληλα με την ανάπτυξη του συστήματος ταξινόμησης του Booker ο Wilson(Wilson ,S,W(1981),(86) δούλεψε σε ένα σύστημα ταξινόμησης με τον συντονισμό ενός αισθητήρα μίας κινητής βιντεοκάμερας. Ο πρωταρχικός σκοπός του συστήματος ήταν να κεντράρει ένα αντικείμενο στο πεδίο της κάμερας. Η εργασία αυτή επηρεάστηκε δυνατά από την αρχιτεκτονική του CS-1, ωστόσο συμπεριέλαβε μερικές καινοτομίες και κυρίως κάποια πολύπλοκη λογαριθμική χαρτογράφηση. Όρισε ως $w=u+iv$ στο κάθετο επίπεδο και $z=x+iy$ στο οριζόντιο επίπεδο , όπου $i=\sqrt{-1}$. Αρχιτεκτονικά μία διαφορά με το CS-1, ήταν ότι υιοθέτησε μία 4×4 διάταξη τριαδικών χαρακτήρων που μπορεί να μοιάζουν και ως

```
####
##11 :3
###1
####
```

Αν και λεπτομερή αποτελέσματα από αυτά τα πειράματα δεν έχουν δημοσιευτεί, ωστόσο τα πειράματα με αυτόν το μηχανισμό είναι επιτυχή, και το σύστημα έμαθε τους κατάλληλους κανόνες που καθορίζουν την κίνηση της κάμερας και το κεντράρισμα του αντικειμένου σε αυτήν.

Το σύστημα ταξινόμησης ANIMAT.

Ο Wilson(87) ανέπτυξε ένα περιαγόμενο σύστημα ταξινόμησης το οποίο αναζήτησε και ερεύνησε σε δισδιάστατα περιβάλλοντα- δάση, ψάχνοντας τροφή και αποφεύγοντας τα δέντρα. Τα αποτύπωσε σε ένα 18x18 ορθογώνιο πλέγμα, και κάθε δάσος περιλάμβανε ομάδες δέντρων και τροφής που ήταν τοποθετημένα σε ομάδες στον χώρο. Η ταξινόμηση ANIMAT έχει γνώση όσον αφορά το κοντινό περιβάλλον. Για παράδειγμα, ως υποθέσουμε ότι το ANIMAT περιβάλλεται από 2 δέντρα(T), ένα πακέτο τροφής(F) και κενό χώρο(B) όπως εμφανίζεται παρακάτω

```
B T T
B * F
B B B
```

Αυτό το σχέδιο παράγει ένα μήνυμα για το χώρο, ξετυλίγοντας μία συμβολοσειρά, ξεκινώντας προς τα βόρεια και κινούμενο δεξιόστροφα.

```
T T F B B B B B
```

Θέτοντας T=01, F=11, B=00(η πρώτη θέση μπορεί να υποτεθεί ως δυαδικός ανιχνευτής οσμής και η δεύτερη ως δυαδικός ανιχνευτής αδιαφάνειας) το μήνυμα που παράγεται είναι το

```
0101110000000000
```

Το σύστημα ταξινόμησης ANIMAT ανταποκρίνεται σε μηνύματα του περιβάλλοντος χρησιμοποιώντας απλούς ταξινομητές με 16 θέσεις (δηλαδή ανταποκρίνονται σε 16 θέσεις μνημάτων), και 8 actions(0-7). Κάθε δράση ανταποκρίνεται σε κίνηση ενός βήματος σε μια από τις 8 κατευθύνσεις(0=βόρεια, 1=βορειοανατολικά, 2=ανατολικά κτλ).

Για παράδειγμα ο κανόνας

```
0#011#00000#0#:2
```

Ταιριάζει με το μήνυμα στο παράδειγμα παραπάνω και οδηγεί σε μία απλή λογική κίνηση(πχ για ένα σύστημα ταξινόμησης που αφορά την εξεύρεση τροφής), στα ανατολικά όπου υπάρχει εκεί η τροφή. Η μέθοδος ANIMAT υποτίθεται ότι βρίσκει κάθε τροφή που είναι παρούσα στο τετράγωνο. Αυτό το σύστημα περιλαμβάνει έναν αριθμό καινοτομιών για την απόδοση του και τα γενετικά υποσυστήματα.

- Ζεύγη ταιριάσματος,
- Δημιουργία χειριστή
- Μερική αλληλεπίδραση του χειριστή
- Εκτίμηση του χρόνου ανταμοιβής

Η διαδικασία της σύζευξης με γνώμονα την απόδοση των υποσυστημάτων, πιστοποιεί ότι το ζεύγος M, το ζεύγος όλων των ταξινομητών ταιριάζουν με το μήνυμα του εξωτερικού χώρου. Η υποομάδα M που συμφωνεί με την επιλεγόμενη απόφαση, ονομάζεται ζεύγος δραστηριότητας A. Αυτοί οι ταξινομητές

έχουν κάποιες τιμές δυναμικότητας, οι οποίες ωστόσο μειώνονται κατά ένα ποσοστό και αυτή η δεξαμενή των ανταμοιβών διανέμεται ανάμεσα στα μέλη της προηγούμενης ομάδας δράσης.

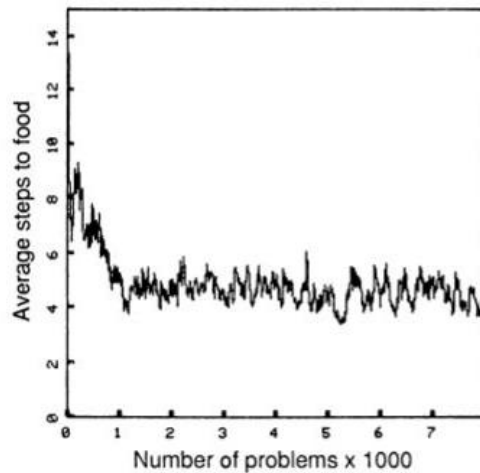
Μία άλλη καινοτομία του συστήματος είναι η χρήση της έννοιας *δημιουργία χειριστή-operator*. Όταν στο σύστημα αυτό ταξινόμησης ANIMAT κάποιο εξωτερικό μήνυμα δεν συγκλίνει με κάποιο ταξινομητή, τότε μπαίνει σε λειτουργία η δημιουργία *operator*. Αυτός ο χειριστής απλά παίρνει ένα αποτύπωμα του εξωτερικού μηνύματος και με συγκεκριμένη πιθανότητα, απλά γενικεύει κάθε θέση του αποτυπώματος (αντικαθιστώντας το 1 ή το 0 με το ≠) και δημιουργώντας έτσι μία ταξινόμηση που εγγυάται ότι θα ταιριάζει το εξωτερικό μήνυμα. Μία τυχαία δράση μετά επιλέγεται (ενας ακέραιος από 0 έως 7), και προσάρταται στην δημιουργηθείσα ταξινομική ομάδα. Ο *operator* μερικής διασταύρωσης αφορά την διασταύρωση ενός αμιγή χειριστή διασταύρωσης και ενός αμιγή χειριστή των σημείων τομής. Κατά την διάρκεια της τομής μίας σειράς, δύο κανόνες με την ίδια δράση επιλέγονται. Για παράδειγμα,

```
1 0 0 # # 0 0 1 : 6
0 1 # 1 1 0 1 # : 6
```

Με τον χειριστή των σημείων τομής, κάθε θέση ασυμφωνίας αντικαθίσταται με το κενό. Για παράδειγμα αυτή η λειτουργία καταλήγει στον παρακάτω κανόνα

```
# # # # # 0 # # : 6
```

Στον παρακάτω σχεδιάγραμμα παρατηρούμε τυπικά αποτελέσματα ενός γύρου του ANIMAT. Πιο συγκεκριμένα, βλέπουμε ότι μέσος χρόνος για την τροφή είναι αρκετά μεγάλος. Στις πρώτες 1000 δοκιμές, η μάθηση είναι αρκετά γρήγορη, με το τελικό μέσο όρο του χρόνου να προσεγγίζει τα 4 βήματα. Για αυτό το δάσος, ο μέσος αριθμός βημάτων είναι 41 και ο ελάχιστος αναμενόμενος χρόνος για την τροφή είναι 2,2 βήματα αν το σύστημα έχει μάθει την διαδικασία. Για να το επιτύχουμε αυτό, πρέπει να έχουμε έναν νοητό χάρτη από δάση έτσι ώστε να ξέρει το σύστημα που να πάει αν περιτριγυρίζεται από κενό. Αυτό το είδος της εσωτερικής μοντελοποίησης μπορεί να αναπτυχθεί μέσα στο πλαίσιο του συστήματος ταξινόμησης. Ωστόσο η δουλειά προς αυτήν την κατεύθυνση είναι αρκετά θεωρητική. Περισσότερη δουλειά θα πρέπει να γίνει πριν αυτοί οι γνωστικοί χάρτες ζητηθούν προκειμένου να βελτιώσουν το πλαίσιο των συστημάτων ταξινόμησης.

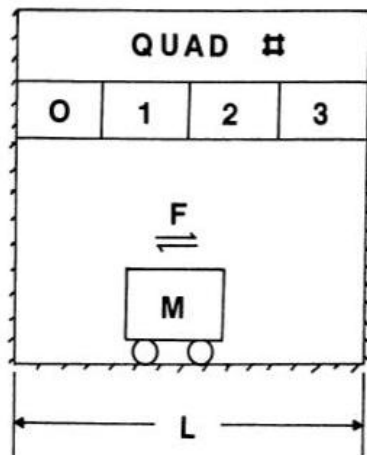


Σχήμα 44°. Το σύστημα ANIMAT απαιτεί μειούμενο αριθμό βημάτων για ανέρευση τροφής σαν διαδικασία μάθησης σε πάνω από 8000 αριθμό προβλημάτων.

Το σύστημα ταξινόμησης pipeline operations

Η έρευνα για αυτό το σύστημα ταξινόμησης διαιρείται σε δύο στοιχεία, την βελτιστοποίηση της λειτουργίας του αγωγού με γενετικό αλγόριθμο και ο έλεγχος εκμάθησης της λειτουργίας του αγωγού με το σύστημα ταξινόμησης. Ο έλεγχος μάθησης της λειτουργίας του αγωγού διαιρείται σε δύο δράσεις

1. Την εργασία που αφορά τον έλεγχο της αδράνειας των αντικειμένων
2. Την εργασία που αφορά τον έλεγχο των αερίων του αγωγού.



Σχήμα 45°. το πρώτο πρόβλημα αυτού του συστήματος ταξινόμησης ήταν η μάθηση ενός αντικειμένου σε μονοδιάστατο χώρο, και χωρίς τριβή, να μείνει στο κέντρο

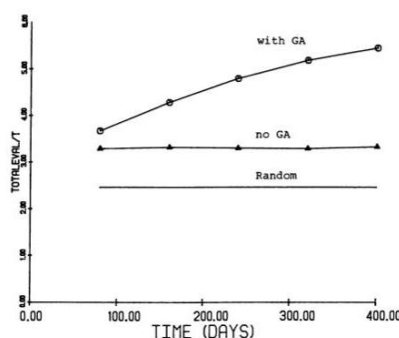
Εδώ, σε αυτό το πρόβλημα, το σύστημα ταξινόμησης προσπαθεί να κεντροποιήσει το χωρίς τριβή, αδρανές υλικό τοποθετώντας κάποια μαγνητική δύναμη δεξιά ή αριστερά. Το πρόβλημα αυτό επιλέχθηκε χάρη στην απλοποιημένη μορφή και επειδή, ο έλεγχος του βέλτιστου χρόνου, ενός χωρίς τριβή

αντικειμένου έχει μία γνωστή λύση. Στο σύστημα ταξινόμησης ενός αγωγού, το πρώτης τάξεως σύστημα με μη γραμμική αντίσταση χρησιμοποιήθηκε για την μοντελοποίηση της δυναμικής ροής του αερίου. Η απαίτηση σε αέριο, διακυμαίνονταν από χρόνο σε χρόνο και από μέρα σε μέρα. Η κατάσταση του περιβάλλοντος μεταδίδονταν στο σύστημα ταξινόμησης από ανιχνευτές. Η πίεση εισόδου και εξόδου και ροής, ο αντίστροφος ρυθμός πίεσης, ο χρόνος της ημέρας και του έτους και η θερμοκρασία ήταν όλα διαθέσιμα στο σύστημα ταξινόμησης όπως φαίνονται στα παρακάτω σχήματα. Επιπλέον, ο αγωγός έχει υποβληθεί σε τυχαία γεγονότα διαρροής όπου σημαντικές ποσότητες ροής έχουν χαθεί από το αντίστροφο άκρο του συστήματος. Οι διαρροές αυτές κάποια στιγμή αντικαθίστανται. Το σύστημα αμείβεται εάν μάθει να λειτουργεί και να ειδοποιεί σωστά. Ο μέσος χρόνος των σκόρ με και χωρίς γενετικούς αλγορίθμους έρχεται σε πλήρη αντίθεση σε σχέση με την τυχαία μετάβαση. Τα αποτελέσματα εξ αρχής, δείχνουν κάπως αντιφατικά αφού το σύστημα ταξινόμησης το οποίο λειτουργεί χωρίς γενετικούς αλγορίθμους κάνει καλύτερη διαχείριση στην σωστή μέτρηση των διαρροών, σε σχέση με το αντίστοιχο που λειτουργεί με γενετικούς αλγόριθμους. Ωστόσο το μυστήριο ξεκαθαρίζει εάν εμείς αναζητήσουμε το ποσοστό των λανθασμένων ειδοποιήσεων, κτλ. Ο κύκλος με γενετικούς αλγορίθμους φαίνεται ότι αποφεύγει αυτή την ανεπιθύμητη συμπεριφορά μαθαίνοντας τον κατάλληλο κανόνα αποφυγής διαρροής, και μαθαίνοντας επίσης πότε πρέπει να ειδοποιήσει και πότε πρέπει να σιωπήσει. Οι απαιτήσεις σε αέριο ποικίλει ανάλογα με το χρόνο του έτους και την ώρα της ημέρας στο σύστημα ταξινόμησης του αγωγού.

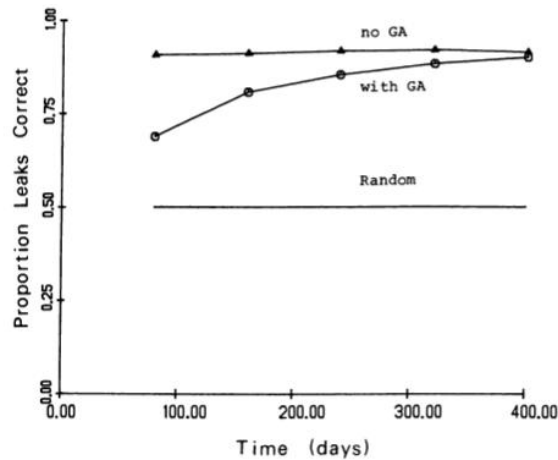
--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

Source: Goldberg (1983).

Σχήμα 46^ο. Πλάνο εξωτερικών μηνυμάτων για το σύστημα ταξινόμησης του αγωγού.

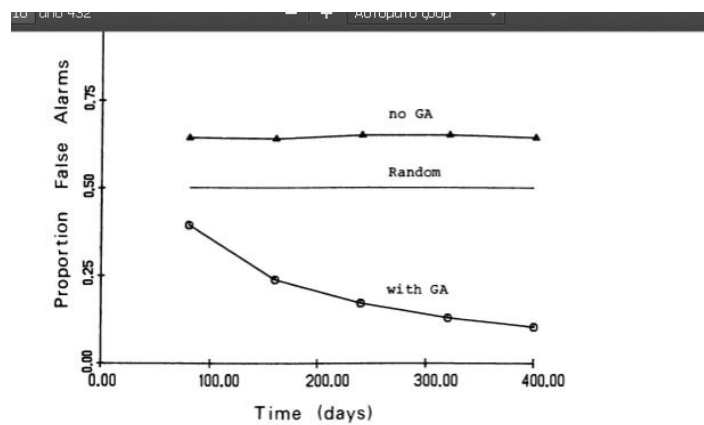


Σχήμα 47°. Κύκλοι διαρροών στο σύστημα ταξινόμησης του αγωγού, συγκρίνοντας το μέσο όρο των σκόρ στο χρόνο. Ο κύκλος με γενετικούς αλγόριθμους υπερéχει αυτού χωρίς γενετικούς αλγόριθμους, ενώ και οι δύο υπερτερούν του τυχαίου περίπατου.



Σχήμα 48°. Το ποσοστό των διαρροών που ειδοποίησαν σωστά σε ένα σύστημα ταξινόμησης ενός αγωγού.

Παρόλο που φαίνεται ότι ο κύκλος χωρίς γενετικούς αλγορίθμους νικάει αυτόν με γενετικούς αλγορίθμους, στο επόμενο σχήμα αυτό ανατρέπεται.



Σχήμα 49° Ποσοστό λανθασμένων ειδοποιήσεων.

Ένα σύστημα ταξινόμησης μαθαίνει μία δύσκολη συνάρτηση *boole*.

Ο Wilson (1986a, b, 1987a), συνέχισε την εργασία του με τα συστήματα ταξινόμησης και ειδικότερα με πειράματα όσον αφορά την εκμάθηση δύσκολων συναρτήσεων Boolean. Υιοθετώντας ένα πρόβλημα των Barto, Andandan, Anderson(1985), ανέπτυξε ένα σύστημα το οποίο και ονόμασε BOOLE και μαθαίνει προβλήματα ιδιαίτερης πολυπλοκότητας όπως πχ το 6- πολυμεταβλητό πρόβλημα το οποίο έχει την μορφή

$$F_6 = a'_0 a'_1 d_0 + a'_0 a_1 d_1 + a_0 a'_1 d_2 + a_0 a_1 d_3,$$

Το σύστημα ταξινόμησης που χρησιμοποιεί BOOLE μοιάζει πολύ με το σύστημα ταξινόμηση ANIMAT, , Το σύστημα χρησιμοποιεί και αυτό απλούς ταξινομητές απλής κατάστασης(condition), και μία δυαδική

δράση. Ο επιμερισμός της ανταμοιβής γίνεται όπως και στην ANIMAT. Ωστόσο εδώ δεν είναι απαραίτητος κάποιος αλγόριθμος bucket brigade διότι κάθε ταξινομητής αμέσως ανταμοιβείται ή και όχι σαν αποτέλεσμα της δράσης του.

Παράλληλα σημασιολογικά δίκτυα στο πλαίσιο ταξινομητών- CL-ONE

Επειδή κατά καιρούς η μηχανική μάθηση βασισμένη στους γενετικούς αλγόριθμους έχουν δεχθεί μεγάλη κριτική όσον αφορά την αδυναμία δύσκολων προβλημάτων, ο Forrest (1982), εισήγαγε υψηλού επιπέδου σημασιολογικά δίκτυα στο πλαίσιο των συστημάτων ταξινόμησης. Κυρίως επικεντρώθηκε στην απόδοση ενός συστήματος ταξινόμησης χρησιμοποιώντας την μέθοδο ανταμοιβής bucket brigade καθώς και γενετικό αλγόριθμο. Έτσι ανέπτυξε ένα είδος μεταγλωτιστή προκειμένου να μπορεί να μεταφράσει τον κώδικα ο οποίος είναι στην γλώσσα του σημασιολογικού δικτύου KL-ONE, στο σύστημα ταξινόμησης. Η Forrest, γεφυρώνει κατά κάποιον τρόπο, τα συστήματα ταξινόμησης με τις ανησυχίες πιο παραδοσιακών ερευνητών της τεχνητής νοημοσύνης και χαρτογραφώντας επιτυχώς την δουλειά των ερευνητών στην format του συστήματος ταξινόμησης, η Forrest, πρόσφερε μία απόδειξη ότι τα συστήματα ταξινόμησης μπορούν να είναι αποτελεσματικά σε περίπλοκα μοντέλα.

5.3.Αυτόματα εκμάθησης στις στρατηγικές σχεδιασμού ελέγχου (από «Ευφυής Υπολογιστική Βελτιστοποίηση»)

Η πρόοδος στην νοημοσύνη έφερε νέες ευκαιρίες και προκλήσεις για τους ερευνητές που αναζητούν νέους τρόπους αντιμετώπισης σύνθετων και αβέβαιων συστημάτων. Στη Μηχανική, πολλά συστήματα είναι πολύ περίπλοκα για να εκπροσωπούνται από ένα ακριβές μαθηματικό μοντέλο, αλλά εξακολουθούν να απαιτούν τη χρήση άλλων προσεγγίσεων για το σχεδιασμό, τη βελτιστοποίηση ή τον έλεγχο της συμπεριφοράς τους. Τα τελευταία χρόνια, αρκετές τεχνικές βασισμένες στην τεχνολογία της πληροφορικής εμφανίστηκαν ως επιτυχημένα εργαλεία για την επίλυση δύσκολων προβλημάτων βελτιστοποίησης τα οποία συχνά δεν αντιμετωπίζονται με παραδοσιακές μεθόδους βελτιστοποίησης. Η παρουσία μη γραμμικοτήτων είναι συνήθως η κύρια πρόκληση. Επιβάλλουν διάφορες συνθήκες στις περισσότερες βιομηχανικές διεργασίες από αυτήν την κατάσταση όπως οι κορεσμοί ή οι νεκρές ζώνες. Από την άλλη πλευρά, το μοντέλο i επιβάλλει επίσης σκληρούς περιορισμούς όταν ένα δεδομένο μαθηματικό μοντέλο δεν μπορεί να αναπαράγει ακριβώς τη συμπεριφορά του. Σύμφωνα με το πλαίσιο ελέγχου, ο σχεδιασμός απαιτεί τη δυνατότητα δημιουργίας παραστάσεων παρόμοιων με μοντέλα καθημερινής ζωής. Με τη σειρά του, αυτό το γεγονός επιτρέπει τη δημιουργία προβλέψεων σχετικά με τον τρόπο με τον οποίο το περιβάλλον θα αντιδράσει σε πολλά σχέδια. Η ικανότητα επιλογής μεταξύ διαφορετικών εναλλακτικών σχεδίων και εκτέλεσης μεταξύ αρκετών ενεργειών έχει εξοικειωθεί, σχεδόν αποκλειστικά με τον άνθρωπο. Ο προγραμματισμός είναι η προσέγγιση που επιτρέπει τη δημιουργία σύνθετων συμπεριφορών που ξεπερνούν την απλή αντίδραση σε αυτό που αισθάνεται. Επιπλέον, ο έλεγχος σχεδιασμού χρησιμοποιεί πληροφορίες σχετικά με το πρόβλημα και το περιβάλλον του, συχνά ενσωματωμένο σε κάποιο τύπο μοντέλου που εξετάζει πολλές επιλογές, επίσης γνωστές ως σχέδια. Επιδιώκει να επιλέξει το καλύτερο σχέδιο για να επιτύχει τους απαιτούμενους στόχους. Ο σχεδιασμός παρέχει επίσης μια πολύ γενική και εύκολη μεθοδολογία για την εφαρμογή. Έχει αξιοποιηθεί εκτενώς σε συμβατικό έλεγχο.. Ωστόσο, όπως προσεγγίζει το ασαφές και εξειδικευμένο σύστημα, είναι ακόμα δυνατή

η ενσωμάτωση των ευρετικών στοιχείων για να καθορίσουμε ποιες είναι οι καλύτερες ενέργειες ελέγχου. Με την ευρεία έννοια, οι προσεγγίσεις σχεδιασμού προσπαθούν να χρησιμοποιήσουν τόσο τις ευρετικές γνώσεις όσο και τις αποφάσεις βάσει μοντέλων για να ασκήσουν έλεγχο. Είναι ο βασικός λόγος για την επιλογή μιας στρατηγικής σχεδιασμού σε ένα απλό σύστημα βασισμένο σε κανόνες.

Ο σχεδιασμός έχει εφαρμοστεί επιτυχώς για την επίλυση αρκετών προβλημάτων μηχανικής(70). Μπορούν να εξεταστούν διάφορες προσεγγίσεις του συστήματος προγραμματισμού ανάλογα με το πρόβλημα και τον αριθμό των σχεδίων που εξετάζονται από τη λύση.

Κλασσικό παράδειγμα είναι η μέθοδος Belief-Desire-Intention (Seow & Sim, 2008) που αποτελεί ένα αποτελεσματικό σχέδιο για τον πεπερασμένο και λογικά μικρό αριθμό σχεδίου, το οποίο δυστυχώς περιορίζει τη χρήση του για έλεγχο. Ο προγνωστικός έλεγχος μοντέλου(71) είναι η προσέγγιση σχεδιασμού που πρόσφατα αναγνώρισε ευρεία αποδοχή για βιομηχανικές εφαρμογές. Η παραγωγή σήματος ελέγχου στη MPC συνεπάγεται την ηλεκτρονική χρήση ενός παραμετρικού μοντέλου εγκατάστασης, με ένα αποτελεσματικό σχέδιο ελέγχου. Οι κύριες τεχνικές σχεδιασμού του MPC περιλαμβάνουν τον έλεγχο αλγορίθμου μοντέλου, τον έλεγχο δυναμικής μήτρας, τον εσωτερικό έλεγχο μοντέλου και τον γενικευμένο προγνωστικό έλεγχο, μεταξύ άλλων (72). Η στρατηγική της MPC είναι, ανά πάσα στιγμή έτοιμη να επιλύσει επί του θέματος ένα βέλτιστο πρόβλημα ελέγχου ανοικτού βρόχου σε ένα πεπερασμένο χρονικό ορίζοντα, λαμβάνοντας μόνο το πρώτο αποτέλεσμα στην ακολουθία ελέγχου. Οι αλγόριθμοι MPC είναι πολύ εύκολα κατανοητοί με πρακτικούς περιορισμούς που συνήθως επιβάλλονται στον αλγόριθμο on-line (73). Η MPC έχει λάβει παγκόσμια προσοχή λόγω της απλής υλοποίησής της σε βιομηχανικές εφαρμογές.

Η αυτόματη μάθηση(LA)(74) είναι μια προσαρμοστική μέθοδος λήψης αποφάσεων που λειτουργεί μέσα σε άγνωστα τυχαία περιβάλλοντα, βελτιώνοντας σταδιακά την απόδοσή της μέσω μιας μαθησιακής διαδικασίας. Το LA είναι πολύ χρήσιμο για τη βελτιστοποίηση των λειτουργιών πολυτροπικών συναρτήσεων, ιδιαίτερα όταν μια τέτοια συνάρτηση είναι άγνωστη και μόνο οι αξιολογήσεις θορύβου είναι διαθέσιμες(75).

Η μέθοδος LA δεν χρειάζεται γνώση του περιβάλλοντος ή οποιαδήποτε άλλη αναλυτική αναφορά στη λειτουργία που πρέπει να βελτιστοποιηθεί. Είναι το κύριο πλεονέκτημά της. Επιπλέον, προσφέρει γρήγορη σύγκλιση για την εκτίμηση διαφόρων παραμέτρων(76).

Το LA έχει χρησιμοποιηθεί για την επίλυση διαφορετικών τεχνικών προβλημάτων σε διάφορα πεδία όπως η αναγνώριση προτύπων, η προσαρμοστική επεξεργασία σήματος ελέγχου και το δίκτυο υπολογιστών. Μάλιστα θεωρείται ότι υπερτερεί έναντι των γενετικών αλγορίθμων λόγω της μεγάλης σύγκλισης. Στην προκειμένη περίπτωση θα χρησιμοποιήσουμε τη αυτοματοποιημένη μάθηση για την ενίσχυση της συνεχούς δράσης (CARLA) ως την επιλεγμένη προσέγγιση αυτόματης μάθησης(77).

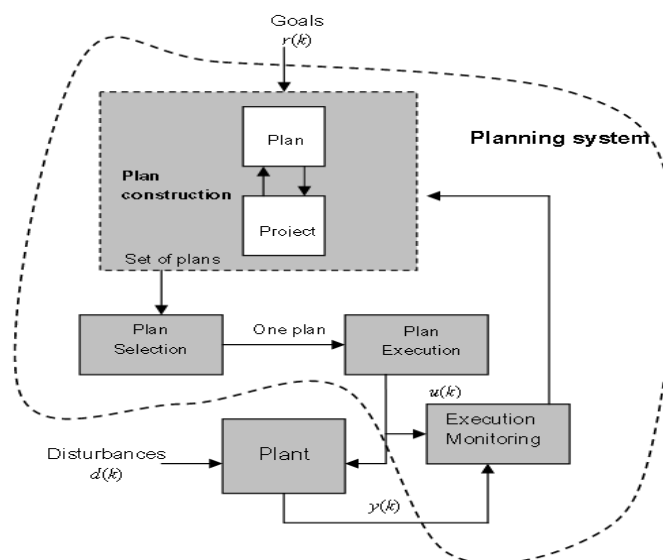
Στρατηγικός σχεδιασμός

Η έννοια του σχεδιασμού είναι κοινά κατανοητή, ακολουθώντας την κοινή λογική, όπως η περίπτωση που ο άνθρωπος σχεδιάζει τις δραστηριότητές του για το Σαββατοκύριακο ή όταν συζητείται μεταξύ τους μια λύση για ένα καθημερινό πρόβλημα. Η λύση προκύπτει συνήθως από μια συλλογή δράσεων που πρέπει να ακολουθηθούν για την επίτευξη συγκεκριμένων στόχων. Μια τέτοια ταξινόμηση δράσης μπορεί να ονομαστεί ως σχέδιο δράσης και μπορεί να εμπίπτει στα ακόλουθα βήματα σχεδιασμού:

1. Προγραμματισμός. Αναφέρεται στην πρώτη αναπαράσταση του προβλήματος που πρέπει να λυθεί. (δηλ. ένα μοντέλο).
2. Καθορισμός στόχων. Είναι απαραίτητο να σχεδιάσουμε και να ορίσουμε την απαιτούμενη συμπεριφορά ή τους γενικούς στόχους.
3. Επιλογή σχεδίου. Λαμβάνοντας υπόψη ότι μερικές φορές οι άνθρωποι απλά αντιδρούν σε καταστάσεις που δεν λαμβάνουν υπόψη τις συνέπειες των πράξεών τους, θα ήταν καλύτερο να αναπτύξουμε πλήρως ένα σχέδιο με την επίτευξη των στόχων.
4. Επιλογή στρατηγικής. Η επιλογή του σχεδίου περιλαμβάνει συνήθως προοπτικές στο μέλλον μέσω ενός μοντέλου. Απαιτεί να εξεταστεί η εκτέλεση μιας σειράς ακολουθιών εργασιών και υπο-στόχων. Απαιτείται ένας αλγόριθμος βελτιστοποίησης για την επιλογή του καλύτερου σχεδίου που πρέπει να ακολουθηθεί λαμβάνοντας ένα μερικό μοντέλο του προβλήματος.
5. Εκτελούμε το σχέδιο. Μετά την επιλογή, πρέπει να αποφασιστεί πώς να εκτελεστεί αυτό το σχέδιο.

Ρύθμιση προγραμματισμού κλειστού βρόχου

Ένα γενικό σύστημα σχεδιασμού μπορεί να ρυθμιστεί στην αρχιτεκτονική ενός τυπικού συστήματος ελέγχου όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα. Σύμφωνα με το γενικό πλάνο επίλυσης ενός προβλήματος, αυτό περιλαμβάνει το ίδιο και το περιβάλλον του. Υπάρχουν έξοδοι $y(k)$ που ουσιαστικά είναι κάποιες μεταβλητές και εξαρτώνται από δράσεις ελέγχου $u(k)$ οι οποίες μπορούν να επηρεάσουν τη φύση του προβλήματος, ορισμένοι θόρυβοι ή αλλιώς αυτό που λέμε διαταραχές $d(k)$ που αντιπροσωπεύουν τυχαία συμβάντα που μπορούν να επηρεάσουν το συγκεκριμένο πρόβλημα και ως εκ τούτου η μετρούμενη μεταβλητή $y(k)$ και ο στόχος $r(k)$ ο οποίος ονομάζεται είσοδος αναφοράς στην συμβατική ορολογία ελέγχου, καθώς αντιπροσωπεύει αυτό που πρέπει να επιτευχθεί. Υπάρχουν προδιαγραφές κλειστού βρόχου για τον καθορισμό των απαιτήσεων απόδοσης και σταθερότητας.



Σχήμα 50°. σύστημα προγραμματισμού κλειστού βρόχου

Γενικά έχουμε

$$y(k+1) = f(x(k), u(k), d(k))$$

όπου το $y(k)$ είναι η έξοδος και το f είναι μια γενικά άγνωστη ομαλή συνάρτηση της κατάστασης $x(k)$, η μετρήσιμη κατάσταση είναι $x(k)$ και η διαταραχή $d(k)$.

$$x(k) = [y(k), y(k-1), \dots, y(k-p), u(k-1), u(k-2), \dots, u(k-q)]^T$$

Όπου P, q δηλώνουν την τάξη του συστήματος. Επίσης το σφάλμα είναι ίσο με

$$e(k) = |r(k) - y(k)|$$

Η τελευταία εξίσωση είναι γνωστή ως σφάλμα παρακολούθησης. Γενικά, ο στόχος είναι να καταστήσει τα σφάλματα παρακολούθησης όσο το δυνατόν μικρότερα, καθώς προσεγγίζει ασυμπτωτικά το μηδέν. Λαμβάνοντας υπόψη το σχέδιο να είναι μια ακολουθία πιθανών εισόδων ελέγχου και το σχέδιο i^{th} μήκους N κατά το χρόνο k , η κατάσταση δομείται ακολούθως

$$u^t[k, N] = u^t(k, 0), u^t(k, 1), \dots, u^t(k, N-1)$$

Ο αλγόριθμος στοχεύει στην ανάπτυξη μιας μεθόδου ελέγχου που βασίζεται στη στρατηγική σχεδιασμού. Ένα μοντέλο καθώς και η μέθοδος βελτιστοποίησης χρησιμοποιούνται για την αξιολόγηση και βαθμολόγηση κάθε σχεδίου (π.χ. MPC). Αυτό με τη σειρά του θα παρέχει μια ποιοτική κατάταξη για κάθε σχέδιο. Το σχέδιο επιλέγεται έτσι (σχέδιο i^*) χρησιμοποιώντας την είσοδο ελέγχου σε κάθε άμεση στιγμή k ως εξής:

$$u^t[k] = u^t(k, 0)$$

Το καλύτερο σχέδιο $u^{i^*}[k, N]$ επιλέχθηκε, χρησιμοποιώντας την πρώτη είσοδο από την ακολουθία ελέγχου ως είσοδο στην εγκατάσταση. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται σε κάθε βήμα του χρόνου. Επίσης, η χρήση ενός αριθμού μεθόδων ελέγχου μπορεί να είναι μια επιλογή για την υλοποίηση του συστήματος σχεδιασμού. Η τρέχουσα κατάσταση και η δεδομένη είσοδος αναφοράς, μπορούν να θεωρηθούν ως "πρότυπο σχέδιο", το οποίο με τη σειρά του αντιπροσωπεύει ένα συγκεκριμένο σχέδιο. Έτσι, ένας αλγόριθμος βελτιστοποίησης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την αξιολόγηση της απόδοσης λαμβάνοντας υπόψη το υπό προσέγγιση μοντέλο της εγκατάστασης, το οποίο πρέπει επίσης να περιλαμβάνει την αβεβαιότητα. Θεωρώντας ότι ένα συνεχές διάστημα για τις παραμέτρους μπορεί να δημιουργήσει ένα άπειρο αριθμό σχεδίων, πρέπει να χρησιμοποιηθεί ένας αλγόριθμος βελτιστοποίησης για την εύρεση του καλύτερου σχεδίου για μια συγκεκριμένη κατάσταση.

Μέθοδος βελτιστοποίησης και μέθοδος επιλογής σχεδίου

Το σύνολο των σχεδίων (στρατηγικών) κουρεύεται μόνο σε ένα που θεωρείται ως το καλύτερο που πρέπει να εφαρμοστεί στην τρέχουσα χρονική στιγμή, καθώς η βελτιστοποίηση είναι πολύ σημαντική για τον προγραμματισμό. Ο συγκεκριμένος τύπος προσέγγισης της βελτιστοποίησης που χρησιμοποιείται για την επιλογή του σχεδίου θα πρέπει να μπορεί να λειτουργεί σε πολυτροπικές συνθήκες, δείχνοντας έναν

εύκολο και γρήγορο υπολογισμό. Οι προηγούμενες απαιτήσεις είναι συνήθως δύσκολο να επιλυθούν μέσω παραδοσιακών αλγορίθμων βελτιστοποίησης, δίδοντας σημασία στην χρήση του LA ως διαδικασίας βελτιστοποίησης.

Μία συνάρτηση κόστους χρησιμοποιείται προκειμένου να διαπιστωθεί το καλύτερο σχέδιο. Η συνάρτηση κόστους δίνεται από την συνάρτηση

$$J(u^t[k, N]) = \omega_1 \sum_{j=1}^N (r(k+1) - y_m^t(k, j))^2 + \omega_2 \sum_{j=1}^N (u^t(k, j))^2$$

Όπου ω_1, ω_2 είναι παράγοντες διαβάθμισης και αφορούν την σημασία από την μείωση του σφάλματος. το καλύτερο σχέδιο μετρίεται από τη παράμετρο $J(u^t[k, N])$.

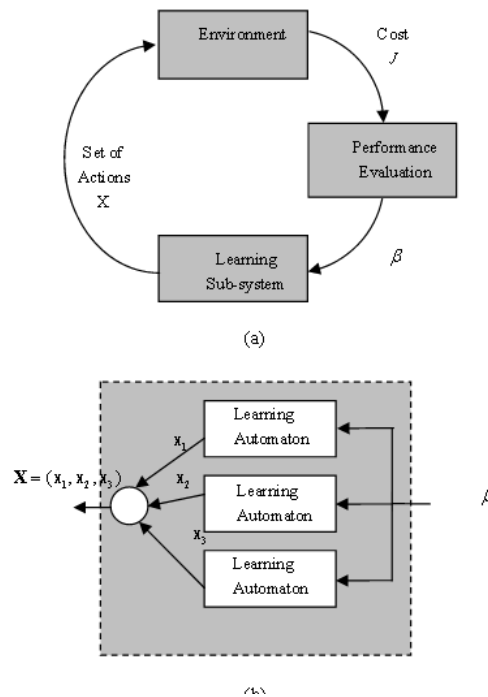
5.4. Αυτόματη μάθηση

Η ιδέα της αυτόματης μάθησης εισήχθη για πρώτη φορά από το πρωτοποριακό έργο του Tsetlin (78). Ενδιαφερόταν για το μοντέλο συμπεριφοράς των βιολογικών συστημάτων και η μετέπειτα έρευνα έχει εξετάσει τη χρήση τέτοιων μεθόδων μάθησης για μηχανικά συστήματα. Παρόλο που η μάθηση LA ή η ενίσχυση αυτής, στοχεύουν στην επίλυση παρόμοιων προβλημάτων, οι μεθοδολογίες και οι αλγόριθμοί τους διαφέρουν σημαντικά. Το LA λειτουργεί επιλέγοντας δράσεις μέσω στοχαστικής διαδικασίας. Τέτοιες ενέργειες λειτουργούν μέσα σε ένα περιβάλλον ενώ αξιολογούνται σύμφωνα με ένα μέτρο της απόδοσης του συστήματος. Το παρακάτω σχήμα δείχνει την τυπική αρχιτεκτονική του συστήματος εκμάθησης. Το αυτόματο επιλέγει πιθανώς μια ενέργεια (X). Τέτοιες ενέργειες λειτουργούν σε ένα περιβάλλον και η λειτουργία αξιολόγησης της απόδοσης παρέχει ένα σήμα ενίσχυσης β. Με τη σειρά του, χρησιμοποιείται ένα τέτοιο σήμα για την ενημέρωση της εσωτερικής κατανομής πιθανοτήτων του αυτοματισμού, όπου οι δράσεις που επιτυγχάνουν επιθυμητή απόδοση ενισχύονται μέσω αυξημένης πιθανότητας. Με την πάροδο του χρόνου, η μέση απόδοση του συστήματος θα βελτιωθεί έως ότου επιτευχθεί ένα δεδομένο όριο.

Στην βιβλιογραφία έχει αναφερθεί μια μεγάλη ποικιλία κανόνων μάθησης. Ένας από τους πιο ευρέως χρησιμοποιούμενους αλγόριθμους είναι το σχήμα γραμμικής ανταμοιβής / αδράνειας (R_L), το οποίο έχει αποδειχθεί ότι εγγυάται τις ιδιότητες σύγκλισης (79). Σε απόκριση της δράσης x_i που επιλέγεται στο βήμα k , οι πιθανότητες ενημερώνονται ως εξής:

$$\begin{aligned} p_i(k+1) &= p_i(k) + \theta \cdot \beta(k) \cdot (1 - p_i(k)) \\ p_i(k+1) &= p_i(k) - \theta \cdot \beta(k) \cdot p_i(k), \text{ if } i \neq j \end{aligned}$$

όπου θ είναι η παράμετρος ρυθμού εκμάθησης $0 < \theta < 1$ και $\beta \in [0, 1]$ το σήμα ενίσχυσης. $\beta = 1$ υποδεικνύει τη μέγιστη ανταμοιβή και $\beta = 0$ είναι μια μηδενική ανταμοιβή. Σε περίπτωση που κυριαρχεί μια ενιαία επιτυχημένη δράση, θεωρείται ότι το αυτόματο έχει συγκλίνει.



Σχήμα 51^ο . παράδειγμα αυτόματης μάθησης

Διακεκριμένα στοχαστικά συστήματα αυτόματης μάθησης μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον προσδιορισμό των βέλτιστων καταστάσεων σε συνολικό επίπεδο για εφαρμογές ελέγχου με πολυτροπικό μέσο τετράγωνο σφάλματος. *Αλγόριθμος CARLA*

Η αυτοματοποίηση εκμάθησης συνεχούς δράσης (CARLA) αναπτύχθηκε ως επέκταση της στοχαστικής αυτόματης μάθησης και για εφαρμογές που περιλαμβάνουν αναζήτηση συνεχούς χώρου δράσης σε τυχαίο περιβάλλον (80). Διάφορες μέθοδοι CARLA μπορούν να διαταχθούν παράλληλα ακριβώς όπως οι διακριτοί αυτόματοι χώροι αναζήτησης πολυδιάστατων χώρων δράσης. Καθώς κάθε αλγόριθμος CARLA λειτουργεί σε ανεξάρτητα πεδία, το σύνολο αυτομάτων εκτελείται με παράλληλη υλοποίηση που ορίζει διάφορες τιμές παραμέτρων. Η επικοινωνία μεταξύ πολλών αλγορίθμων CARLA γίνεται μέσω του περιβάλλοντος και μιας συνάρτησης αξιολόγησης απόδοσης. Η διακριτή κατανομή πιθανότητας στην αυτόματη μάθηση αντικαθίσταται από μια συνεχή συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας η οποία χρησιμοποιείται ως βάση για την επιλογή της λειτουργίας. Λειτουργεί ένας κανόνας μάθησης ανταμοιβής / αντίδρασης παρόμοιος με τα διακριτά αυτόματα εκμάθησης. Οι επιτυχημένες ενέργειες λαμβάνουν μια αύξηση στην πιθανότητά τους για μελλοντική επιλογή μέσω της συνάρτησης Gaussian. Έτσι η πιθανότητα μελλοντικής επιλογής ενισχύεται καθώς υπάρχει ή ήδη η εμπειρία καποιας προηγούμενης επιτυχημένης δράσης.

Αν η ενέργεια x ορίζεται πάνω από το εύρος (x_{\min}, x_{\max}) , η συνάρτηση πυκνότητας $f(x, n)$ στην επανάληψη n ενημερώνεται σύμφωνα με τον ακόλουθο κανόνα:

$$f(x, n + 1) = \begin{cases} a[f(x, n) + b((n)H(x, r))] & \forall x \in (x_{\min}, x_{\max}) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

Με το α να έχει επιλεχθεί για την εκ νέου ομαλοποίηση της κατανομής σύμφωνα με την ακόλουθη συνθήκη

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} f(x, n+1) dx = 1$$

με $\beta(n)$ να είναι το σήμα ενίσχυσης στην αξιολόγηση απόδοσης και $H(x, r)$ μια συμμετρική Gaussian συνάρτηση της περιοχής με κέντρο $r = x(n)$.

$$H(x, r) = \lambda \exp(-(x - r)^2 / 2\sigma^2)$$

Όπου λ και σ είναι παράμετροι που καθορίζουν το ύψος και το πλάτος της συνάρτησης της περιοχής. Αυτές ορίζονται με βάση το εύρος των ενεργειών ως εξής

$$\sigma = g_w(x_{max} - x_{min}), \quad \lambda = g_k / (x_{max} - x_{min})$$

όπου η τιμή g_w ελέγχει το πλάτος και η παράμετρος g_k ορίζει το ύψος της Gaussian συνάρτησης που προστίθεται στη διανομή.

$\beta(n)$ -σήμα ενίσχυσης στην αξιολόγηση απόδοσης δίνεται από την παρακάτω ισότητα

$$\beta(n) = \max\{0, (j_{med} - j_n | j_{med} - j_{min})\}$$

Αν η ενέργεια $x(n)$ εφαρμοστεί στο περιβάλλον στην επανάληψη n , επιστρέφει μέρος κόστους απόδοσης $J(n)$. Οι τρέχουσες και οι προηγούμενες τιμές κόστους αποθηκεύονται μέσα στον παράγοντα $R(n)$ για τον υπολογισμό των μέσων και των ελάχιστων τιμών J_{med} , J_{min} . Και οι δύο τιμές πρέπει να υπολογιστούν. Προκειμένου να αποφευχθούν προβλήματα μόνο οι τελευταίες m τιμές των συναρτήσεων κόστους αποθηκεύονται στην $R(n)$. Επίσης η τελευταία εξίσωση περιορίζει την $\beta(n)$, σε τιμές μεταξύ 0, 1.

Για τις μεθόδους βελτιστοποίησης CARLA, η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας συνδέεται με κάθε μεταβλητή απόφασης. Είναι μέσω της τροποποίησης τέτοιων συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας και ενός επαρκούς αριθμού επαναλήψεων, ώστε να προσδιορίζεται η βέλτιστη τιμή των μεταβλητών απόφασης. Σε κάθε βήμα, η διαδικασία τροποποίησης είναι που ενεργοποιείται από το σήμα ενίσχυσης $\beta(n)$ που αντιστοιχεί σε μια προκαθορισμένη συνάρτηση κόστους.

Εφαρμογες

Η προτεινόμενη προσέγγιση αντιπροσωπεύει το συνολικό σύστημα σχεδιασμού που βασίζεται σε προσεγγιστικά μοντέλα της εγκατάστασης. Ως εκ τούτου, ενδέχεται να υπάρχουν αρκετά σχέδια και η εκλογή του καλύτερου σχεδίου πρέπει να καθοριστεί από το LA μέσω εκτιμήσεων σχετικά με την απόδοση του κατά προσέγγιση μοντέλου και τα μελλοντικά αποτελέσματα για κάποιες μελλοντικές περιπτώσεις. Η εκλογή κάθε σχεδίου γίνεται σε κάθε δειγματοληπτική στιγμή k . Παρακάτω, η

προτεινόμενη επιχειρηματική στρατηγική εφαρμόζεται για τον συμβατικό έλεγχο της λεγόμενης δεξαμενής υπερχειλίσσης.

Έλεγχος στάθμης σε δεξαμενή υπερχειλίσσης

Η "δεξαμενή υπερχειλίσσης", μοντελοποιείται ως εξής

$$\frac{dh(t)}{dt} = [(-\bar{d}\sqrt{2gh(t)}|A(h(t))|) + (\bar{c}|A(h(t))|)u(t)].$$

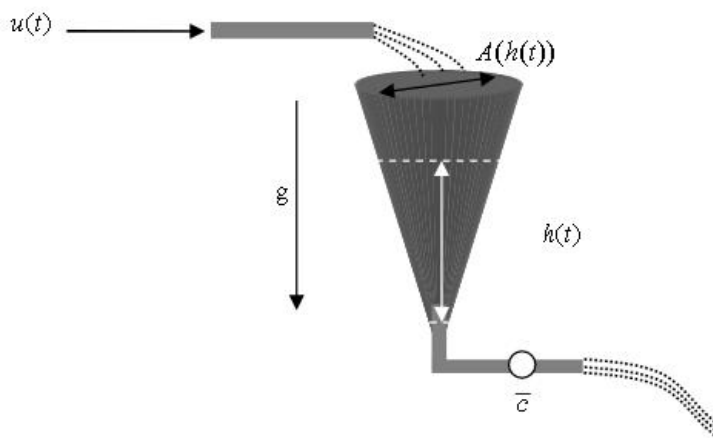
Επίσης το σφάλμα δίνεται ότι είναι ίσο με $e(t) = |r(t) - h(t)|$

Το $h(t)$ είναι η στάθμη του υγρού, $u(t)$ είναι η ροή του υγρού, $A(h(t)) = |\bar{a}h(t) + \bar{b}|$ είναι η διατομή της δεξαμενής. Ισχύει ότι

$\bar{a} > 0, \bar{b} > 0$, συνήθως $\bar{a} = 0,01, \bar{b} = 0,2, g = 9,81$,

$\bar{c} \in (0,9 - 1)$. και d είναι παράμετρος που σχετίζεται με την διάμετρο του εξωτερικού αγωγού και η απόδοση δίνεται από τη παρακάτω ισότητα

$$u[k] = k_p e(k) + k_1 \sum_{l=0}^k e(l)$$



Σχήμα 52°. δεξαμενή υπερχειλίσσης

5.4. Γενετική βελτιστοποίηση ομάδων εκπαίδευσης για βελτιωμένα μοντέλα μηχανικής μάθησης των μοριακών ιδιοτήτων

Γενετική Βελτιστοποίηση εκπαιδευτικών συνόλων

Σκοπός στην εκτίμηση ενός μοντέλου μηχανικής μάθησης είναι η επιλογή των κατάλληλων δεδομένων που θα χρησιμοποιηθούν στην εκπαίδευση. Παρακάτω θα ασχοληθούμε με προβλήματα που έχουν να κάνουν με την μοριακή χημεία και εκτιμήσεις μοριακών ιδιοτήτων. Παραδείγματα εκπαιδευτικών συνόλων τυπικά επιλέγονται από τυχαία κατανομή ωστόσο αυτό δεν αποτελεί και εγγύηση ότι τα δεδομένα θα οδηγήσουν και στο βέλτιστο αποτέλεσμα. Υπάρχει πληθώρα στρατηγικών σχεδιασμού

μοντέλων μηχανικής μάθησης με μειωμένο σχετικά απόλυτο σφάλμα. Σε προγενέστερη εργασία είχε χρησιμοποιηθεί η k-fold cross validation προκειμένου να μειωθεί το σφάλμα πρόγνωσης απλά με βελτιστοποίηση υπερπαραμέτρων σ και λ . Στην παρουσίαση παρακάτω, χρησιμοποιείται η Δ- μάθηση προκειμένου να βρεθούν οι διαφορές ενθαλπίας των PM 7 & B3LYP. Ενώ αυτή εργασία στηρίζεται στην δεδομένα κβαντικής χημείας που δημοσιεύθηκαν το 2014, και περιλαμβάνει γεωμετρίες και 13 μοριακές ιδιότητες για 133.885 μικρά οργανικά μόρια με περισσότερα από 9 άτομα που απομονώθηκαν από την λίστα GDB-17 και η οποία θα αναφέρεται ως GDB9 βάση δεδομένων. Σε αυτήν την εργασία χρησιμοποιείται και υποομάδα γνωστή και ως GDB8 και η οποία περιλαμβάνει μόρια με περισσότερα από 8 άτομα η οποία οδηγεί σε 21800 μόρια. Για την δεύτερη υποομάδα, οι εξεταζόμενες ιδιότητες είναι η ενθαλπία H και η ελεύθερη ατομική ενέργεια G, η θερμοικανότητα C, η ιστροπική μοριακή πόλωση α , η ανταλλαγή ηλεκτρονίων R^2 , η ενέργεια δόνησης στο 0, ZPVE, κ.α.

Γενετική βελτιστοποίηση των εκπαιδευτικών σετ.

Πολλές φορές, η απλή συστηματική απαρίθμηση για την εύρεση εκπαιδευτικών συνόλων που ελαχιστοποιούν το προγνωστικό σφάλμα κάποιου μοντέλου ML είναι ένα υπολογιστικά απαιτητικό πρόβλημα βελτιστοποίησης, αφού για να βρει κάποιος 1000 βέλτιστα μόρια εκπαίδευσης για την κατάρτιση μιας θα πρέπει να τρέξει την εκπαίδευση $5,56 \times 10^{1760}$ μηχανών πλήρους αναζήτησης για την βάση δεδομένων GDB8. Σαφώς, είναι αδύνατη η πλήρης βελτιστοποίηση αυτής της σύνθετης κατάρτισης σε έναν τέτοιο σχεδόν απεριόριστο μεγάλο χώρο, οπότε απαιτείται μια έξυπνη μέθοδος αναζήτησης για την εξεύρεση βέλτιστων λύσεων. Εδώ χρησιμοποιούμε γενετικό αλγόριθμο (GA)(100), μια βιολογικά εμπνευσμένη τεχνική μεταερευτικής βελτιστοποίησης, η οποία αποδείχθηκε ένα επιτυχημένο σχήμα βελτιστοποίησης σε χώρους μεγάλης διαστάσεως(101). Η διαδικασία βελτιστοποίησης GA είναι συνοπτικά εικονογραφημένη στο παρακάτω σχήμα.

Στο παράδειγμα μας, οι εκπαιδευτικές μονάδες αναπαρίστανται ως μοριακά σημεία

$$\mathbf{X}_i = \{x_1, x_2, \dots, x_\alpha, \dots, x_N\}.$$

Το X_i ορίζεται ως παράγοντας θέσης, όπου κάθε στοιχείο x_α χαρτογραφείται μοναδικά σε μία μήτρα Coulomb M^α ενώ N είναι το μέγεθος του σετ εκπαίδευσης. Αναφορικά, η M^α είναι η μήτρα Coulomb του μορίου α . Κάθε διάνυσμα θέσης X_i χρησιμοποιείται για την εκπαίδευση του μοντέλου ML και επομένως διευκολύνει τον υπολογισμό του μέσου απόλυτου σφάλματος (MAE) της πρόβλεψης ιδιοτήτων εκτός δείγματος. Ξεκινώντας από έναν εκπαιδευτικό πληθυσμό με μοναδικά μόρια δειγματοληψίας από ομοιόμορφη κατανομή, τα άτομα επιλέγονται στοχαστικά χρησιμοποιώντας το κριτήριο της καταλληλότητας του MAE. Αυτά τα σύνολα αρχικής κατάρτισης αναπτύσσονται διαδοχικά ακολουθώντας την επιλογή, τη διαφοροποίηση και την επανατοποθέτηση. Η επιλογή ορίζει ποια εκπαιδευτικά σύνολα θα μείνουν στον πληθυσμό για να παράξουν την εκπαιδευτική ομάδα της επόμενης γενεάς. Η διακύμανση ορίζεται από δύο λειτουργίες, η πρώτη ενσωματώνει δυο εκπαιδευτικά σύνολα προκειμένου τα άτομα που θα προκύψουν να περιλαμβάνουν ιδιότητες και των δύο προηγούμενων εκπαιδευτικών συνόλων. Η δεύτερη λειτουργία ουσιαστικά εισάγει νέες πληροφορίες εντός του

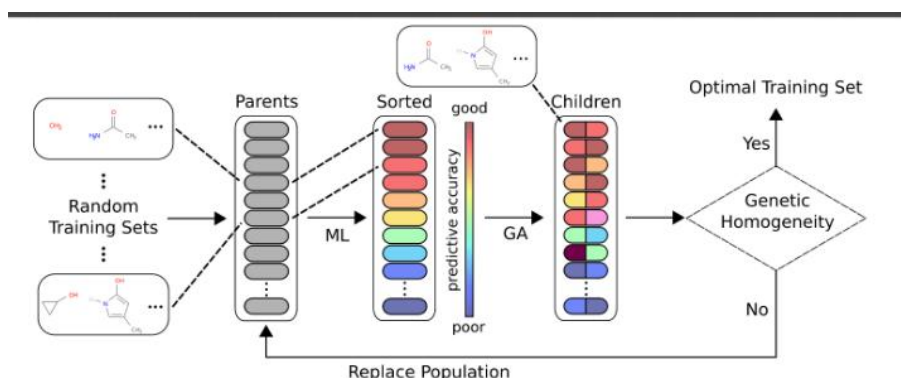
πληθυσμού. Μετά από μία σειρά επαναλήψεων η γενετική ομοιογένεια υπάρχει και τα εκπαιδευτικά σύνολα φαίνεται ότι δεν μπορούν να βελτιωθούν παραπάνω.

Εκπαίδευση

Για την βελτιστοποίηση GA των εκπαιδευτικών συνόλων στην βάση δεδομένων GDB8 όλη βάση με τα 21800 μόρια διαιρείται σε δύο ανεξάρτητες βάσεις δεδομένων με 10900 μόρια η καθεμία. Η διαδικασία βελτιστοποίησης τρέχει για την καθεμία από τις δύο αυτές διαιρεμένες βάσεις ξεχωριστά και υπολογίζεται το MAE. Επίσης δημιουργείται και μία Τρίτη βάση δεδομένων όπου όλα τα μόρια από την GDB8 μετακινούνται από την GDB9. Για αυτό και ονομάζεται GDB9-8. Οι δύο βάσεις δεδομένων GDB9 & GDB9-8 διαιρούνται ανά 65k & 55k αντίστοιχα.

Υπολογιστικές λεπτομέρειες

Η γενετική βελτιστοποίηση γίνεται χρησιμοποιώντας ένα πληθυσμό 2000 εκπαιδευτικών ομάδων για κάθε ιδιότητα και 500 επαναλήψεις. Η πιθανότητα μετάλλαξης ανά γονίδιο είναι ίση με $0,5/N$ όπου N είναι το μέγεθος της ομάδας εκπαίδευσης, Η πιθανότητα διασταύρωσης ανά γονίδιο δίνεται ίση με 0,5, και τέλος η επιλογή των επιθυμητών ατόμων μέσω συνάρτησης καταλληλότητας δίνεται με αναλογία 0,7. Αυτοί οι παράμετροι θεωρητικά οδηγούν σε μειωμένο σφάλμα.



Σχήμα 53^ο. Μια διαδικασία βελτιστοποίησης μοριακών συνόλων για την εκπαίδευση του μοντέλου ML.

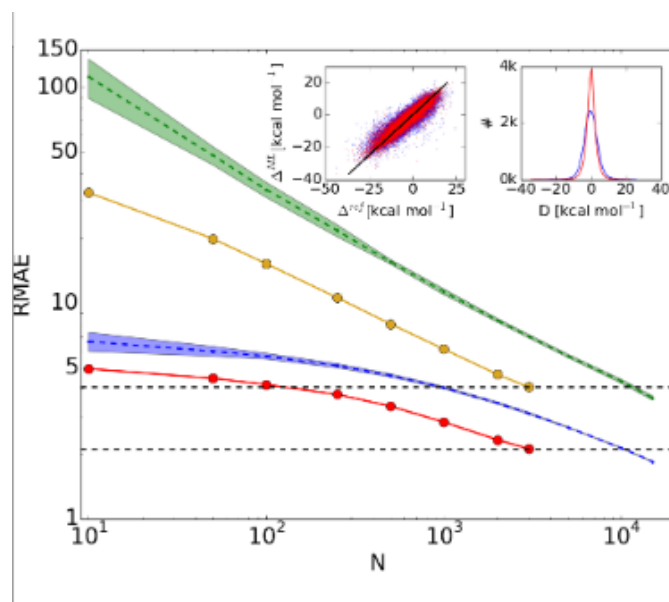
Μια διαδικασία βελτιστοποίησης μοριακών συνόλων για την εκπαίδευση του μοντέλου ML. Ένας πληθυσμός δοκιμαστικών συνόλων που περιέχουν έναν ίδιο αριθμό μορίων λαμβάνεται δειγματοληπτικά από τη μοριακή βάση δεδομένων. Αυτός ο αρχικός πληθυσμός της δοκιμαστικής ομάδας εκπαίδευσης χρησιμεύει ως τη πρώτη επανάληψη του αλγορίθμου και δηλώνεται ως ο γονικός πληθυσμός. Ένα μοντέλο ML εκπαιδεύεται για κάθε ομάδα εκπαίδευσης και το μέσο σφάλμα πρόβλεψης εκτός δείγματος αποδίδεται στο σετ κατάρτισης ως μέτρο βέλτιστης κατάστασης. Στη συνέχεια, ο πληθυσμός υφίσταται επιλογή και παραλλαγή προκειμένου να δημιουργήσουν παιδικό πληθυσμό. Ένα μέρος των μη αποδεκτών απογόνων αποκαθίστανται από καλύτερους γονείς. Τέλος, οι καλύτεροι απόγονοι επισημαίνονται και αυτοί με την σειρά τους ως γονείς και ο αλγόριθμος επαναλαμβάνεται μέχρι να

υπάρξει περιορισμένη διαφορά πληροφοριών μεταξύ των επόμενων επαναλήψεων, δηλαδή να μην υπάρξει κάποια περαιτέρω αξιοσημείωτη βελτίωση μεταξύ των απογόνων των επαναλήψεων

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Όλα τα αναφερόμενα σχετικά μέση απόλυτα σφάλματα (RMAE) αναφέρονται στην πρόβλεψη 10900 μορίων από μια μηχανή που εκπαιδεύτηκε με μόρια N δείγματος. Η ακρίβεια στόχου (για τις οποίες $RMAE = 1$) για τις θερμοχημικές ιδιότητες και τις τροχιακές ενέργειες είναι 1 kcal mol^{-1} . Για το ZPVE είχε επιλεχθεί μια ακρίβεια στόχου 10 cm^{-1} , συγκρίσιμη με τη μέση ακρίβεια των συζευγμένων μεθόδων συστάδων με συγκλίνοντα σύνολα βάσεων για την πρόβλεψη αρμονικών δονητικών συχνοτήτων μικρών μορίων.

Το παρακάτω σχήμα εμφανίζει τυχαίες καμπύλες μάθησης αλλά και GA-βελτιστοποιημένων συνόλων εκπαίδευσης για προβλέψεις εκτός δείγματος των ενθαλπίων B3LYP, H, χρησιμοποιώντας τόσο την άμεση εκμάθηση όσο και το μοντέλο $\Delta H^{B3LYP}_{PM7-ML}$ (102).



Σχήμα 54°. Καμπύλες μάθησης που αφορούν μέτρηση του σφάλματος ανάλογα με το μέγεθος του πληθυσμού και αφορούν την μέτρηση της ενθαλπίας μορίων χρησιμοποιώντας τέσσερις μεθόδους μάθησης. Πίο συγκεκριμένα η πράσινη καμπύλη αφορά την ενθαλπία μορίων με τυχαία επιλογή, η δεύτερη κίτρινη καμπύλη αφορά την μηχανική μάθηση με την χρήση γενετικών αλγορίθμων, η Τρίτη μπλέ καμπύλη αφορά την χρήση μεθόδου B3LYP-PM7 D^{ML} , και η τέταρτη κόκκινη καμπύλη αφορά μέθοδο που είναι μίξη των δύο προηγούμενων μεθόδων Δ^{GA} .

Τα RMAE για μοντέλα ML με και χωρίς χρήση GA (με χρήση γενετικών αλγορίθμων είναι οι τιμές εντός παρένθεσης) συνοψίζονται στον παρακάτω πίνακα για διάφορα μεγέθη σετ εκπαίδευσης και όλες τις προαναφερόμενες ιδιότητες. Η GA βελτιστοποίηση της σύνθεσης των εκπαιδευτικών συστημάτων βελτιώνει συστηματικά RMAEs για όλες τις ιδιότητες και τα μεγέθη των συνόλων εκπαίδευσης.

Ορισμένες ιδιότητες έχουν μεγαλύτερη βελτίωση από άλλες. Η μείωση στο RMAE είναι πιο εντυπωσιακή για μικρότερα μεγέθη ομάδων εκπαίδευσης, ιδιαίτερα μεγέθους $N = 10$. Πιο συγκεκριμένα, οι ιδιότητες που σχετίζονται με τη χημική σύνδεση, όπως οι ενθαλπίες και οι ελεύθερες ενέργειες των αερίων καθώς και το ZPVE, βελτιώνονται κατά $\sim 75\%$. Άλλες ιδιότητες, όπως η θερμική ικανότητα ή η πολικότητα, βελτιώνονται κατά 50% . Αντίθετα, κάποιες άλλες ηλεκτρονικές ιδιότητες έχουν πολύ λιγότερη βελτίωση. Συνολικά, βρέθηκε η μικρότερη μείωση RMAE για το πρότυπο της διπολικής ροπής. Ενώ είναι κατά το ήμισυ, φαινομενικά μικρό, η μείωση του σφάλματος για το ΔH_{PM7}^{B3LYP} είναι πολύ σημαντική λόγω της εξαιρετικής ακρίβειας του. Αυτά τα αποτελέσματα φανερώνουν σαφώς την αριθμητική απόδειξη ότι η επιλογή του τρόπου επιλογής των μελών ομάδας εκπαίδευσης μπορεί να έχει δραματική επίδραση στην προγνωστική δύναμη του προκύπτοντος μοντέλου ML. Συνεπώς, θα απαιτηθούν ουσιαστικά λιγότερα παραδείγματα εκπαίδευσης για την παραγωγή μοντέλων ML που να φτάνουν με την ίδια ακρίβεια με τα ML μοντέλα που εκπαιδεύονται σε ένα πολύ μεγαλύτερη ομάδα εκπαιδευτικών δειγμάτων

$P^{ML} (P^{GA})$	N										
	10	50	100	500	1k	2k	3k				
H	113.0 (31.6)	48.0 (18.3)	33.3 (14.3)	14.8 (7.5)	10.2 (5.8)	6.8 (4.5)	5.1 (3.9)				
G	101.8 (28.8)	44.0 (17.7)	31.4 (14.1)	14.3 (7.5)	9.9 (5.6)	6.7 (4.3)	5.0 (3.9)				
C_v	27.3 (14.5)	18.2 (9.4)	14.6 (7.8)	7.4 (4.0)	5.2 (2.9)	3.4 (2.8)	2.5 (2.0)				
ZPVE	353.2 (83.2)	150.4 (38.4)	97.9 (28.0)	31.5 (14.0)	20.9 (10.5)	13.9 (7.0)	10.5 (3.5)				
$\langle R^2 \rangle$	168.5 (92.2)	117.0 (44.2)	85.6 (33.2)	35.7 (19.1)	25.7 (15.5)	18.3 (12.7)	14.5 (11.6)				
μ	11.3 (8.5)	10.3 (7.7)	9.9 (7.4)	8.4 (6.3)	7.5 (5.7)	6.2 (5.1)	5.2 (4.7)				
α	40.8 (16.3)	23.1 (12.0)	18.5 (10.8)	11.8 (7.8)	9.6 (6.5)	7.2 (5.4)	5.8 (4.9)				
ϵ_{HOMO}	13.0 (9.0)	11.2 (8.1)	10.4 (7.3)	7.7 (5.2)	6.3 (4.5)	4.9 (3.8)	4.0 (3.5)				
ϵ_{LUMO}	22.3 (15.8)	18.8 (12.7)	17.0 (11.1)	11.9 (8.0)	9.7 (6.7)	7.4 (5.6)	5.9 (5.0)				
gap	24.0 (17.8)	20.8 (15.0)	19.5 (13.5)	14.3 (9.8)	11.8 (8.1)	9.0 (6.8)	7.3 (6.2)				
$\Delta^{ML}(\Delta^{GA})_H$	6.6 (5.0)	6.0 (4.4)	5.7 (4.1)	4.6 (3.2)	4.1 (2.6)	3.4 (2.1)	3.1 (1.9)				

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Εδώ έχουν χρησιμοποιηθεί γενετικοί αλγόριθμοι (GA) για τη βελτιστοποίηση της σύνθεσης των ομάδων μοριακής εκπαίδευσης που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εκπαίδευση μοντέλων μηχανικής μάθησης μοριακών ιδιοτήτων. Η εφαρμογή του GA σε ένα σετ κατάρτισης ενός δεδομένου μεγέθους βελτιώνει ουσιαστικά την απόδοση του μοντέλου ML ουσιαστικά, σε σύγκριση με ένα μοντέλο εκπαιδευμένο σε τυχαία επιλεγμένα μόρια που προέρχονται από την βάση δεδομένων GDB οργανικών μορίων που ακολουθεί μια κατανομή που είναι πλήρης. Αντίθετα, για την επίτευξη της ίδιας ακρίβειας, χρειάζονται λιγότερα εκπαιδευτικά σύνολα. Ωστόσο, φαίνεται ότι είναι εφικτός ο σχεδιασμός βελτιωμένων GA συνόλων κατάρτισης που περιέχουν δομές που αναγνωρίζονται μέσω της χρήσης απλών κανόνων μοριακής προβολής που εφαρμόζονται στα σετ κατάρτισης. Έχοντας εξαντλήσει μόρια $\sim 100k$ της βάσης δεδομένων GDB9-8 χρησιμοποιώντας κατασκευασμένα GA μόρια σετ κατάρτισης GA δημιουργείται πλέον η $\sim 20k$ μορίων GDB8.

Η συλλογή των μορίων κατάρτισης που παράγουν τέτοιες βελτιστοποιημένες RMAEs εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την επιλογή των παραμέτρων GA, αλλά κυρίως από το μέγεθος του πληθυσμού, δηλ.

από την έκταση της δειγματοληψίας των εκπαιδευτικών συνόλων. Αντίθετα, η ταχύτητα βελτιστοποίησης συνδέεται άμεσα με τα μεγέθη πληθυσμού και κατάρτισης, με αποτέλεσμα να υπάρχει αντιστάθμιση μεταξύ της μείωσης RMAE και του χρόνου υπολογισμού. Παρόλα αυτά, το σφάλμα αυτό μπορεί να μειωθεί περαιτέρω χρησιμοποιώντας μεγαλύτερα μεγέθη πληθυσμού ή περισσότερα στοιχεία εκπαίδευσης. Η αυστηροποίηση των κριτηρίων σύγκλισης GA μπορεί επίσης να οδηγήσει σε κάποια βελτίωση. Επιπλέον, η κατανομή των βέλτιστων συνόλων εκπαίδευσης εξαρτάται έντονα από την επιλεγμένη συνάρτηση που στην περίπτωση μας, πρόκειται για έναν συνδυασμό της συνάρτησης Slater-type kernel, της απόστασης Manhattan και της μήτρας Coulomb. Η τροποποίηση του μοντέλου (πχ παλινδρόμησης / επιλογής υπερπαραμέτρου) πιθανόν να επηρεάσει κάποιες λεπτομέρειες όσον αφορά την πίεση επιλογής συγκεκριμένων μορίων για ένα δεδομένο μέγεθος ή κάποια ιδιότητα της ομάδας εκπαίδευσης. Οποιοδήποτε άλλο μοντέλο ML μπορεί να οδηγήσει σε άλλη βέλτιστη κατανομή. Ωστόσο, η γενική εικόνα ότι οι ουσιαστικές βελτιώσεις μοντέλων μπορούν να επιτευχθούν μέσω της βελτιστοποίησης GA θα πρέπει να είναι γενικές, καθώς η προκατάληψη επιλογής που υπάρχει στα σύνολα εκπαίδευσης είναι ανεξάρτητη από τις λεπτομέρειες του μοντέλου. Η ακριβής φύση της σχέσης μεταξύ των ειδικών του ML μοντέλου και της μεροληψίας επιλογής παραμένει να αποσαφηνιστεί σε μελλοντικές εργασίες.

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- (1) (Shivaswamy et al., 2006- P. K. Shivaswamy, C. Bhattacharyya, and A. J. Smola. Second order cone programming approaches for handling missing and uncertain data. Journal of Machine Learning Research, 7:1283–1314, 2006.)
- (2) (R. S. Niculescu, T. M. Mitchell, and R. B. Rao. Bayesian network learning with parameter constraints. Journal of Machine Learning Research, 7:1357–1383, 2006.)
- (3) (De Bie and Cristianini, 2006- . De Bie and N. Cristianini. Fast SDP relaxations approaches of graph cut clustering, transduction and other combinatorial problems. Journal of Machine Learning Research, 7:1409–1436, 2006.)
- (4) (Kennedy J., Eberhart R.. Particle Swarm Optimization. Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks. IV. pp. 1942–1948.),
- (5) (Kennedy, J., Eberhart, R. C., & Shi, Y. (2001). Swarm intelligence. San Francisco: Morgan Kaufman)
- (6) (H. Robbins and S. Monro. A Stochastic Approximation Method. The Annals of Mathematical Statistics, 22(3):400–407, 1951)
- (7) A. Defazio, F. Bach, and S. Lacoste-Julien. SAGA: A Fast Incremental Gradient Method With Support for Non-Strongly Convex Composite Objectives. In Z. Ghahramani, M. Welling, C. Cortes, N. D. Lawrence, and K. Q. Weinberger, editors, Advances in Neural Information Processing Systems 27, pages 1646–1654. Curran Associates, Inc., 2014
- (8) M. Schmidt, N. Le Roux, and F. Bach. Minimizing finite sums with the stochastic average gradient. arXiv preprint arXiv:1309.2388, 2013G.
- (9) R. S. Dembo, Eisenstat S. C., and T. Steihaug. Inexact Newton Methods. SIAM Journal on Numerical Analysis, 19(2):400–408, 1982).
- (10) Naman Agarwal, Brian Bullins, and Elad Hazan. Second order stochastic optimization in linear time. arXiv preprint arXiv:1602.03943, 2016.

- (11) B. T. Polyak and A. B. Juditsky. Acceleration of Stochastic Approximation by Averaging. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 30(4):838–855, 1992
- (12) B. T. Polyak. New Method of Stochastic Approximation Type. *Automation and Remote Control*, 51(4):937–946, 1991
- (13) G. H. Golub and C. F. Van Loan. *Matrix Computations*. Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, USA, fourth edition, 2012
- (14) R. S. Dembo, Eisenstat S. C., and T. Steihaug. Inexact Newton Methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 19(2):400–408, 1982
- (15) Richard H Byrd, Gillian M Chin, Will Neveitt, and Jorge Nocedal. On the use of stochastic Hessian information in optimization methods for machine learning. *SIAM Journal on Optimization*, 21(3):977–995, 2011
- (16) R. Fletcher. A New Approach to Variable Metric Algorithms. *Computer Journal*, 13(3):317–322, 1970.
- (17) J. E. Dennis and J. J. Moré. A Characterization of Superlinear Convergence and Its Application to Quasi-Newton Methods. *Mathematics of Computation*, 28(126):549–560, 1974
- (18) Hyeyoung Park, Sun-ichi Amari, and Kenji Fukumizu. Adaptive natural gradient learning algorithms for various stochastic models. *Neural Networks*, 13(7):755–764, 2000
- (19) Stéphane Ross, Paul Mineiro, and John Langford. Normalized online learning. In *Proceedings of the Twenty-Ninth Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI)*, 2013
- (20) Optimization Methods for Machine Learning Part II – The theory of SG. Leon Bottou. AI Research, Frank E. Curtis Lehigh University, Jorge Nocedal Northwestern University
- (21) H. Robbins and S. Monro. A Stochastic Approximation Method. *The Annals of Mathematical Statistics*, 22(3):400–407, September 1951).
- (22) G. Lan. An optimal method for stochastic composite optimization. *Mathematical Programming*, 133(1):365–397, 2012.
- (23) M. Schmidt, N. LeRoux, and F. Bach. Minimizing finite sums with the stochastic average gradient. *arXiv preprint arXiv:1309.2388*, 2013
- (24) A. De fazio, F. Bach, and S. Lacoste-Julien. Saga: A fast incremental gradient method with support for non-strongly convex composite objectives. In Z. Ghahramani, M. Welling, C. Cortes, N.D. Lawrence, and K.Q. Weinberger, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 27*, pages 1646–1654. Curran Associates, Inc., 2014),
- (25) (S. Shalev-Shwartz and T. Zhang. Accelerated proximal stochastic dual coordinate ascent for regularized loss minimization. *Mathematical Programming*, pages 1–41, 2013)
- (26) (Johnson and T. Zhang. Accelerating stochastic gradient descent using predictive variance reduction. In C.J.C. Burges, L. Bottou, M. Welling, Z. Ghahramani, and K.Q. Weinberger, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 26*, pages 315–323. 2013.)
- (27) Geoffrey Hinton, Li Deng, Dong Yu, George E Dahl, Abdel-rahman Mohamed, Navdeep Jaitly, Andrew Senior, Vincent Vanhoucke, Patrick Nguyen, Tara N Sainath, et al. Deep neural networks for acoustic modeling in speech recognition: The shared views of four research groups. *IEEE Signal Processing Magazine*, 29(6):82–97,
- (28) Dan Ciregan, Ueli Meier, and Jürgen Schmidhuber. Multi-column deep neural networks for image classification. In *Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, 2012 IEEE Conference on, pages 3642–3649. IEEE, 2012C.
- (29) (Andrei Karpathy, George Toderici, Sanketh Shetty, Thomas Leung, Rahul Sukthankar, and Li Fei-Fei. Large-scale video classification with convolutional neural networks.

- In Proceedings of the IEEE conference on Computer Vision and Pattern Recognition, pages 1725–1732, 2014
- (30) Kyunghyun Cho, Bart Van Merriënboer, Caglar Gulcehre, Dzmitry Bahdanau, Fethi Bougares, Holger Schwenk, and Yoshua Bengio. Learning phrase representations using rnn encoder-decoder for statistical machine translation. arXiv:1406.1078, 2014.
- (31) I. Flood and N. Kartam. Neural networks in civil engineering I: Principles and understanding. *Journal of computing in civil engineering*, 8(2):131–148,
- (32) **Adam: A Method for Stochastic Optimization**
Diederik P. Kingma, Jimmy Ba, 2015
- (33) A. W. Harrow, A. Hassidim, and S. Lloyd. “Quantum algorithm for linear systems of equations”. In: *Physical review letters* 103.15 (2009), p. 150502
- (34) E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann. “A quantum approximate optimization algorithm applied to a bounded occurrence constraint problem”. In: arXiv preprint arXiv:1412.6062 (2014)
- (35) E. Farhi et al. “Quantum computation by adiabatic evolution”. In: arXiv preprint quant-ph/0001106 (2000)
- (36) Holland, J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*; University of Michigan Press: Ann Arbor, MI, 1975.-. Goldberg, D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*; Addison-Wesley: Reading, MA, 19
- (37) Deb, K.; Goldberg, D.E. Sufficient conditions for deceptive and easy binary functions; *Ann Math Artif Intell* 1994, 10, 385–408
- (38) Rinnooy Kan, A. H. G., & Timmer, G. T. (1987a). Stochastic global optimization methods. Part I: Clustering methods. *Mathematical Programming*, 39, 27–56
- (39) Dill, K. A., Phillips, A. T., & Rosen, J. B. (1997a). Cgu: An algorithm for molecular structure prediction. In L. T. Bigler, T. F. Coleman, A. R. Conn, & F. N. Santosa (Eds.), *Large-scale optimization with applications. part 3: Molecular structure and optimization*. (Vol. 94, pp. 1–21). Springer
- (40) Leary, R. H. (2000). Global optimization on funneling landscapes. *Journal of Global Optimization*, 18, 367–383.
- (41) Johnson, E. L.; Nemhauser, G. L.; and Savelsbergh, M. W. 2000. Progress in linear programming-based algorithms for integer programming: An exposition. *INFORMS Journal on Computing* 12(1):2–23.
- (42) A. Eiben and M. Schoenauer, “Evolutionary computing,” *Information Processing Letters*, vol. 82, no. 1, pp. 1 – 6, 2002, evolutionary Computation.
- (43) A. E. Eiben and J. E. Smith, *What Is an Evolutionary Algorithm?* Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2015, pp. 25–48.
- (44) A. E. Eiben and J. E. Smith, *Representation, Mutation, and Recombination*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2015, pp. 49–78
- (45) A. Eiben and M. Schoenauer, “Evolutionary computing,” *Information Processing Letters*, vol. 82, no. 1, pp. 1 – 6, 2002, evolutionary Computation
- (46) A. E. Eiben and J. E. Smith, *What Is an Evolutionary Algorithm?* Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2015, pp. 25–48
- (47) M. Mitchell and C. E. Taylor, “Evolutionary computation: An overview,” *Annual Review of Ecology and Systematics*, vol. 30, pp. 593–616, 1999
- (48) D. B. Fogel and L. J. Fogel, *An introduction to evolutionary programming*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1996, pp. 21–33
- (49) Z. Michalewicz, R. Hinterding, and M. Michalewicz, *Evolutionary Algorithms*. Boston, MA: Springer US, 1997, pp. 3–31

- (50) Z. Michalewicz, R. Hinterding, and M. Michalewicz, Evolutionary Algorithms. Boston, MA: Springer US, 1997, pp. 3–31
- (51) Z. Michalewicz, R. Hinterding, and M. Michalewicz, Evolutionary Algorithms. Boston, MA: Springer US, 1997, pp. 3–31
- (52) Z. Michalewicz, R. Hinterding, and M. Michalewicz, Evolutionary Algorithms. Boston, MA: Springer US, 1997, pp. 3–31
- (53) P. Koehn, “Combining genetic algorithms and neural networks: The encoding problem,” 1994
- (54) D. J. Montana and L. Davis, “Training feedforward neural networks using genetic algorithms.” in IJCAI, vol. 89, 1989, pp. 762–767.
- (55) P. Koehn, “Combining genetic algorithms and neural networks: The encoding problem,” 1994.
- (56) S. Das, A. Abraham, and A. Konar, Particle Swarm Optimization and Differential Evolution Algorithms: Technical Analysis, Applications and Hybridization Perspectives. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008, pp. 1–38
- (57) Rosenberg, R. S. (1967). Simulation of genetic populations with biochemical properties – Doctoral dissertation of University of Michigan. Dissertation Abstracts International 28(7), 2372B. University Microfilms.
- (58) De Jong K.A. -1975. An analysis of the behavior of a class of genetic adaptive systems . Dissertation abstracts international 36(10) 5140-University microfilms).
- (59) (Hollstien R.B. -1971. Artificial genetic adaptation in computer control systems (Doctoral dissertation University of Michigan) Dissertation Abstracts international 32(3). University of Microfilms No. 71-23,773)
- (60) Brindle (1981) genetic algorithms for function optimization Unpublished doctoral dissertation University of Alberta, Edmonton.
- (61) Bangley J.D. The behavior of adaptive systems which employ genetic and correlation algorithms. Doctoral dissertation University of Michigan). Dissertation Abstracts International 28(12), 5106 B (University Microfilms No 68-7556)
- (62) Cavicchio D.J. (1970), Adaptive search using simulated evolution, unpublished doctoral dissertation University of Michigan Ann, Arbor
- (63) Frantz (1972) (Non linearities in genetic adaptive search. Doctoral dissertation University of Michigan . Dissertation Abstract International 33(11), 5240b-5241b. University of Microfilms No 73-11,116),
- (64) Holland J.H. (1975), (76) (Adaptation in natural and artificial systems, Ann Arbor The University of Michigan press,)
- (65) Schaffer -1984, (Some experiments in machine learning using vector evaluated genetic algorithms Unpublished doctoral dissertation Vanderbilt University Nashville,)
- (66) Goldberg D.E. (1983) Computer-aided gas pipeline operation using genetic algorithms and rule learning – Doctoral Dissertation University of Michigan. Dissertation Abstracts International 44(10), 3174B. University Microfilms No 8402282)
- (67) Holland J.H. & Reitman J.S. (1978). Cognitive systems based on adaptive algorithms. In D.A. Waterman & F. Hayes Roth (Eds), Pattern directed inference systems pp 313-329, New York academic press.
- (68) (Goldberg D.E. & Smith R.E. -1987. Non stationary function optimization using genetic algorithms with dominance and diploidy. Genetic algorithms and their applications Proceedings of the second International Conference on Genetic Algorithms 59-68).

- (69)Booker L (1985)B,Improving the performance of genetic algorithms in classifier systems. Proceedings of an international Conference on Genetic Algorithms and their applications 80-92.
- (70)Ying-Pin, C., Low, C., Shih-Yu, H.: Integrated feasible direction method and genetic algo-rithm for optimal planning of harmonic filters with uncertainty conditions. Expert Sys-tems with Applications 36, 3946–3955 (2009)
- (71)Cueli, R., Bordons, C.: Iterative nonlinear model predictive control. Stability, robustness and applications. Control Engineering Practice 16, 1023–1034 (2008)
- (72)Potočnik, B., Mušič, G., Škrjanc, I., Zupančič, B.: Model-based Predictive Control of Hy-brid Systems: A Probabilistic Neural-network Approach to Real-time Control. J. Intell. Robot Syst. 51, 45–63 (2008)
- (73)Chen, W., Li, X., Chen, M.: Suboptimal Nonlinear Model Predictive Control Based on Ge-netic Algorithm. In: 2009 Third International Symposium on Intelligent Information Technology Application Workshop (2009)
- (74)Narendra, K.S., Thathachar, M.A.L.: Learning Automata: an Introduction. Prentice-Hall, London (1989)
- (75)Torkestani, J.A., Meybodi, M.R.: An intelligent backbone formation algorithm for wireless ad hoc networks based on distributed learning automata. Computer Networks 54, 826–843 (2010)
- (76)Tsetlin, M.L.: Automaton Theory and Modeling of Biological Systems. Academic Press, New York (1973)
- (77)Meybodi, M.R., Beigy, H.: A note on learning automata-based schemes for adaptation of BP parameters. Neurocomputing 48, 957–974 (2002)
- (78)Thathachar, M.A.L., Sastry, P.S.: Varieties of learning automata: An overview. IEEE Trans. Systems. Man Cybernet. Part B: Cybernet. 32, 711–722 (2002)
- (79)Narendra, K.S., Thathachar, M.A.L.: Learning Automata: an Introduction. Prentice-Hall, London (1989)
- (80)Howell, M., Gordon, T.: Continuous action reinforcement learning automata and their ap-plication to adaptive digital filter design. Engineering Applications of Artificial Intelli-gence 14, 549–561 (2001)