

Függvényextrémum keresés (Optimalizáció)

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Áttekintés

- Motiváció, általában az extrémumkeresésről
- Egydimenziós módszerek:
 - függvény derivált felhasználását nem igénylő módszerek
 - függvény deriváltat is használó módszer
- Többváltozós függvények extrémumkeresése
 - Nelder-Mead módszer
 - Konjugált gradiens módszer
- Összehasonlítás a χ^2 minimalizáció egy korábbi megoldásával
- Kitekintés: Ising modell, utazó ügynök probléma

Motiváció és emlékeztető: nemlineáris függvényillesztés

A χ^2 költségfüggvényt szeretnénk minimalizálni:

$$\chi^2 = \sum_i \frac{[y_i - y(x_i|\mathbf{a})]^2}{\sigma_i^2}$$

Általános esetben ez a következőre vezet:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} = 2 \cdot \sum_{i=1}^N \left[\frac{f(x_i|\mathbf{a}) - y_i}{\sigma_i^2} \cdot \frac{\partial f(x|\mathbf{a})}{\partial a_j} \Big|_{x=x_i} \right] = 0$$

- Ha f az \mathbf{a} paraméterektől nem függő bázisfüggvények lineáris kombinációja \Rightarrow probléma lineáris
- egyébként egy nemlineáris egyenletrendszer

Optimalizáció, extrémumok megkeresése

Egy lehetséges stratégia:

- nem a deriváltra vonatkozó egyenletrendszer oldjuk meg,
- hanem közvetlenül próbáljuk χ^2 -et minimalizálni
- általában viszont ismerjük a $\frac{\partial f(x|a)}{\partial a_j}$ deriváltakat, ez még jól jön

Optimalizáció, extrémumok megkeresése

Egy lehetséges stratégia:

- nem a deriváltra vonatkozó egyenletrendszer oldjuk meg,
- hanem közvetlenül próbáljuk χ^2 -et minimalizálni
- általában viszont ismerjük a $\frac{\partial f(\mathbf{x}|a)}{\partial a_j}$ deriváltakat, ez még jól jön

Az extrémumkeresés ennél egy még általánosabb probléma

- adott egy $f(\mathbf{x})$ függvény, hol van a minimuma, illetve maximuma?
- extrémum: minimum vagy maximum
- pl. rendszer energiaminimuma, legkisebb hatás stb.

A továbbiakban egy $f(\mathbf{x})$ függvény minimumkeresését tekintjük

- maximumkeresés: $f(\mathbf{x}) \rightarrow -f(\mathbf{x})$

Optimalizáció, extrémumok megkeresése

Feladat: találjuk meg az extrémumot

- minél kevesebb lépésben
- minél pontosabban
- minél kevesebb függvénykiértékeléssel

Optimalizáció, extrémumok megkeresése

Feladat: találjuk meg az extrémumot

- minél kevesebb lépésben
- minél pontosabban
- minél kevesebb függvénykiértékeléssel

A gyökkereséshez hasonlóan, két fő csoportra oszthatóak a módszerek

- csak az $f(\mathbf{x})$ függvényértékeit használják
- $f(\mathbf{x})$ deriváltját is használják

Fő probléma: lokális és globális minimumok

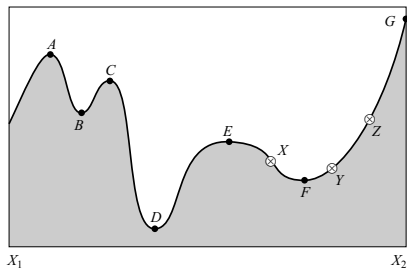


Figure: Egy függvény lokális és globális minimumai. ©Numerical Recipes

- az algoritmusok általában lokálisan működnek
- emiatt rossz helyről indulva rossz minimumot találnak
- “bennragadnak” a lokális minimumban
- nemlineáris esetben univerzálisan jó globális algoritmus nincs

Minimum bekeretezése egy dimenzióban

Minimumkeresés esetén

- $a < b < c$, továbbá $f(b) < f(a)$ és $f(b) < f(c)$
- ekkor a függvénynek *lokális minimuma* van a és c között
- a minimum bekeretezéséhez tehát három pontot kell használni
- emlékeztető: a gyökkeresés esetén két pontot használtunk a bekeretezéshez

Minimum iteratív keresése

Kiindulás:

- bekereteztük a minimumot az a , b és c számokkal

Iterációs lépés:

- választunk egy új x pontot az $[a, c]$ intervallumon belül, pl.
 $b < x < c$
- ha $f(x) < f(b)$ akkor az új bekeretező pontháromas (b, x, c)
- ha $f(x) > f(b)$ akkor az új bekeretező pontháromas (a, b, x)
- addig folytatjuk, míg a két szélső pont közötti távolság elég kicsi nem lesz

Minimum iteratív keresése

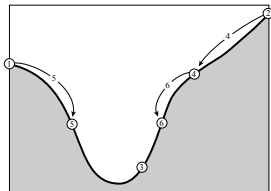


Figure: Az iteratív minimumkeresés grafikus szemléltetése. ©Numerical Recipes

Minimum iteratív keresése

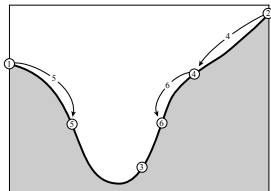


Figure: Az iteratív minimumkeresés grafikus szemléltetése. ©Numerical Recipes

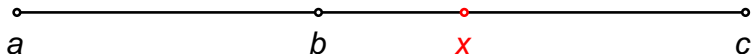
Hol érdemes az új pontot választani?

- a kialakuló legrövidebb intervallumot akarjuk megtartani
- de ennek is tudnia kell a feltételt:
 $f(b') < f(a')$ és $f(b') < f(c')$
- minimalizálni akarjuk a rossz pont választásának esélyét

Az új pont helyének megválasztása: aranymetszés módszer

Meg lehet mutatni, hogy (lásd Numerical Recipes):

- egy (a,b,c) pontháromasból indulva
- tekintve az $[a, b]$ és a $[b, c]$ intervallumokat
- az új x pontot a két fenti intervallum közül a nagyobbik 0.38197-ed részénél érdemes felvenni

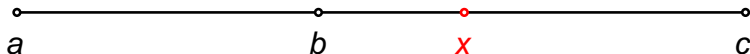


Ez a szám kapcsolatban áll az aranymetszéssel: $(1 + \sqrt{5})/2$

Az új pont helyének megválasztása: aranymetszés módszer

Meg lehet mutatni, hogy (lásd Numerical Recipes):

- egy (a,b,c) pontháromasból indulva
- tekintve az $[a, b]$ és a $[b, c]$ intervallumokat
- az új x pontot a két fenti intervallum közül a nagyobbik 0.38197-ed részénél érdemes felvenni



Ez a szám kapcsolatban áll az aranymetszéssel: $(1 + \sqrt{5})/2$

Ez azt jelenti:

- a keresési intervallum minden lépésben 0.61803-szorosára csökken
- kicsit lassabb, mint a gyökkeresés felezgetős módszere

Leállási feltétel

Milyen pontosan lehet megtalálni a minimumot?

Ha a minimumot $(1 - \epsilon)b < b < (1 + \epsilon)b$ közé akarjuk keretezni

- a minimum körüli Taylor-sok második tagja eltűnik

$$f(x) \approx f(b) + \frac{1}{2}f''(b)(x - b)^2$$

- a második tag a fenti egyenletben elhanyagolható lesz az elsőhöz képest, ha

$$|b - x| < \sqrt{\epsilon} |b| \sqrt{\frac{2|f(b)|}{b^2 f''(b)}}$$

ahol ϵ a számábrázolási pontosság

- így a minimum közelébe csak $\sqrt{\epsilon}$ rendben kerülhetünk

Brent-módszer parabolikus interpolációval

Ha a függvény jól viselkedik, akkor az aranymetszés módszernél gyorsabban konvergáló módszer is van

Brent-módszer parabolikus interpolációval

Ha a függvény jól viselkedik, akkor az aranymetszés módszernél gyorsabban konvergáló módszer is van

Ha az a , b és c pontok bekeretezik a minimumot

- megpróbálhatunk parabolát illeszteni
- az új pontot a parabola minimumába tesszük

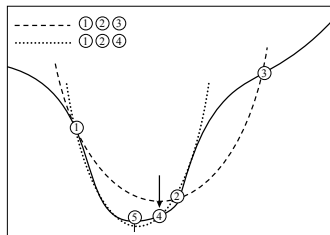


Figure: Minimumkeresés parabolaillesztéssel. ©Numerical Recipes

Ha nem sikerül jó parabolát illeszteni, visszatérünk az intervallum felosztásához

Deriváltat is használó módszer egy dimenzióban

Ha nem csak az f függvény, de a deriváltja is ismert

- elvileg kereshetnénk a derivált zérushelyeit, valamely gyökkereső módszerrel
- de nem tudjuk megmondani, hogy az $f'(x) = 0$ helyek maximumnak vagy minimumnak felelnek meg

Az arany metszéses módszer javítható

- ha a deriváltat olcsó kiszámolni
- a minimumot itt is a , b és c pontok keretezik
- kiszámoljuk $f'(b)$ -t, az előjele megadja, hogy merre lépünk

Többdimenziós módszerek

Több dimenzióban, vagyis egy többváltozós $f(\mathbf{x})$ függvény esetén nem tudjuk bekeretezni a minimumot!

Többdimenziós módszerek

Több dimenzióban, vagyis egy többváltozós $f(\mathbf{x})$ függvény esetén nem tudjuk bekeretezni a minimumot!

A módszerek most is két csoportra oszthatóak:

- csak függvénykiértékelések szükségesek, pl Nelder–Mead-módszer
- a függvény $\nabla f(\mathbf{x})$ gradiensét is fel tudjuk használni, pl konjugált gradiens módszer

Mi a *szimplex*?

- a D dimenziós térben $D + 1$ pont által meghatározott test
- 2 dimenzióban: háromszög
- 3 dimenzióban: általános tetraéder stb.
- nemdegenerált szimplex: ha $D + 1$ pont közül egyiket az origónak választjuk, az origóból a többi D pontba mutató vektorok kifeszítik a D dimenziós vektorteret

A Nelder–Mead-módszer

Kiindulás:

- választunk egy \mathbf{P}_0 pontot, ami közel van a minimumhoz
- ekörül választunk egy nem túl nagy szimplexet
- például a következő módon:

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{P}_0 + \lambda \mathbf{e}_i$$

- \mathbf{e}_i -k a bázisvektorok
- ha van valamilyen karakterisztikus hossz-skálája a problémának, akkor λ -t eszerint választjuk
- egyébként próbálgatás

A Nelder–Mead-módszer

Kiindulás:

- választunk egy \mathbf{P}_0 pontot, ami közel van a minimumhoz
- ekörül választunk egy nem túl nagy szimplexet
- például a következő módon:

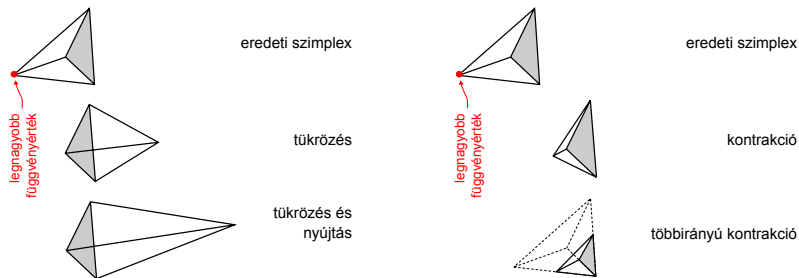
$$\mathbf{P}_i = \mathbf{P}_0 + \lambda \mathbf{e}_i$$

- \mathbf{e}_i -k a bázisvektorok
- ha van valamilyen karakterisztikus hossz-skálája a problémának, akkor λ -t eszerint választjuk
- egyébként próbálgatás

Elemi lépés:

- meghatározzuk a szimplex azon csúcsát, ahol a függvény értéke a legnagyobb
- ezt a csúcsot módosítjuk
- a módosítás többféle módon történhet
- a szimplex csúcsaiban felvett függvényértékek összehasonlításával eldöntjük, hogy melyik módosítást fogadjuk el

Lehetséges szimplex lépések



Látványos animáció arról, hogy hogyan működik a módszer egy kétdimenziós függvény esetén a [Wikipedián](https://en.wikipedia.org/wiki/Nelder%E2%80%93Mead_method)

https://en.wikipedia.org/wiki/Nelder%E2%80%93Mead_method

A szimplex amőbaszerűen mozogva találja meg a legközelebbi lokális függvényminimumot

A szimplex módszer tulajdonságai

- a függvény parciális deriváltjai nem szükségesek
- de a szimplex csúcsai mindig valami képet adnak a függvény lokális meredekségéről

Az “amőba” mozgása

- a függvény meredek részein lemászik a hegyről
- a szűk völgyekben összehúzódik, és úgy halad lefelé
- a végén ráhúzódik a minimumra

Leállási feltétel:

- a szimplex térfogata egy adott méretnél kisebb
- a csúcsokban felvett függvényértékek egy adott határon belül vannak

Konjugált gradiens módszere

Mint a módszer neve is jelzi, a függvény gradiensére is szükségünk lesz

Alapötlet: tegyük fel, hogy $f(\mathbf{x})$ igaz:

$$f(\mathbf{x}) \approx c - \mathbf{b} \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2} \cdot \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x},$$

- jó közelítéssel kvadratikus
- emlékeztető: pl a χ^2 minimalizálási problémák is lehetnek ilyenek!

Konjugált gradiens módszere

Mint a módszer neve is jelzi, a függvény gradiensére is szükségünk lesz

Alapötlet: tegyük fel, hogy $f(\mathbf{x})$ igaz:

$$f(\mathbf{x}) \approx c - \mathbf{b} \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2} \cdot \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x},$$

- jó közelítéssel kvadratikus
- emlékeztető: pl a χ^2 minimalizálási problémák is lehetnek ilyenek!

- f -nek nagyságrendileg $O(N^2)$ paramétere van
- ezek a \mathbf{b} , valamint az \mathbf{A} elemei
- ha bármelyik paramétert ezek közül változtatjuk, az befolyásolhatja a minimum helyét
- tehát nagyjából $O(N^2)$ számot kell meghatároznunk
- ehhez használhatjuk a gradiens vektor elemeit
- illetve különböző irányok mentén vett (egydimenziós) minimalizációkat

A legmeredekebb ereszkedés

Legegyszerűbb hozzáállás: induljunk ki egy \mathbf{P}_0 pontból

- határozzuk meg a gradiensvektort: $-\nabla f(\mathbf{P}_0)$, ez kijelöl egy irányt
- ez az irány mentén csökken a leggyorsabban a függvény
- ezért a lépés maga az irány által kijelölt *egyenes mentén* történő minimalizáció legyen
- így érünk el a \mathbf{P}_1 pontba
- a lépéssor ismétlése $-\nabla f(\mathbf{P}_i)$ irányba
- ez a legmeredekebb ereszkedés (steepest descent) módszer

A legmeredekebb ereszkedés problémája

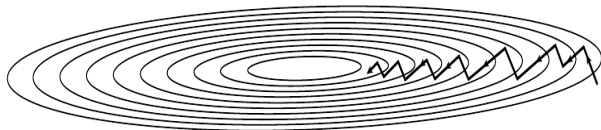


Figure: Legmeredekebb ereszkedés iteráció. ©Numerical Recipes

Probléma

- az újabb pontban a gradiens mindig merőleges a előző irányra
- ez abból következik, hogy minimumba léptünk
- vagyis egy újabb lépés mindig merőleges lesz az előzőre
- “szűk völgyekben” nagyon lassan halad az iteráció

Konjugált gradiens módszere

Ha mindig gradiens irányba megyünk, az nem jó

- lépünk ún. konjugált irányokba

Konjugált gradiens módszere

Ha mindig gradiens irányba megyünk, az nem jó

- lépünk ún. konjugált irányokba

Vektorok egy $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_n$ halmaza *ortogonális*, ha

$$\mathbf{g}_i^T \cdot \mathbf{g}_j = 0, \quad \text{ha } i \neq j$$

Vektorok egy $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \dots, \mathbf{h}_n$ halmaza \mathbf{A} szerint *konjugált*, ha

$$\mathbf{h}_i^T \mathbf{A} \mathbf{h}_j = 0, \quad \text{ha } i \neq j$$

Konjugált gradiens módszere

Ha mindig gradiens irányba megyünk, az nem jó

- lépünk ún. konjugált irányokba

Vektorok egy $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_n$ halmaza *ortogonális*, ha

$$\mathbf{g}_i^T \cdot \mathbf{g}_j = 0, \quad \text{ha } i \neq j$$

Vektorok egy $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \dots, \mathbf{h}_n$ halmaza \mathbf{A} szerint *konjugált*, ha

$$\mathbf{h}_i^T \mathbf{A} \mathbf{h}_j = 0, \quad \text{ha } i \neq j$$

- egy \mathbf{P}_0 pontból kiindulva olyan lépéseket szeretnénk generálni, melyek teljesítik a konjugalitási feltételt.
- belátható, hogy ezzel hatékonyan minimalizálható a korábban felírt $f(\mathbf{x})$ kvadratikus probléma

Konjugált gradiens módszere

Egy \mathbf{g}_n és egy \mathbf{h}_n vektorsorozatot fogunk generálni

Kiindulás:

- \mathbf{P}_0 pontból indulunk
- az első lépést gradiens irányban tesszük: $\mathbf{g}_0 = -\nabla f(\mathbf{P}_0)$
- a másik vektorsorozat inicializálása: $\mathbf{h}_0 = \mathbf{g}_0$
- a \mathbf{h}_0 irányban keressük meg a függvény lokális minimumát : \mathbf{P}_1
- ekkor nyilván írható: $\mathbf{P}_1 = \mathbf{P}_0 + \alpha_0 \mathbf{h}_0$

Konjugált gradiens módszere

Egy \mathbf{g}_n és egy \mathbf{h}_n vektorsorozatot fogunk generálni

Kiindulás:

- \mathbf{P}_0 pontból indulunk
- az első lépést gradiens irányban tesszük: $\mathbf{g}_0 = -\nabla f(\mathbf{P}_0)$
- a másik vektorsorozat inicializálása: $\mathbf{h}_0 = \mathbf{g}_0$
- a \mathbf{h}_0 irányban keressük meg a függvény lokális minimumát : \mathbf{P}_1
- ekkor nyilván írható: $\mathbf{P}_1 = \mathbf{P}_0 + \alpha_0 \mathbf{h}_0$

További lépések:

- meghatározzuk a legmeredekebb irányt: $\mathbf{g}_n = -\nabla f(\mathbf{P}_n)$
- de a következő minimalizálást a $\mathbf{h}_n = \mathbf{g}_n + \gamma_n \mathbf{h}_{n-1}$ irányba végezzük, ahol

$$\gamma_n = \frac{\mathbf{g}_n^T \mathbf{g}_n}{\mathbf{g}_{n-1}^T \mathbf{g}_{n-1}}$$

- vagyis $\mathbf{P}_n = \mathbf{P}_{n-1} + \alpha_n \mathbf{h}_n$,

Konjugált gradiens módszere

Tehát

- az első lépést még a $\mathbf{h}_0 = \mathbf{g}_0$ legmeredekebb ereszkedés irányába tesszük
- de $\mathbf{h}_1 = \mathbf{g}_1 + \gamma_1 \mathbf{h}_0 \neq \mathbf{g}_1$
- vagyis a következő lépéseket már nem a $\mathbf{g}_1 \equiv -\nabla f(\mathbf{P}_1)$ legmeredekebb ereszkedés irányába történnek

Konjugált gradiens módszere

Tehát

- az első lépést még a $\mathbf{h}_0 = \mathbf{g}_0$ legmeredekebb ereszkedés irányába tesszük
- de $\mathbf{h}_1 = \mathbf{g}_1 + \gamma_1 \mathbf{h}_0 \neq \mathbf{g}_1$
- vagyis a következő lépéseket már nem a $\mathbf{g}_1 \equiv -\nabla f(\mathbf{P}_1)$ legmeredekebb ereszkedés irányába történnek

Honnan ered a név?

Megmutatható, hogy a \mathbf{h}_n vektorokra teljesül:

$$\mathbf{h}_i^T \mathbf{D} \mathbf{h}_j = 0, \quad \text{ha } i \neq j$$

ahol az \mathbf{D} mátrix az $f(\mathbf{x})$ függvény Hessian mátrixa

Viszont az \mathbf{D} mátrixot nem kell explicit számolni!

Emlékeztető és összehasonlítás

- hasonló problémával már találkoztunk: nemlineáris függvényillesztés előadás
- akkor $\chi^2(\mathbf{a})$ költségfüggvény minimális egy \mathbf{a}_{min} paramétervektor esetén
- ha van valami sejtésünk arról, hogy \mathbf{a}_{min} hol helyezkedik el a paramétertérben, akkor ezt kihasználhatjuk: \mathbf{a}_{min} -hez közeli \mathbf{a}_0 esetében

$$\chi^2(\mathbf{a}) \approx \chi^2(\mathbf{a}_0) + \left. \frac{\partial \chi^2}{\partial \mathbf{a}_k} \right|_{\mathbf{a}_0} (\mathbf{a} - \mathbf{a}_0) + (\mathbf{a} - \mathbf{a}_0)^T \left. \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial \mathbf{a}_k \partial \mathbf{a}_l} \right|_{\mathbf{a}_0} (\mathbf{a} - \mathbf{a}_0)$$

Tehát

$$\nabla \chi^2(\mathbf{a}) = \nabla \chi^2(\mathbf{a}_0) + \mathbf{D} \cdot (\mathbf{a} - \mathbf{a}_0)$$

Jelölések:

$$\nabla \chi^2(\mathbf{a}_0) = \left. \frac{\partial \chi^2}{\partial \mathbf{a}_k} \right|_{\mathbf{a}_0} \quad D_{kl} = \left. \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial \mathbf{a}_k \partial \mathbf{a}_l} \right|_{\mathbf{a}_0}$$

Mivel a model explicit adott, $\nabla \chi^2(\mathbf{a}_0)$ és \mathbf{D} kiszámolható

Emlékeztető és összehasonlítás

Ha $\mathbf{a} = \mathbf{a}_{min}$, akkor $\nabla\chi^2(\mathbf{a}_{min}) = 0. \Rightarrow$

$$(\mathbf{a}_{min} - \mathbf{a}_0) = -\mathbf{D}^{-1}[\nabla\chi^2(\mathbf{a}_0)]$$

Elvileg egy lépésben megtalálhatjuk \mathbf{a}_{min} -t:

$$\mathbf{a}_{min} = \mathbf{a}_0 - \mathbf{D}^{-1}[\nabla\chi^2(\mathbf{a}_0)]$$

Emlékeztető és összehasonlítás

Ha $\mathbf{a} = \mathbf{a}_{min}$, akkor $\nabla \chi^2(\mathbf{a}_{min}) = 0. \Rightarrow$

$$(\mathbf{a}_{min} - \mathbf{a}_0) = -\mathbf{D}^{-1}[\nabla \chi^2(\mathbf{a}_0)]$$

Elvileg egy lépésben megtalálhatjuk \mathbf{a}_{min} -t:

$$\mathbf{a}_{min} = \mathbf{a}_0 - \mathbf{D}^{-1}[\nabla \chi^2(\mathbf{a}_0)]$$

Összefoglalva

- ha ismerünk egy minimumhoz közeli \mathbf{a}_0 pontot
- és tudjuk számolni a \mathbf{D} Hessian mátrixot
- akkor nem kell iterálni, hanem akár egy lépésben is megtalálhatjuk a minimumot
- a \mathbf{D} számolása sok probléma esetén nem lehetséges, és/vagy nincs egy jó \mathbf{a}_0 kiinduló pont
- ekkor iteratív módszerek

Néhány nehéz probléma

Minimalizációs problémák több szempontból is lehetnek nehezek

- nagyon bonyolult a minimalizálandó függvény
- nem ismerjük a deriváltjait
- lehet, hogy nem is adott függvényként, pl algoritmus állítja elő
- a függvénynek nagyon sok változója van

Fizikában többnyire

- valamilyen rendszer energiaminimumát keressük
- az energia lesz tehát a költségfüggvény
- a változók a rendszer szabadsági fokai

Az energiafelület (költségfüggvény) lehet nagyon bonyolult

- nagyon sok változó
- a konfigurációs térnek lehetnek nagy “vízválasztókkal” szeparált részei az egyes (lokális) minimumok között
- ezeken a (energia)hegyeken csak nagy ugrással lehet átjutni
- kérdés, hogy elég-e hozzá az elemi lépés

Példa sok változóra: Ising-modell

Ferromágneses vagy antiferromágneses anyagok modellje

- olyan anyag, amiben az atomok egy rácsban vannak
- minden atomnak van egy spinje és ezzel arányos mágneses momentuma
- a spinek kölcsönhatnak

A rendszer összenergiája

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \mu H \sum_j S_j,$$

- S_i az i . spin, értéke $+1$ vagy -1
- J_{ij} a két spin közötti csatolási állandó
- H a külső mágneses tér

Ising-modell

A rendszer összenergiája

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \mu H \sum_j S_j,$$

Ferromágnes legegyszerűbb modellje

- $J_{ij} = J > 0$ állandó, és csak a szomszédos spinek között
- mivel $J > 0$ ezért a szomszédos spinek parallel beállása preferált
- nulla hőmérsékleten az alapállapot (energia minimum) az, hogy minden spin parallel \rightarrow maximális mágnesezettség
- véges hőmérsékleten termikus fluktuációk
- a mágnesezettség (\sim a spin átlagos értéke) tehát függ a T hőmérséklettől
- $T > T_c$ esetén eltűnik a mágnesezettség
- mekkora T_c értéke? 1 és 2 dimenzióban a feladat egzaktul megoldható
- realiztikusabb esetben (3D, nem csak első szomszéd J_{ij}) már nincs egzakt megoldás

Utazó ügynök (travelling salesman)

Egy ügynöknek be kell járnia az USA összes N nagyvárosát. Találjuk meg a legrövidebb útat, amely minden város pontosan egyszer érint!

- a városok a térképen x_i, y_i pontokban helyezkednek el
- a költségfüggvény

$$L = \sum_{i=1}^N \sqrt{(x_i - x_{i+1})^2 + (y_i - y_{i+1})^2} \quad (1)$$

Ha a városok száma N , akkor

- $\frac{1}{2}N(N - 1)$ távolság van
- az összes lehetséges bejárás száma: $N!$ (permutáció)

Nehéz számítási problémák

A lehetséges konfigurációk száma nagyon nagy

- Ising-modellnél spinek beállása: 2^N
- utazó ügynöknél az utak száma: $N!$
- tehát a konfigurációk száma exponenciálisan növekszik
- ezért nem lehet minden konfigurációt végigpróbálgatni, hogy megtaláljuk a minimumot

Nehéz számítási problémák

A lehetséges konfigurációk száma nagyon nagy

- Ising-modellnél spinek beállása: 2^N
- utazó ügynöknél az utak száma: $N!$
- tehát a konfigurációk száma exponenciálisan növekszik
- ezért nem lehet minden konfigurációt végigpróbálgatni, hogy megtaláljuk a minimumot

Közös jellemző, hogy egy adott konfigurációra

- az Ising modellnél az energia kiszámítása legrosszabb esetben is $O(N^2)$ nagyságrendű
- utazó ügynöknél az út kiszámítása csak $O(N)$ nagyságrendű

Nehéz számítási problémák

Vagyis a probléma

- megoldása úgy, hogy minden konfigurációt kipróbálunk, nehezebb, mint polinomiális
- de egy konfiguráció polinomiális idő alatt kiértékelhető

Az ilyen számítási problémákat *NP-teljesnek* nevezzük (non-deterministic polynomial)

Nehéz számítási problémák

Vagyis a probléma

- megoldása úgy, hogy minden konfigurációt kipróbálunk, nehezebb, mint polinomiális
- de egy konfiguráció polinomiális idő alatt kiértékelhető

Az ilyen számítási problémákat *NP-teljesnek* nevezzük (non-deterministic polynomial)

Az Ising modell illetve az utazó ügynök probléma megoldására más megközelítést szoktak alkalmazni, lásd **Monte Carlo** módszerek

Köszönöm a figyelmet!