MAT-468: Sesión 11, Optimización Monte Carlo

Felipe Osorio

http://fosorios.mat.utfsm.cl

Departamento de Matemática, UTFSM

Optimización Monte Carlo

Objetivo:

Se desea un enfoque basado en simulación para resolver el problema:

$$\max_{\theta \in \Theta} h(\boldsymbol{\theta}).$$

La diferencia con el enfoque numérico está en el tratamiento de la función h, en este caso desde el punto de vista probabilístico.

Exploración estocástica

Si Θ es acotado (lo que puede ser conseguido mediante reparametrización), entonces un primer enfoque es simular desde una uniforme sobre Θ.

Es decir, considere $u_1, \ldots, u_m \sim \mathrm{U}(\Theta)$, y usamos la aproximación:

$$h_m^* = \max\{h(u_1), \ldots, h(u_m)\}.$$

Este método converge (cuando $m \to \infty$) pero puede ser muy lento dado que no toma en cuenta ninguna característica específica de h. Otras distribuciones en lugar de la uniforme podrían ser mejores.

Observación:

- Note que para funciones de verosimilitud costosas de evaluar, este método es poco práctico.
- Exploración puede ser difícil cuando Θ no es convexo, en cuyo caso métodos basados en simular una muestra $\theta_1, \ldots, \theta_m$, pueden ser útiles.

Exploración estocástica

Ejemplo:

Considere la función:

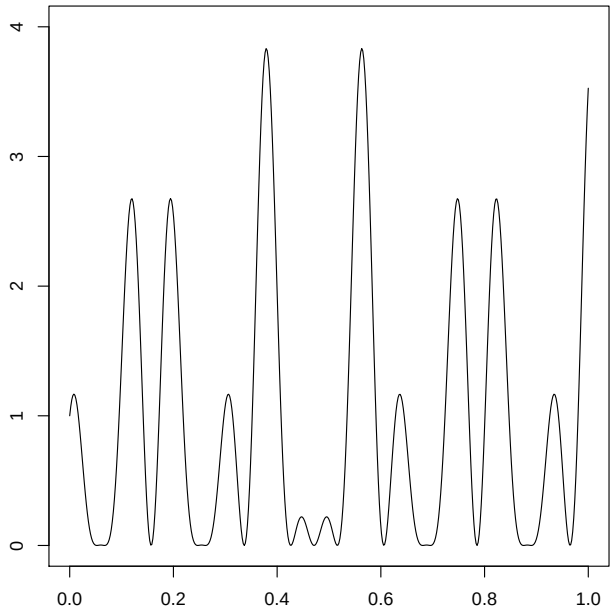
$$h(x) = \{\cos(50x) + \sin(20x)\}^2, \qquad 0 < x < 1.$$

El máximo de $h(x)$ es 3.832544. Mientras que usando 5000 puntos desde $\mathrm{U}(0, 1)$, obtenemos

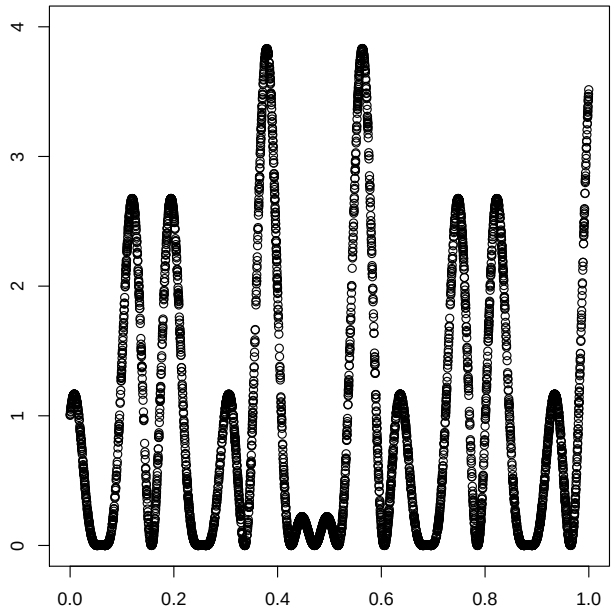
$$h_m^* = 3.832466,$$

que es una aproximación muy buena para el máximo.

Exploración estocástica



(a)



(b)

Exploración estocástica

Suponga que h está relacionado con una función de probabilidad. Por ejemplo, si h es positivo y si

$$\int_{\Theta} h(\theta)\,\mathrm{d}\,\theta < +\infty,$$

entonces el problema de $\max_{\theta\in\Theta} h(\theta)$ es equivalente a hallar las modas de la densidad h.

En ocasiones es posible transformar $h(\theta)$ en otra función $H(\theta)$ tal que

(i) H es no negativa y $\int H < +\infty$.

(ii) las soluciones de $\max_{\theta} h(\theta)$ son aquellas que maximizan $H(\theta)$ en Θ.

La idea es escribir $H(\theta)$ como

$$H(\theta) = \exp(h(\theta)/T),$$

y se escoge T de manera de acelerar la convergencia o evitar máximos locales.

Métodos gradiente estocásticos

Estos procedimientos producen una secuencia de soluciones $\{\boldsymbol{\theta}^{(k)}\}$ que converge a una solución exacta del problema $\max_\theta h(\boldsymbol{\theta})$ digamos $\boldsymbol{\theta}^*$. La secuencia es construída como

$$\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(k)} + \gamma_k \nabla h(\boldsymbol{\theta}^{(k)}), \qquad \gamma_k > 0, \tag{1}$$

donde ∇h es el gradiente de h, mientras que la secuencia $\{\gamma_k\}_{k\geq 1}$ es escogida de manera apropiada para asegurar la convergencia del algoritmo.

Cuando h es una función ruidosa el algoritmo anterior puede ser modificado mediante perturbaciones estocásticas y aún alcanzar convergencia.

(a) Suponga que la secuencia $\{\gamma_k\}_{k\geq 1}$ satisface la condición

$$\sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k = \infty, \qquad \sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k^2 < \infty. \tag{2}$$

(b) Substituir el gradiente ∇h por la diferencia, como

$$\nabla h_k(\boldsymbol{\theta}) \approx \frac{h(\boldsymbol{\theta} + \lambda_k z_k) - h(\boldsymbol{\theta} - \lambda_k z_k)}{2\lambda_k} z_k = \frac{\triangle(\boldsymbol{\theta}, \lambda_k z_k)}{2\lambda_k} z_k$$

donde $\{\lambda_k\}_{k\geq 1}$ es una segunda secuencia como en (2) y z_j es uniforme distribuído sobre la esfera unitaria $\|\boldsymbol{z}\| = 1$.

Métodos gradiente estocásticos

Esto lleva a la actualización:

$$\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(k)} + \frac{\gamma_k}{2\lambda_k} \triangle(\boldsymbol{\theta}^{(k)}, \lambda_k z_k)\, z_k.$$

Aunque el método no sigue la dirección de búsqueda dada por el gradiente permite poder escapar de óptimos locales.

La convergencia $\{\boldsymbol{\theta}^{(k)}\}$ a la solución depende de la elección de las secuencias $\{\gamma_k\}$ y $\{\lambda_k\}$. Se necesita la condición (2), mientras que $\{\lambda_k\}$ debe decrecer más lentamente, tal que la serie

$$\sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\gamma_k}{\lambda_k}\right)^2 < \infty.$$

Ejemplo:

Considere minimizar la función en $\mathbb{R}^2$

$$h(x,y) = (x\sin(20y) + y\sin(20x))^2 \cosh(\sin(10x)x) \\ + (x\cos(10y) - y\sin(10x))^2 \cosh(\cos(20y)y), \quad (x,y) \in [-1,1]^2,$$

cuyo mínimo global es 0 en el punto $(0,0)$. Esta función tiene muchos minimos globales y es bastante desafiante para los algoritmos estándar de minimización.

Considere la siguiente tabla:[1]

γ_k	λ_k	$\boldsymbol{\theta}^{(K)}$	$h(\boldsymbol{\theta}^{(K)})$	iter (K)
$1/(10k)$	$1/(10k)$	(-0.1660, 1.020)	1.28700	50
$1/(100k)$	$1/(100k)$	(0.2690, 0.786)	0.00013	93
$1/(10\log(1+k))$	$1/k$	(0.0004, 0.245)	$4.2{\cdot}10^{-6}$	58

[1] Estimación inicial: $(0.65, 0.80)$

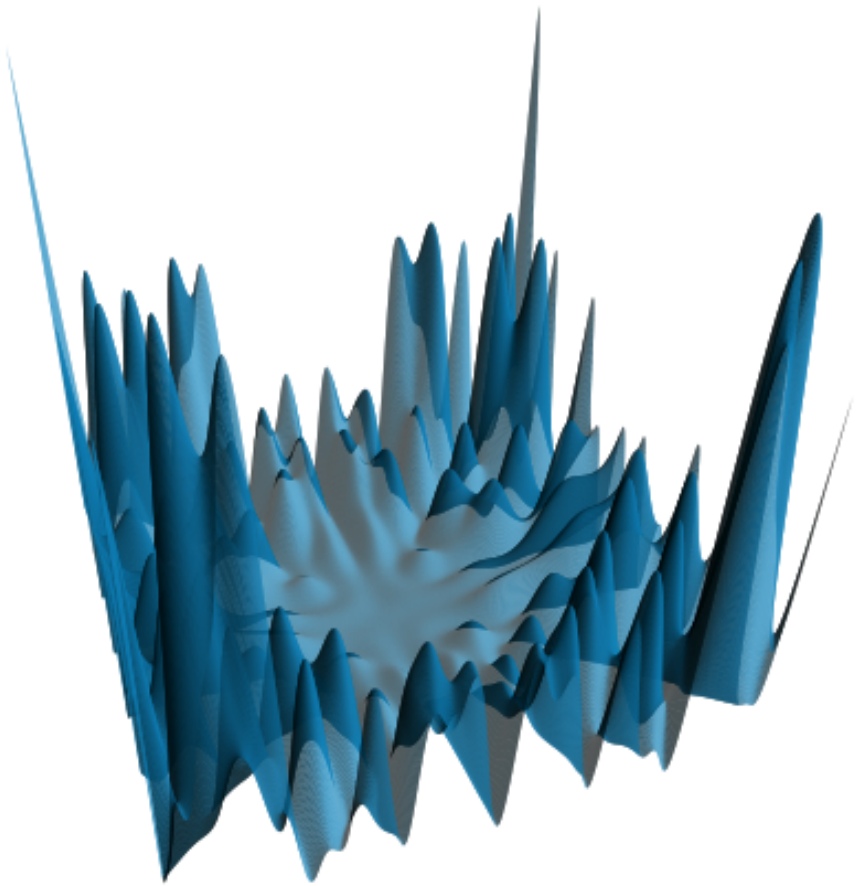


Figure: Gráfico de la función $h(x, y)$.

Tarea:

Implementar el algoritmo gradiente estocástico con $h(x, y)$ definida en el ejemplo anterior, y considere los siguientes escenarios:

1. $$\gamma_k = \frac{1}{\log(1+k)}, \qquad \lambda_k = \frac{1}{\log(1+k)^{1/10}}$$
2. $$\gamma_k = \frac{1}{100\log(1+k)}, \qquad \lambda_k = \frac{1}{100\log(1+k)}$$
3. $$\gamma_k = \frac{1}{1+k}, \qquad \lambda_k = \frac{1}{(1+k)^{1/2}}$$
4. $$\gamma_k = \frac{1}{1+k}, \qquad \lambda_k = \frac{1}{(1+k)^{1/10}}$$

Simulated Annealing

El procedimiento de simulated annealing construye una secuencia $\{\boldsymbol{\theta}^{(k)}\}$ simulando desde una densidad instrumental π_k.

Una elección estándar para π_k está basado en la transformación de Boltzman-Gibbs de h,

$$\pi_k(\boldsymbol{\theta}) \propto \exp(h(\boldsymbol{\theta})/T_k),$$

donde $\{T_k\}$ es una secuencia decreciente de *temperaturas*.

Observación:
Conforme $T_k \downarrow 0$ los valores simulados se concentran en un área cercana la máximo local de h.

Simulated Annealing

El siguiente algoritmo fue propuesto por Metropolis et al., (1953)[2] y está relacionado con el algoritmo Metropolis-Hastings

En efecto, para actualizar $\boldsymbol{\theta}^{(k)}$ a $\boldsymbol{\theta}^{(k+1)}$ se debe generar una dirección $\boldsymbol{\delta}$ desde una densidad simétrica g y el nuevo valor $\boldsymbol{\theta}^{(k+1)}$ se construye como:

$$\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \begin{cases} \boldsymbol{\theta}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}, & \text{con probabilidad } \rho = \min\{\exp(\triangle h/T_k), 1\} \\ \boldsymbol{\theta}^{(k)}, & \text{con probabilidad } 1-\rho \end{cases},$$

donde $\triangle h = h(\boldsymbol{\theta}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}) - h(\boldsymbol{\theta}^{(k)})$.

[2] The Journal of Chemical Physics **21**, 1087-1092.

Simulated Annealing

Es decir, el método propone una perturbación simétrica del valor actual $\boldsymbol{\theta}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}$.

- Si la perturbación incrementa h es decir, si

$$h(\boldsymbol{\theta}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}) \geq h(\boldsymbol{\theta}^{(k)}),$$

el paso es automáticamente aceptado.

- Por otro lado, si

$$h(\boldsymbol{\theta}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}) < h(\boldsymbol{\theta}^{(k)}),$$

aún podemos aceptar una dirección candidata con probabilidad $\rho > 0$.

Observación:

Permitiendo movimientos en los que h puede decrecer llevan a que el método de simulated annealing tenga la habilidad de escapar de óptimos locales.

Obviamente el desempeño del algoritmo depende de g y $\{T_k\}$.[3]

[3] Una elección común es $T_k = 1/\log(1+k)$.

Exploración estocástica

Tarea:

Considere la función:

$$h(x) = \{\cos(50x) + \sin(20x)\}^2, \qquad 0 < x < 1.$$

Implementar el algoritmo Simulated Annealing (SA) considerando g como $\mathsf{U}(-\zeta, \zeta)$, $T_k = 1/\log(1+k)$ y $\zeta = \sqrt{T_k}$.