Sztuczna Inteligencja
3.2 Szukanie heurystyczne I

Włodzisław Duch
Katedra Informatyki Stosowanej UMK
Google: Włodzisław Duch

Strona wykładów

Było

- Szukanie jako uniwersalna metoda rozwiązywania problemów.
- Podstawy: grafy i drzewa
- Przykłady: przesuwanka, zagadki logiczne, kryptoartymetyka
- Znaczenie reprezentacji

- Metody szukania na ślepo
- Szukanie w głąb
- Szukanie wszerz
- Szukanie iteracyjnie pogłębiane
- Szukanie dwukierunkowe
- PATHDEMO

Szukanie heurystyczne

- Metody szukania heurystycznego
- Definicja funkcji heurystycznej
- Najpierw najlepszy
  - Przesuwanka
  - Szukanie zachłanne
  - Szukanie A*
- Algorytmy iteracyjne
  - Wspinaczka
  - Monte Carlo
  - Symulowane wyżarzanie
- Klasyfikacja algorytmów szukania
- Szukanie z więzami

Szukanie heurystyczne

- Wiele rzeczywistych problemów wymaga szukania najlepszych kombinacji uwzględniających różne ograniczenia: połączeń, kosztów podróży, upakowania elementów, sekwencji DNA …
- Największym problemem w takich zastosowaniach jest eksplozja kombinatoryczna liczby dróg w **możliwych sekwencjach**.
- Ślepe szukanie **nie używa informacji** o możliwej strukturze drzewa lub ocen podobieństwa danego stanu do pożądanego celu.
- Szukanie heurystyczne wykorzystuje informacje, które mogą poprawić efektywność procesu szukania, chociaż nie gwarantują znalezienia rozwiązań optymalnych.
- Taka informacja może przyczynić się do optymalizacji procesu szukania.
- Duże modele językowe dostarczają bardzo dobrych heurystyk w procesach szukania.

Ocena procesów szukania

Jak oceniać algorytmy szukania? Najważniejsze aspekty to:

- ✓ **Zupełność** – czy jest gwarancja dotarcia do celu, jeśli istnieje.
- ✓ **Optymalność** – czy gwarantuje znalezienie optymalnego rozwiązania, czyli najtańszego rozwiązania, najkrótszej drogi.
- ✓ **Złożoność czasowa**.
- ✓ **Złożoność pamięciowa**.

Podstawowe oznaczenia:

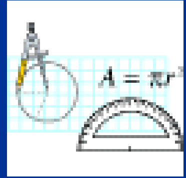
- *b* – czynnik rozgałęzień (ang. *branching factor*),
- *d* – minimalna głębokość drzewa, na której jest cel,
- *m* – maksymalna długość uwzględnianej ścieżki.

Heurystyczne Metody Szukania

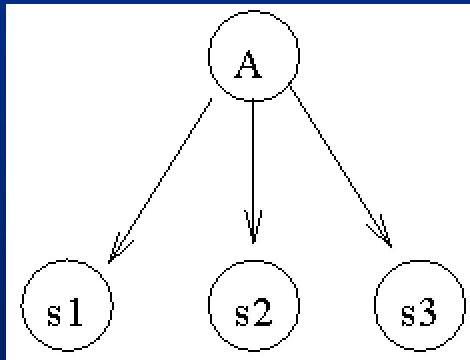
- Używają heurystyk, „reguł kciuka” by określić, która część drzewa decyzji rozwijać najpierw.
- Heurystyki to reguły lub metody, które **często, choć nie zawsze,** gwarantują podjęcie lepszej decyzji.
- Np. w sklepie z wieloma kasami dobrą reguła jest:
  stań przy kasie z najkrótszą kolejką. Ale uwaga na wyjątki!

1) jeśli stoi przy niej osobnik z furą zakupów;
2) lub nie ma przy niej kasjera;
3) lub przyjmują tylko gotówkę, a chcesz na kartę;
   ....
   to nie jest najlepsza decyzja.

Funkcja Heurystyczna



- Funkcja $h : \Psi \rightarrow R$, gdzie Ψ to zbiór dozwolonych stanów, R to liczby rzeczywiste, odwzorowuje stany *s* ze zbioru Ψ na wartości $h(s)$ służące do oceny względnych kosztów lub zysków rozwijania dalszej drogi przez węzeł odpowiadający ***s***.



Przykładowy graf

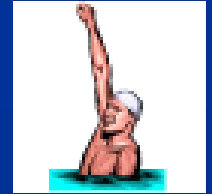
Węzeł A ma 3 potomków.

h(s1)=0.8, h(s2)=2.0, h(s3)=1.6

Wartości = koszty utworzenia węzła; najtaniej jest utworzyć węzeł s1 i ten z punktu widzenia danej heurystyki jest najlepszym kandydatem.

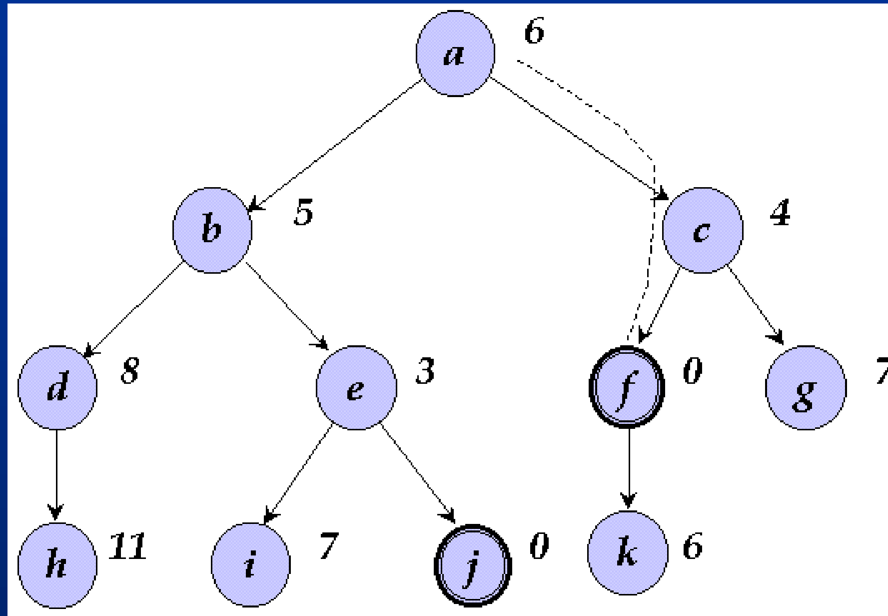
Przykłady z Javapoint AI.

Najpierw najlepszy (BestFS)



- BestFS to klasa metod łącząca szukanie w głąb (**DFS**)
  i szukanie wszerz (**BFS**).
- DFS może znaleźć dobre rozwiązania taniej niż BFS,
  ale BFS nie wpada w zamknięte pętle ani w głębokie ślepe zaułki.
- Metoda „najpierw najlepszy" (BestFS) pozwala połączyć korzyści
  z obu metod.
- Jest kilka wariantów tej metody, posługujących się heurystycznymi miarami oceny odległości od celu.
- Najprostszym wariantem jest metoda zachłanna, w której rozwijany jest tylko pierwszy najlepszy węzeł:
  marsz prosto do celu z pomijaniem innych możliwości.

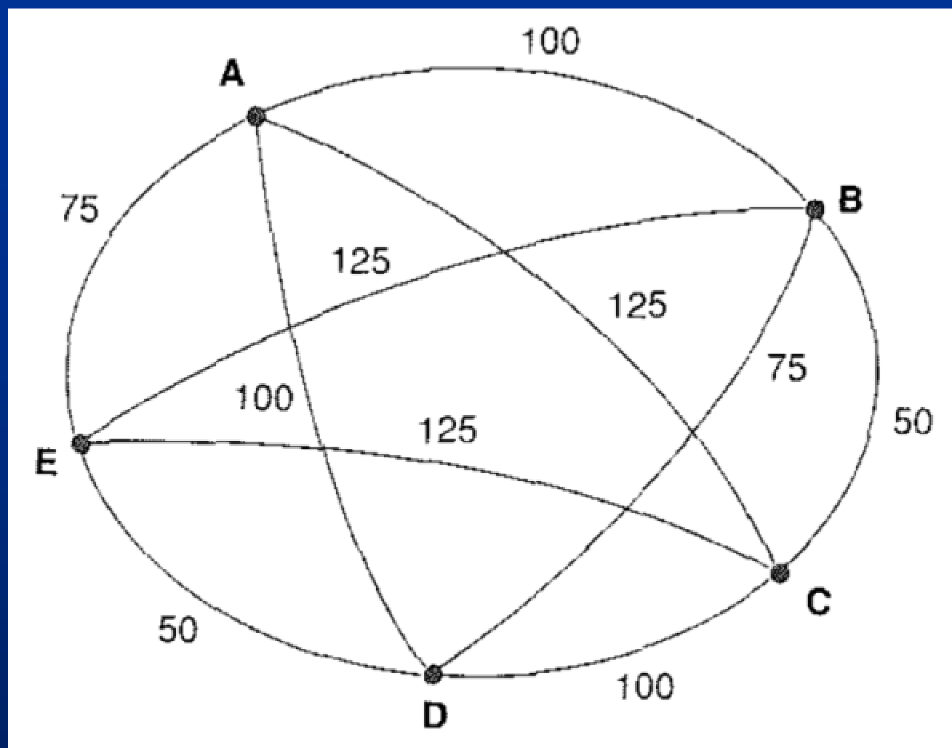
Szukanie zachłanne - ilustracja



Jeśli szukamy drogi z miejsca *a* do miejsca *j* mając tylko informacje o najbliższych miejscach to BFS odwiedzi *c*, *f* i *k*, cofnie się do *c*, odwiedzi *g*, cofnie się do *a*, odwiedzi *b, e, j*.

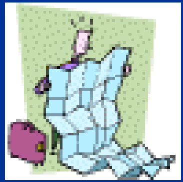
Potrzebna jest lepsza funkcja heurystyczna – np. ocena odległości od celu.

Problem wędrującego sprzedawcy



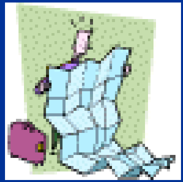
To „klasyczny problem", którego złożoność rośnie jak N! Dla N miejsc.
Zaczynamy od A, trzeba obejść wszystkie miasta. Mamy 4!=24 możliwości.
Jaka jest najkrótsza droga?
Tu odległość od celu jest początkowo 0 więc stosujemy BFS bez cofania.
Jaką drogę wybierze heurystyka zachłanna?

BFS1: szukanie zachłanne



- Szukanie zachłanne (Greedy Search, GS) to jedna z najprostszych strategii BestFS.
- Funkcja heurystyczna *h*(*n*) – ocenia pozostałe koszty dotarcia do celu, np. odległość od celu. Wówczas:
- GS = *minimalizacja ocenianych kosztów dotarcia do celu*.
- Generowane są wszystkie węzły i rozwijany węzeł najbliższy celu.
- Idziemy w głąb ile się da.
  Lepszy wariant: wracamy i wybieramy kolejny najbliższy węzeł.
- W problemach szukania drogi możliwe są różne metryki:
  (1) Najkrótsza odległość Euklidesowa między punktami;
  (2) Odległość Manhattan, czyli poruszanie się tylko po prostych poziomych i pionowych (dozwolonych drogach).
- W innych problemach mogą to być oceny podobieństwa.

Algorytm zachłanny



Dane: start S, cel G. Operatory uporządkowane O_i.

1. Inicjalizacja: bieżący węzeł C=S; koszt całkowity F=0; poziom k=1; droga V(*k*)=C.

2. Powtarzaj 3-5 jeśli k<m+1 (max głębokość)

3. Zastosuj wszystkie operatory O_i do C, oceń koszty $f_C(O_i)$ węzłów.

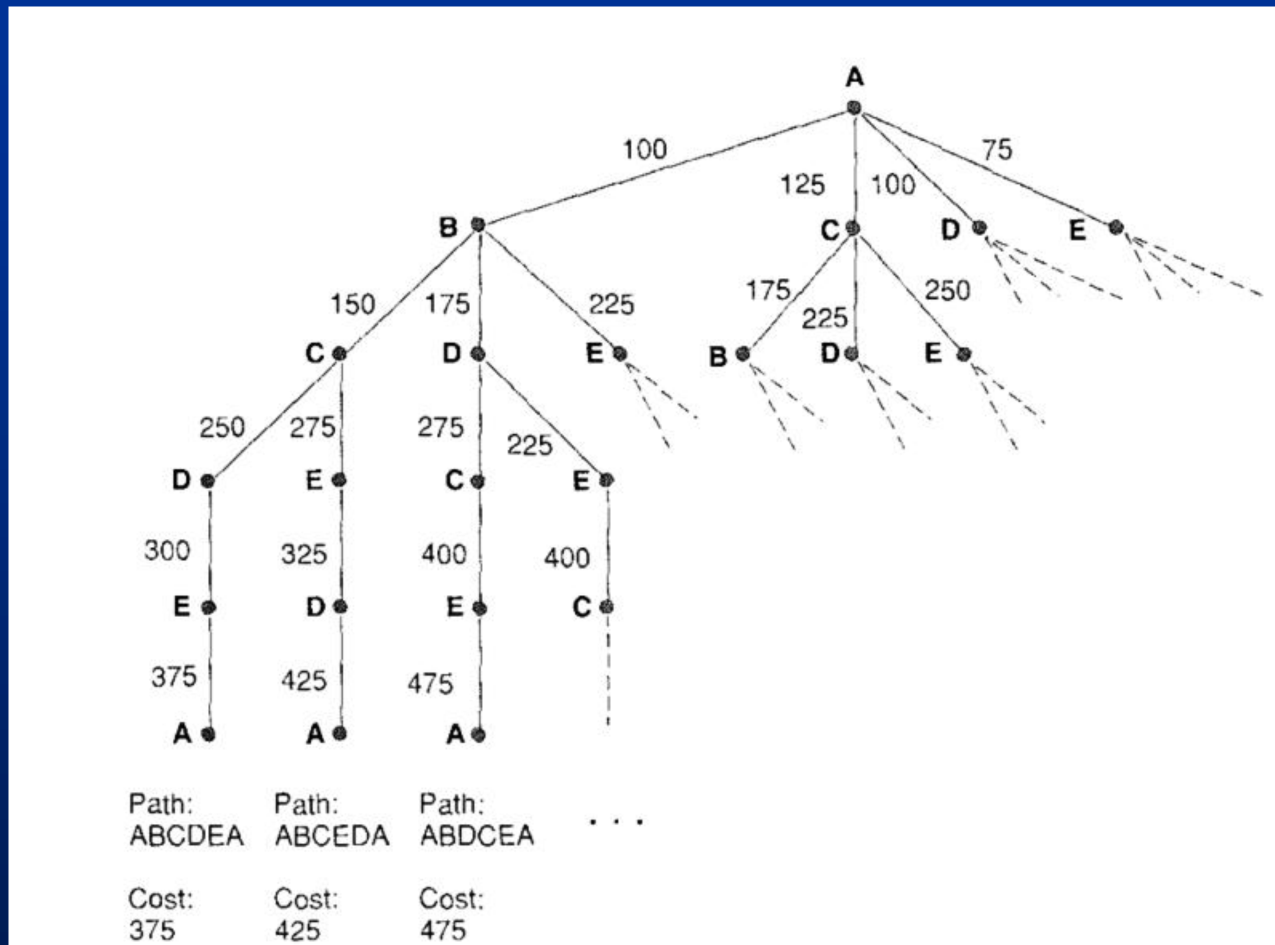
4. Jeśli nie można zastosować żadnego operatora zwróć węzeł C i *k*-wymiarowy wektor rozwiązań $V(\cdot)$; stop.

5. Przejdź do węzła C=arg min f(O_i); k=k+1; V(k)=C

Problemy: kilka węzłów ma ten sam koszt. Impas - wybieramy pierwszy, albo przypadkowy.
Bez cofania algorytm może trafić w ślepy zaułek.

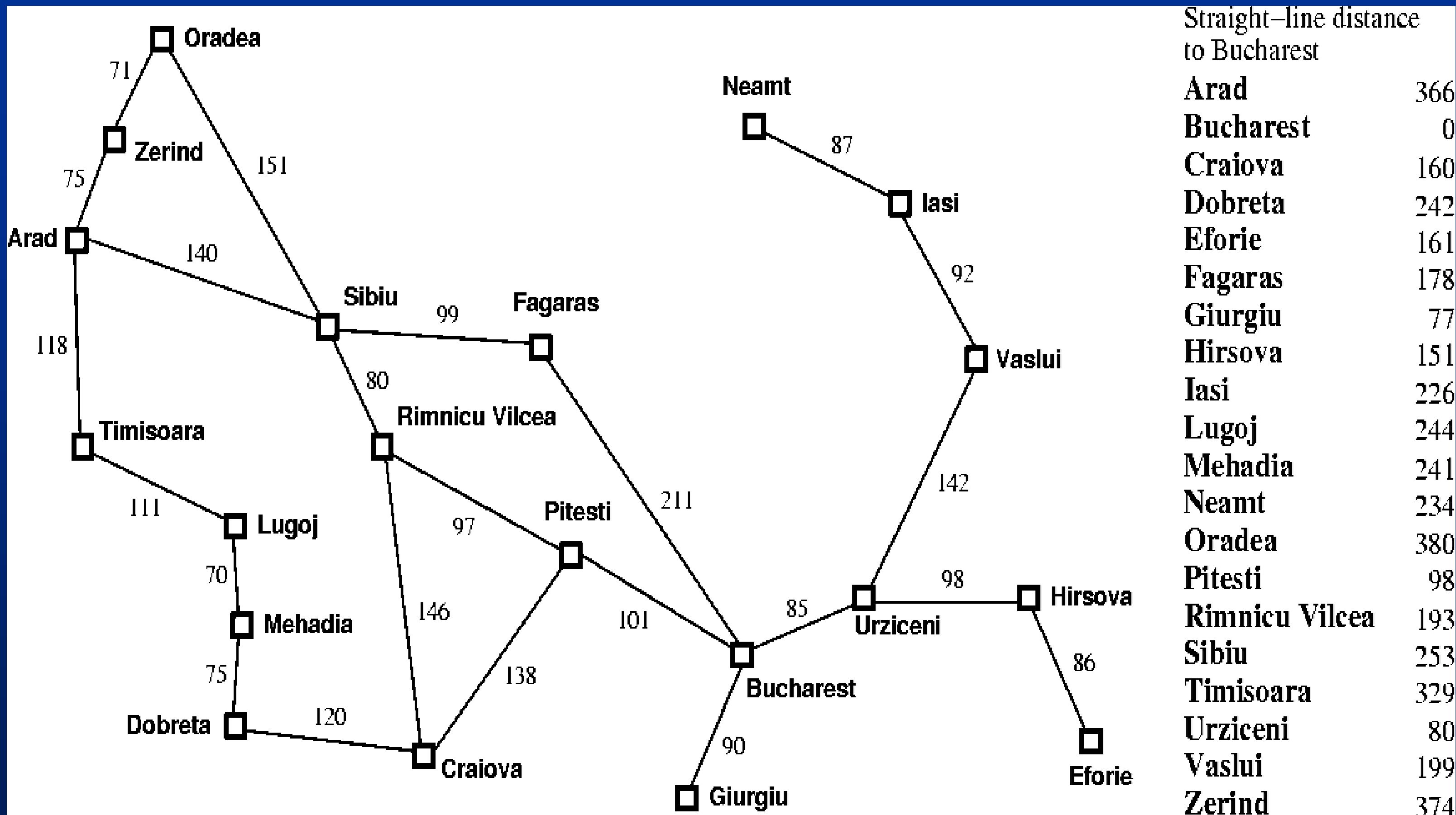
Złożoność pamięciowa i czasowa **O(*bd*)**;
metoda nie jest ani optymalna ani zupełna, ale jest tania.

Drzewo DFS dla wędrującego sprzedawcy



Zakładając N+1 miejsc i powrót do początku jest tu N! dróg dla wszystkich permutacji. Np. plany odwiedzin 21 miast i powrót do domu to 20!= 2.4×10^{18} czyli 2.4 mld mld możliwości.

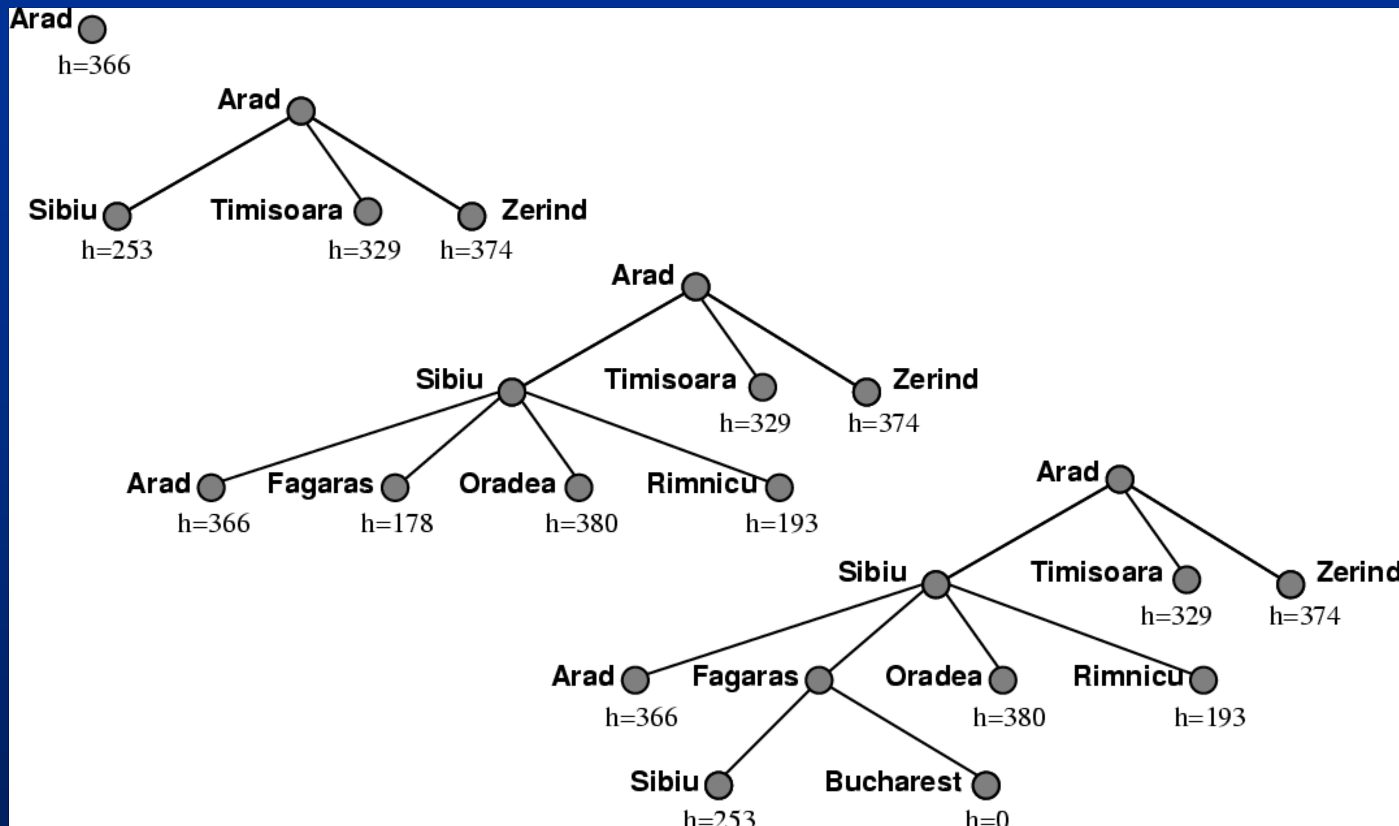
BestFS1: przykład GS z szukaniem trasy



Odległości od Bukaresztu miast na mapie Rumunii;
$h_{SLD}(n)$ = odległości w linii powietrznej do miasta n.

Przykład z Russell/Norvig, Sztuczna inteligencja. Nowe spojrzenie, 2023.

BestFS1: szukanie trasy - graf



Szukanie zachłanne najkrótszej drogi do Bukaresztu.
Wartość funkcji heurystycznej $h(n)$ = odległości mierzonej w linii prostej od Bukaresztu, podanej obok węzłów grafu.
Znaleziona droga A $\rightarrow$ S $\rightarrow$ F $\rightarrow$ B. Czy jest optymalna?

BestFS zachłanne

- Znalezione rozwiązanie A $\rightarrow$ S $\rightarrow$ F $\rightarrow$ B **nie jest optymalne**, jest o 32 km dłuższe niż optymalna droga $A \rightarrow S \rightarrow R \rightarrow P \rightarrow B$.

- Strategia zachłanna GS maksymalnie zmniejsza różnicę redukując koszt następnego kroku dotarcia do celu, ale bez oceny czy znalezione rozwiązanie jest „globalnie” optymalne.

- Chciwość to jeden z 7 grzechów głównych, ale **zwykle się opłaca**, chociaż nie zawsze rozwiązanie jest najlepsze.

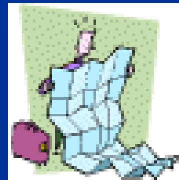
- Szukanie zachłanne może utknąć w ślepej uliczce.
  Np. jadąc z *Iasi* do *Fagaras* zacznie od *Neamt,* gdzie droga się od razu kończy; algorytm Best FS musi uwzględnić cofanie się (backtracing) jeśli nie dotarł do celu.

Zadanie: zmodyfikuj algorytm zachłanny dodając cofanie.
Jak komplikuje to obliczenia?

BestFS-backtracing

- Szukanie Best FS przypomina **DFS** rozwijając tylko jedną ścieżkę, wycofując się, kiedy trafi się na ślepy zaułek.
- Algorytm ma te same problemy co DFS – nie jest to algorytm optymalny ani zupełny, ale jest szybki.
- Złożoność w najgorszym razie (wiele ślepych dróg) wynosi $O(b^m)$, dla m kroków w głąb i średnio b możliwości, ale w praktyce bywa bliższa $O(m)$.
- Dobra funkcja heurystyczna powinna zredukować znacznie złożoność procesu szukania, ale zależy to od konkretnego problemu i od samej funkcji heurystycznej, nie można więc podać dokładniejszych oszacowań.

UCS - stałe koszty



Uniform Cost Search (UCS): szukanie przy stałych kosztach, ulepszona wersja algorytmu „najpierw najlepszy” BestFS.

1. Oceń koszty, uporządkuj kolejkę według kosztów.
2. Przejdź do węzła o najniższym koszcie.
3. Jeśli jest to stan docelowy G zakończ.
4. Jeśli koszt przekroczy zadany próg cofnij się o jeden poziom i wybierz kolejny węzeł z kolejki.

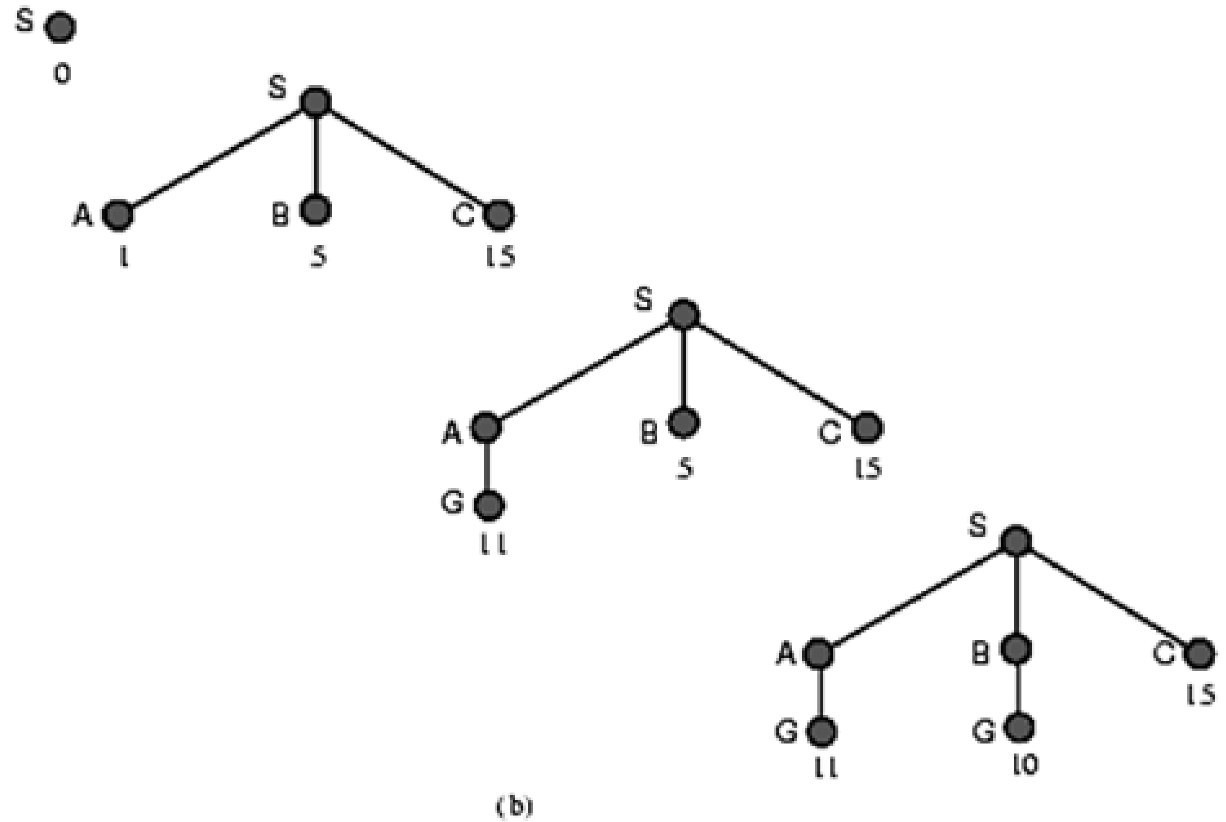
Jeśli koszt wszystkich węzłów jest jednakowy to UCS jest równoważne zwykłemu szukaniu w głąb.

Złożoność: C^* to długość najkrótszej ścieżki do celu,
ε to minimalny koszt każdego kroku, b to maksymalna liczba rozgałęzień.
W najgorszym przypadku czas i pamięć jest $O(b^{1+\lfloor C^*/\varepsilon \rfloor})$.

Dowód jest w podręczniku Russela i Norviga.

UCS - przykład

Przechodzimy z S do G. Koszty są po lewej stronie. Niech $F_{max}=10$



Węzeł C nie wymaga sprawdzenia, droga do G ma koszt > F_{max}.

Przykłady i warianty UCS w Java.

Programowanie dynamiczne

Ogólna idea (Bellman, 1957):

1. Rozbij rekursywnie problem na coraz prostsze podproblemy.
2. Oceń koszty i rozwiąż najprostsze problemy.
3. Zapisz koszty rozwiązania w tablicy.
4. Poszukaj drogi w tablicy minimalizującej koszty rozwiązań całego problemu, złóż końcowe rozwiązanie z podproblemów zgodnie z minimalnymi kosztami.

Wielokrotne wykorzystanie powtarzających się prostych rozwiązań pozwala czasami zredukować złożoność eksponencjalną na wielomianową.

- Intro to Dynamic Programming.

PD-proste przykłady

•Bardzo przydatna technika, popularna szczególnie w trudnych problemach bioinformatyki, np. szukania współliniowości ciągu aminokwasów w białkach lub par zasad DNA.

Przykłady: ciąg Fibonacciego, oblicz F(n) dla dużego n. Animacja.
$F(n) = F(n-1) + F(n-2)$; $F(0) = 0$; $F(1) = 1$

•Jeśli robimy to rekursywnie za każdym razem powtarzamy *n* kroków, jaka jest wtedy złożoność? Lepiej część zapamiętać.

Tabela: F(i)=[1,1,2,3,5,8,13 …]

Współczynniki dwumienne: oblicz C(n,k)

$C(n,k) = C(n-1,k) + C(n-1,k-1)$
for $n > k > 0$; $C(n,0) = 1$, $C(n,n) = 1$ for $n \geq 0$

Potrzebna tabela 2D dla C(n,k) – trójkąt Pascala.

1
1 1
1 2 1
1 3 3 1
1 4 6 4 1
1 5 10 10 5 1

Cząstkowe obliczenia redukują złożoność problemu.

Idea PD dla szukania

Zasada „programowania dynamicznego” dla algorytmów szukania opiera się na uwadze:

- Jeśli najlepsza droga do celu G przechodzi przez pośredni węzeł P, to najlepsza droga od startu S do P połączona z najlepszą drogą z P do G daje optymalne rozwiązanie.

Wniosek: szukając najlepszej drogi do celu wystarczy rozpatrywać tylko najkrótszą drogę do P (ale trzeba znać P).

Trzeba więc znać długość różnych fragmentów – stąd hasło DP: ”kto nie pamięta przeszłości, musi ją odtworzyć”.

Przykład: wędrówki po Australii ze strony „shortest path place”: http://www.ifors.ms.unimelb.edu.au/tutorial/path/

Przykłady zastosowań i tutorial Programowania Dynamicznego z freecodecamp.org oraz VisualGo Dynamic Programming - problem komiwojażera i jego złożoność metodą PD.

Algorytm Floyda-Warshalla

Szukaj najbliższej drogi pomiędzy dowolną parą węzłów w grafie.

•Oblicz tablicę $D(v_i,v_j)$ minimalnych odległości (kosztów) pomiędzy węzłami mając Graf $G = (V; E; d)$.
Dla każdej pary połączonych węzłów oblicz $d(v_1,v_2)$;
jeśli nie są połączone to wstaw inf (∞).

Algorytm:

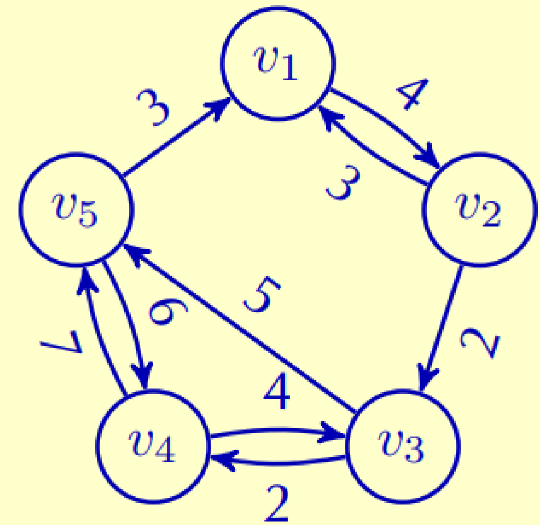
```
for (int k = 1; k<=n; k++)
  for (int i = 1; i<=n; i++)
    for (int j = 1; j<=n; j++)
D[i,j] := min (D[i,j], D[i,k] + D[k,j];
return D;
```

Złożoność czasowa ~$O(n^3)$ dla n węzłów grafu.

Ilustracja algorytmu z Programiz

Przykład PD metodą Floyda

W k-tym kroku wartość D[i;j] to długość najkrótszej drogi z v_i do v_j o wierzchołkach pośrednich ze zbioru {v_1 … v_k}.



D^0	1	2	3	4	5
1	0	4	∞	∞	∞
2	3	0	2	∞	∞
3	∞	∞	0	2	5
4	∞	∞	4	0	7
5	3	∞	∞	6	0

D^1	1	2	3	4	5
1	0	4	∞	∞	∞
2	3	0	2	∞	∞
3	∞	∞	0	2	5
4	∞	∞	4	0	7
5	3	7	∞	6	0

D^2	1	2	3	4	5
1	0	4	6	∞	∞
2	3	0	2	∞	∞
3	∞	∞	0	2	5
4	∞	∞	4	0	7
5	3	7	9	6	0

D^3	1	2	3	4	5
1	0	4	6	8	11
2	3	0	2	4	7
3	∞	∞	0	2	5
4	∞	∞	4	0	7
5	3	7	9	6	0

D^4	1	2	3	4	5
1	0	4	6	8	11
2	3	0	2	4	7
3	∞	∞	0	2	5
4	∞	∞	4	0	7
5	3	7	9	6	0

D^5	1	2	3	4	5
1	0	4	6	8	11
2	3	0	2	4	7
3	8	12	0	2	5
4	10	14	4	0	7
5	3	7	9	6	0

BestFS2: szukanie A*

- BestFS1 minimalizuje tylko koszty dojścia do celu $h(n)$.

- **Alternatywą** jest minimalizacja kosztów dojścia do każdego węzła $g(n)$ jak w PD – jest to metoda kompletna, optymalna,
ale dość kosztowna $\sim O(n^3)$.

- Metoda A* łączy obydwie funkcje heurystyczne,
$h(n)$ oraz $g(n)$ w jednej funkcji oceniającej koszty najtańszego rozwiązania przechodzącego przez węzeł *n*, tzn.
$f(n) = g(n) + h(n)$.

- Jeśli $f(n) \leq$ rzeczywistych kosztów A* jest optymalne!

Ilustracja A* w Javatpoint i w PathFinding.

S

A 2 +5 = 7

E 2 +7 = 9

B 4 +4 = 8

F 7 +4 = 11

C 6 +4 = 10

G 9 +2 = 11

D 9 +3 = 12

T 11 + 0 = 11

S

E 7

2

2

5

A 5

2

F 4

C 4

2

B 4

2

3

G 2

2

D 3

3

T

BestFS2: A* cd.

Własności:

- Ponieważ wybierana jest najtańsza droga do danego węzła *n* żadna inna droga nie może obniżyć całkowitego kosztu (**monotoniczność**).
- *h(n)* powinno być wiarygodną oceną kosztów dojścia do celu – monotoniczne zaniżenie wszystkich kosztów nie przeszkadza.
- Algorytm A* **jest w tym przypadku optymalny.**

Ćwiczenie: udowodnić optymalność A*.

Ocena złożoności zależy od użytych heurystyk do obliczania oszacowania kosztów dotarcia do celu $h(n)$.
W najgorszym przypadku to $O(b^d)$ dla czasu i pamięci, co może być ograniczeniem, stąd wariant z iteracyjnym pogłębianiem.

IDA*, czyli A* iteracyjnie pogłębiane.

Podobny do IDDF

- Stosuj algorytm szukania w głąb.
- Oceniaj całkowite koszty $f(n) = g(n) + h(n)$ heurystyką A*.
- Jeśli $f(n) > T$ cofaj się; T jest tu zmiennym progiem.
- Jeśli nie znaleziono rozwiązania zwiększ T i powtarzaj.

Wady: powtarza część ścieżek, ale i tak końcowe szukanie zajmuje najwięcej czasu.

Zalety: znajduje optymalne rozwiązanie jak A*, ale nie trzyma w pamięci wszystkich węzłów, tylko węzły na rozwijanej ścieżce, więc złożoność pamięciowa jest liniowa $O(db)$.

Heurystyki dla 8-ki

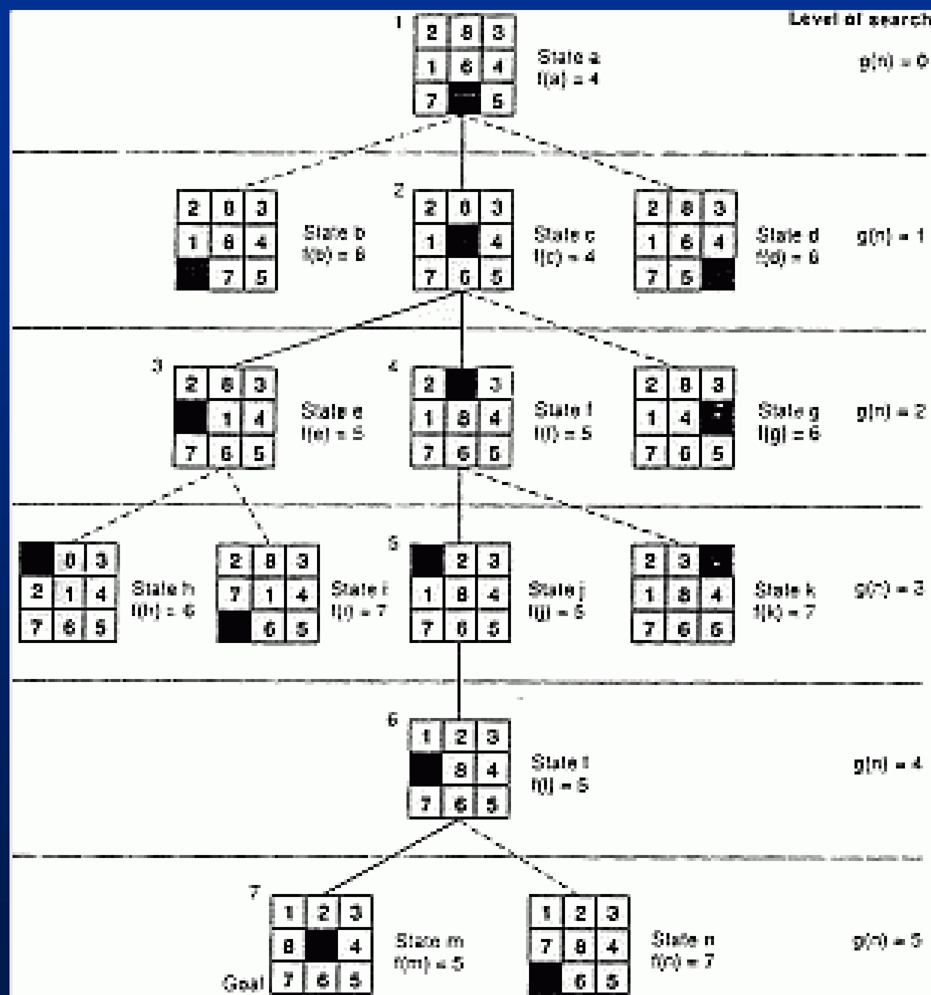
- Algorytmy szukania heurystycznego testuje się często na problemie przesuwanki.
- Dla 8-ki jest 9!/2 or **181.440 możliwych stanów, dla 15-ki** ok. **653 mld.**
- W procesie szukania dobra funkcja heurystyczna zmniejsza liczbę rozpatrywanych stanów < **50**.
- Dwie funkcje, które nigdy nie przeceniają kosztów:
  1. $\boldsymbol{h_1}$ = liczba płytek na złych pozycjach – każdą trzeba przesunąć przynajmniej raz.

  2. $\boldsymbol{h_2}$ = suma odległości od celu, metryka Manhattan; każdy ruch zmniejsza odległość o 1; tu h1=8, h_2 = 18

5	4	
6	1	8
7	3	2

1	2	3
8		4
7	6	5

Przykład A* dla 8-ki



Przestrzeń stanów utworzona w czasie heurystycznego szukania 8-ki.

$f(n) = g(n) + h(n)$

$g(n)$ = odległość od startu do stanu n.

$h(n)$ = liczba elementów na złym miejscu.

Animacja algorytmu A* dla labiryntu.

Porównanie efektów heurystyk

	Search Cost			Effective Branching Factor		
d	IDS	$A^*(h_1)$	$A^*(h_2)$	IDS	$A^*(h_1)$	$A^*(h_2)$
2	10	6	6	2.45	1.79	1.79
4	112	13	12	2.87	1.48	1.45
6	680	20	18	2.73	1.34	1.30
8	6384	39	25	2.80	1.33	1.24
10	47127	93	39	2.79	1.38	1.22
12	364404	227	73	2.78	1.42	1.24
14	3473941	539	113	2.83	1.44	1.23
16	–	1301	211	–	1.45	1.25
18	–	3056	363	–	1.46	1.26
20	–	7276	676	–	1.47	1.27
22	–	18094	1219	–	1.48	1.28
24	–	39135	1641	–	1.48	1.26

Średnia z 100 symulacji dla 8-ki i dwóch heurystyk.

Ilustracje algorytmów

- Animacje algorytmów: VisualAlgo
- Animacje algorytmów szukania na PathFinding
- Ilustracje data structures and algorithms
- Visualizations of data structures and algorithms
- Algorithm-visualizer z przykładami w Java/C++
- Data Structures & Algorithms (Google)

- ERIC, Institute for Education Sciences (publikacje)

Jest wiele animacji algorytmów w sieci.