



Wintersemester 2007/08

Praktische Optimierung
(Vorlesung)

Prof. Dr. Günter Rudolph

Fakultät für Informatik

Lehrstuhl für Algorithm Engineering (LS XI)

Fachgebiet *Computational Intelligence*





MOP: Pareto-Gradientenabstiegsverfahren

Annahme: Zielfunktion differenzierbar

- $d = 1$: (monokriteriell)

$v \in \mathbb{R}^n$ ist Abstiegsrichtung in $x \in \mathbb{R}^n$ wenn $\nabla f(x)' v < 0$

- $d > 1$: (multikriteriell)

$v \in \mathbb{R}^n$ ist Abstiegsrichtung in $x \in \mathbb{R}^n$ wenn $\forall i=1, \dots, d: \nabla f_i(x)' v < 0$

bzw. $\max \{ \nabla f_i(x)' v : i=1, \dots, d \} < 0$

\Rightarrow Bewegung von x in Richtung v mit geeigneter Schrittweite s
führt zu einer Lösung $y = x + s \cdot v$, die x dominiert: $f(y) \prec f(x)$



MOP: Pareto-Gradientenabstiegsverfahren

Berechnung einer Abstiegsrichtung v für gegebenes x

Ansatz: $\max \{ \nabla f_i(x)' v : i=1, \dots, d \} \rightarrow \min!$
unter $\| v \|_\infty \leq 1$

\Leftrightarrow

$$v_0 \rightarrow \min!$$

unter

$$\forall i=1, \dots, d: \nabla f_i(x)' v \leq v_0$$

$$\forall i=1, \dots, d: -1 \leq v_i \leq 1$$

lineares
Optimierungsproblem (LP)

Bestimmung der Schrittweite s

finde größtes s mit $f(x + s \cdot v) \leq f(x) + s \cdot J(x) v$, $J(x)$ Jacobi-Matrix

bzw. $\forall i=1, \dots, d: f_i(x + s \cdot v) \leq f_i(x) + s \cdot \nabla f_i(x)' v$ und echt kleiner für mindestens ein i



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

Arbeitsdefinition:

Metaheuristik =_{def}

Algorithmischer Rahmen für eine Lösungsstrategie,
bei der viele Bestandteile initial unspezifiziert sind. ■

- ⇒ viele algorithmische Bestandteile können ausgetauscht werden,
ohne die generelle Lösungsstrategie zu verändern
- ⇒ viele verschiedene Algorithmen
- ⇒ Aufbau einer Theorie mühsam



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

Beispiel: Monokriterieller (1+1) – EA („evolutionärer Algorithmus“)

wähle $x_0 \in X$ zufällig; setze $k = 0$

repeat

$$y_k = x_k \oplus m_k$$

falls $f(y_k) \in B(f(x_k))$ dann $x_{k+1} = y_k$

sonst

$$x_{k+1} = x_k$$

$$k = k + 1$$

until Stoppkriterium erfüllt

Mutation

Selektion

m_k : Zufallsvektor (hier: unspezifiziert)

$f : X \rightarrow \mathbb{R}$ Zielfunktion (\rightarrow min!)

$B(z^0) = \{z \in F : z < z^0\}$ Zielwerte, die besser als z^0 sind



Multikriterieller (1+1)-EA: Was wäre zu ändern?

wähle $x_0 \in X$ zufällig; setze $k = 0$

repeat

$$y_k = x_k \oplus m_k$$

falls $f(y_k) \in B(f(x_k))$ dann $x_{k+1} = y_k$

sonst $x_{k+1} = x_k$

$$k = k + 1$$

until Stoppkriterium erfüllt

1. Mutationsvektoren \rightarrow keine Änderung nötig!
 2. Selektion \rightarrow Neudefinition: $B(z^0) = \{ z \in F : z \preceq z^0 \}$
- \Rightarrow keine Änderung an der Rahmenstruktur des Algorithmus!



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

$$B(z^0) = \{z \in F : z \preceq z^0\}$$

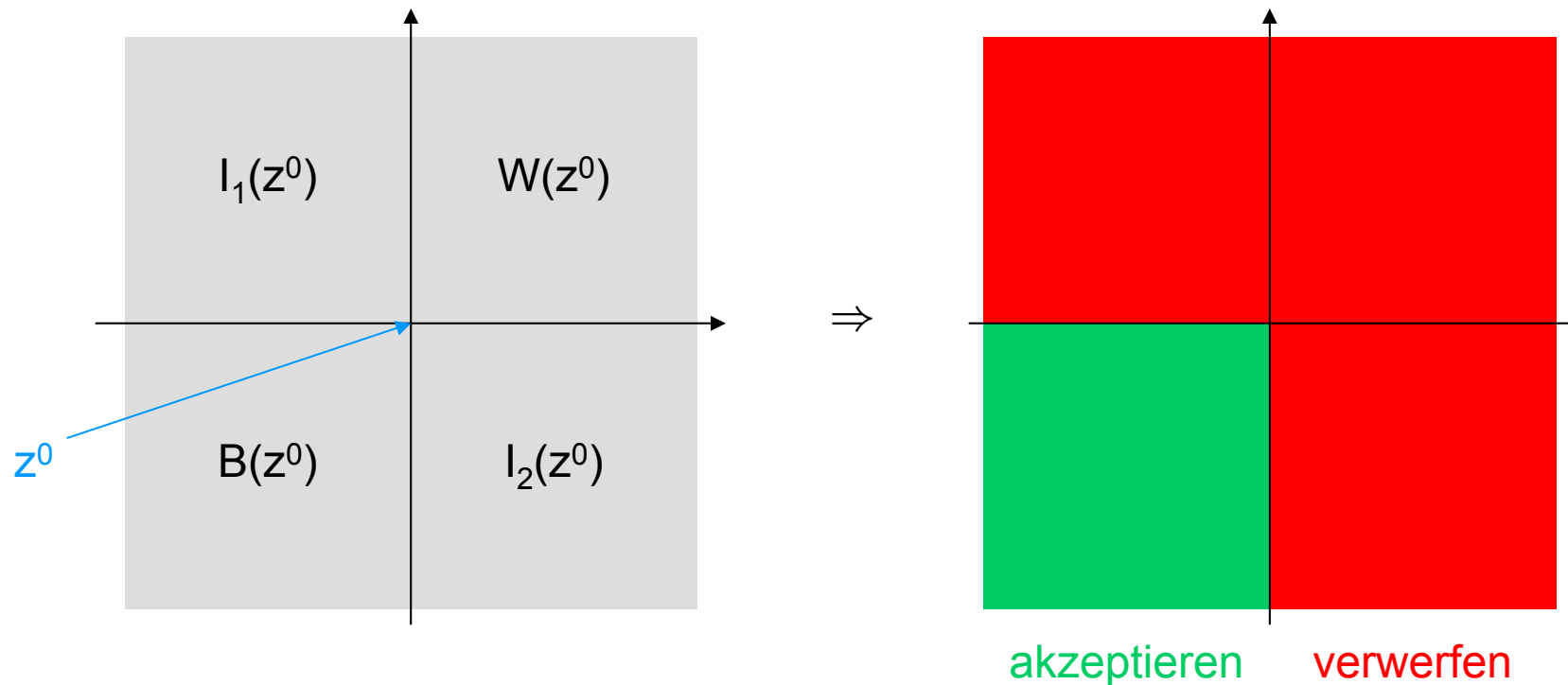
“better than“ z^0

$$I(z^0) = \{z \in F : z \parallel z^0\}$$

“incomparable to“ z^0

$$W(z^0) = \{z \in F : z^0 \preceq z\}$$

“worse than“ z^0





MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

Beispiel: Monokriterielles Threshold Accepting (TA)

wähle $x_0 \in X$ zufällig; setze $k = 0$

repeat

$$y_k = x_k + m_k$$

falls $f(y_k) \in B(f(x_k) + T_k)$ dann $x_{k+1} = y_k$

sonst

$$x_{k+1} = x_k$$

$$T_{k+1} = \gamma(T_k), k = k + 1$$

until Stoppkriterium erfüllt

m_k : Zufallsvektor (hier: unspezifiziert)

Threshold $T_k \geq 0$

$f : X \rightarrow \mathbb{R}$ Zielfunktion (\rightarrow min!)

T_k monoton fallend $\rightarrow 0$

$B(z^0) = \{z \in F : z < z^0\}$ Zielwerte, die besser als z^0 sind



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

Idee bei monokriteriellem Threshold Accepting (TA)

- Akzeptiere jede Verbesserung
- Akzeptiere zu Anfang der Suche auch große Verschlechterungen
- Akzeptiere danach immer geringere Verschlechterungen

⇒ am Ende nahezu keine Akzeptanz von Verschlechterungen mehr

⇒ Verlassen von lokalen Optima durch Akzeptanz von Verschlechterungen

Regeln für T_k :

$$T_k = c T_{k-1}, c \in (0,1)$$

$$T_k = T_0 / (k+1)^a \Leftrightarrow a > 0$$

$$T_k = T_0 / \log(k+1)$$

} weitere Regeln denkbar
und wohl auch im Einsatz



Multikriterielles Threshold Accepting: Was wäre zu ändern?

wähle $x_0 \in X$ zufällig; setze $k = 0$

repeat

$$y_k = x_k + m_k$$

falls $f(y_k) \in B(f(x_k) + T_k)$ dann $x_{k+1} = y_k$

sonst

$$x_{k+1} = x_k$$

$$T_{k+1} = \gamma(T_k), k = k + 1$$

until Stoppkriterium erfüllt

1. T_k wird m-dimensionaler Vektor (ein Threshold je Zielgröße oder einer für alle)
2. ggf. m verschiedene T_k – Verringerungsregeln



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

$$B(z^0) = \{z \in F : z \preceq z^0\}$$

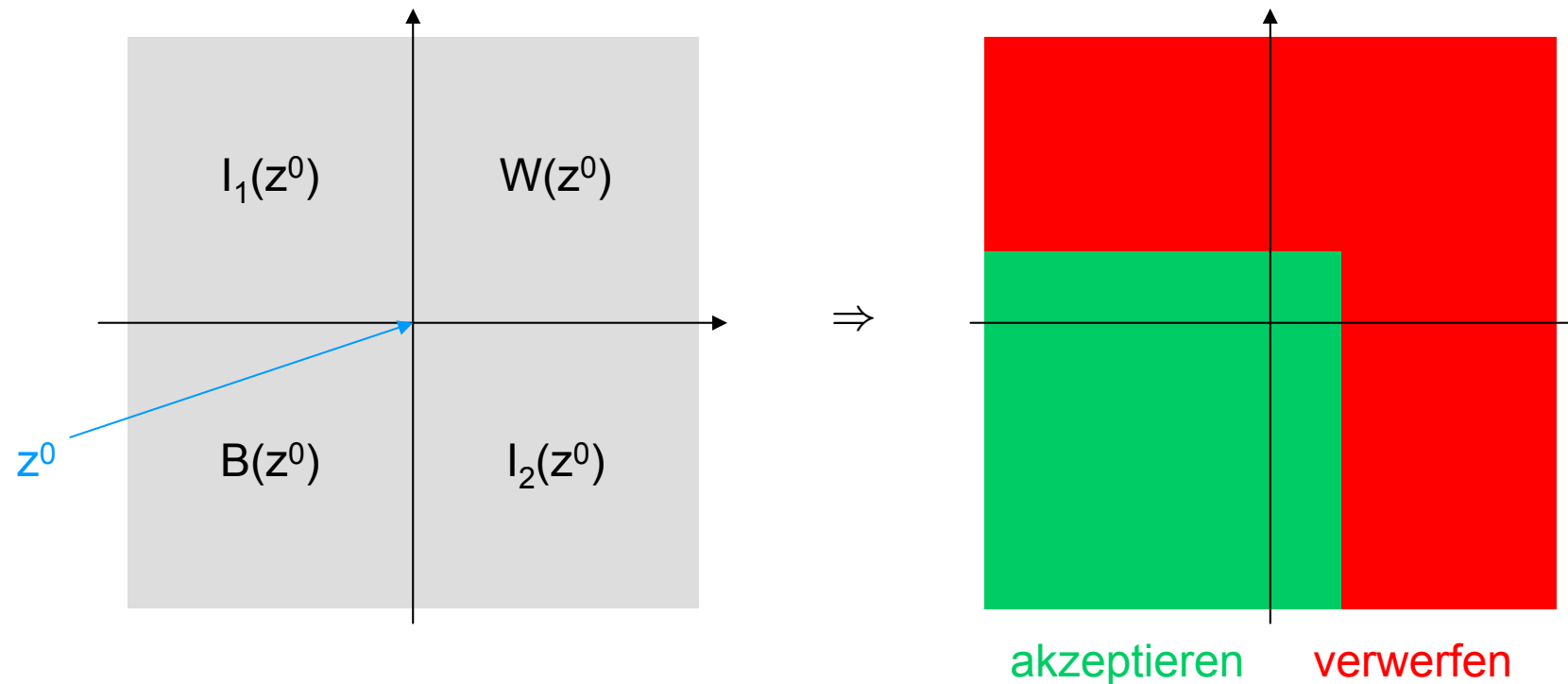
“better than“ z^0

$$I(z^0) = \{z \in F : z \parallel z^0\}$$

“incomparable to“ z^0

$$W(z^0) = \{z \in F : z^0 \preceq z\}$$

“worse than“ z^0





Alternative Akzeptanzregeln für multikriterielles TA

Sei $\delta_i = f_i(y_k) - f_i(x_k)$.

$\delta_i > 0 \Rightarrow$ Verschlechterung bzgl. Ziel i

$\delta_i < 0 \Rightarrow$ Verbesserung bzgl. Ziel i

1. $\max\{ \delta_i : i = 1, \dots, m \} \leq T_k$
 2. $\sum_i w_i \max\{ \delta_i, 0 \} \leq T_k$
 3. $\sum_i w_i \delta_i \leq T_k$
 4. ...
- $\longrightarrow f(y_k) \in B(f(x_k) + T_k \cdot (1, \dots, 1))$
- Konvexkombination w_1, \dots, w_m



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

$$B(z^0) = \{z \in F : z \preceq z^0\}$$

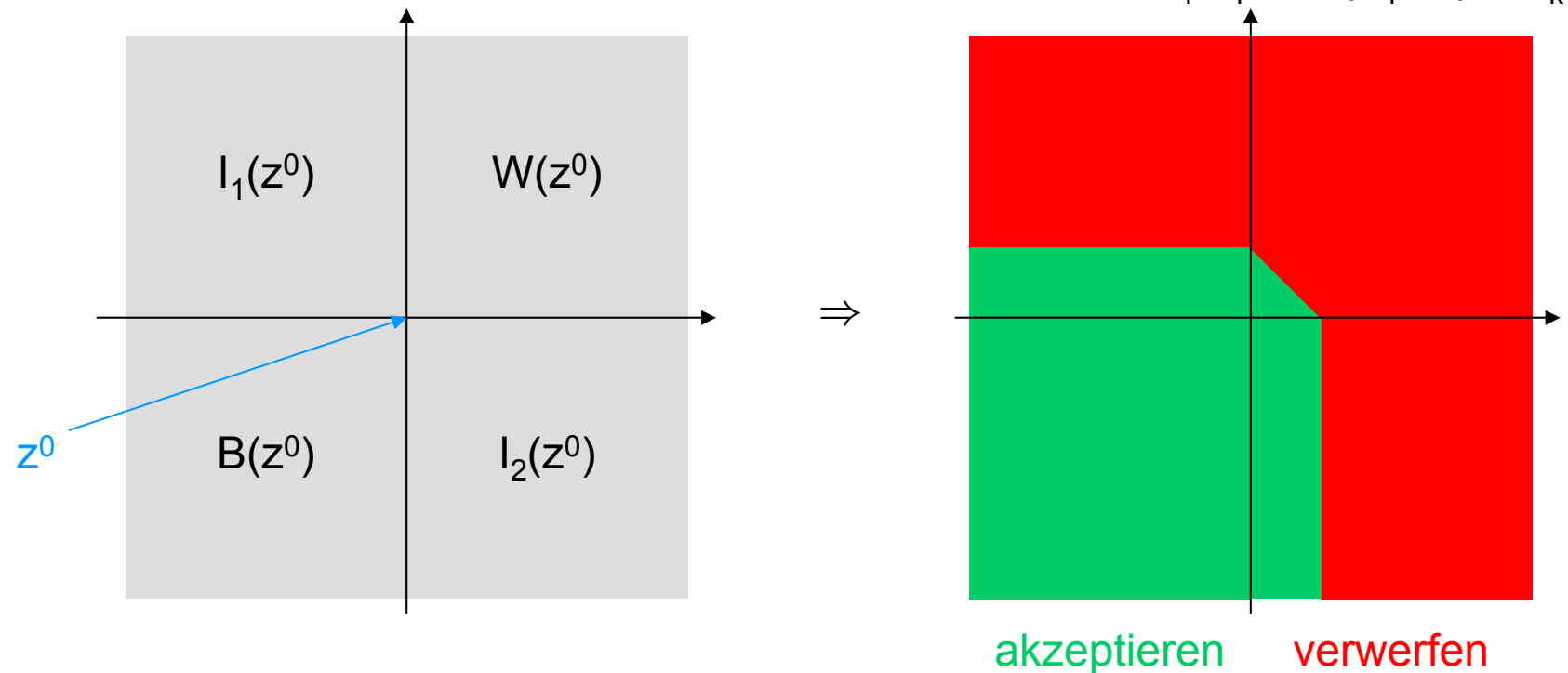
“better than“ z^0

$$I(z^0) = \{z \in F : z \parallel z^0\}$$

“incomparable to“ z^0

$$W(z^0) = \{z \in F : z^0 \preceq z\}$$

“worse than“ z^0





MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

$$B(z^0) = \{z \in F : z \preceq z^0\}$$

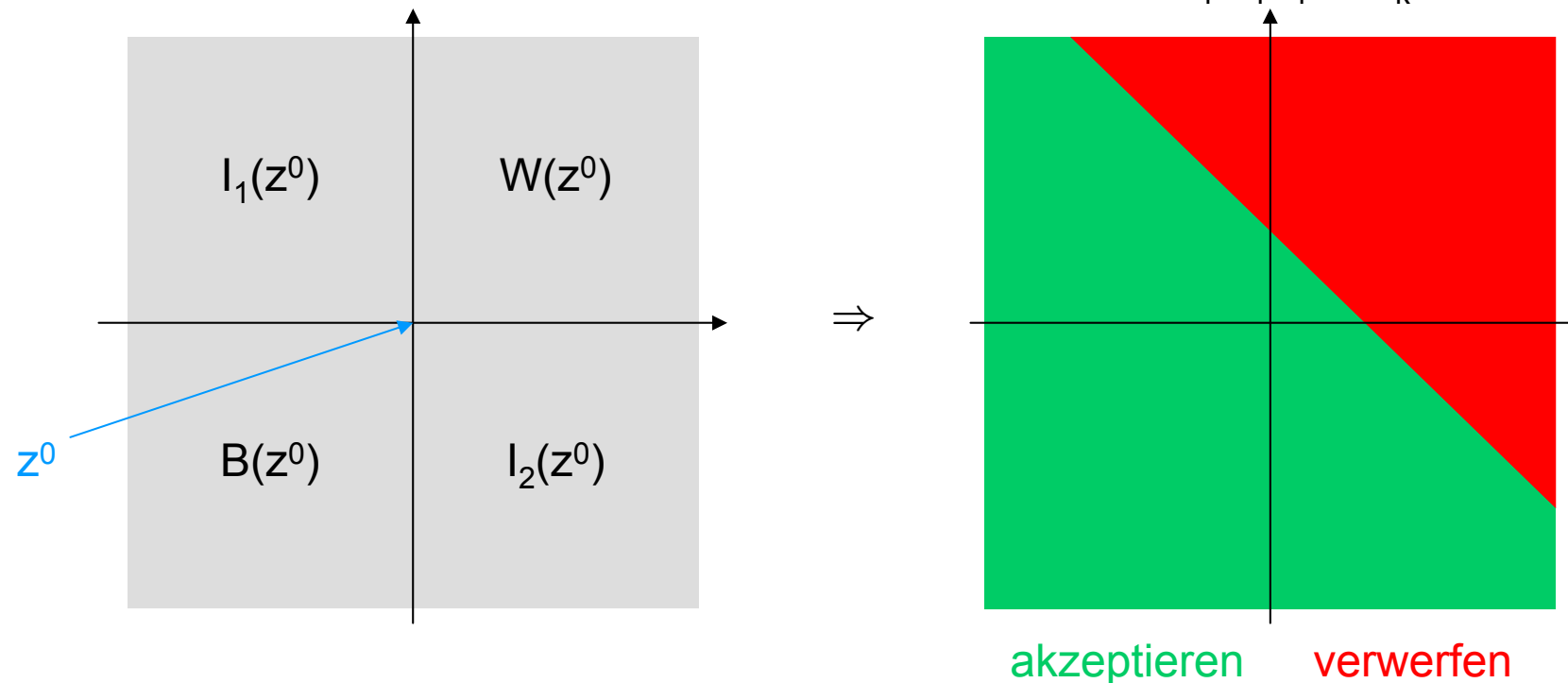
“better than“ z^0

$$I(z^0) = \{z \in F : z \parallel z^0\}$$

“incomparable to“ z^0

$$W(z^0) = \{z \in F : z^0 \preceq z\}$$

“worse than“ z^0





MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

Beispiel: Monokriterielles Simulated Annealing (SA)

```
wähle  $x_0 \in X$  zufällig; setze  $k = 0$ 
repeat
   $y_k = x_k + m_k$ 
  falls  $f(y_k) \in B(f(x_k))$  dann  $x_{k+1} = y_k$ 
  falls  $f(y_k) \in W(f(x_k))$ 
    falls  $u < \exp(-\Delta f_k / T_k)$  dann  $x_{k+1} = y_k$ 
    sonst  $x_{k+1} = x_k$ 
   $T_{k+1} = \gamma(T_k)$ ;  $k = k + 1$ 
until Stoppkriterium erfüllt
```

m_k : Zufallsvektor

$$B(z^0) = \{z \in F : z < z^0\}$$

$$W(z^0) = \{z \in F : z > z^0\}$$

$u \sim U[0,1]$, $T_k \rightarrow 0$ monoton fallend

Zielwerte, die besser als z^0 sind

Zielwerte, die schlechter als z^0 sind



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

Idee beim monokriteriellem Simulated Annealing:

Akzeptiere auch schlechtere Lösungen mit abnehmender Wahrscheinlichkeit, um aus lokalen Optima zu entkommen!

Satz (Hayek 1988, Haario & Saksman 1991)

$T_k = T_0 / \log(k + 1)$, m_k mit beschränktem Träger
⇒ SA konvergiert gegen globales Optimum mit W'keit 1 ■

→ sehr langsame Temperaturverringierung!

→ Praxis: $T_{k+1} = c \cdot T_k$ mit $c \in (0,1)$

Satz (Belisle 1992)

$T_k = c^k \cdot T_0$, $c \in (0,1)$ und $\text{supp}(m_k) = \mathbb{R}^n$
⇒ SA konvergiert zum globalen Optimum mit W'keit 1 ■



Multikriterielles Simulated Annealing: Was wäre zu ändern?

```
wähle  $x_0 \in X$  zufällig; setze  $k = 0$ 
repeat
   $y_k = x_k + m_k$ 
  falls  $f(y_k) \in B(f(x_k))$  dann  $x_{k+1} = y_k$ 
  falls  $f(y_k) \in W(f(x_k)) \cup I(f(x_k))$ 
    falls  $u < \exp(-\Delta_k / T_k)$  dann  $x_{k+1} = y_k$ 
    sonst  $x_{k+1} = x_k$ 
   $T_{k+1} = \gamma(T_k)$ ;  $k = k + 1$ 
until Stoppkriterium erfüllt
```

$$\delta_i(k) = f_i(y_k) - f_i(x_k)$$

$$\Delta_k = \max\{\delta_i(k) : i = 1, \dots, m\}$$

$$B(z^0) = \{z \in F : z \preceq z^0\}$$

Zielwerte, die besser als z^0 sind

$$W(z^0) = \{z \in F : z \succeq z^0\}$$

Zielwerte, die schlechter als z^0 sind



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

$$B(z^0) = \{z \in F : z \preceq z^0\}$$

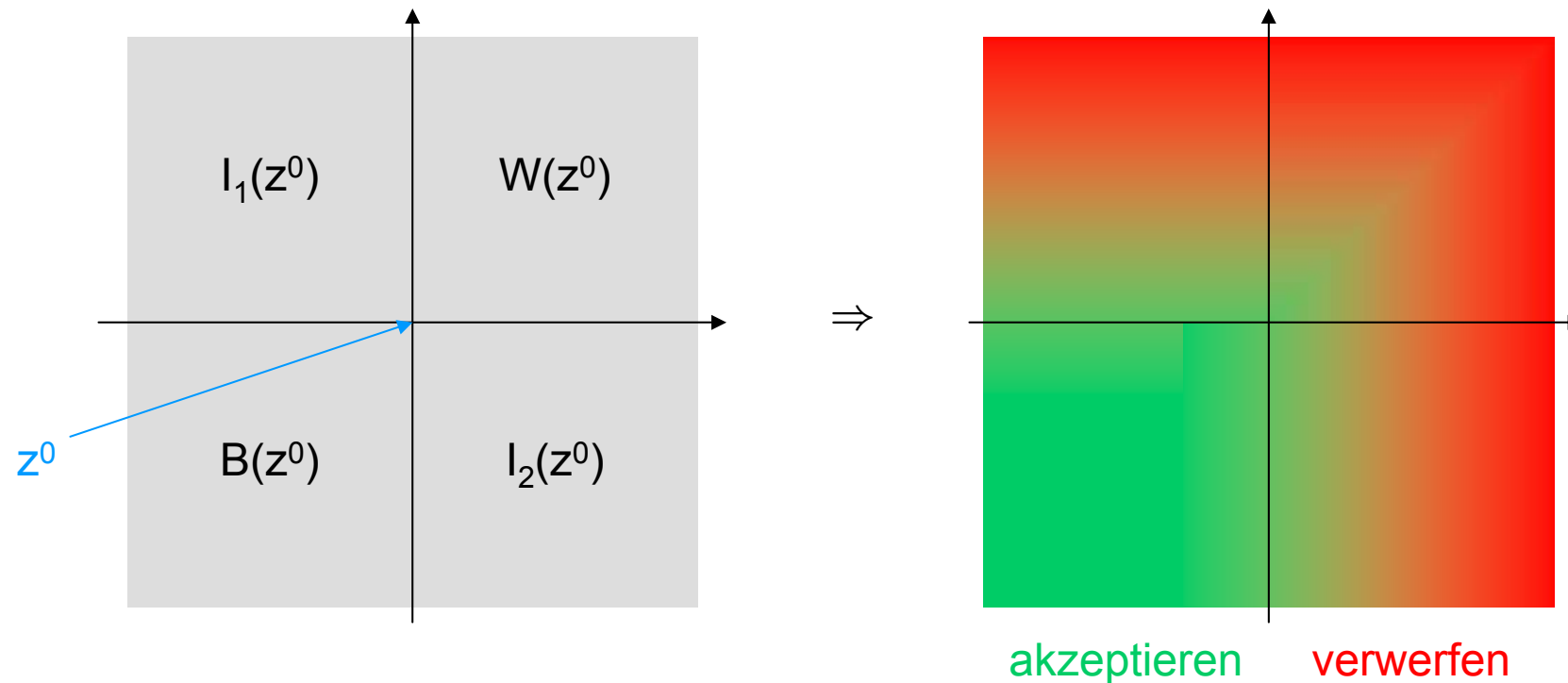
“better than“ z^0

$$I(z^0) = \{z \in F : z \parallel z^0\}$$

“incomparable to“ z^0

$$W(z^0) = \{z \in F : z^0 \preceq z\}$$

“worse than“ z^0





Multikriterielles Simulated Annealing: Serafini (1992)

wähle $x_0 \in X$ zufällig; setze $k = 0$

repeat

$$y_k = x_k + m_k$$

falls $f(y_k) \in B(f(x_k))$ dann $x_{k+1} = y_k$

sonst

falls $u < \vartheta(\delta(k), T_k)$ dann $x_{k+1} = y_k$

sonst

$$x_{k+1} = x_k$$

$$T_{k+1} = \gamma(T_k); k = k + 1$$

until Stoppkriterium erfüllt

$$\vartheta: \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}_+ \rightarrow [0, 1]$$

$$\delta(k) = (\delta_1(k), \dots, \delta_m(k))' \text{ mit } \delta_i(k) = f_i(y_k) - f_i(x_k)$$

supp(m_k) kann beschränkt sein



MSA (Serafini 1992)

Sei $f(y_k) \notin B(f(x_k))$, so dass $\exists i : \delta_i(k) > 0$.

$$\vartheta(\delta(k), T_k) = \left\{ \begin{array}{l} \exp \left(\sum_{i=1, \delta_i(k) > 0}^m w_i \delta_i(k) / T_k \right) \\ \prod_{i=1, \delta_i(k) > 0}^m \exp(-\delta_i(k) / T_k) \\ \min_{i=1, \dots, m} \{ \exp(-w_i \delta_i(k) / T_k) : \delta_i(k) > 0 \} \\ \max_{i=1, \dots, m} \{ \exp(-w_i \delta_i(k) / T_k) : \delta_i(k) > 0 \} \end{array} \right.$$

zzgl. zusammengesetzte Regeln: $\vartheta(\cdot) = \alpha \vartheta_1(\cdot) + (1 - \alpha) \vartheta_2(\cdot)$



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

MSA (Engrand et al. 1998)

Ersatzzielfunktion $f(x) = \sum_{i=1}^m \log f_i(x)$

→ erfordert $\forall i : \forall x: f_i(x) > 0$

Skalarisierung!



vermutlich nicht alle
Lösungen erreichbar!

$$\begin{aligned} \Delta f_k &= f(y) - f(x) \\ &= \sum_{i=1}^m \log f_i(y) - \sum_{i=1}^m \log f_i(x) \\ &= \sum_{i=1}^m (\log f_i(y) - \log f_i(x)) \\ &= \sum_{i=1}^m \log \left(\frac{f_i(y)}{f_i(x)} \right) \end{aligned}$$



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

MSA (Engrand et al. 1998)

Ersatzzielfunktion $f(x) = \sum_{i=1}^m \log f_i(x)$



Ansatz: $g_i(x) = \exp(f_i(x)) \longrightarrow \forall i : \forall x : g_i(x) > 0$



lokale und globale Minimalstellen identisch!

Ersatzzielfunktion $g(x) = \sum_{i=1}^m g_i(x) = m \sum_{i=1}^m w_i g_i(x)$ mit $w_i = 1/m$

⇒ kann nur Pareto-optimale Lösungen im konvexen Zielbereich finden!



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

Beispiel: Monokriterielles Tabu Search (TS)

wähle $x_0 \in X$ zufällig; setze $L_k = ()$ und $k = 0$

repeat

$$x_{k+1} = \operatorname{argmin}\{f(x) : x \in N(x_k) \setminus L_k\}$$

$$L_{k+1} = \operatorname{tail}(\operatorname{append}(L_k, x_k), \ell)$$

$$k = k + 1$$

until Stoppkriterium erfüllt

Tabu-Liste L_k mit max. Länge ℓ

Nachbarschaft $N(x)$ von $x \in X$

→ auch schlechtere neue Punkte werden akzeptiert!

zugeschnitten für
diskrete Probleme



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

Bisher: Ein Lauf → ein Lösungskandidat

Erwünscht: Approximation der Paretomenge

Ansatz: Einsammeln nicht-dominierter Lösungen

→ Knowles & Corne (2000): Pareto-Archived ES (PAES)



MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

(1+1)-PAES (Knowles & Corne 2000)

wähle $x_0 \in X$ zufällig; $A_0 = \{x_0\}$; setze $k = 0$

repeat

$$y_k = x_k + m_k$$

falls $f(y_k) \in B(f(x_k))$ dann $x_{k+1} = y_k$; $A_k = A_k \cup \{y_k\}$

sonst falls $f(y_k) \in W(f(x_k))$ dann $x_{k+1} = x_k$

sonst falls $\exists a \in A_k : f(y_k) \in W(f(a))$ dann $x_{k+1} = x_k$

sonst $x_{k+1} = \text{replace}(A_k, x_k, y_k)$

$$k = k + 1$$

until Stoppkriterium erfüllt

A_k : Archiv zum Zeitpunkt k



(1+1)-PAES (Knowles & Corne 2000)

```
replace( $A_k, x_k, y_k$ ):=
```

```
falls  $A_k$  nicht voll
```

```
   $A_k = A_k \cup \{y_k\}$ 
```

```
  falls lessCrowded( $y_k, x_k; A_k$ ) dann return  $y_k$ 
```

```
  sonst return  $x_k$ 
```

```
sonst
```

```
  falls  $\exists a \in A_k : \text{lessCrowded}(y_k, a; A_k)$ 
```

```
     $A_k = A_k \cup \{y_k\}; A_k = A_k \setminus \{a\}$ 
```

```
  falls lessCrowded( $y_k, x_k; A_k$ ) dann return  $y_k$ 
```

```
  sonst return  $x_k$ 
```

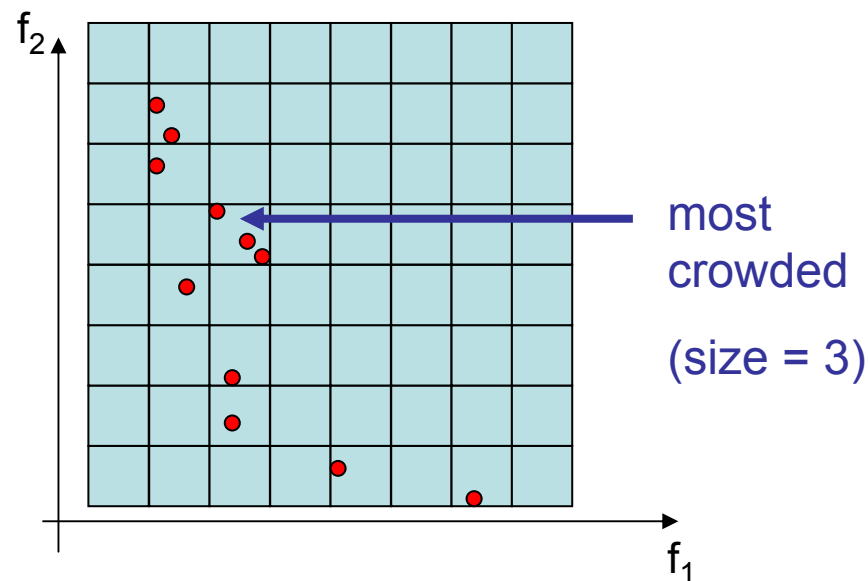


MOP: Metaheuristiken – Einzelpunktmethoden

(1+1)-PAES (Knowles & Corne 2000)

```
boolean lessCrowded( $y, x; A$ ):=  
    return cell( $y; A$ ).size()  $\leq$  cell( $x; A$ ).size();
```

Idee: Zielraum unterteilen in Raster mit $2^d \cdot s$ Zellen (cells); $d = \dim(F)$



Speichereffiziente
Implementierung möglich
→ **quadtree**