# 13. januar

## Generelle optimeringsheuristikker

Også kaldet *metaheuristikker*. I dag gennemgås:

- Indplacering
- Lokal søgning
- Simuleret udgløding
- Tabusøgning
- Genetiske algoritmer

## Løsningsmetoder for $\mathcal{NP}$-hårde opimeringsproblemer

Opdelingskriterier

- løsningskvalitet: optimal/ikke-optimal
- beregningstid: polynomiel/ikke-polynomiel

*Approximationsalgoritme* giver garanti for løsningskvalitet
*Heuristik* giver ingen garanti for løsningskvalitet

## Generelle optimeringsheuristikker

Branch-and-bound

- helhedsbetragtninger til at finde grænseværdier
- global struktur holder styr på alle delproblemer

Konstruktionsheuristikker

- konstruerer en løsning fra grunden
- når først et valg er truffet er det låst

Lokalsøgning

- forbedrer løsninger, tidligere valg ændres
- omegn, validering, objektfunktion

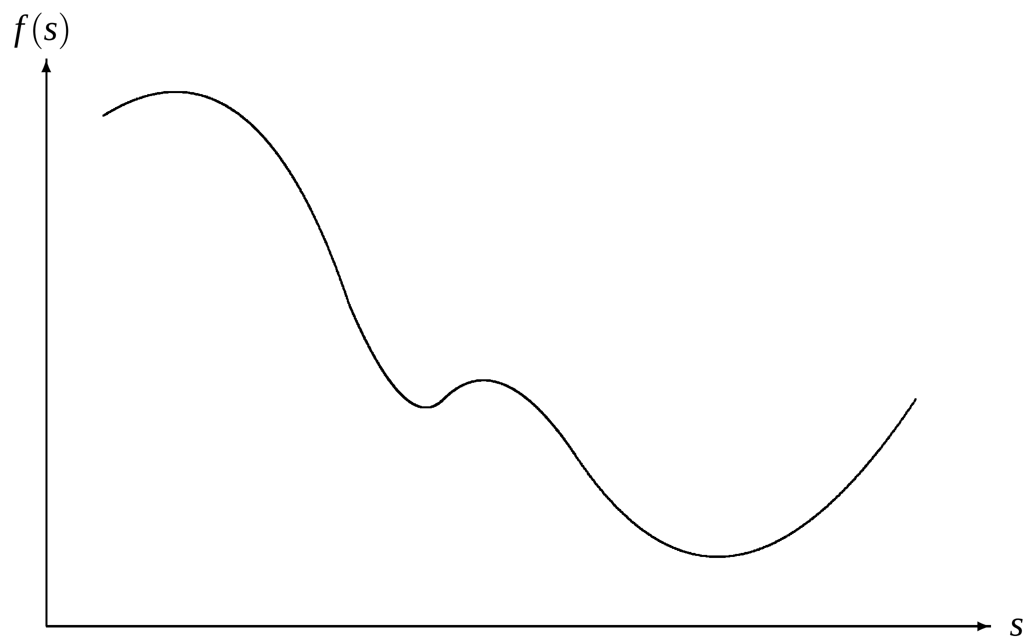
## Definitioner

Løsningsrum $S$
Objektfunktion $f : S \to \mathbb{R}$ skal minimeres
Omegn $N(s) \subset S$ for hver løsning $s \in S$
Omegn skal opfylde at alle løsninger kan nås
Skridt (*overgang*) betegner $s \to s'$

## Simpleste lokalsøgning

**algorithm** lokalsøgning
vælg en initiel løsning $s \in S$
**repeat**
  vælg en løsning $s' \in N(s)$
  **if** accepter_ny_løsning($s, s'$) **then** $s := s'$
**until** stopkriterium;

Acceptkriterium: f.eks. trinvis forbedring




Eksempel: TSP

## Design af lokalsøgningsalgoritmer

Balanceakt mellem

- *Intensivering* (skal forfølge gode løsninger til bunds)
- *Diversifikation* (skal komme rundt i løsningsrummet)

Intensivering

- Grådigt paradigme
- Selvom havner i lokalt minimum, undersøges omegn

Diversifikation

- Genstart fra tilfældigt sted
- Accepter dårligere løsninger nogle gange

Undgå at besøge tidligere besøgte løsninger

- tilfældighed i valg af naboløsninger
- forbyd alle tidligere besøgte løsninger

# Varianter af lokalsøgning

**algorithm** trinvis forbedring
vælg en initiel løsning $s \in S$
**repeat**
  vælg en løsning $s' \in N(s)$
  **if** $f(s') < f(s)$ **then** $s := s'$
**until** $s$ er et lokalt minimum
**return** $s$

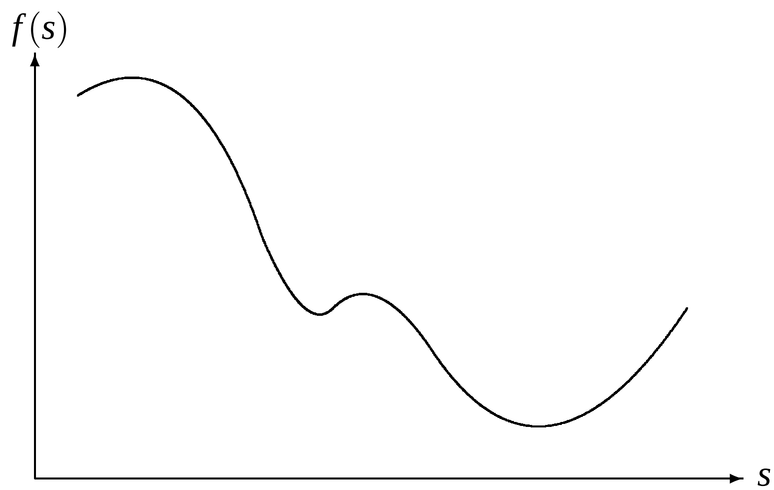
Løsning $s$ er lokalt minimum hvis $\forall s' \in N(s) : f(s') \geq f(s)$

- Trinvis forbedring: Vælg en vilkårlig $s' \in N(s)$ hvor $f(s') < f(s)$.
- Stejleste nedstigning: Vælg $s' \in N(s)$ så $f(s') < f(\hat{s})$ for alle $\hat{s} \in N(s)$

Genstart: Benyt forskellige initielle løsninger for trinvis forbedring eller stejleste nedstigning.

## Simuleret udglødning

Fysiske systemer: metal, glas (Metropolis 1953)
Heuristik (Kirkpatrick 1983)

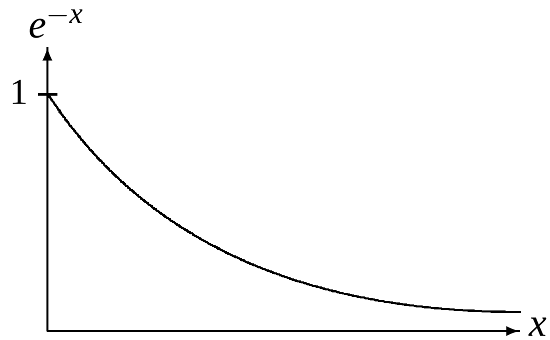



Heuristik har intet at gøre med fysiske systemer

- $s' \in N(s)$ vælges tilfældigt
- Intensivering: accepter altid $f(s') \leq f(s)$
- Diversifikation: accepter $f(s') > f(s)$ med sandsynlighed

$$P(s \rightarrow s') = e^{-\frac{f(s')-f(s)}{T}}$$

hvor $T$ er aftagende kontrolparameter (kaldet *temperatur*)



# Ordbog

Dowsland (1995) viser følgende sammenhæng mellem fysisk nedkøling og optimering

| Thermodynamic Simulation | Combinatorial Optimisation |
|---|---|
| System States | Feasible Solutions |
| Energy | Cost |
| Change of State | Neighbouring Solutions |
| Temperature | Control Parameter |
| Frozen State | Heuristic Solution |

# Simuleret udglødning

**algorithm** simuleret udglødning
vælg en initiel løsning $s \in S$
vælg en initiel temperatur $T$
**repeat**
    vælg en løsning $s' \in N(s)$
    **if** $f(s') \leq f(s)$ **then** $s := s'$
    **else**
        $p := \text{rand}(0,1)$
        **if** $p < e^{-\frac{f(s')-f(s)}{T}}$ **then** $s := s'$
    **end**
    $T :=$ ny temperatur$(T)$
**until** stopkriterium
**return** $s$

- Hvad skal initiel temperatur $T_0$ være?
- Hvorledes skal $T_{i+1}$ udregnes på basis af $T_i$?
- Hvornår skal algoritmen slutte ?

**Simuleret udglødning**

Initiel temperatur

- Bestemmes eksperimentelt
- Accept ratio $\chi(T) \approx 0.5$ ved $T_0$

Kølingsrate

- $T_{i+1} := \alpha T_i, \qquad 0 \leq \alpha < 1$
- jo større $\alpha$ des længere køretid

Stopkriterie

- Temperaturen $T$ kommer under en given grænse $T_s$
- Ingen forbedring sidste $K$ iterationer

Der findes også en variant af simuleret udglødning hvor der foretages $M$ skridt for hver temperatur, inden denne sænkes. Ingen signifikant forskel.

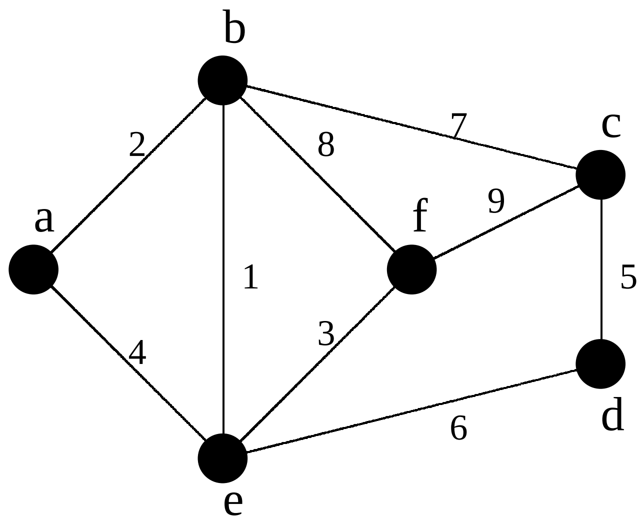
## Simuleret udglødning

Laarhoven (1988) viste at hvis temperatur sænkes uendeligt langsomt,og der er uendeligt mange skridt til rådighed, så vil simuleret udglødning returnere optimal løsning.

$$\lim_{\substack{\infty \text{ langsom afkøling} \\ \infty \text{ mange iterationer}}} P(\text{optimal løsning}) \to 1$$

Bevis baseret på Markovkæder

## Simuleret udglødning for grafdeling




Givet graf $G = (V, E)$ og omkostnings funktion $c : E \to \mathbb{N}$. Del $V$ i to *lige store dele* $V_1$ og $V_2$ så omkostningen af kanter $(u, v)$ hvor $u \in V_1$ og $v \in V_2$ minimeres.

Lad $x_v = 1$ hvis $v \in V_1$ mens $x_v = 0$ hvis $v \in V_2$. Kvadratisk minimeringsproblem:

$$\min \sum_{u,v \in V} c_{uv} x_u (1 - x_v)$$

hvor

$$\sum_{v \in V} x_v = |V|/2$$

## Simuleret udglødning for grafdeling

- Objektfunktion:
$$f(x) = \sum_{u,v \in V} c_{uv} x_u (1 - x_v)$$
- Omegn:
Ombyt to elementer $k, \ell$ hvor $k \in V_1$ og $\ell \in V_2$
- Udregning af objektfunktion:
Trivielt $O(V^2)$
Ved ombytning af knuder ændres objektfunktionen
$$\begin{aligned}\Delta f = & \sum_{v \in V} x_v c_{kv} - \sum_{v \in V} (1 - x_v) c_{kv} \\ & + \sum_{v \in V} (1 - x_v) c_{\ell v} - \sum_{v \in V} x_v c_{\ell v}\end{aligned}$$
(idet $x_k = 1 \rightarrow x_k = 0$ og $x_\ell = 0 \rightarrow x_\ell = 1$).
Kan beregnes i $O(V)$ tid.

## Simuleret udglødning, diskussion

Intensivering $\leftrightarrow$ diversifikation

- Intensivering: Accepter altid forbedrende løsning
- Diversifikation: Accepter forværret løsning med lille sandsynlighed
- Algoritmen gennemløber kontinuum fra stærk diversifikation til intensiv søgning

Fordele $\leftrightarrow$ ulemper

+ Robust algoritme uanset omegn $N(s)$
+ Få parametre $(T_0, \alpha)$, disse kan justeres automatisk
– Ikke videre grådig, meget tid bruges på at gætte

Hints

- Mest vellykket søgning “midt” i udglødning, derfor varianter med genopvarmning
- Udregn $f(s') := f(s) + \Delta f$
- Kan være hensigtsmæssigt at tillade ulovlige løsninger mod straf i objektfunktion
- Genstart

## Tabusøgning

Tidligere algoritmer

- Trinvis forbedring
- Stejleste nedstigning
- Genstart
- Simuleret udglødning

Ingen af ovenstående har hukommelse

*Tabusøgning*

- opsamler information og bruger hukommelse til at styre søgning
- har ingen simpel definition
- er svær at analysere matematisk
- kræver mere tilpasning til hvert problem/omegn

## Tabusøgning

Paradigmet anvendt i 1970’erne, nuværende form indført af Glover (1986)

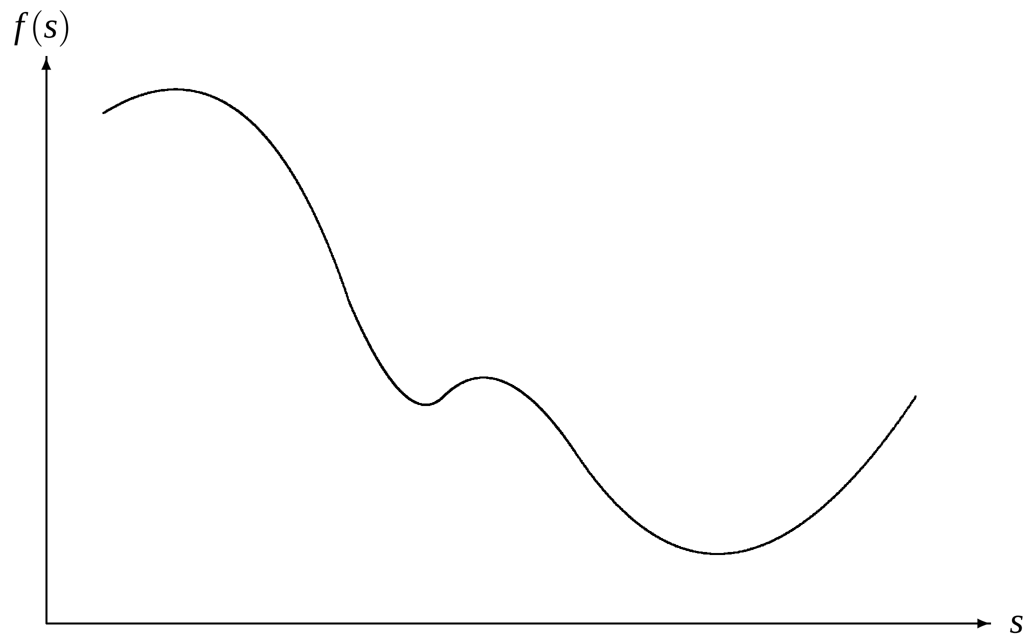
- “... a framework that links the perspectives of artificial intelligence and operations research”
- “... effective strategies for combinatorial problems can require methods that formal theorems are unable to justify”
- “Methods that are ’intelligently flexible’ lie in some yet-to-be-defined realm to which theorems do not apply, yet which embraces enough structure to exclude aimless wandering”

Vellykkede anvendelser og klogt valgt navn har gjort tabusøgning til standard metaheuristik

## Ordbog

| AI | ordinary meaning |
|---|---|
| tabu | forbidden (change of solution vector) |
| tabu list | table of previous solutions (compact) |
| aspiration level | objective function value |
| aspiration criterion | accept criterion |
| long time memory | statistics of good/bad solutions |

# Tabusøgning




Videreudvikling af stejleste nedstigning

**algorithm** tabusøgning
vælg en initiel løsning $s \in S$
sæt $s^* := s$
intialiser tabuliste
**repeat**
  find bedste løsning $s' \in N(s)$ som ikke er tabu
  $s := s'$
  opdater tabuliste
  **if** $f(s) \leq f(s^*)$ **then** $s^* := s$
**until** stopkriterium
**return** $s^*$

## Tabusøgning

Grundlæggende strategi

- vælg mest forbedrende (eller mindst forværrende) skridt i hver iteration
- undgå cykler ved at forbyde visse løsninger/skridt, såkaldte tabuløsninger

Implementation

- forbyd alle tidligere løsninger
- forbyd max $k$ tidligere løsninger
- forbyd max $k$ tidligere skridt
- forbyd løsninger med en given attribut

Tabuliste: hvis ændrer $x_i = a$ til $x_i = b$ tilføjes $x_i \neq a$

| | | |
|---|---|---|
| $x_3 \neq 1$ | $x_4 \neq 7$ | $x_5 \neq 2$ |

## Tabusøgning

Tabulistens længde 5–10.

- for lille: cykler
- for stor: tidskrævende at kontrollere tabu
  alt for restriktiv

Med længde $M$ garanteres cykler $\geq M+1$

## Aspirationskriterie

Giver mulighed for at bryde forbud i tabulisten

- hvis objektfunktion bedre end hidtil globalt bedste
- hvis objektfunktion bedre end daværende bedste

| | | |
|---|---|---|
| $x_3 \neq 1$ | $x_4 \neq 7$ | $x_5 \neq 2$ |
| 17 | 12 | 14 |

## Tabusøgning for grafdeling

- Objektfunktion:

$$f(x) = \sum_{u,v \in V} c_{uv} x_u (1 - x_v)$$

- Omegn:
  Ombyt to elementer $k, \ell$ hvor $k \in V_1$ og $\ell \in V_2$

- Mindre Omegn:
  Flyt et element fra $V_1$ til $V_2$ eller omvendt. Straf for ej overholdt begrænsning.

- Effektiv udregning af objektfunktion

$$f(s') := f(s) + \Delta f$$

- Tabuliste:
  Hvis knude $k$ flyttes fra $V_1$ til $V_2$ ($x_k = 1 \rightarrow x_k = 0$)

| variabel | $k$ | $\ell$ | 7 | 8 | 3 |
|---|---|---|---|---|---|
| forbudt tilstand | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 |

- Hvis aspirationskriterie benyttes husker jeg gældende objektfunktion sammen med tabu listen:

| variabel | $k$ | $\ell$ | 7 | 8 | 3 |
|---|---|---|---|---|---|
| forbudt tilstand | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| objektfunktion | 55 | 63 | 57 | 58 | 61 |

## Tabu Søgning for Kvadratisk Tildeling

- $n$ faciliteter med strøm $a_{ij}$ fra facilitet $i$ til $j$
- $n$ lokaliteter med afstand $b_{ij}$ fra lokalitet $i$ til $j$
- find en permutation $\pi$ der minimerer

$$f(\pi) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{\pi(i)\pi(j)}$$

- $\pi_i$ er facilitet $i$'s placering

| lokalitet | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|---|---|---|---|---|---|
| facilitet | 2 | 4 | 3 | 5 | 1 |

- Løsningsrum: alle mulige permutationer af $n$ tal, $O(n!)$

## Tabu Søgning for Kvadratisk Tildeling

- Omegn

  $N(\pi) = \{\pi' | \pi' \text{ opnås ved at ombytte to elementer i } \pi\}$

| lokalitet | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|---|---|---|---|---|---|
| facilitet | 2 | 1 | 3 | 5 | 4 |

- I tabu-listen gemmes følgende skridt

$$(i,j) : \text{facilitet } i \text{ og } j \text{ bytter plads}$$

$$(u,v) : \text{lokalitet } u \text{ og } v \text{ bytter plads}$$

- Dårlig repræsentation da

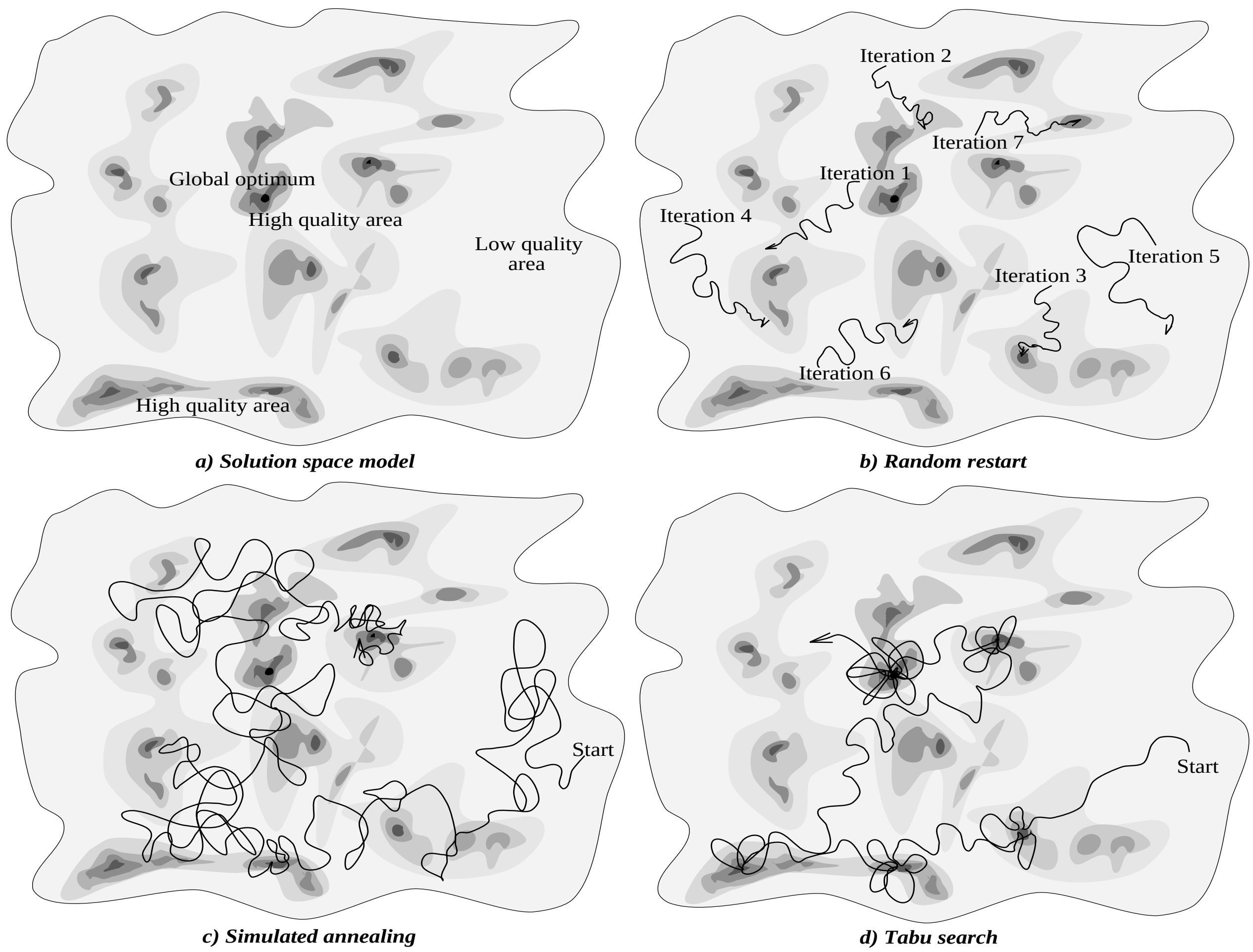
$$\begin{array}{cccc} i & j & k & l \\ i & k & j & l \\ l & k & j & i \\ l & k & i & j \\ k & l & i & j \\ i & l & k & j \\ i & j & k & l \end{array}$$

  forhindrer ikke cyklisk opførsel

- I tabu-listen gemmes følgende skridt

$$(i,\pi(i)) \text{ og } (j,\pi(j))$$

# Sammenligning



## Tabusøgning, diskussion

Intensivering $\leftrightarrow$ diversifikation

- Intensivering: Bedste løsning i $N(s)$ vælges
- Diversifikation: Tabuliste, aspirationskriterier

Fordele $\leftrightarrow$ ulemper

+ Meget grådig
– Følsom overfor omegns størrelse da hele $N(s)$ skal gennemsøges
– Flere parametre end simuleret udglødning
– Deterministisk, kan derfor cykle
+ Veldesignet algoritme giver gode løsninger

Hints

- Betragt kun en delmængde af $N(s)$ hvis $N(s)$ er stor
- Udregn $f(s') := f(s) + \Delta f$
- Kan være hensigtsmæssigt at tillade ulovlige løsninger mod straf i objektfunktion
- Reaktiv tabusøgning, langtidshukommelse, genstart

## Genetiske algoritmer

Indført af Holland (1975) motiveret af Darvinisme

```
TCAAGCAGATCACTGTCCTTCTGCCATGGCCCTGT
GGATGCGCCTCCTGCCCCTGCTGGCGCTGCTGGCC
```

Princip

- population af løsninger
- udvælgelse
- krydsning
- mutation

**algorithm** genetisk optimering
vælg en initiel population $P = \{s_i\}$, hvor $s_i \in S$
**repeat**
  evaluer population($P$);
  udvælg individer($P$, basis);
  kryds individer(basis, $P'$);
  muter individer($P'$);
  $P := P'$
**until** stopkriterium
**return** $P$

## Genetiske algoritmer

Udvælgelse

- “survival of the fittest”
- objektfuntion $f(s) \to K(s)$ kvalitetsmål
- udvælgelsessandsynlighed

$$p_u(s) = \frac{K(s)}{\sum_{s' \in P} K(s')}$$

vælger probabilistisk $|P|$ gange

Krydsning: gentag til $|P|$ individer

1 udvælg en tilfældig løsning $s_1$ fra basis

2 overfør $s_1$ direkte til nye generation med sandsynlighed $p_d$

3 udvælg en anden løsning $s_2$, kryds $s_1$ og $s_2$ overfør afkom til ny generation med sandsynlighed $(1 - p_d)$.

Bemærk: “gamle” individer kan overleve, typisk $p_d \approx \frac{1}{2}$

## Genetiske algoritmer

Krydsning

- to-punkts krydsning

$$
\begin{aligned}
s_1&: \mathsf{01101001\ 00101010\ 1110}\\
s_2&: \underline{\mathsf{01100111}}\ \underline{\mathsf{11001101}}\ \underline{\mathsf{0100}}\\[1em]
s_1'&: \mathsf{01101001}\ \underline{\mathsf{11001101}}\ \mathsf{1110}\\
s_2'&: \underline{\mathsf{01100111}}\ \mathsf{00101010}\ \underline{\mathsf{0100}}
\end{aligned}
$$

- bedste eller begge medtages i næste generation

Mutation

- ændrer et tegn

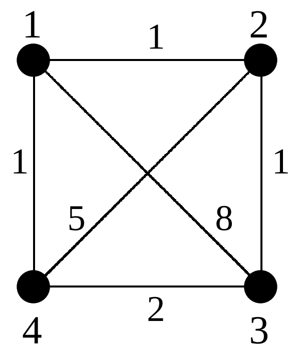
$$s_1: \mathsf{011010010\ 0\ 1010101110}$$

$$s_1': \mathsf{011010010\ 1\ 1010101110}$$

- sikre spredning i population da risiko for at alle ens
- sandsynlighed $p_m = \dfrac{1}{|P|}$
- krydsning skal være vigtigste operator

## Genetiske algoritmer, TSP

$G = (V, E)$ med vægte $d_{ij}$, find korteste Hamilton-kreds




Permutation $\pi$ af $\{1, 2, 3, \ldots, n\}$ som minimierer

$$f(\pi) = \sum_{i=1}^{n} d_{\pi(i)\pi(i+1)}$$

Krydsning skal bevare at $\pi$ er permutation

$$\begin{array}{ll} \pi_1: & 2\ 1\ 5\ 4\ 7\ 3\ 8\ 6 \\ \pi_2: & \underline{3\ 1\ 5\ 8\ 2\ 4\ 6\ 7} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \pi'_1: & 2\ 1\ 5\ \underline{8\ 2\ 4}\ 8\ 6 \\ \pi'_2: & \underline{3\ 1\ 5}\ 4\ 7\ 3\ \underline{6\ 7} \end{array}$$ (to-punkts)

$$\begin{array}{ll} \pi'_1: & 2\ 1\ 5\ \underline{3\ 8\ 4\ 6\ 7} \\ \pi'_2: & \underline{3\ 1\ 5}\ 2\ 4\ 7\ 8\ 6 \end{array}$$ (et-punkts)

Mutation

$$\begin{array}{ll} \pi: & 2\ 1\ 5\ 4\ 7\ 3\ 8\ 6 \\ \pi': & 2\ 1\ 3\ 4\ 7\ 5\ 8\ 6 \end{array}$$ (ombyt to elementer)

## Genetiske algoritmer, diskussion

Intensivering $\leftrightarrow$ diversifikation

- Intensivering: Population af løsninger
- Diversifikation: Krydsning, mutation

Fordele $\leftrightarrow$ ulemper

+ Returnerer familie af løsninger
+ Bevarer lokale egenskaber
– Dyrt at vedligeholde mange ens løsninger
– Svært at finde god kodning for mange problemer
– Temmelig mange paramtere
+ Parametre kan indgå som del af strengen (mod øget beregning)

Hints

- Population $|P| \approx 100$
- Stopkriterium: uændret bedste løsning $K$ gange

## Litteratur


P.J.M. van Laarhoven (1988), ”Theoretical and computational aspects of simulated annealing”, Erasmus University, Rotterdam, PhD thesis.

N. Metropolis m.fl. (1953) ”Equation of state calculations by fast computing machines”, Journal of Chemical Physics, 21, 1087-1092.

S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt, M.P. Vecchi (1983) ”Optimization by Simulated Annealing”, Science 220, 671-680.

J.H. Holland (1975) ”Adaptation in Natural and Artificial Systems”, University of Michigan Press, Ann Arbor.

Reeves (1995) ”Modern Heuristic Techniques for Combinatorial Problems”, McGraw-Hill.

F. Glover (1986) ”Tabu Search, part I”, ORSA Journal on Computing 1, 190-206.

Dowsland (1995) ”Variants of Simulated Annealing for Practical Problem Solving”in V. J. Rayward-Smith (Ed) Applications of Modern Heuristic Methods, Henley-on-Thames, Alfred Waller, 3-16.