

### Generelle optimeringsheuristikker (*metaheuristikker*)

- Indplacering
- Lokal søgning
- Simuleret udglødning
- 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

1

### 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  $f : S \rightarrow \mathbb{R}$  skal minimeres

Omegn  $N(s) \subset S$  for hver løsning  $s \in S$

Omegn skal opfylde at alle løsninger kan nås

Skridt (*overgang*) betegner  $s \rightarrow s'$

2

### Simpleste lokalsøgning

#### algorithm lokalsøgning

vælg en initial løsning  $s \in S$

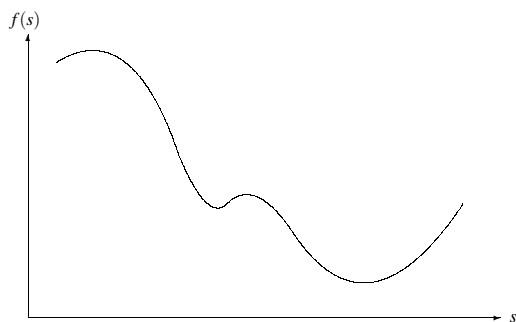
#### repeat

    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

3

### 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

4

## Varianter af lokalsøgning

**algorithm** trinvis forbedring  
vælg en initial 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.

5

## Ordbog

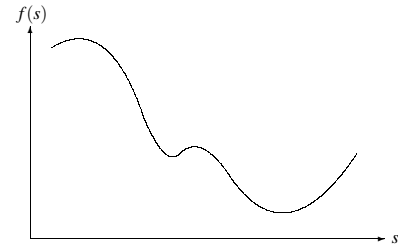
Dowland (1995) viser følgende sammenhæng mellem fysisk nedkøling og optimering

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

7

## Simuleret udglødning

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

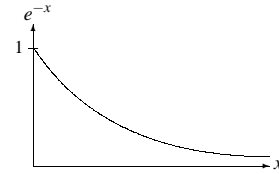


Heuristik har intet at gøre med fysiske systemer

- $s' \in N(s)$  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*)



6

## Simuleret udglødning

**algorithm** simuleret udglødning  
vælg en initial løsning  $s \in S$   
vælg en initial 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**  
   $T := \text{ny temperatur}(T)$   
**until** stopkriterium  
**return**  $s$

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

8

## Simuleret udglødning

Initiel temperatur

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

Kølingsrate

- $T_{i+1} := \alpha T_i, \quad 0 \leq \alpha < 1$
- 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.

9

## Simuleret udglødning

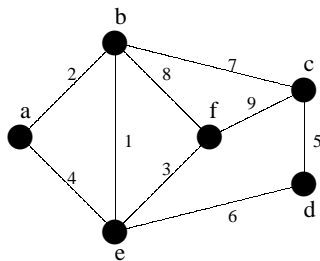
Laarhoven (1988) viste at hvis temperatur sænkes uendeligt langsomt, og der er uendeligt mange skridt til rådighed, så vil simuleret udglødning returnere optimal løsning.

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

Bevis baseret på Markovkæder

10

## Simuleret udglødning for grafdeling



Givet graf  $G = (V, E)$  og omkostnings funktion  $c : E \rightarrow \mathbb{N}$ . 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

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

11

## 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

$$\begin{aligned} \Delta f &= \sum_{v \in V} x_v c_{kv} - \sum_{v \in V} (1 - x_v) c_{kv} \\ &\quad + \sum_{v \in V} (1 - x_v) c_{\ell v} - \sum_{v \in V} x_v c_{\ell v} \end{aligned}$$

(idet  $x_k = 1 \rightarrow x_k = 0$  og  $x_\ell = 0 \rightarrow x_\ell = 1$ ). Kan beregnes i  $O(V)$  tid.

12

## Simuleret udglødning, diskussion

Intensivering ↔ diversifikation

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

Fordele ↔ ulemper

- + Robust algoritme uanset omegn  $N(s)$
- + Få parametre ( $T_0, \alpha$ ), disse kan justeres automatisk
- Ikke videre grådige, 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

13

## 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

14

## 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”

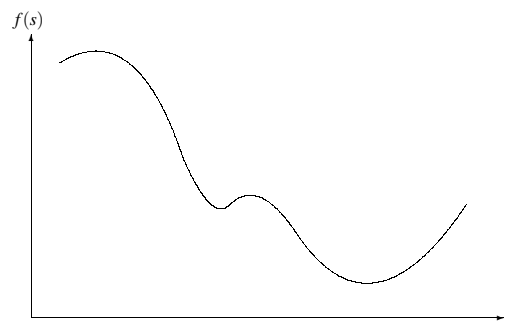
Vellykkede anvendelser og klogt valgt navn har gjort tabusøgning til standard metaheuristik

## 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

15

## Tabusøgning



Videreudvikling af stejleste nedstigning

**algorithm** tabusøgning

vælg en initial løsning  $s \in S$

sæt  $s^* := s$

initialiser 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**  $s^*$

16

## Tabusøgning

### Grundlæggende strategi

- vælg mest forbedrende (eller mindst forværende) 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  $x_i \neq a$

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

17

## 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

18

## 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

19

## 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,  $O(n!)$

20

## Tabu Søgning for Kvadratisk Tildeling

- Omegn

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

lokalitet	1	2	3	4	5
facilitet	2	1	3	5	4

- I tabu-listen gemmes følgende skridt

$(i, j)$  : facilitet  $i$  og  $j$  bytter plads

$(u, v)$  : lokalitet  $u$  og  $v$  bytter plads

- Dårlig repræsentation da

$i \ j \ k \ l$   
 $i \ k \ j \ l$   
 $l \ k \ j \ i$   
 $l \ k \ i \ j$   
 $k \ l \ i \ j$   
 $i \ l \ k \ j$   
 $i \ j \ k \ l$

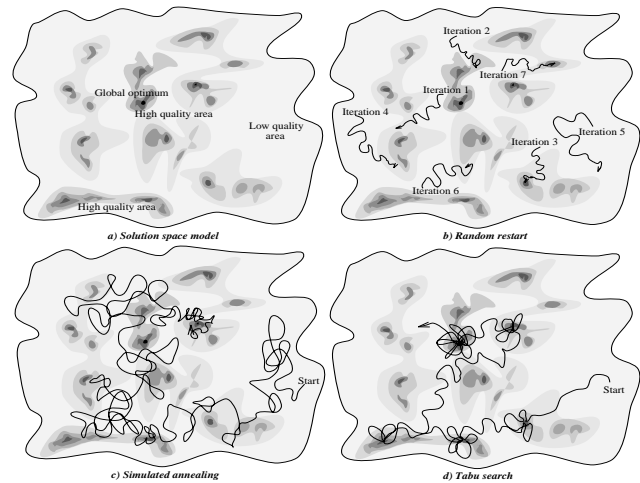
forhindrer ikke cyklisk opførsel

- I tabu-listen gemmes følgende skridt

$(i, \pi(i))$  og  $(j, \pi(j))$

21

## Sammenligning



22

## Tabusøgning, diskussion

Intensivering ↔ diversifikation

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

Fordele ↔ ulemper

- + Meget grådig
- Følsom overfor omegns størrelse da hele  $N(s)$  skal gennemses
- 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

23

## Genetiske algoritmer

Indført af Holland (1975) motiveret af Darwinisme

```
TCAAGCAGATCACTGTCCTTCTGCCATGGCCCTGT  
GGATGCGCCTCCTGCCCTGCTGGCGCTGCTGGCC
```

Princip

- population af løsninger
- udvælgelse
- krydsning
- mutation

**algorithm** genetisk optimering

vælg en initial 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**  $P$

24

## Genetiske algoritmer

### Udvælgelse

- “survival of the fittest”
- objektfunktion  $f(s) \rightarrow K(s)$  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  $p_d \approx \frac{1}{2}$

25

## Genetiske algoritmer

### Krydsning

- to-punkts krydsning

$s_1$ : 01101001 00101010 1110

$s_2$ : 01100111 11001101 0100

$s'_1$ : 01101001 11001101 1110

$s'_2$ : 01100111 00101010 0100

- bedste eller begge medtages i næste generation

### Mutation

- ændrer et tegn

$s_1$ : 011010010 0 1010101110

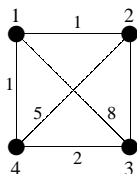
$s'_1$ : 011010010 1 1010101110

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

26

## Genetiske algoritmer, TSP

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



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

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

Krydsning skal bevare at  $\pi$  er permutation

$\pi_1$ : 2 1 5 4 7 3 8 6

$\pi_2$ : 3 1 5 8 2 4 6 7

$\pi'_1$ : 2 1 5 8 2 4 8 6 (to-punkts)

$\pi'_2$ : 3 1 5 4 7 3 6 7

$\pi'_1$ : 2 1 5 3 8 4 6 7 (et-punkts)

$\pi'_2$ : 3 1 5 2 4 7 8 6

### Mutation

$\pi$ : 2 1 5 4 7 3 8 6

$\pi'$ : 2 1 3 4 7 5 8 6 (ombyt to elementer)

27

## 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 parametre
- + Parametre kan indgå som del af strengen (mod øget beregning)

### Hints

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

28

## 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.

Dowland (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.