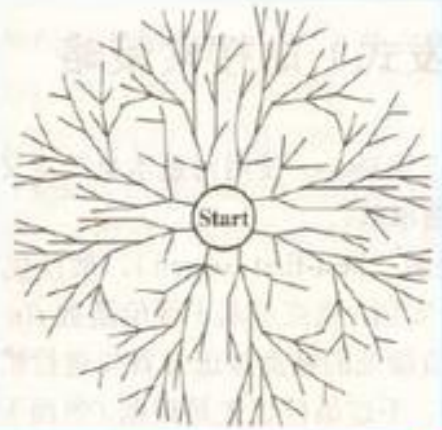
第4讲 优化问题求解

尹慧琳，yinhuilin@tongji.edu.cn
同济大学 电子与信息工程学院

第 4 讲 优化问题求解

第3讲讨论的 搜索
- 问题：可观察的、确定的、已知的
- 方法：系统地探索问题空间
- 目标：到达目标结点，得到解

- 现实世界的问题
  - 问题空间不一定都满足确定性和可观察性
  - 到达目标的路径往往是无关紧要的
  - 目标结点并非已知，更非唯一



- 优化问题（Optimization problem）

从多元的解空间中提取使目标函数达到最优的选项

第 4 讲 优化问题求解

4.1 优化问题

4.2 优化问题的求解

4.3 局部搜索方法

4.4 元启发式方法

4.5 群体智能方法

第4讲 优化问题求解

4.1 优化问题

- 问题实例1：**旅行推销员问题**

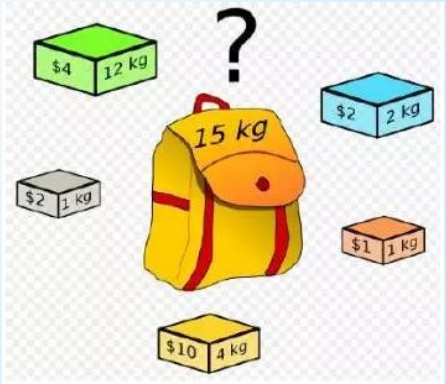
(Travelling salesman problem, TSP)

有个推销员要走访n个城市。他从某个城市出发，每个城市只能走访一次，最后要回到原来出发的城市。目标是找到一条路径，其行走的路程为所有路径中的最小值。

- 问题实例2：**背包问题**

(Knapsack problem)

给定一组物品，每个物品都标有重量和价格，在限定背包的总重量内，如何选择最合适的物品放置于背包中并且满足物品的总价格最高。

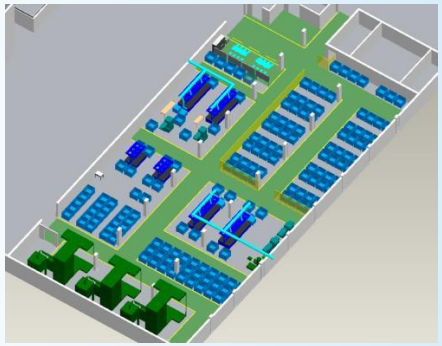


第4讲 优化问题求解

4.1 优化问题

- 问题实例3：**车辆路由问题**（Vehicle routing problem, VRP）

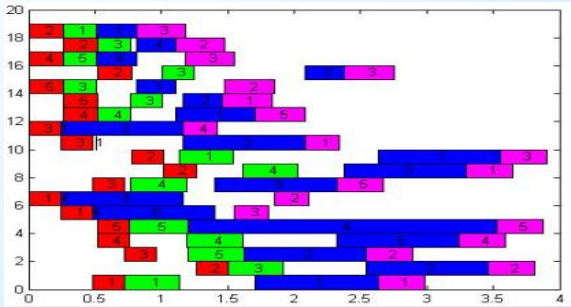
  如何组织车辆寻找最佳的行车路线进行配货。

  - 工厂车间布局
  - 电信
  - 网络优化
  - 机器人导航

- 问题实例4：**负载均衡问题**（Load balance problem）

  寻找为不同的机器分配不同任务的最优分配方案。

  - 投资组合管理
  - 车间作业调度
  - 自动装配排序

第4讲 优化问题求解

4.1 优化问题

- 线性优化 vs 非线性优化
- 确定性优化 vs 随机性优化
- 静态优化 vs 动态优化
- 连续 vs 离散
  - 连续优化问题（Continuous optimization）或函数优化问题
  - 离散优化问题（Discrete optimization）或组合优化问题
- 无约束 vs 有约束
  - 无约束优化问题
  - 约束优化问题

第 4 讲 优化问题求解

4.1 优化问题

4.2 优化问题的求解

4.3 局部搜索方法

4.4 元启发式方法

4.5 群体智能方法

第4讲 优化问题求解

4.2 优化问题的求解

- 建模（三要素）　$X = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^T$
  - 决策变量和参数　$\boldsymbol{min}\ \boldsymbol{f}(X)$ 或 $\boldsymbol{max}\ \boldsymbol{f}(X)$
  - 目标函数　$g_i(X) \leq$ 或 $\geq 0\ (i = 1,2,\ldots,m)$
  - 约束条件　$h_j(X) = 0\ (j = 1,2,\ldots,l)$
- 求解

传统方法

- 数学解析法：经典运筹学
- 数值计算法：迭代逼近

启发式方法

- 局部搜索：爬山法, 束搜索
- 元启发式：SA, GA, TS, …
- 群体智能：PSO, ACO, ABC, …

第4讲 优化问题求解

4.2 优化问题的求解：传统方法

- 数学解析方法：*绝对最优*
  - 针对线性问题：
  - 针对非线性问题：
    - 一阶导数-梯度（必要条件）
    - 二阶导数-海赛矩阵（充分条件）
    - 凸函数的极小值就等于其最小值
- 数值计算法：*近似最优*
  - 迭代算法的共同原则：趋优，收敛，精度
  - 算法的关键：
    - 确定搜索方向：梯度法、共轭梯度法、变尺度法、步长加速法、……
    - 确定步长：固定常数、可接受点算法、插值法、……

第4讲 优化问题求解

4.2 优化问题的求解：局部搜索

- 局部搜索 / 邻域搜索（Local Search）

  采用局部最优的思想，从问题空间中的某个解出发，每次找出一个相邻的解并进行比较，直到找到一个最优解

- 局部搜索 vs 经典搜索
  - 经典搜索：目的是找到达既定目标的路径。
  - 局部搜索：没有既定的目标，不以路径的搜寻为目的。
- 特点
  - 使用很少的内存
  - 能够在状态空间中发现合理的解

第4讲 优化问题求解

4.2 优化问题的求解：元启发式

- 元启发式（Metaheuristic）
  - 基于客观约束条件或受自然现象的启发而形成的一类优化算法
  - 利用一些指导规则来指导整个解空间中优良解的探索，如：SA、GA、TS等
- 特点
  - 不依赖问题的特有条件、不做人为的假设，是一种通用的启发式
  - 基于问题的客观约束条件、或模拟一些自然现象
  - 通常用于解决优化问题中的不确定性、随机性和动态信息

群体智能也可以算作受自然现象启发而形成的算法，但由于其所具有的群体性质，将群体智能从元启发式方法中分离出来：

第4讲 优化问题求解

4.2 优化问题的求解：群体智能

- 群体智能（Swarm Intelligence）

  受集群智能（Collective Intelligence）的启发而形成的一类方法。集群智能是大量的同类智能主体通过合作实现的智能。例如

  - 鱼群（schools of fish）
  - 鸟群（flocks of birds）
  - 蚁群（colonies of ants）

- 特点

  其中的每个主体呈现出自主、分散式、自组织状态，通常用于：

  - 有效觅食（Effective Foraging for Food）
  - 躲避猎物（Prey Evading）
  - 群体搬迁（Colony Relocation）

第 4 讲 优化问题求解

4.1 优化问题

4.2 优化问题的求解

4.3 局部搜索方法

4.4 元启发式方法

4.5 群体智能方法

第4讲 优化问题求解

4.3 局部搜索方法：爬山法

- 邻域搜索算法：

  从任一解出发，对其邻域的不断搜索和当前解的替换来实现优化。

  邻域设置有多种可能性，比如10010， ITS

- 爬山法（Hill climbing）

  是最基本的局部邻域搜索方法。以局部优化策略在当前解的邻域中贪婪搜索：若候选解优于已有解，则将其作为新的解；重复上述操作直到无法进一步改善为止。

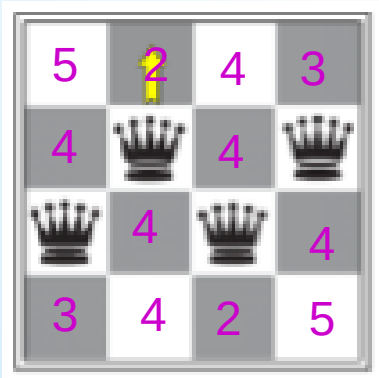
  相当于 深度优先+启发式

- 优点：
  - 只用很少的内存，通常是常数
  - 能够在系统化算法不适用的很大或无限（连续的）状态空间中找到合理的解

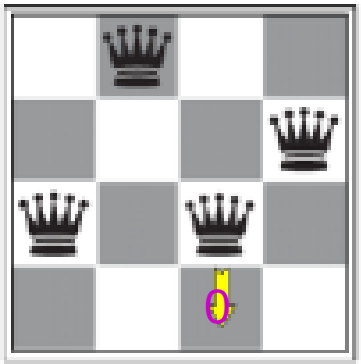
第4讲 优化问题求解

4.3 局部搜索方法：爬山法

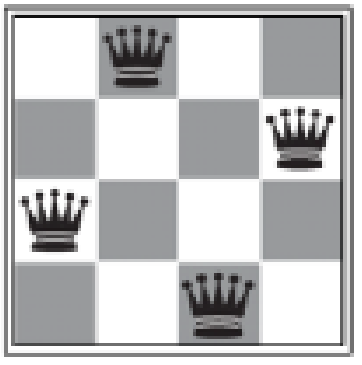
- 举例：4皇后问题（n皇后问题）
  - 状态：全态形式化（complete-state formulation）
  - 启发式评估函数：h=形成相互攻击的皇后对的数量
  - 后继状态数：3*4=12
  - 最优目标：h=0



h=5



h=2

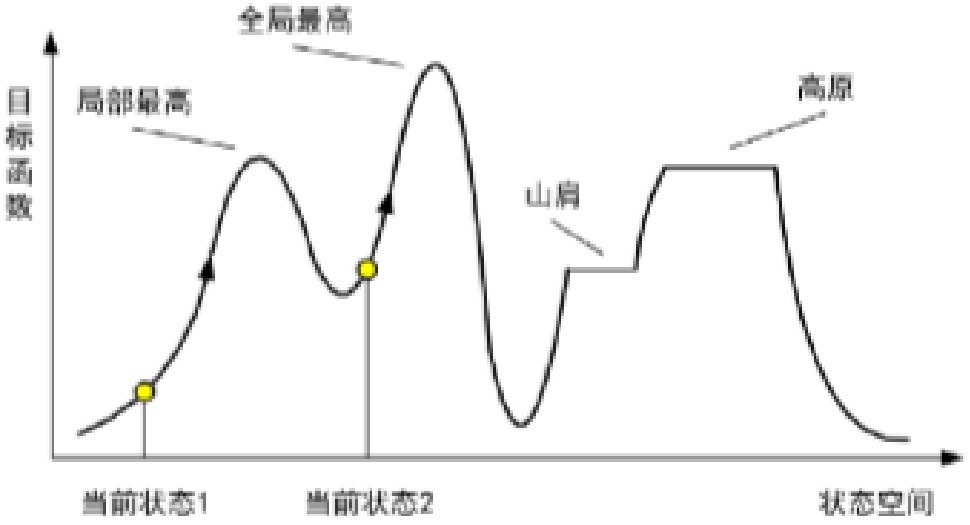


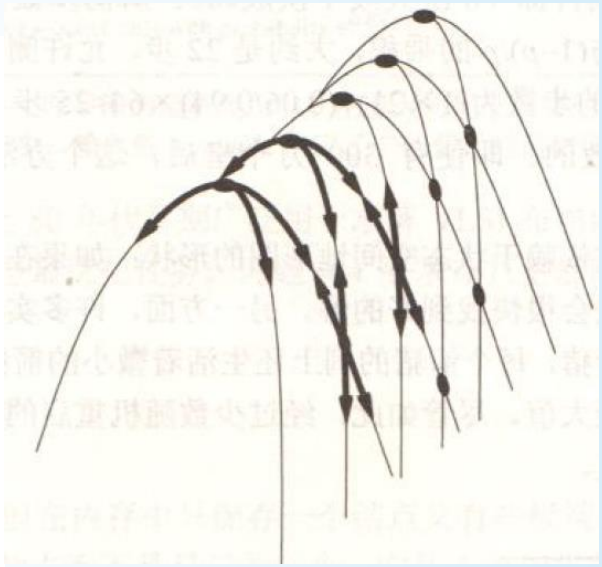
h=0

第4讲 优化问题求解

4.3 局部搜索方法：爬山法

- 性能分析：有效但不完备





- 由于初始状态的随机性，爬山法可以保证局部最优，但无法保证全局最优
- 若搜索的范围进入“山肩”或“高原”，其状态则为若干局部最优解中的一个，算法难以处理

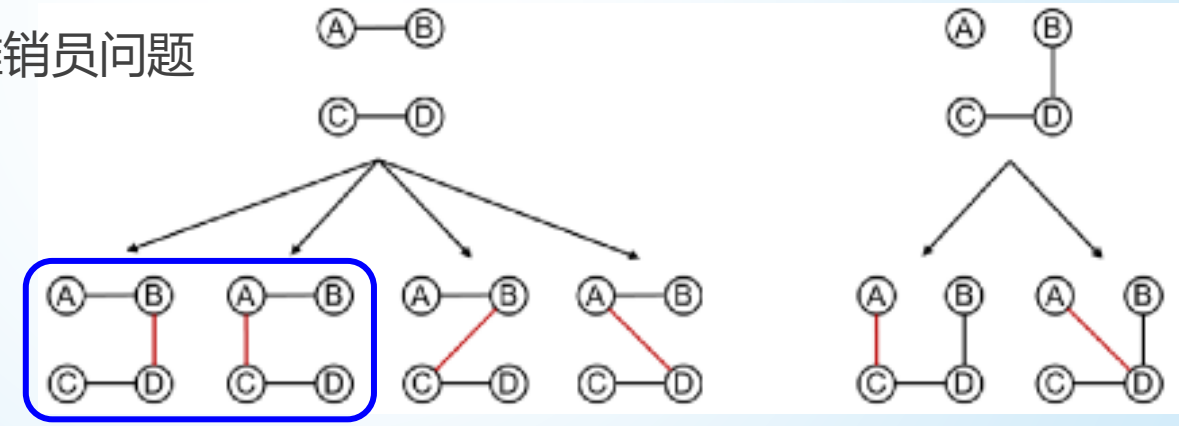
第4讲 优化问题求解

4.3 局部搜索方法：局部束搜索

- 局部束搜索

开始时随机选取k个状态；再生成k个状态的全部后继；若后继中存在一个局部最优解，则搜索停止；否则从后继中选取最优的k个状态，重复上述步骤。

- 四城市旅行推销员问题
- k=2



- 局部束搜索 vs 爬山法：
  - 局部束搜索每次保存若干个状态，而爬山法每次仅保存一个状态

第 4 讲 优化问题求解

4.1 优化问题

4.2 优化问题的求解

4.3 局部搜索方法

4.4 元启发式方法

4.5 群体智能方法

第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法

启发式算法 = 元启发式算法 + 问题特征

许多元启发式算法都从自然界的一些随机现象取得灵感

启发式 Heuristic

- 高效获得可行解的办法
- 往往依赖于某个特定问题

元启发式 Meta-heuristic

- 通用的启发式策略
- 通常不借助于问题的特有条件
- 能够运用于更广泛的方面

- 基于个体
  - 禁忌搜索TS
  - 模拟退火SA
  - 遗传算法GA
  - ……
- 基于群体
  - 蚁群算法
  - 粒子群算法
  - ……

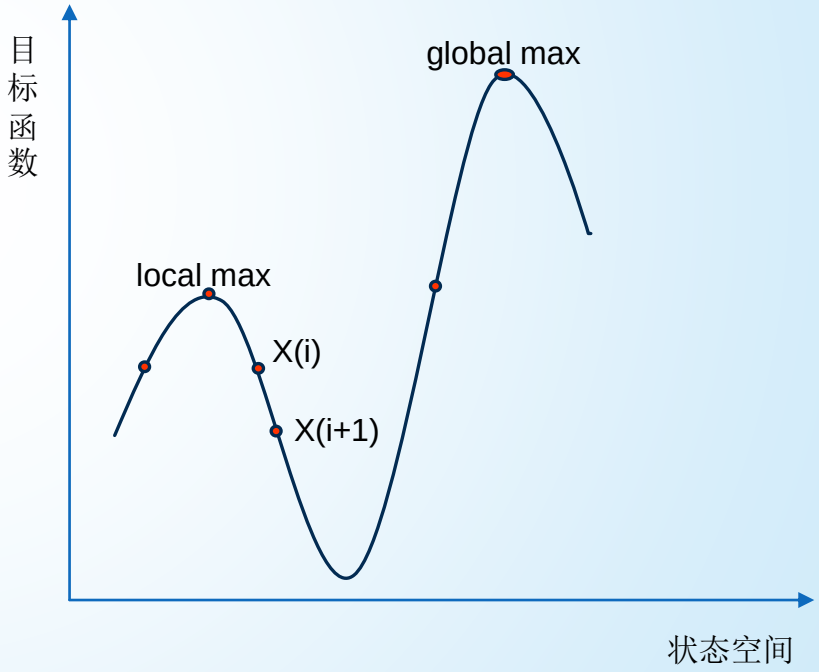
第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法

启发式方法本质：

第一步：求局部最优解

第二步：设计方法跳出局部最优



第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：禁忌搜索

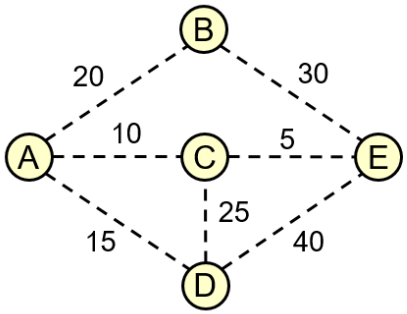
- 禁忌搜索（Tabu Search, TS）
  - 根据所指定的禁忌条件进行搜索，在潜在的解到改进的解之间移动，直到满足某些停止条件。
  - 使用禁忌表（tabu list），将每一步找到的局部最优解放入禁忌表，以期获得更大的搜索空间。
- 禁忌搜索的相关概念
  - 禁忌表：保存禁忌对象，避免操作的重复进行
  - 禁忌长度：决定禁忌对象的任期
  - 特赦规则：允许有条件地无视禁忌限制
  - 终止规则：结束整个搜索过程的规则

禁忌（Tabu）指的是不能触及的事物。

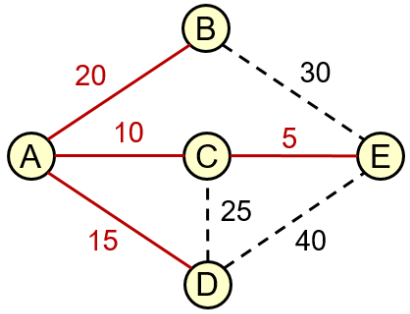
第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：禁忌搜索

- 举例：最小生成树问题

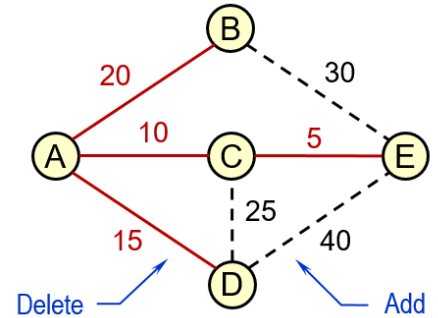


用最小代价连接所有节点



无约束的最优解

第一次迭代求解



增加	删除	代价
BE	CE	75 + 200 = 275
BE	AC	70 + 200 = 270
BE	AB	60 + 100 = 160
CD	AD	60 + 100 = 160
CD	AC	65 + 300 = 365
DE	CE	85 + 100 = 185
DE	AC	80 + 100 = 180
DE	AD	75 + 0 = 75

增删代价表

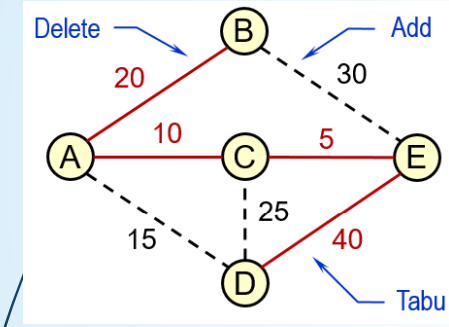
- 约束1：仅当连接DE时才可以连接AD （处罚：100）
- 约束2：选择AD、CD或AB连接中的一个
  （处罚：若选择其中的两个罚100，
  若选择其中的三个罚200）。

第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：禁忌搜索

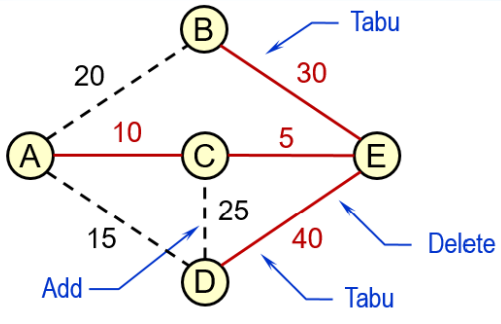
- 举例：最小生成树问题

第二次迭代求解

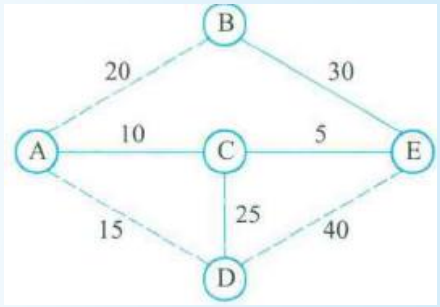


增加	删除	代价
AD	DE*	禁忌
AD	CE	85 + 100 = 185
AD	AC	80 + 100 = 180
BE	CE	100 + 0 = 100
BE	AC	95 + 0 = 95
BE	AB	85 + 0 = 85
CD	DE*	禁忌
CD	CE	95 + 100 = 195

第三次迭代求解



增加	删除	代价
AB	BE*	75+0=75 禁忌
AB	CE	100 + 0 = 100
AB	AC	95 + 0 = 95
AD	DE*	60 + 100 = 160
AD	CE	95 + 0 = 95
AD	AC	90 + 0 = 90
CD	DE*	70 + 0 = 70
CD	CE	105 + 0 = 105

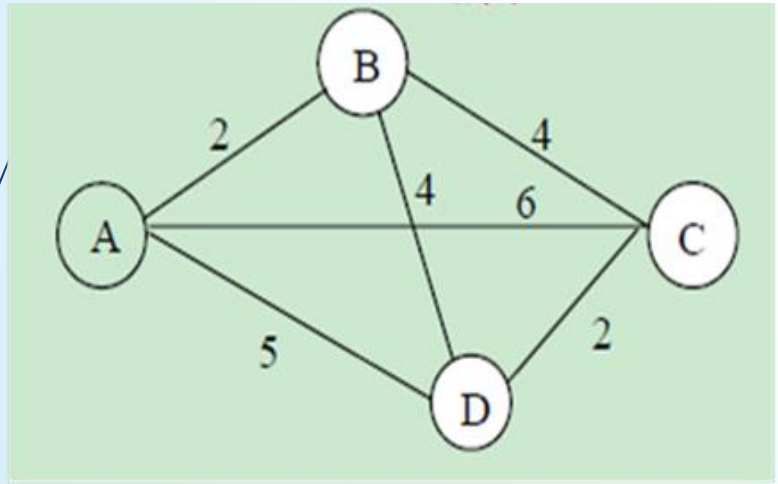


最优解

第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：禁忌搜索

- 举例：旅行商问题



ABCD

BACD

ACBD

ABDC

BADC

第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：模拟退火

- 爬山法 vs 随机行走
  - 爬山法：从后继节点集合中选择最优的作为后继——高效但不完备
  - 随机行走：从后继集合中完全等概率的随机选取后继——完备但低效
- 退火

  一种用于增强金属和玻璃的韧性或硬度的热处理工艺。

  先将固体材料加热到高温，再让它们逐渐冷却，以使材料到达低能量的结晶态。
- 比方

  想象在高低不平的平面上有个乒乓球，希望使其掉到最深的裂缝之中。

  通过不断晃动平面，使乒乓球弹出局部最小点。

第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：模拟退火

优化问题和热力学问题具有很多的相似性

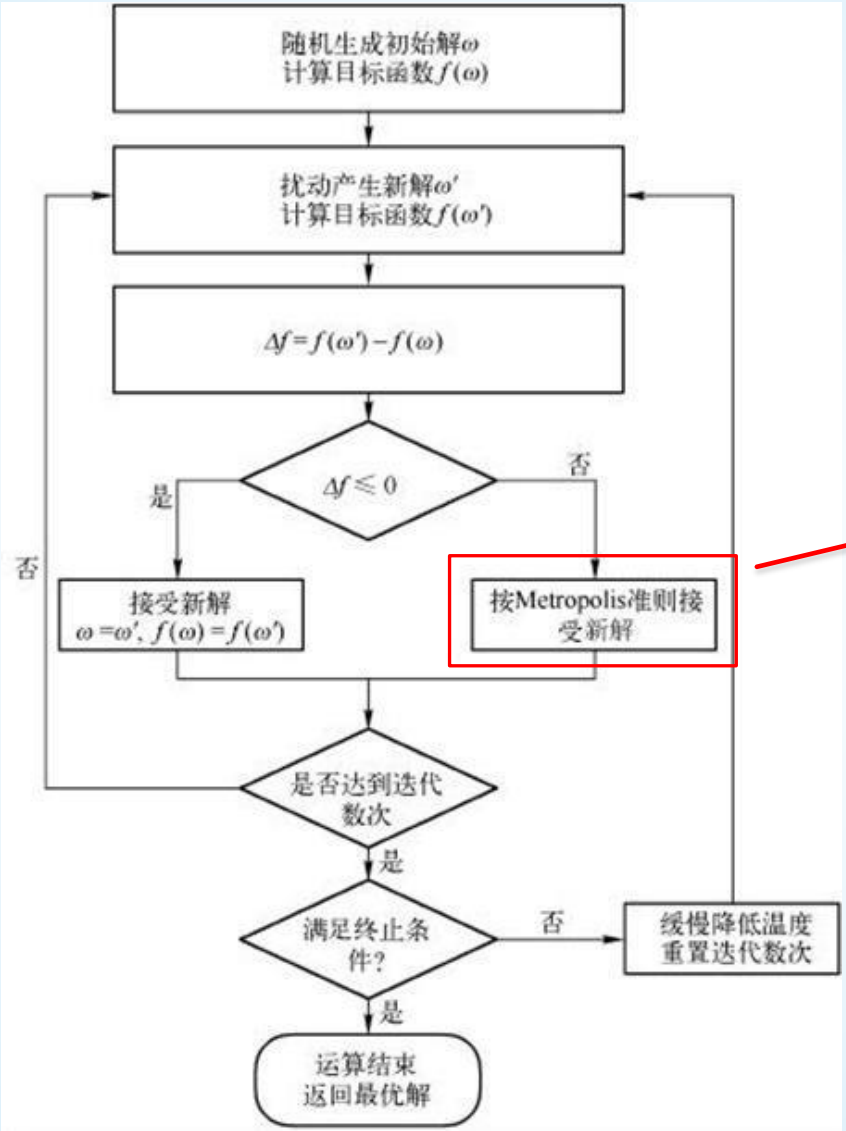
表 4.1 优化问题与热力学问题的比较

优化问题	热力学问题
目标函数(objective function)	能量极位(energy level)
可采纳解(admissible solution)	系统状态(system state)
相邻解(neighbor solution)	状态变化(change of state)
控制参数(control parameter)	温度(temperature)
较优解(better solution)	凝固状态(solidification state)

第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：模拟退火

- 模拟退火（Simulated Annealing, SA）
  - 先用启发式方法随机生成初始解；
  - 再生成相邻解；
  - 若相邻解代价较低则接受，否则以概率 P （P<1）接受；
  - 概率 P 随时间 T 推移而减小；若移动导致状态“变坏”，则概率成指数级下降；
  - 当解的值低于阈值或达到迭代最大次数时，则停止操作。
- 特点
  - 是一种求得近似全局最优解的概率方法
  - 适用于离散搜索空间


随机生成初始解ω
计算目标函数f(ω)
扰动产生新解ω′
计算目标函数f(ω′)
Δf=f(ω′)−f(ω)
Δf≤0
是
否
否
接受新解
ω=ω′, f(ω)=f(ω′)
按Metropolis准则接受新解
是否达到迭代数次
是
满足终止条件?
否
缓慢降低温度
重置迭代数次
是
运算结束
返回最优解

算法核心

第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：模拟退火

- Metropolis准则

温度越高，算法接收新解的概率越高，但并不完全抛弃“差解”。这样以一定概率接收“差解”的方法叫Metropolis准则。

$$P = e^{-\Delta E/kT}$$

第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：模拟退火

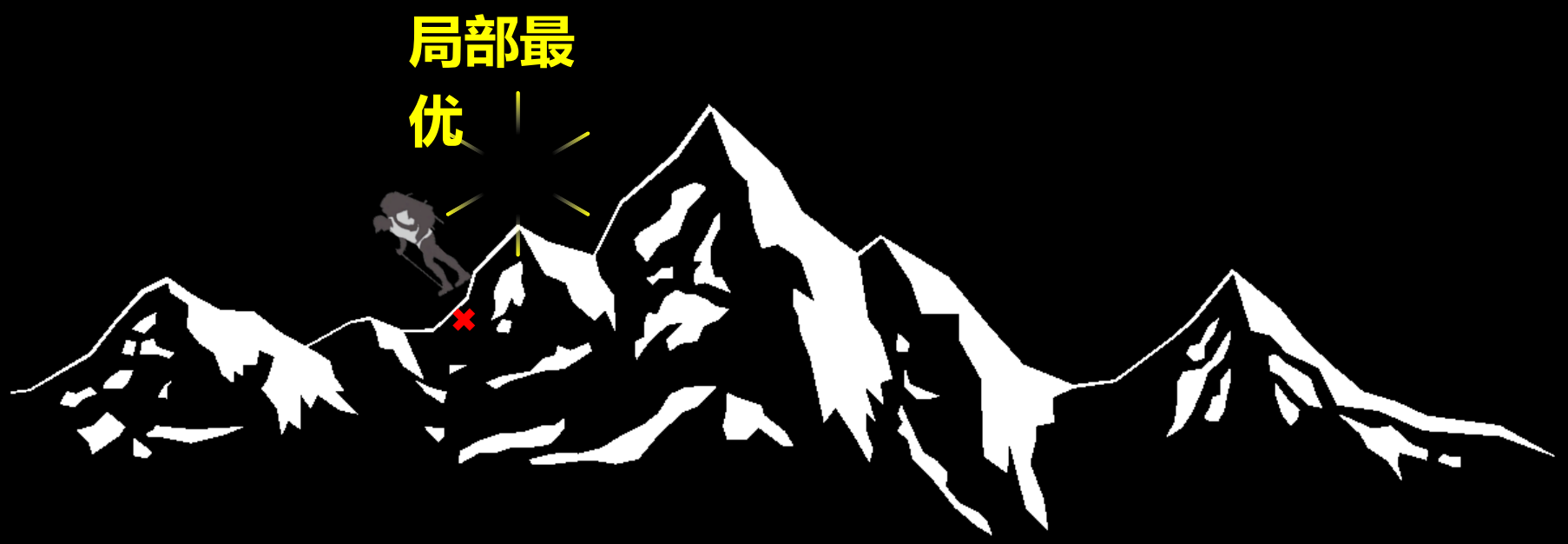
算法步骤

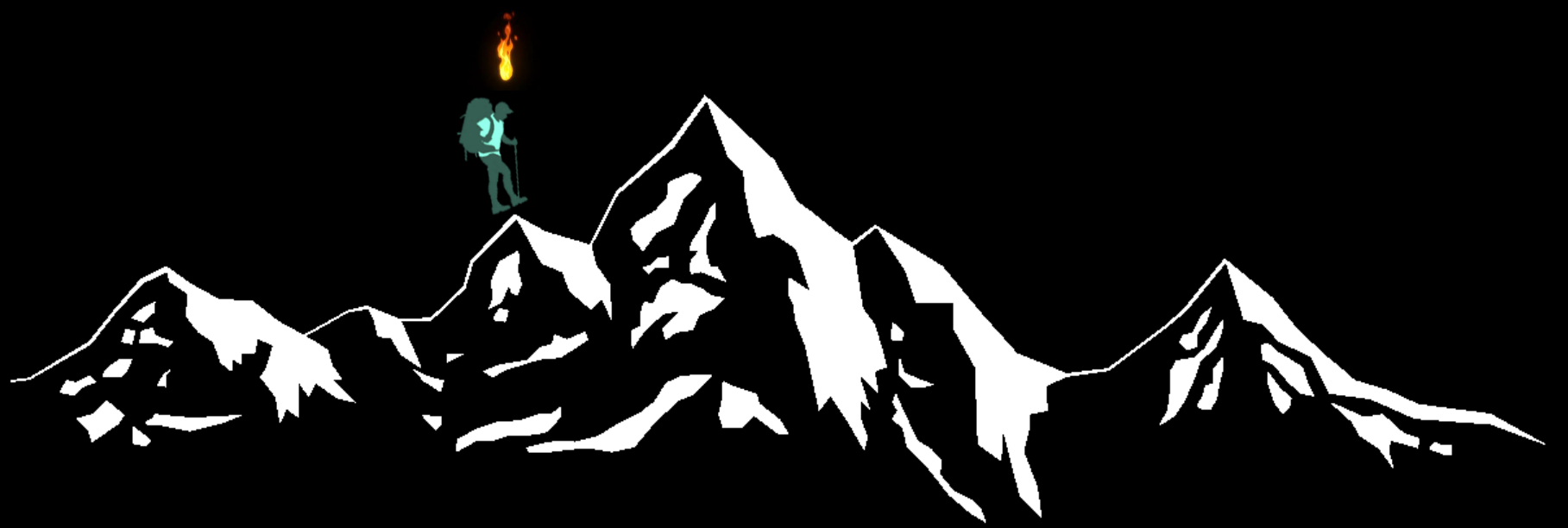
1. 令$T = T_0$，表示开始退火的初始温度，随机产生一个初始解x_0，并计算对应的目标函数值$E(x_0)$;
2. 令$T = kT$，其中k取值0到1，为温度下降速率；（降温）
3. 对当前解x_T施加随机扰动，在其邻域内产生一个新解x_T'，并计算对应的目标函数以及 $\Delta E = E(x_T') - E(x_T)$
4. 若$\Delta E < 0$，则接受新解，否则（即新解比当前解差）按照概率$e^{-\Delta E/kT}$判断是否接受新解;
5. 在温度T下，重复L次步骤3与4;
6. 判断是否满足终止条件，若满足则结束算法，否则返回步骤2。

第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：模拟退火

- 可视化演示


局部最
优




全局最
优

调整参数

e.g. 初始温度、温度衰减速度等

调整参数

e.g. 初始温度、温度衰减速度等

调整参数

e.g. 初始温度、温度衰减速度等

调整参数

e.g. 初始温度、温度衰减速度等

调整参数

e.g. 初始温度、温度衰减速度等

调整参数

e.g. 初始温度、温度衰减速度等

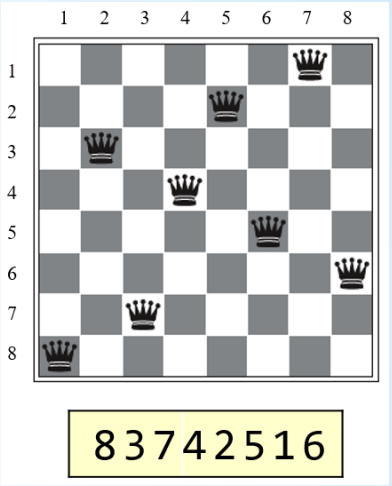
第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：遗传算法

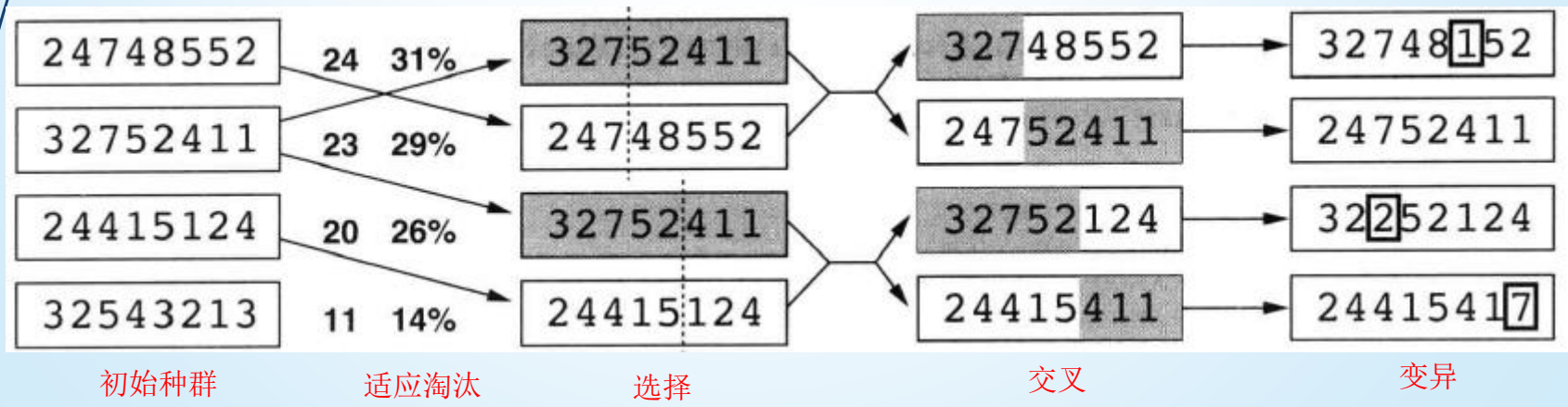
- 遗传算法（Genetic Algorithms, GA）
  - 模仿自然选择过程的启发式搜索算法。
- 遗传算法 vs 束搜索
  - 束搜索的后继节点是单一状态；遗传算法的后继节点是状态的组合。
  - 束搜索相当于无性繁殖；遗传算法相当于有性繁殖。
- 遗传算法 vs 进化算法（Evolutionary Algorithms, EA）
  - 遗传算法属于进化算法
  - 以自然进化的方式生成优化问题的解
  - 自然进化的基本环节：
    - 遗传（inheritance）；
    - 选择（selection）；
    - 杂交/交叉（mutation）；
    - 突变/变异（crossover）

第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：遗传算法



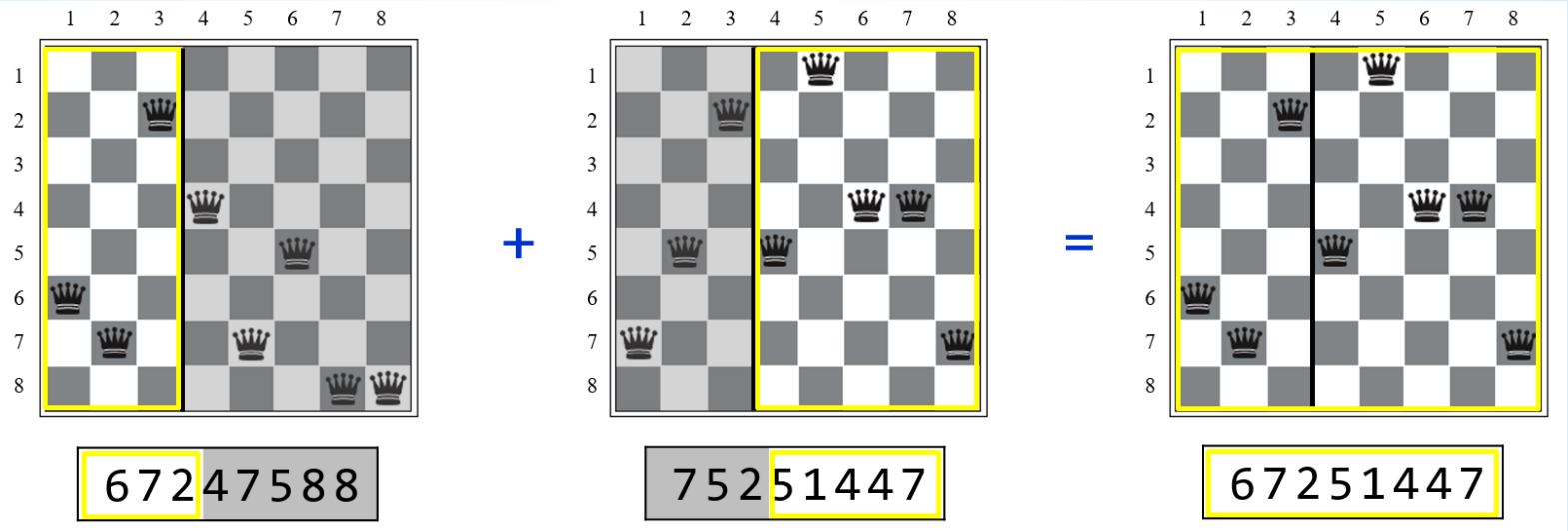
- 举例：8皇后问题
  - 全态形式化：8个皇后均在棋盘上，每列一个。
  - 编码：每个皇后用1-8表示其所在的行数，按照1-8列的顺序排列，则：
  - 产生后继节点：选择、交叉、变异
  - 适应函数：h 值=不相互攻击的皇后对的数目，最优解的值为 28



第4讲 优化问题求解

4.4 元启发式方法：遗传算法

- 举例：交叉操作



- 遗传算法特点：
  - 结合了上山趋势（趋优）、随机探索和在并行搜索线程之间的交换
  - 来自交叉操作的算法优势，体现了基于模式（schema）的运转过程

第 4 讲 优化问题求解

4.1 优化问题

4.2 优化问题的求解

4.3 局部搜索方法

4.4 元启发式方法

4.5 群体智能方法

第4讲 优化问题求解

4.5 群体智能方法

- 群体智能：受自然界群居性生物表现出来的智能启发的算法
- 主要的群体智能方法：
  - 蚁群优化（Ant Colony Optimization）
  - 粒子群优化（Particle Swarm Optimization）
  - 蜂群算法（Bee Colony Algorithm）
  - 鱼群算法（Fishswarm Algorithm）
  - 细菌群优化（Bacterial Colony Optimization）
  - 蝙蝠算法（Bat Algorithm）
  - 萤火虫群优化（Glowworm Swarm Optimization）
  - 自行式粒子（Self-propelled Particles）

第4讲 优化问题求解

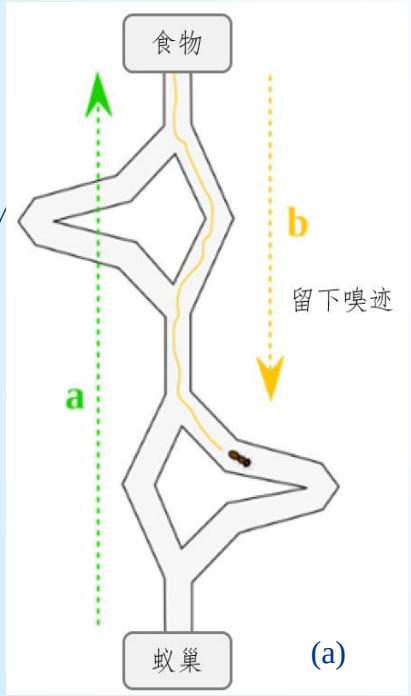
4.5 群体智能方法：蚁群优化

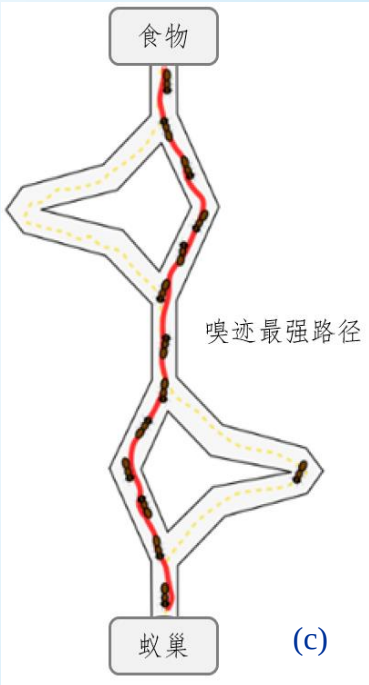
- 蚁群觅食
  - 蚂蚁从蚁巢出发，沿途留下信息素（pheromone）嗅迹，找到食物源后返回蚁巢；
  - 后面的蚂蚁通过该嗅迹察觉到前面蚂蚁的路径后，往往跟随。
  - 较短的路径上会留下更多的信息素，增加了更多蚂蚁跟随该路径的概率。从而通过群体行为发现蚁巢到食物源的最短路径。
- 蚁群优化（Ant Colony Optimization, ACO）
  - 受蚁群觅食所启发，产生了蚁群优化算法的灵感。
  - 一种解决组合优化问题的启发式搜索技术，可用于发现图中的最佳路径

第4讲 优化问题求解

4.5 群体智能方法：蚁群优化

- 基本思想：
  - 信息素跟踪；
  - 信息素遗留和挥发



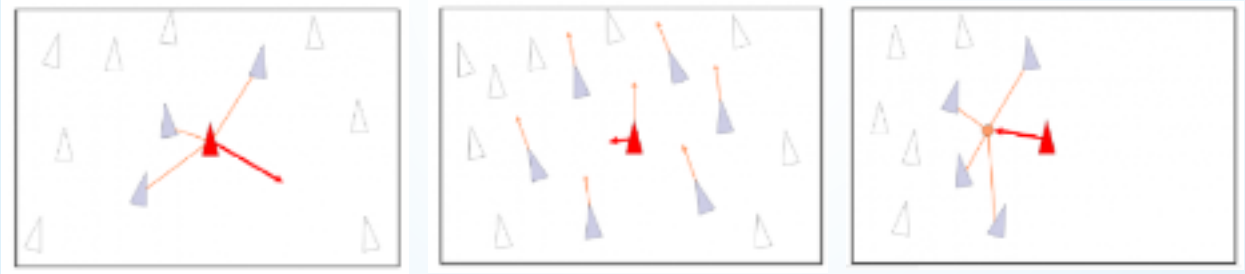


- 应用：旅行推销员问题、车间调度排产、车辆路径.....

第4讲 优化问题求解

4.5 群体智能方法：粒子群优化

- 鸟群觅食
  - 一群鸟在某个区域内随机地飞翔，为了寻找食物。
  - 鸟不知道食物在哪儿，但经过盘旋飞行后知道食物的范围。
  - 其它鸟发现食物的最佳策略是跟随最接近食物的鸟。



避免与相邻鸟碰撞　保持与相邻鸟相同的速度　靠近相邻的鸟

鸟群遵循的三个简单规则

- 粒子群优化（Particle Swarm Optimization, PSO）
  - 通过模拟鸟群觅食行为而形成的一种基于群体协作的随机搜索算法。

第4讲 优化问题求解

4.5 群体智能方法：粒子群优化

- 基本原理
  - 初始化为一群随机粒子，通过不断迭代寻找最优解。
  - 群体：通过若干粒子构成一个围绕搜索空间移动的群体来寻找最优解。
  - 个体：通过跟踪二个“极值”来更新自己，即调整其“飞行”。
    - 个体极值：粒子本身所找到的最优解；
    - 全局极值：整个群体目前找到的最优解。
- 应用：
  - 神经网络训练
  - 机器人领域
  - 通讯领域
  - 机械设计领域
  - 车辆路径领域
  - 电力系统领域
  - 生物信息领域
  - 医学领域
  - 图像处理领域
  - 经济领域
  - 运筹学领域
  - ……

第4讲 优化问题求解

4.5 群体智能方法：粒子群优化

假设在一个D维的目标搜索空间中，有N个粒子组成一个群落，其中第i个粒子表示为一个D维的向量：

$$X_i = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{iD}), i = 1, 2, \cdots, N$$

第i个粒子的“飞行”速度也是一个D维的向量，记为：

$$V_i = (v_{i1}, v_{i2}, \cdots, v_{iD}), i = 1, 2, \cdots, N$$

在第t代的第i个粒子向第t+1代进化时，根据如下式子更新：

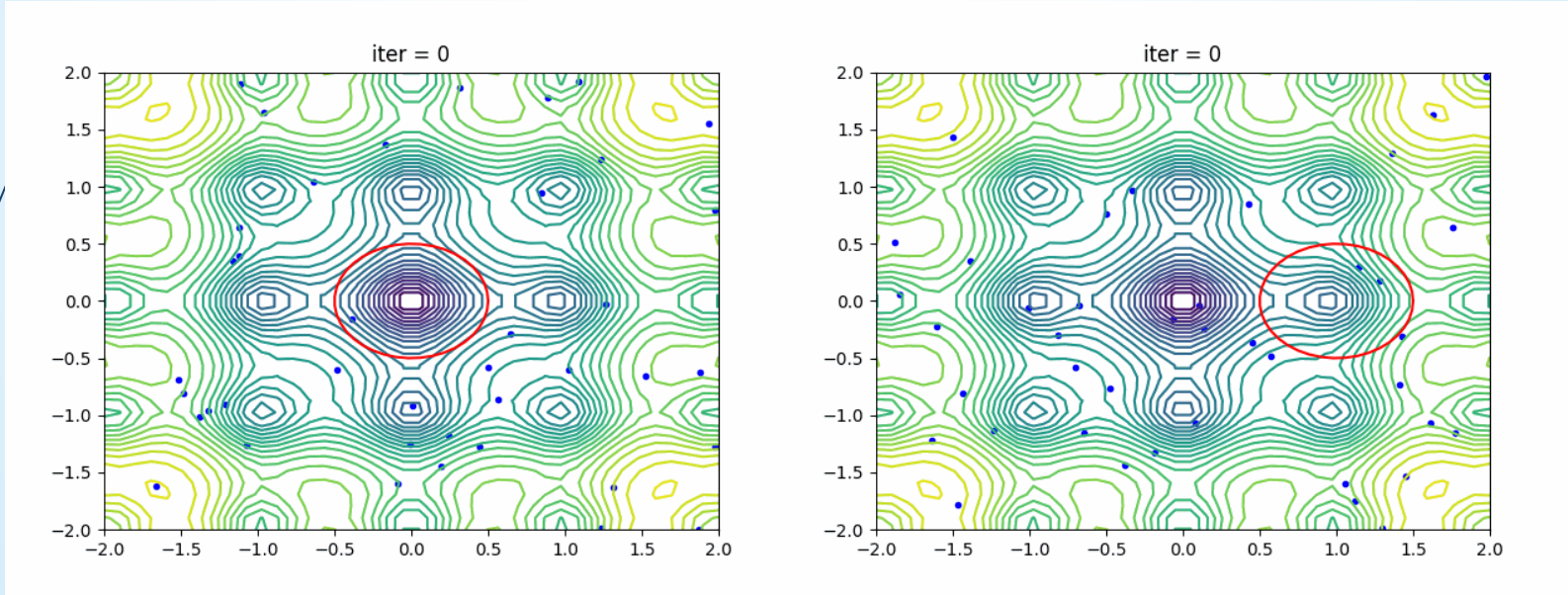
$$v_{ij}(t+1) = wv_{ij}(t) + c_1 r_1(t)[p_{ij}(t) - x_{ij}(t)] + c_2 r_2(t)[p_{gj}(t) - x_{ij}(t)]$$

$$x_{ij}(t+1) = x_{ij}(t) + v_{ij}(t+1)$$

第4讲 优化问题求解

4.5 群体智能方法：粒子群优化

例：求解$f(x,y)=-20e^{-\frac{(x^2+y^2)^2}{20}}-e^{\frac{cos2\pi x+cos2\pi y}{2}}+20+e$的最小值。



1.无约束

2.有约束

作业

有五个点，其相互关联关系及成本如图，请用最小代价连接图中所有点。

1. 用爬山法求解；
2. 用TS方法求解；
3. 以上两种方法比较。