

- Optimization Methods
 - 基本概念
 - 一元函数极值基础
 - 范数
 - 向量范数
 - 矩阵范数
 - 梯度
 - 向量值函数的导数
 - 凸集和凸函数
 - 线性规划
 - 非线性规划
 - MC求解非线性规划
 - 最优化模型——直接搜索法和MC法
 - 无约束优化方法——间接法
 - 黄金分割法(0.618法)
 - 最速下降法(梯度下降法)
 - 牛顿法
 - 阻尼牛顿法
 - 有约束优化方法
 - 外点罚函数法
 - 内点罚函数法
 - 动态规划
 - 目标规划和多目标规划
 - 多目标规划
 - 帕累托最优(Pareto Optimal)
 - MOO的传统解法
 - 多目标遗传算法
 - 快速不可支配排序
 - 拥挤度
 - 选择合适的父代——精英策略
 - 选择 交叉 变异
 - 遗传算法GA
 - GA基本概念
 - GA Example
 - GA Solve TSP
 - 评价GA
 - 模拟退火
 - 禁忌搜索(要补充)
 - Matlab常用的优化函数和优化工具箱(未写)
 - 随机模拟

Optimization Methods

常用的最优化方法

- 线性规划
- 整数规划
- 非线性规划
- 动态规划
- 多目标规划
- 对策论? ? ?

基本概念

一元函数极值基础

驻点——导数为0的点。

奇点——使函数连续，但导数不存在的点

极值问题——求某个函数的极值，但其中的变量**收到一些条件的约束**。有约束的极值问题称为**条件极值问题**，无条件的极值问题称为**无条件极值问题**

如函数, $f(x, y)$, 在条件, $\varphi(x, y) = 0$, 下的极值问题——, $f(x, y)$, 是目标函数, $\varphi(x, y) = 0$, 是约束条件

等式约束下的条件极值问题的数学模型——拉格朗日乘数法

$$\min_x f(x) \text{ s.t. } g_i(x) = 0, i = 1, 2, \dots, m$$

求函数, $f(x, y)$, 在条件, $\varphi(x, y) = 0$, 下的极值, 运用拉格朗日乘数法

构造函数, $F(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda \varphi(x, y)$ 令 $\nabla F = 0 \Rightarrow$ 解出 (x_0, y_0) , 则该点就是可能的极值点

范数

向量范数

常用范数

- 1范数

$$\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n|$$

- 2范数

$$\|x\|_2 = (|x_1|^2 + |x_2|^2 + \cdots + |x_n|^2)^{\frac{1}{2}} = (x^T x)^{\frac{1}{2}}$$

- 无穷范数

$$\|x\|_{\infty} = \max\{|x_i| \mid 1 \leq i \leq n\}$$

范数性质

- Holder不等式

$$|x^T y| \leq \|x\|_p \|y\|_q, \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 \text{ 特别的, } p = q = 2 \text{ 时, 是柯西-施瓦茨不等式 } |x^T y| \leq \|x\|_2 \|y\|_2$$

矩阵范数

常用的矩阵范数

$$\|A\|_{m_1} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \quad \|A\|_{m_2} = \left(\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m |a_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad \|A\|_{\infty} = \max_{i,j} |a_{ij}| \quad \|A\|_F = \left(\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m |a_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad F \text{范数}$$

梯度

$$\text{函数 } f(x) \text{ 存在一阶偏导数, } x \in R^n, \text{ 称向量 } \nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right)^T \text{ 为 } f(x) \text{ 在点 } x \text{ 处的梯度}$$

梯度方向，函数值增长最快；负梯度方向，函数值增长最慢

常用的梯度

$$\text{常数函数 } c \Rightarrow \nabla c = (0, 0, \dots, 0)^T = 0$$

$$\text{对 } b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T \in R^n, x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \quad b^T x = b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_n x_n \quad \nabla(b^T x) = b$$

$$\nabla(x^T x) = \nabla(x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2) = 2x$$

$$\text{若 } A \text{ 是对称矩阵, 则 } \nabla(x^T A x) = 2Ax$$

向量值函数的导数

向量值函数

$$g(x) = (g_1(x), g_2(x), \dots, g_m(x))^T, \text{ 其中 } x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$$

向量值函数的一阶导数(Jacob矩阵)

$$\nabla g(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_1(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial g_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_2(x)}{\partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial g_m(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial g_m(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_m(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

向量值函数的二阶导数(Hesse矩阵)

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

凸集和凸函数

☞ 是非线性规划的基本概念

☞ 凸集

定义8.3 设 $S \in R^n$, 若对任意 $x^{(1)}, x^{(2)} \in S$, 及 $\lambda \in [0, 1]$, 都有 $\lambda x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)} \in S$, 则称 S 为 **凸集**. $\lambda x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)}$ 称为 $x^{(1)}$ 和 $x^{(2)}$ 的 **凸组合**.

☞ 凸函数

定义8.4 设 $f: S \subset R^n \rightarrow R^1$, S 是 **凸集**, 如果对所有的 $x^{(1)}, x^{(2)} \in S$, $\lambda \in (0, 1)$, 都有

$$f(\lambda x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)}) \leq \lambda f(x^{(1)}) + (1 - \lambda)f(x^{(2)}),$$

则称 $f(x)$ 为 S 上的 **凸函数**.

凸函数的**线性运算(数乘和加法)**(但是数乘的系数必须非负, 线性组合也必须非负)之后还是凸函数

凸函数的重要性

定理8.6 设 S 为 R^n 中的一个非空凸集, $f(x)$ 是定义在 S 上的凸函数, 则 $f(x)$ 在 S 上的局部极小点是**全局极小点**, 且极小点的集合为 **凸集**.

凸函数的一阶判别条件

定理8.7 设 $f: S \subset R^n \rightarrow R^1$, S 是非空凸集, 且 $f(x)$ 在 S 可微, 则 $f(x)$ 是在 S 上的**凸函数**的充要条件是对任意 $x^{(1)}, x^{(2)} \in S$, 成立

$$f(x^{(2)}) \geq f(x^{(1)}) + \nabla f(x^{(1)})^T (x^{(2)} - x^{(1)}).$$

凸函数的二阶判别条件

定理8.8 设 $f: S \subset R^n \rightarrow R^1$, S 是非空凸集, 且 $f(x)$ 是 S 上的二次可微函数, 则 $f(x)$ 是在 S 上的凸函数的充要条件为

对 $\forall x \in S$, 在 x 处的 Hesse 矩阵是半正定的.

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

☞ 凸规划

\$\$ 设 $f(x)$ 是凸函数, $g(x)$ 是凹函数, $h_j(x)$ 是线性函数, 下面的规划是凸规划 $\min_{x \in R^n} f(x) \text{ s.t. } g_i(x) \geq 0 \text{ } i = 1, \dots, m, h_j(x) = 0 \text{ } j = 1, \dots, l$

\$\$

线性规划

☞ 化为标准形式

☞ 单纯形法

☞ Matlab 求解——`linprog`

以下图为例

$$\begin{aligned} \min F(x) &= 0.03x_1 + 0.22x_2 + 0.38x_3 + 0.5x_4 + 0.35x_5 \\ s.t. \quad &\begin{cases} 0 \leq x_1 \leq 0.3 \\ 0 \leq x_2 \leq 0.25 \\ 0.1 \leq x_3 \leq 0.3 \\ 0.2 \leq x_4 \leq 1 \\ 0.05 \leq x_5 \leq 0.2 \\ x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 = 1 \end{cases} \end{aligned}$$

```
%目标函数中决策变量前的系数
f = [0.03 0.22 0.38 0.5 0.35];
lb = [0 0 0.1 0.2 0.05]; %每一个决策变量的下界
ub = [0.3 0.25 0.3 1 0.2]; %每一个决策变量的上界
A = []; b = [];
Aeq = [1 1 1 1 1]; beq = 1;
[optx,optvalue,flag] = linprog(f,A,b,Aeq,beq,lb,ub)
```

$$\min_x f^T x \text{ such that } \begin{cases} A \cdot x \leq b, \\ Aeq \cdot x = beq, \\ lb \leq x \leq ub. \end{cases}$$

其中关于 $A \cdot b$ $Aeq \cdot beq$,

`linprog`是求最小值, 若求最大值只需在目标函数添一个负号

若决策变量均是整数, 则属于整数规划, 可以在Matlab中用`intlinprog`, 也可以用Lingo软件

$$\begin{aligned} \min f(x) &= x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 \\ s.t. \quad &\begin{cases} x_2 + 2x_3 + 3x_4 + 5x_5 + 6x_6 \geq 2000, \\ 5x_1 + 4x_2 + 3x_3 + 2x_4 + x_5 \geq 1000, \\ x_i \geq 0 (i = 1, 2, \dots, 6) \text{ 且为整数.} \end{cases} \end{aligned}$$

用Lingo求解整数规划如下

```
x2 + 2*x3 + 3*x4 + 5*x5 + 6*x6 <= 2000; !约束条件
5*x1 + 4*x2 + 3*x3 + 2*x4 + x5 <= 1000;
f1 = x1+ x2 + x3 + x4 + x5 + x6; !目标函数
min = f1;
x1>=0;x2>=0;x3>=0;x4>=0;x5>=0;x6>=0;
@GIN(x1);@GIN(x2);@GIN(x3);@GIN(x4);@GIN(x5);@GIN(x6);
END
```

非线性规划

☞ 定义: 目标函数或约束条件中至少有一个是非线性函数的最优化问题

MC求解非线性规划

见最优化模型——直接搜索法和MC法这一节

最优化模型——直接搜索法和MC法

☞ 无约束, 有约束都可以

☞ 对于☞的模型分别使用直接搜索法和MC

$$\min f(x) \text{ s.t. } g(x) \leq 0 \quad l_i \leq x_i \leq u_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

☞ 直接搜索法

要设置步长搜索

以二元函数为例

```
tmin = inf ;
for x1 = l1:s1:u1 %s1=(u1-l1)/N
    for x2 = l2:s2:u2 %s2 = (u2-l2)/N
        if f(x)<tmin and g(x) <= 0:
            tmin = f(x); %存储最优值
            tx = x; %存储决策
        endif
    endfor
endfor
```

☞ MC法

- 无约束

```
N = 1e6; %投点次数
min_val = 1e5;
for i = 1:m
```

```

for j = 1 : n %n是决策变量的维度
    r(j) = rand; %r(j)是在[0,1]均匀分布
    x(j) = l(j) + r(j) * (u(j)-l(j)); %x(j)是在[l(j),u(j)]均匀分布
endfor
if f(x) < min_val:
    min_val = f(x);
    min_x = x;
endif
endfor

```

- 有约束只需在 `if f(x) < min_val` 加上判断是否满足约束条件即可

无约束优化方法——间接法

黄金分割法(0.618法)

☞ 一种**一维搜索方法**，单变量函数最优化

☞ **单峰函数**区间上求极小值的一种方法

☞ 基本思想

在搜索区间[a,b]内适当插入两点，将[a,b]分成三段，通过比较这两点的函数值，利用**单峰函数的性质**，就可以删去最左端或最右端的一段区间。

然后在留下的区间内再插入一点，重复☞过程。这样可以包含极小值的区间无限缩小

最速下降法(梯度下降法)

☞ 算法

1. 选定初始点 $x^{(0)}$ ， $k = 0$.

2. $k = k + 1$.

3. 寻找一个合适的方向 $P^{(k)}$.

4. 求出沿 $P^{(k)}$ 方向前进的步长 $\lambda^{(k)}$

5. 得到新的点 $x^{(k+1)}$ ， $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda^{(k)} P^{(k)}$

检验 $x^{(k+1)}$ 是否最优，如果是最优，则迭代结束，否则转到（2）执行。

☞ 方向就是**负梯度方向**

$$P^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$$

如何算最佳步长, $\lambda^{(k)}$,

$$\min_{\lambda} f(x^{(k)} + \lambda P^{(k)}) \Rightarrow \min_{\lambda} f(x^{(k)} - \lambda \nabla f(x^{(k)}))$$

算最佳步长属于求关于 λ 的一元函数极值的问题，这一过程被称为一维搜索

最后梯度的长度小于某个阈值，程序停止

☞ 评价

从局部看，梯度下降是朝目标函数值下降最快的方向。但是从全局看，它的收敛是比较慢的

牛顿法

☞ 基本思想

以目标函数的一个**二次函数**作为近似，求这个二次函数的极小值点，以该点来近似原目标函数的一个局部最小值点

☞ 算法

- 给定初始点, $x^{(1)} \in R^n$, 给定误差, $\varepsilon > 0$, 令 $k = 1$,
- 由, $\nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$, , 解线性方程组得到搜索方向, $d^{(k)}$,
- 令, $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$,
- 如果, $\|d^{(k)}\| < \varepsilon$, , 则迭代终止, 否则, 置, $k = k + 1$, , 继续搜索迭代

Tips: $\nabla^2 f(x^{(k)})$, 是求Hesse矩阵

🔗 评价

- 当目标函数的梯度和Hesse矩阵易求, 且能对初始点给出较好估计时, 可以使用牛顿法, 需要注意的是**牛顿方向不一定是下降方向**
- 当初始点远离极小值点时, 牛顿法可能不收敛

阻尼牛顿法

🔗 与牛顿法的区别: 增加了沿牛顿方向进行的一维搜索, 迭代公式变为

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda^k d^{(k)}$$

🔗 算法

- 给定初始点, $x^{(1)} \in R^n$, 给定误差, $\varepsilon > 0$, 令, $k = 1$,
- 由, $\nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$, , 解线性方程组得到搜索方向, $d^{(k)}$,
- 从, $x^{(k)}$, 出发, 沿方向, $d^{(k)}$, 作一维搜索求得最佳搜索步长, $\lambda^{(k)}$,

$$\min_{\lambda} f(x^{(k)} + \lambda d^{(k)})$$

- 令, $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda^{(k)} d^{(k)}$,
- 如果, $\|d^{(k)}\| < \varepsilon$, , 则迭代终止, 否则, 置, $k = k + 1$, , 继续搜索迭代

有约束优化方法

🔗 主要思想: 转换为无约束优化问题进行求解

外点罚函数法

🔗 基本思想: 利用目标函数和约束条件组成**辅助函数**, 对违反约束的点(即位于可行域之外)在辅助函数中加入相应的“惩罚”, 使得辅助函数取值很大, 而对可行域内的点不予惩罚, 此时辅助函数等于原问题的目标函数

🔗 对于**只含等式约束的优化问题**

$$\min f(x) \text{ s.t. } h_j(x) = 0 (j = 1, 2, \dots, l)$$

建立如下的罚函数

$$F(x, m_k) = f(x) + m_k \sum_{j=1}^l h_j^2(x) \quad m_k \text{ 是第 } k \text{ 步迭代时很大的正整数}$$

这样就有约束转化为了无约束的问题

$$\min F(x, m_k)$$

🔗 的最优解必然使得, $h_j(x) \approx 0$,

🔗 对于**只含不等式约束的优化问题**

$$\min f(x) \text{ s.t. } g_i(x) \geq 0 (i = 1, 2, \dots, m)$$

构造罚函数

$$F(x, m_k) = f(x) + m_k \sum_{i=1}^m g_i^2(x) u_i(g_i) \quad m_k \text{ 是第 } k \text{ 步迭代时很大的正整数} \quad u_i(g_i) \text{ 是单位阶跃函数 } u_i(g_i) = \begin{cases} 0, & g_i \geq 0 \\ 1, & g_i < 0 \end{cases}$$

🔗 对于**既含等式约束 又含不等式约束的优化问题**

构造罚函数

$$F(x, m_k) = f(x) + m_k P(x) \quad P(x) = \sum_{j=1}^l L(h_j(x)) + \sum_{i=1}^m U(g_i(x)) \quad \text{当 } y = 0 \text{ 时}, L(y) = 0 \quad \text{当 } y \neq 0 \text{ 时}, L(y) > 0 \quad \text{当 } y \geq 0 \text{ 时}, U(y) = 0 \quad \text{当 } y < 0 \text{ 时}, U(y) > 0$$

关于函数, L 和 U ,的典型取法

$$L(h_j(x)) = |h_j(x)|^\beta \quad \beta \geq 1 \quad U(g_i(x)) = [\max(0, -g_i(x))]^\alpha \quad \alpha \geq 1$$

其中常取, $\alpha = 2, \beta = 2$,

🔗 求解步骤

① 初始化

- 选定初始点, $x^{(0)}$,
- 初始罚因子, m_1 ,
- 设置罚因子放大系数, $c > 1$,
- 置, $k = 1$,

② 迭代

以, $x^{(k-1)}$, 为初始点, 求解无约束问题, 设其极小值点为, $x^{(k)}$,

- 若, $m_k P(x) < \varepsilon$, 则, $x^{(k)}$, 是最优解, 迭代终止, 否则置, $m_{k+1} = cm_k, k = k + 1$,

☞ 综上, $m_k P(x)$, 称为罚项, m_k , 称为罚因子, $F(x, m_k)$, 称为罚函数

☞ 转化为无约束问题之后, 就可以用无约束的求解方法进行处理。像这种通过求解无约束问题来获得约束问题最优解的方法称为**序列无约束极小化方法(SUMT)**

☞ 若**可行域外性质复杂或无定义**, 则外点罚函数法失效

内点罚函数法

☞ 内点法要求迭代过程始终在可行域内进行, 因此将初始点取在可行域内, 并若迭代点靠近边界点时, 给出的新的目标函数值迅速增大, 从而使迭代点留在可行域内

☞ 由于内点罚函数总是从内点出发, 并保持在可行域内进行搜索, 因此内点法适用于**没有等式约束的优化问题**

☞ 类似于外点罚函数设计辅助函数的思路, 定义**障碍函数**

$$F(x, r_k) = f(x) + r_k B(x) \quad B(x) \text{ 使连续函数, 当 } x \text{ 趋向可行域边界时, } B(x) \rightarrow +\infty \quad r_k \text{ 是第 } k \text{ 次迭代时的障碍因子, } r_k \text{ 是很小的整数}$$

$B(x)$, 的一般取法

$$B(x) = \sum_{i=1}^m \frac{1}{g_i(x)} \quad B(x) = - \sum_{i=1}^m \ln g_i(x) \quad B(x) = \sum_{i=1}^m \frac{1}{g_i^2(x)}$$

从而可以将有约束转化为无约束

☞ 求解步骤和外点罚函数法类似, 但是需要设置的是**障碍因子的缩小系数**

☞ 内点法和外点法的收敛情况与**罚因子的选取关系很大**

动态规划

☞ 是用来解决**多阶段决策过程最优化的一种数量方法**。可以把一个, n , 维决策问题变换为几个一维最优化问题

☞ 例子

- 最短路
- 投资分配
- 背包问题(也可归为整数规划)
- 排序问题

☞ 用LINGO求解最短路

目标规划和多目标规划

多目标规划

☞ 标准模型

$$\begin{aligned} \min/\max \quad & f_m(x), \quad m = 1, 2, \dots, M \\ \text{subject to} \quad & g_j(x) \geq 0, \quad j = 1, 2, \dots, J \\ & h_k(x) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, K \\ & \underset{\text{lower bound}}{x_i^{(L)}} \leq x_i \leq \underset{\text{upper bound}}{x_i^{(U)}}, \quad i = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

☞ 特点

- 包含多个**有冲突**的目标函数
- 希望能找到很好平衡全部优化目标的解集

帕累托最优(Pareto Optimal)

☞ 是指**资源分配的一种理想状态**。

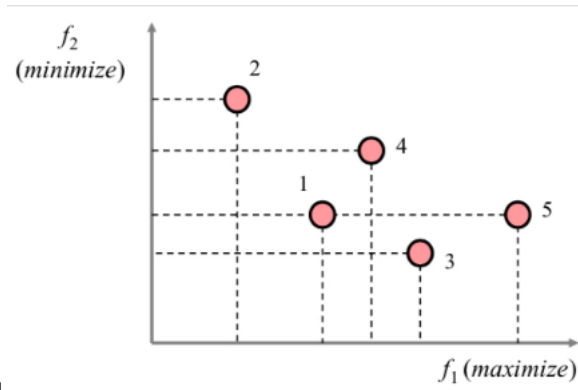
- 给定固有的一群人和可分配的资源, 如果从一种分配状态到另一种状态的变化中, **在没有使任何人情况变坏的前提下**, 使得至少一个人变得更好, 称为**帕累托改善**
- 帕累托的**最优状态**即为不可能再有更多的帕累托改善的状态

☞ 一些概念

- 支配(Dominance)

当, x_1, x_2 , 满足下述条件时, 称, x_1 , 支配, x_2 ,

- 对于所有的目标函数, x_1 , 不比, x_2 , 差
- 至少在一个目标函数上, x_1 , 严格比, x_2 , 好



如下图中，点1支配点2，点5支配点1，点1和点4互不支配

- 不可支配解集(Non-dominated solution set)

当一个解集中**任何一个解**都不能被该集中其他解**支配**，则称该解集为**不可支配解集**

- 帕累托最优解集(Pareto-optimal set)

所有可行的不可支配解集

- 帕累托最优前沿面(Pareto-optimal front)

帕累托最优解集的边界

🔗 MOO问题的目标

- 寻找尽可能接近帕累托最优前沿面的解集
 - 因为不一定可以找到不可支配解集，定义了**帕累托等级**
 - 尽可能增大找到解的多样性

🔗 帕累托等级

在一组解中，**不可支配解的帕累托等级为1**，将不可支配解从解的集合中**删除**，类推等级为2,3,...解

MOO的传统解法

- 加权法
 - 很难设定一个权重向量

$$\begin{aligned} \min \quad & F(x) = \sum_{m=1}^M w_m f_m(x), \\ \text{subject to} \quad & g_j(x) \geq 0, \quad j = 1, 2, \dots, J \\ & h_k(x) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, K \\ & x_i^{(L)} \leq x_i \leq x_i^{(U)}, \quad i = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

- 在一些非凸情况不能保证获得帕累托最优解
- , ϵ - constraint, method,
 - 只保留一个目标函数，其他的目标函数被设定为值约束

$$\begin{aligned} \min \quad & f_\mu(x), \\ \text{subject to} \quad & f_m(x) \leq \epsilon_m, \quad m = 1, 2, \dots, M \text{ and } m \neq \mu \\ & g_j(x) \geq 0, \quad j = 1, 2, \dots, J \\ & h_k(x) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, K \\ & x_i^{(L)} \leq x_i \leq x_i^{(U)}, \quad i = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

- 保留哪一个函数要精心选择

多目标遗传算法

🔗 NSGA2(Nondominated sorting genetic algorithm 非支配排序遗传算法)

🔗 利用遗传算法来搜索帕累托最优前沿面

🔗 算法思想

- 随机产生一定规模的种群，**不可支配排序**后通过遗传算法的选择、交叉、变异三个基本操作得到第一代**子代种群**
- 从第二代开始，将父代种群与子代种群合并，进行快速非支配排序，同时对每个不可支配层中的个体进行拥挤度计算，根据**不可支配关系**和**个体的拥挤度**选取合适的个体组成新的**父代种群**，继续进行遗传算法的三步操作，直到满足程序结束的条件

🔗 算法流程

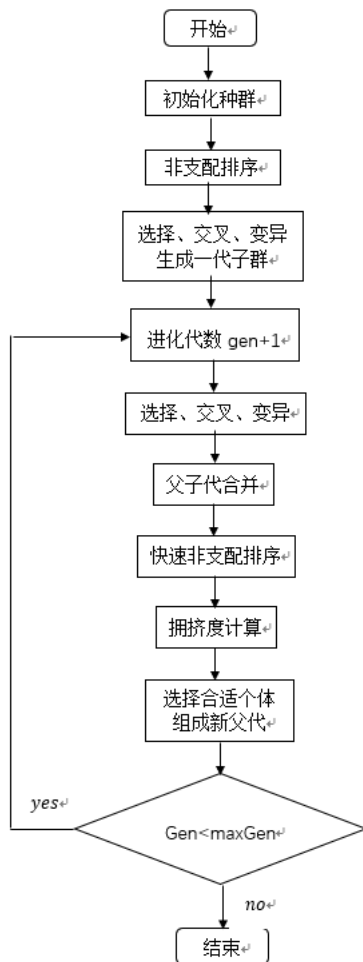


图 3 NSGA-II 算法流程图

快速不可支配排序

需要先计算每个个体 p_i 的 **被支配个数**, n_p , 和该个体 **支配的解的集合**, S_{p_i} , 伪代码如下

计算种群中 $n_p = 0$ 的个体放入集合 F_1 中 $for, i, in, F_1 : for, j, in, S_i :$ 注意是找被个体 i 支配的解 $n_j = n_j - 1$ 即消除等级 1 的解 对其余个体的支配 相当于删除

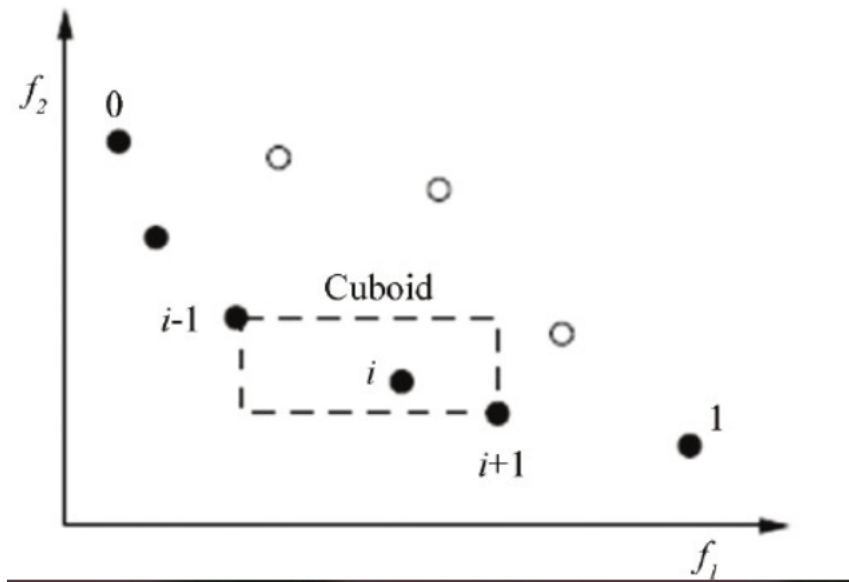
拥挤度

同一等级的非支配个体集合中, 为了保证解的个体能**均匀分布在帕累托前沿**, 即使同一层中的非支配个体具有**多样性**, 因此引入**拥挤度(拥挤距离)**, 用于计算同一等级的集合中某个给定个体周围其他个体的密度

显然拥挤度越高, 个体的多样化程度也越高

每个个体拥挤距离的是计算**与其相邻的两个个体在每一个子目标函数上的距离差之和**来求取, **注意, 每个子目标函数做差之后要进行归一化处理, 即除以该子目标函数的极差**

举例来说, 对于二目标规划, 拥挤距离就是下图中矩形的长宽之和



✧ 算法流程

设同一等级的非支配个体数目为 N ，每个个体的拥挤度为 $n_d (n \in 1, 2, \dots, N)$

$n_d = 0$ for, 每个子目标函数 f_m : 根据子目标函数对此等级的个体排序, 记 f_m^{max} 为此等级个体在子目标函数 f_m 上的最大值, 设 f_m^{min} 为此等级个体在子目标函数 f_m 上的最小值, 则拥挤度 $n_d = n_d + \frac{f_m - f_m^{min}}{f_m^{max} - f_m^{min}}$

选择合适的父代——精英策略

将父代种群 C_i 和子代种群 P_i 合并成新的父代种群 C_{i+1} ① 根据帕累托等级从低到高的顺序, 将整层种群个体根据拥挤度从小到大排序, 不能全部放入父代, 直到父代和子代种群个体数达到设定值

选择 交叉 变异

✧ 采用ga的算法

遗传算法GA

GA基本概念

✧ 思想

- 种群中个体的选择
- 种群中交叉繁殖
- 种群中个体的变异

✧ 反复执行, 个体逐渐优化

GA Example

✧ Ex

$$\text{求解方程 } x^{10} + e^x = 100 (x > 0)$$

将方程求解问题转化为生存问题——将区间 $[0, 10]$ 划分成若干小区间, 设想每个小区间为一个生物个体, $|x^{10} + e^x - 100|$, 最小的个体有最好的生存能力, 该个体即为解

- 初始化

✧ 个体编码

若使用二进制编码, 假设要求的精度是小数点后 m 位, 区间的长度是 n , 则至少要把区间 $n \times 10^m$ 份, 之后求与此数最接近的 2 的 p 次幂, p 就是二进制串的位数

假定本题要求小数点后两位, 至少要把区间划分 $10 \times 10^2 = 1000$ 份, 所以要把区间划分为 $2^{10} = 1024$, 二进制串的位数为 10

✧ 种群初始化

随机生成任意数量的 10 位二进制串

- 选择

✧ 定义适应度函数

这里是以目标函数的倒数作为适应度函数

$$f = \frac{1}{|x^{10} + e^x - 100|}$$

✧ 选择适应度较大的个体

轮盘赌：将所有个体的适应度求和，得到总适应度。每一个体被选择到的概率为**该个体适应度/总适应度**

代码实现——产生[0,1]的随机数选择个体

- 交叉

选中的优势个体进行交叉，这里采用**单点交叉**：在编码串中只随机设置一个交叉点，以该点为分界，交换部分染色体

☞ 交叉算子有好几种

- 变异

在个体中的某几位的值发生改变

☞ 变异的方法也有好几种

☞ 交叉和变异操作都以一定概率进行

☞ 反复进行选择，交叉，变异并记录最优个体。

☞ 程序结束的判定

- 根据循环次数
- 根据最大适应度
- 根据种群中相同个体数与总个体数的比值

GA Solve TSP

- 初始化

取长度为N的数字串，串中数字互不重复，取值范围为[1,N]之间的整数，每一个数字串代表一个个体，个体中数字出现的位置是路径中城市出现的顺序

- 选择

适应度函数——路径长度的倒数

- 交叉

TSP的交叉算子与普通的不同——要保证生成的解是有效解

☞ 在一个父个体中随机选取一段子串A，在另一个父个体中将子串A出现的数字去掉形成串B，AB就是一个新的字串

- 变异

☞ 常用的变异操作——随机选取两个相邻位置的数字，交换顺序

评价GA

☞ GA各步骤的作用

• 选择 --- 优胜劣汰

选择操作为种群提供了演进的方向

• 交叉 --- 优优组合

交叉操作的作用在于汇集散布于不同个体间的局部优势模式

• 变异 --- 寻找新模式

变异操作是种群向外扩展的触角(随机)
好的变异将保留，坏的淘汰

☞ GA的评价

优点

- 全局收敛性(依概率收敛)

- 泛化能力很强

缺点

- 得到的解是近似的数值解
- 对于经典数学可以解决的问题，效率很低

模拟退火

不会陷入局部最优，因为会有一定概率不会接收当前最优解(Metropolis准则)

当前能量为 $E(n)$ ，产生扰动后在 $n+1$ 状态的能量为 $E(n+1)$ $P(\text{接受新的状态}) = \begin{cases} 1, & E(n+1) \leq E(n) \\ e^{-\frac{\Delta E}{T}}, & E(n+1) > E(n) \end{cases}$ T 是当前状态的温度

类似于RL中的epsilon greedy

算法的步骤

```
temperature = 1000; %初始温度
thres_temperature = 1; %设置温度阈值
cooling_rate = 0.94; %温度的下降率
iteration_count = 1; %计数迭代次数
prev_energy = ?; %获得初始解

while tempratrue > thres_temperature
    curr_energy = ?; %扰动获得新的解
    diff = curr_energy - prev_energy;
    %利用metropolis准则
    if (diff<0) || (rand < exp(-diff/temperature))
        prev_energy = curr_energy; %获得新的状态
        iteration_count = iteration_count + 1;
    end
    if iteration_count >= 100 %如果某个T的迭代次数超过100次 降温
        temperature = cooling_rate * temperature;
        iteration_count = 0; %迭代次数置零
    end
end
```

禁忌搜索(要补充)

Matlab常用的优化函数和优化工具箱(未写)

随机模拟