PRIMERJAVA REŠITEV OB NEGOTOVOSTI V VEČKRITERIJSKI OPTIMIZACIJI

Miha Mlakar, Tea Tušar, Bogdan Filipič

Odsek za inteligentne sisteme, Institut "Jožef Stefan" in
Mednarodna podiplomska šola Jožefa Stefana
Jamova cesta 39, 1000 Ljubljana, Slovenija
e-mail: {miha.mlakar, tea.tusar, bogdan.filipic}@ijs.si

POVZETEK

V prispevku definiramo nove relacije za primerjavo rešitev v večkriterijski optimizaciji v primeru negotovosti, ko so rešitve predstavljene z aproksimiranimi vrednostmi in intervali zaupanja. Z vključitvijo intervalov zaupanja v primerjavo se verjetnost napačnih primerjav zaradi netočnih aproksimacij zmanjša. Primerjava rešitev brez upoštevanja intervalov zaupanja v netočno aproksimiranih rešitvah lahko pri preiskovanju vodi do ohranjanja slabih rešitev na račun novih perspektivnih rešitev. Novo definirane relacije so generalizacija relacij Pareto dominiranosti in jih lahko uporabimo za primerjavo rešitev ob negotovosti ali brez nje. Prikažemo tudi primer uporabe teh relacij v primerjavi dveh rešitev v evolucijskem večkriterijskem optimizacijskem algoritmu z nadomestnimi modeli. Z uporabo novih relacij lahko pogosto ugotovimo, katero rešitev je smiselno obdržati in katero zavreči, ne da bi jih bilo potrebno pred tem eksaktno ovrednotiti.

1. UVOD

Z optimizacijskimi problemi se v različnih oblikah pogosto srečujemo v vsakdanjem življenju. Mnogi optimizacijski problemi zahtevajo sočasno optimizacijo več, mnogokrat nasprotujočih si kriterijev. Takim problemom pravimo večkriterijski optimizacijski problemi. Rešitev takih problemov ni le ena sama točka, ampak množica točk, imenovana Pareto optimalna množica. Ta množica rešitev da odločevalcu vpogled v lastnosti problema, preden izbere eno izmed Pareto optimalnih rešitev.

Eden najučinkovitejših načinov reševanja problemov z več kriteriji je uporaba evolucijskih večkriterijskih optimizacijskih algoritmov [1]. Ti algoritmi so populacijski in se zgledujejo po optimizacijskih procesih, ki potekajo v naravi. Da bi našli kar najboljše rešitve, je potrebno med optimizacijskim procesom ovrednotiti (izračunati) veliko število rešitev. Če so ta ovrednotenja računsko zahtevna, lahko celoten optimizacijski proces traja zelo dolgo.

Da bi hitreje prišli do rezultatov računsko zahtevnega optimizacijskega problema, lahko v optimizacijskem procesu uporabimo nadomestne modele za aproksimiranje kriterijske funkcije problema. Namesto zamudnega eksaktnega vrednotenja rešitve tako lahko isto rešitev aproksimiramo z nadomestnim modelom. Ker je aproksimacija (veliko) hitrejša, lahko s tem pospešimo celoten optimizacijski proces. Vendar pa pri uporabi nadomestnih modelov lahko pride do težav, če so aproksimirane rešitve netočne. Posledica tega je, da so pri primerjavi rešitev lahko dobre eksaktno ovrednotene rešitve zavržene, ker izgledajo slabše kot napačno preveč optimistično aproksimirane rešitve. To lahko upočasni optimizacijski proces oziroma celo prepreči algoritmu, da najde najboljše rešitve. Ker ne poznamo pravih vrednosti aproksimiranih kriterijev, pravimo, da primerjamo rešitve *ob negotovosti*.

Nekateri nadomestni modeli pri aproksimaciji vrednosti enega kriterija vračajo porazdelitev, iz katere se lahko izračunata aproksimirana vrednost in interval zaupanja za to aproksimacijo. Z upoštevanjem intervalov zaupanja smo definirali nove relacije za primerjavo rešitev ob negotovosti, ki upoštevajo intervale zaupanja in zahtevajo eksaktna ovrednotenja samo v primerih, ko ne želimo negotovosti. Ta pristop zmanjšuje napake v primerjavah, ki so posledice netočno aproksimiranih rešitev.

Kot primer uporabe novo definiranih relacij te uporabimo v evolucijskem večkriterijskem optimizacijskem algoritmu, kjer primerjamo rešitvi, ki sta lahko aproksimirani z nadomestnim modelom ali pa eksaktno ovrednoteni.

Struktura prispevka je naslednja. V 2. razdelku pregledamo obstoječe metode, ki so namenjene primerjavi rešitev, predstavljenih z aproksimiranimi vrednostmi in intervali zaupanja. 3. razdelek predstavlja relacije brez negotovosti in 4. razdelek relacije ob negotovosti. V 5. razdelku opišemo primer uporabe relacij ob negotovosti v evolucijskem algoritmu. S 6. razdelkom zaključimo prispevek s povzetkom opravljenega dela in pomena novih relacij.

2. PREGLED LITERATURE

Za reševanje optimizacijskih problemov literatura navaja več nadomestnih modelov, ki se v optimizacijski proces vključujejo na razne načine. V primerjavi z optimizacijo brez nadomestnih modelov je pri optimizaciji z nadomestnimi modeli potrebno manj eksaktnih ovrednotenj kriterijske funkcije, kakovost rezultatov pa ostane primerljiva [5, 12].

Pristopi pri uporabi nadomestnih modelov se razlikujejo glede na to, katere rešitve se eksaktno ovrednoti in katere aproksimira ter katere in koliko rešitev se uporablja pri gradnji nadomestnih modelov. V našem pregledu literature se omejimo na primere, ki za gradnjo nadomestnih modelov uporabljajo metode, ki poleg aproksimirane vrednosti vrnejo tudi interval zaupanja za aproksimacijo, saj nam ta nudi dodatno informacijo, ki lahko izboljša kakovost rezultatov [4].

V [2] so avtorji uporabili širino intervalov zaupanja za usmerjanje algoritma v iskanje novih rešitev na manj raziskanih področjih, ki bi lahko vsebovala globalni optimum. Zaupanje v napovedi se skupaj z aproksimirano vrednostjo lahko uporabi tudi za izračun kriterija pričakovanega izboljšanja. Pristopi, ki uporabljajo ta način, so predstavljeni v [11]. Primer uporabe tega kriterija za izbiranje rešitev, ki naj bodo eksaktno ovrednotene, in rešitev, ki naj bodo aproksimirane, je opisan v [6].

V primerih, ko je negotovost nemogoče odpraviti z dodatnimi aproksimacijami, so v [7] predstavili primerjavo rešitev ob negotovosti. Avtorji ob primerjavi intervalov zaupanja definirajo možnost, da prvi interval nad drugim dominira z gotovostjo, in možnost, da dominiranost ni zanesljiva. Na podlagi teh primerjav avtorji nato predlagajo krepko Pareto dominiranost za primere, ko je dominiranost možno določiti, in šibko Pareto dominiranost za ostale primere, ko to zaradi negotovosti ni mogoče. V takem primeru se za rešitve privzame srednja vrednost in rešitve primerjajo na podlagi teh vrednosti.

V [10] so avtorji predlagali delno urejenost rešitev kot pomoč pri primerjavi rešitev, predstavljenih z intervali zaupanja. Problem takega pristopa je, da ne razlikuje med primerom, kjer zgornji rob prvega intervala dominira nad spodnjim robom drugega intervala, in primerom, kjer se intervala prekrivata. Zelo podoben pristop obravnavanja rešitev, predstavljenih z intervali, imenovan netočne Pareto relacije, je predstavljen tudi v [8].

Mejni okvir, ki je podrobno definiran v 4. razdelku, je bil kot način predstavitve večkriterijskih rešitev z intervali zaupanja že predstavljen v [3]. Vendar pa je primerjava mejnih okvirov tudi v tem primeru poenostavljena na to, da zavržemo rešitve, za katere je malo verjetno, da bi bile dobre, oziroma eksaktno ovrednotimo rešitve, za katere je zelo verjetno, da so dobre.

V našem primeru večkriterijske rešitve z intervali zaupanja prav tako predstavimo z mejnimi okviri, vendar pa pri primerjavi rešitev ne delamo poenostavitev, tako da pokrijemo vse možnosti in tudi pokažemo njihovo možnost uporabe na konkretnem primeru.

3. RELACIJE BREZ NEGOTOVOSTI

Večkriterijski optimizacijski problem je predstavljen kot iskanje minimuma funkcije:

$$f : X \to Z$$
$$f : (x_1, ..., x_n) \mapsto (f_1(x_1, ..., x_n), ..., f_m(x_1, ..., x_n)),$$

kjer n označuje število spremenljivk in m število kriterijev in kjer se vsaka rešitev $x = (x_1, ..., x_n) \in X$ imenuje *odločitveni vektor*, medtem ko se ustrezen element $z = f(x) \in Z$ imenuje *vektor kriterijev*. Ta definicija problema se uporablja za opis relacij, predstavljenih brez negotovosti in z negotovostjo.

Najprej se posvetimo primeru, ko so vse rešitve večkriterijskega optimizacijskega problema eksaktno ovrednotene. To pomeni, da ni negotovosti in so širine intervalov zaupanja enake 0.

Definicija 3.1 (Pareto dominiranost) *Vektor kriterijev z dominira nad vektorjem kriterijev w, $z \prec w$, če velja $z_j \leq w_j$ za vsak $j \in \{1, ..., m\}$ in $z_k < w_k$ za vsaj en $k \in \{1, ..., m\}$.*

Definicija 3.2 (šibka Pareto dominiranost) *Vektor kriterijev z* šibko dominira *nad vektorjem kriterijev w, $z \preceq w$, če velja $z_j \leq w_j$ za vsak $j \in \{1, ..., m\}$.*

Definicija 3.3 (krepka Pareto dominiranost) *Vektor kriterijev z* krepko dominira *nad vektorjem kriterijev w, $z \prec\prec w$, če velja $z_j < w_j$ za vsak $j \in \{1, ..., m\}$.*

Če $z = f(x), w = f(y)$ in z (šibko ali krepko) dominira nad w, pravimo, da rešitev x (šibko ali krepko) dominira nad rešitvijo y. Z drugimi besedami, rešitev x je enaka ali boljša od rešitve y. Šibka Pareto dominiranost je naravna posplošitev relacije $\leq$ in krepka Pareto dominiranost je naravna posplošitev relacije $<$.

Definicija 3.4 (neprimerljivost) *Vektorja kriterijev z in w sta* neprimerljiva, *$z \| w$, če velja $z \npreceq w$ in $w \npreceq z$.*

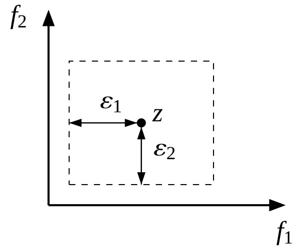
Tudi za ta primer velja, da če sta z in w neprimerljiva, potem sta rešitvi x in y neprimerljivi.

4. RELACIJE OB NEGOTOVOSTI

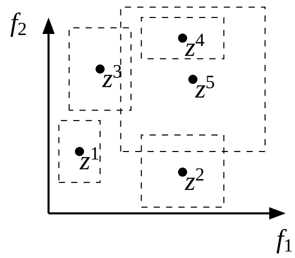
V tem razdelku se posvetimo primerjavi rešitev, predstavljenih z aproksimiranimi vrednostmi in intervali zaupanja za aproksimacijo. Če želimo pri primerjavi upoštevati tudi intervale zaupanja, potem relacije, predstavljene v prejšnjem razdelku, ne zadoščajo, ampak jih je potrebno prilagoditi. Vsaka rešitev x je predstavljena z vektorjem aproksimiranih vrednosti kriterijev, $z = (z_1, z_2, ..., z_m)$, in z vektorjem zaupanja za vsak kriterij, $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, ..., \varepsilon_m)$. Za kriterij z_i je tako interval zaupanja enak $[z_i - \varepsilon_i, z_i + \varepsilon_i]$. Za potrebe primerjave rešitev, predstavljenih na ta način, so relacije med rešitvami ob negotovosti definirane na *mejnih okvirih* (angl. bounding box) vektorja kriterijev. Iz intervalov zaupanja se mejni okvir vektorja kriterijev z izračuna kot (slika 1):

$$\mathrm{BB}(z, \varepsilon) =$$
$$[z_1 - \varepsilon_1, z_1 + \varepsilon_1] \times [z_2 - \varepsilon_2, z_2 - \varepsilon_2] \times ... \times [z_m - \varepsilon_m, z_m - \varepsilon_m].$$

Definicija 4.1 (verjetna Pareto dominiranost) *Mejni okvir $\mathrm{BB}(z, \varepsilon)$ verjetno dominira nad mejnim okvirom $\mathrm{BB}(w, \delta)$, $\mathrm{BB}(z, \varepsilon) \prec_u \mathrm{BB}(w, \delta)$, če za vsak $z' \in \mathrm{BB}(z, \varepsilon)$ in vsak $w' \in \mathrm{BB}(w, \delta)$ velja: $z' \prec w'$.*



Slika 1: Mejni okvir vektorja kriterijev



Slika 2: Aproksimirane rešitve, predstavljene z mejnimi okviri

Če imamo $z = f(x)$ z vektorjem zaupanja ε, $w = f(y)$ z vektorjem zaupanja δ in velja $BB(z, \varepsilon) \prec_u BB(w, \delta)$, potem rešitev x verjetno dominira nad rešitvijo y. Z drugimi besedami, x dominira nad y z (velikim) zaupanjem (odvisnim od ε in δ).

Na sliki 2 so predstavljene vrednosti kriterijev $z^1, .., z^5$ in njihovi mejni okviri. Na sliki lahko vidimo, da z^1 verjetno dominira nad rešitvijo z^4 ($z^1 \prec_u z^4$).

Na podoben način so definirane tudi ostale relacije.

Definicija 4.2 (verjetna Pareto nedominiranost) *Mejni okvir* $BB(z, \varepsilon)$ *je verjetno nedominiran glede na mejni okvir* $BB(w, \delta)$*,* $BB(z, \varepsilon) \nsucc_u BB(w, \delta)$*, če za vsak* $z' \in BB(z, \varepsilon)$ *in* $w' \in BB(w, \delta)$ *velja:* $z' \prec w'$ *or* $z' \| w'$*.*

Nekaj primerov verjetne Pareto nedominiranosti je vidnih na sliki 2: $z^1 \nsucc_u z^2, z^1 \nsucc_u z^3, z^1 \nsucc_u z^5, z^2 \nsucc_u z^4, z^3 \nsucc_u z^4$.

Če imamo $z = f(x)$ z vektorjem zaupanja ε, $w = f(y)$ z vektorjem zaupanja δ in $BB(z, \varepsilon) \nsucc_u BB(w, \delta)$, potem rečemo, da je rešitev x verjetno nedominirana s strani rešitve y. Šele ko se negotovost odstrani, to je ko so vse rešitve eksaktno ovrednotene, lahko izvemo, ali x dominira nad y, ali pa sta rešitvi neprimerljivi.

Definicija 4.3 (verjetna neprimerljivost) *Mejni okvir* $BB(z, \varepsilon)$ *je verjetno neprimerljiv z mejnim okvirom* $BB(w, \delta)$*,* $BB(z, \varepsilon) \|_u BB(w, \delta)$*, če za vsak* $z' \in BB(z, \varepsilon)$ *in* $w' \in BB(w, \delta)$ *velja:* $z' \| w'$*.*

Tudi v tem primeru sta dve rešitvi verjetno neprimerljivi, če sta njuna pripadajoča mejna okvira verjetno neprimerljiva. Na sliki 2 je z^2 verjetno neprimerljiva z z^3.

Če rešitvi nista v nobeni od zgoraj definiranih relacij, potem sta v neznani relaciji.

Definicija 4.4 (neznana relacija) *Mejni okvir* $BB(z, \varepsilon)$ *je v neznani relaciji z mejnim okvirom* $BB(w, \delta)$*,* $BB(z, \varepsilon) \sim_u BB(w, \delta)$*, če velja* $BB(z, \varepsilon) \cap BB(w, \delta) \neq 0$.

Na sliki 2 je z^5 v neznani relaciji z z^2, z^3 in z^4.

Iz verjetne Pareto dominiranosti ali verjetne neprimerljivosti sledi verjetna Pareto nedominiranost:

$$x \prec_u y \Rightarrow x \nsucc_u y$$
$$x \|_u y \Rightarrow x \nsucc_u y.$$

Primeri izpeljane verjetne Pareto nedominiranosti, ki so vidni na sliki 2: $z^1 \nsucc_u z^4, z^2 \nsucc_u z^3, z^3 \nsucc_u z^2$.

Če so vse rešitve eksaktno ovrednotene, so vse širine njihovih intervalov zaupanja enake nič. V takem primeru se relacije, predstavljene v tem razdelku, neposredno pretvorijo v v relacije, predstavljene v 3. razdelku.

Z uporabo relacij ob negotovosti lahko večkriterijski optimizacijski algoritem primerja dve rešitvi in določi, katero obdržati in katero zavreči, brez potrebe, da bi jih moral najprej eksaktno ovrednotiti.

Če pri primerjavi še vedno obstaja negotovost, je potrebno eksaktno ovrednotenje in nato ponovna primerjava rešitev. Ta način primerjanja rešitev zmanjšuje možnost napak pri primerjavi rešitev, ki so posledica netočnih aproksimacij.

5. PRIMERJAVA REŠITEV OB NEGOTOVOSTI

V tem razdelku relacije ob negotovosti uporabimo za primerjavo rešitev v evolucijskem algoritmu za večkriterijsko optimizacijo na osnovi diferencialne evolucije (algoritem DEMO [9]). V tem algoritmu se iz vsake rešitve v populaciji (starš) tvori nova rešitev (kandidat). Algoritem nato primerja starša in kandidata in boljšo rešitev doda v populacijo ter slabšo zavrže. Če sta rešitvi neprimerljivi, se v populacijo dodata obe. Zaradi prisotnosti negotovosti pri primerjavi rešitev je potrebno prilagoditi postopek, ki določa katere rešitve dodati v populacijo, katere zavreči in katere pred primerjavo eksaktno ovrednotiti.

Pri primerjavi kandidata c z vektorjem zaupanja ε in starša p z vektorjem zaupanja δ po vrsti preverimo naslednjih šest možnosti:

1. Če velja $c \|_u p$, obe rešitvi dodamo v populacijo.

   V tem primeru sta rešitvi c in p verjetno neprimerljivi. Torej tudi če bi obe rešitvi eksaktno ovrednotili, bi bili verjetno neprimerljivi in bi obe rešitvi dodali v populacijo. Zato v tem primeru dodatnih eksaktnih ovrednotenj ne izvedemo.

2. Če velja $c \prec_u p$, rešitev c dodamo v populacijo in rešitev p zavržemo.

   V tem primeru je rešitev c verjetno boljša od rešitve p, zato dodatnih eksaktnih ovrednotenj ne izvedemo.

3. Če velja $p \prec_u c$, rešitev p dodamo v populacijo in rešitev c zavržemo.

   Ta možnost je podobna prejšnji, le da je tu rešitev p perspektivnejša.

4. Če velja $c \nsucc_u p$, preverimo ε. Če je $\varepsilon \neq 0$, eksaktno ovrednotimo c in nato rešitvi primerjamo še enkrat. Če

velja $\varepsilon = 0$ (c je že eksaktno ovrednoten), eksaktno ovrednotimo p in nato rešitvi primerjamo še enkrat.

V tem primeru je rešitev c verjetno boljša vsaj po enem kriteriju. Da bi lahko določili, ali rešitev c dominira nad rešitvijo p ali pa sta rešitvi neprimerljivi, je potrebno (vsaj) eno rešitev eksaktno ovrednotiti. Ker ima c več možnosti, da je boljša, najprej preverimo njene intervale zaupanja. Če so širine intervalov različne od nič, kar pomeni, da je rešitev aproksimirana, potem eksaktno ovrednotimo rešitev c in nato ponovno primerjamo rešitvi. Če pa so širine intervalov zaupanja enake nič, kar pomeni, da je rešitev c že eksaktno ovrednotena, potem eksaktno ovrednotimo rešitev p in nato ponovno primerjamo rešitvi.

5. Če velja $p \nprec_u c$, preverimo δ. Če je $\delta \neq 0$, eksaktno ovrednotimo p in nato ponovno primerjamo rešitvi. Če je $\delta = 0$, eksaktno ovrednotimo c in ponovno primerjamo rešitvi.

   Ta možnost je podobna prejšnji, le da je sedaj rešitev p perspektivnejša.

6. Če velja $c \sim_u p$, preverimo ε. Če je $\varepsilon \neq 0$, eksaktno ovrednotimo c in nato ponovno primerjano rešitvi. Če je $\varepsilon = 0$, eksaktno ovrednotimo p in nato ponovno primerjamo rešitvi.

   V tem primeru je edini način, da izvemo, v kakšni relaciji sta rešitvi, da eksaktno ovrednotimo (vsaj) eno rešitev. Ker za kandidata (potomca) obstaja možnost, da je boljši od starša, najprej preverimo, ali je že eksaktno ovrednoten. Če ni, kandidata eksaktno ovrednotimo. Če je, eksaktno ovrednotimo starša in nato ponovno primerjamo rešitvi.

6. ZAKLJUČEK

V prispevku smo definirali nove relacije za primerjavo rešitev ob negotovosti. V našem primeru je negotovost posledica aproksimacij z nadomestnimi modeli in ne npr. šuma v podatkih. Rešitve so predstavljene z aproksimiranimi vrednostmi in intervali zaupanja. Novo definirane relacije razširjajo že znane relacije Pareto dominiranosti in pri primerjavi upoštevajo tudi intervale zaupanja. Primerjava rešitev s temi relacijami zmanjšuje možnosti napačnih primerjav in preprečuje, da bi netočne aproksimacije poslabšale optimizacijske rezultate. Nove relacije smo uporabili v evolucijskem večkriterijskem optimizacijskem algoritmu za primerjavo rešitev. Poleg tega, da je mogoče z novimi relacijami rešitve primerjati ne glede na morebitne netočnosti v aprokcimacijah, je prednost novih relacij tudi možnost določitve dominiranosti rešitev, ne da bi jih bilo potrebno najprej eksaktno ovrednotiti.

Literatura:

[1] K. Deb. *Multi-Objective Optimization Using Evolutionary Algorithms*. Wiley, New York, 2001.

[2] M. Emmerich, A. Giotis, M. Özdemir, T. Bäck in K. Giannakoglou. Metamodel-assisted evolution strategies. *Parallel Problem Solving from Nature – PPSN VII*, *Lecture Notes in Computer Science*, zv. 2439, str. 361–370. Springer, Berlin, 2002.

[3] M. Emmerich in B. Naujoks. Metamodel assisted multiobjective optimisation strategies and their application in airfoil design. *Adaptive Computing in Design and Manufacture VI*, str. 249–260. Springer, London, 2004.

[4] Y. Jin in J. Branke. Evolutionary optimization in uncertain environments – a survey. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, let. 9, št. 3, str. 303–317, 2005.

[5] Y. Jin, M. Olhofer in B. Sendhoff. Managing approximate models in evolutionary aerodynamic design optimization. *2001 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, zv. 1, str. 592–599. 2001.

[6] D. R. Jones, M. Schonlau in W. J. Welch. Efficient global optimization of expensive black-box functions. *Journal of Global Optimization*, let. 13, št. 4, str. 455–492, 1998.

[7] P. Limbourg. Multi-objective optimization of problems with epistemic uncertainty. *Evolutionary Multi-Criterion Optimization – EMO 2005*, *Lecture Notes in Computer Science*, zv. 3410, str. 413–427. Springer, Berlin, 2005.

[8] P. Limbourg in D. E. S. Aponte. An optimization algorithm for imprecise multi-objective problem functions. *2005 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, zv. 1, str. 459–466. 2005.

[9] T. Robič in B. Filipič. DEMO: Differential evolution for multiobjective optimization. *Evolutionary Multi-Criterion Optimization – EMO 2005*, *Lecture Notes in Computer Science*, zv. 3410, str. 520–533. Springer, Berlin, 2005.

[10] G. Rudolph. A partial order approach to noisy fitness functions. *2001 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, zv. 1, str. 318–325. 2001.

[11] T. Wagner, M. Emmerich, A. Deutz in W. Ponweiser. On expected-improvement criteria for model-based multiobjective optimization. *Parallel Problem Solving from Nature – PPSN XI*, *Lecture Notes in Computer Science*, zv. 6238, str. 718–727. Springer, Berlin, 2010.

[12] Z. Zhou, Y. S. Ong, P. B. Nair, A. J. Keane in K. Y. Lum. Combining global and local surrogate models to accelerate evolutionary optimization. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part C: Applications*, let. 37, št. 1, str. 66–76, 2007.