

Ein mehrkriterielles Evolutionsverfahren zur Bestimmung des Phasengleichgewichts von gemischten Flüssigkeiten

Günter Rudolph, Mike Preuss

Lehrstuhl für Algorithm Engineering
Universität Dortmund, 44221 Dortmund

Tel.: (0231) 755 - 77 01

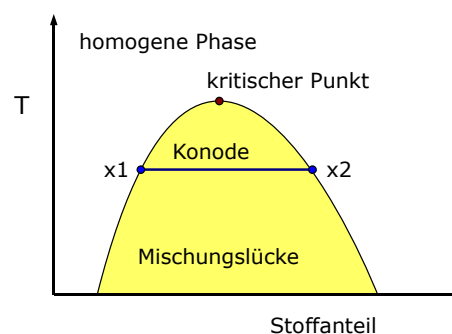
Fax: (0231) 755 - 77 40

E-Mail: {guenter.rudolph, mike.preuss}@uni-dortmund.de

1 Ein vermeintlich einfaches Problem aus der Thermodynamik

Das hier behandelte Problem mutet zunächst einfach an, da es in seiner einfachsten Form nur zwei zu bestimmende Variablen enthält. Es kommt aus dem Kontext der Flüssig-Flüssig-Phasengleichgewichte (englisch *Liquid-Liquid Equilibria* (LLE)), bei dem es vor allem darum geht, die Bereiche zu bestimmen, in denen industrielle Trennverfahren operieren können. Liegt ein Gemisch aus verschiedenen Flüssigkeiten vor, das in seine einzelnen Komponenten zerlegt werden soll, muss es in einen Zustand gebracht werden, in dem die Durchmischung möglichst schlecht ist. Bei günstiger Wahl der Umgebungsbedingungen wie z.B. Temperatur und Druck lässt sich oft die Entmischung erzwingen, so dass das Gemisch in einzelne Phasen zerfällt. Man versucht also, die sogenannte *Mischungslücke* zu finden, die diesen Bereich charakterisiert. In Abbildung 1 ist die Mischungslücke nach oben durch einen kritischen Punkt begrenzt, oberhalb dessen keine getrennten Phasen mehr vorliegen. Dieser Fall tritt beim hier betrachteten Stoffsystem Wasser/Pentanol ein, ist aber nicht der einzig mögliche. Andere Gemische können einen unteren kritischen Punkt haben, oder einen unteren und einen oberen, oder gar keinen.

Bild 1: Die Mischungslücke bezeichnet den Bereich, in dem keine homogene Mischung vorliegt, da das Gemisch in Phasen zerfällt. Für jede Temperatur (T) sind die Endpunkte der entsprechenden Konode gesucht, die die Grenzen zwischen homogener Phase und dem mehrphasigen Bereich darstellen. Am kritischen Punkt fallen die beiden Endpunkte zu einem zusammen.



Jedes durch Angabe von Temperatur, Druck, Dichten, Stoffkonzentrationen usw. vollständig bestimmte System lässt sich durch Lösen des entsprechenden Gleichungssystems relativ genau berechnen. Dadurch wird ermittelt, ob es sich um einen stabilen, d.h. in der Realität tatsächlich erreichbaren Zustand handelt. Ausgehend vom gewünschten chemischen Gleichgewicht lassen sich über Hilfskonzepte wie das der über thermodynamische Modelle berechenbaren Fugazität $\varphi_i^\alpha(T, p, x_i^\alpha)$ entsprechende (nichtlineare) Gleichungen aufstellen, wie z.B. für das einfache Zweistoffsystem Wasser/Pentanol:

$$x_i^\alpha \cdot \varphi_i^\alpha = x_i^\beta \cdot \varphi_i^\beta, \quad (i = 1, 2). \quad (1)$$

Dabei stehen die x_i für die beiden Stoffe, und die oberen Exponenten α und β für die verschiedenen Phasen. Sei x_1 Wasser und α die wasserreiche Phase (β die pentanolreiche Phase), so ergeben sich die Endpunkte der Konode für eine bestimmte Temperatur T unter konstantem Druck P aus der Bestimmung von x_1^α und x_1^β , der Konzentrationen von Wasser in beiden Phasen. Die beiden Variablen des entsprechenden Optimierungsproblems sind dann $x1 = x_i^\alpha$ und $x2 = x_i^\beta$. Nach der Berechnung der Fugazitätskoeffizienten erhält man aus den beiden Gleichungen (1) zwei Fehlerwerte e_1 und e_2 , die jeweils möglichst klein ($e_i \leq 10^{-10}$) werden sollen. Als Zielfunktion verwenden wir die Summe der quadratischen Fehler (2), die zu minimieren ist:

$$f(x1, x2) = e_1^2 + e_2^2. \quad (2)$$

Leider hat diese Modellierung des Problems den Nachteil, dass die Gleichungen (1) unerwünschte triviale Lösungen zulassen, z.B. bei $x_i^\alpha = x_i^\beta$, also gleicher Konzentration eines Stoffes in beiden Phasen. Da der Fehler hier 0 wird, sind alle diese Punkte sogar global optimal, während das gewünschte Optimum aufgrund numerischer Schwierigkeiten in der Fugazitätsmodellierung nur näherungsweise bestimmt werden kann und damit immer ein lokales Optimum bleibt. Die Gitterplots in Abbildung 2 zeigen zusätzlich, dass es ein sehr dominantes Attraktionsbassin gibt, das zu einer trivialen Lösung führt. Das Attraktionsgebiet des gewünschten Optimums ist dagegen so klein, dass es ohne Transformation kaum sichtbar ist. Für die Optimierung folgt also, daß man nach einem sehr schwer zu findenden lokalen Optimum sucht. Es versteht sich von selbst, dass herkömmliche gradientenbasierte Verfahren, wie sie oft in der Thermodynamik zum Einsatz kommen, auf einem solchen Problem völlig überfordert sind.

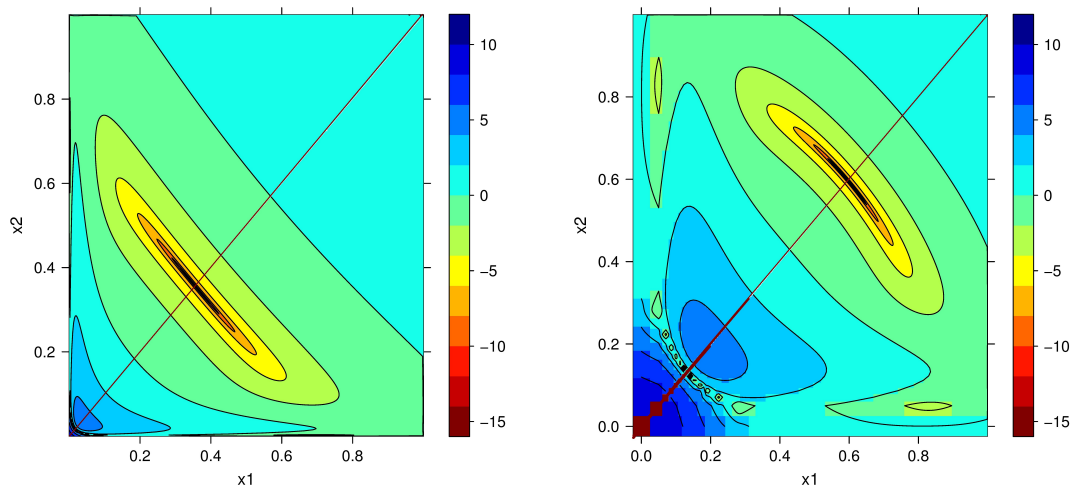


Bild 2: Links: Gitterplot über die Variablen $x1$ und $x2$. Rechts: mit einer Wurzelfunktion transformiert. Nur im rechten Bild lassen sich die gewünschten Optima bei ca. (0.650, 0.001) bzw. (0.001, 0.650) erkennen. Die Diagonale stellt die triviale Lösungsmenge $x1 = x2$ dar.

2 Lösungsansätze mit kanonischen evolutionären Algorithmen

Aus den beschriebenen Eigenschaften des behandelten Optimierungsproblems lässt sich schon vermuten, dass neben klassischen Verfahren auch kanonische evolutionäre Algorithmen Schwierigkeiten mit dem Auffinden des gewünschten lokalen Optimums haben werden. Allerdings können letztere leicht mit einem Multistart-Mechanismus ausgestattet werden, der die Suche bei Stagnation abbricht und an anderer Stelle fortsetzt. Außerdem ist zu hoffen, dass man die Eigenschaften der EAs über eine automatisierte Parameter-suche so weit an das Optimierungsproblem anpassen kann, dass sich ihre Erfolgswahrscheinlichkeit deutlich steigern lässt. Wir setzen dazu die *Sequentielle Parameteroptimierung* (SPO) [1] ein, die auf Basis eines initialen, raumfüllenden Designs ein gemischtes Regressions- und Krigingmodell anpasst und anhand dessen sukzessive nach erfolgreicher Parameterkombinationen sucht. Dieser Ansatz hat den Vorteil, dass die Ergebnisse nicht durch ungeeignete Parametrisierung der untersuchten Optimierverfahren verfälscht werden. Die erhaltene Aussage betrifft also nicht nur die Algorithmen unter Einsatz von standardisierten oder manuell gesuchten Parameterwerten, sondern ihre parameterbasierte Anpassbarkeit an das Problem insgesamt.

Die betrachteten drei Optimierverfahren stehen prototypisch für verschiedene, relativ einfache Möglichkeiten, den Suchprozess in Zeit und/oder Raum zu parallelisieren. Dabei kommt bei dem behandelten Problem der Möglichkeit zum mehrfachen Neustart eine besondere Bedeutung zu, da das aufzufindende Attraktionsbassin sehr klein ist. Wird nicht wenigstens ein Suchpunkt in diesem Bassin plaziert, bleibt die Suche zwangsläufig erfolglos.

Multistart (1+1) Evolutionstrategie (ES): Aus einem Elternindividuum wird durch Mutation jeweils ein Nachkomme generiert, der nur akzeptiert wird, wenn er mindestens genauso gut ist wie sein Elter. Der Neustart erfolgt hier nach einer festgelegten Anzahl von Generationen ohne Verbesserung.

Multistart (μ, λ) Evolutionstrategie: Populationsbasierte Suche, λ Nachkommen werden aus μ Eltern durch Rekombination und Mutation erzeugt, nur die besten μ Nachkommen überleben und werden Eltern der nächsten Generation. Hier wird der Neustart ebenfalls nach einer festgelegten Stagnationszeit ausgelöst.

Multistart Small-World Netzwerk zellulärer EA (swn-CEA): Hier handelt es sich um eine Population einzelner (1+1) Strategien, die untereinander in einer Ringtopologie verbunden sind. Einige der Kanten im Ring werden nach dem Verfahren von Watts und Strogatz [2] zufällig mit anderen als ihren Nachbarknoten verbunden. Durch Setzen oder Löschen dieser abkürzenden Kanten kann die Gesamtkonnektivität des Systems drastisch erhöht oder verringert werden. Wenn für eine festgelegte Anzahl an Generationen keine „Zelle“ eine Verbesserung erzielt, wird der Algorithmus neu gestartet.

In Tabelle 1 sind die für SPO erlaubten Parameterintervalle angegeben. Insgesamt durfte die Parameteroptimierung für jeden EA jeweils 1000 Algorithmen-Läufe durchführen, wobei ein initiales Design der Größe 100 mit je 4 Wiederholungen benutzt wird.

Die Ergebnisse der Parameteroptimierung sind in Tabelle 2 zusammengefasst. Zwei Gesichtspunkte sind bei deren Betrachtung von besonderem Interesse:

- Wie weit kann die Performance für die einzelnen Varianten gesteigert werden?

Tabelle 1: Algorithmendesigns (Parameterintervalle) für SPO auf den drei EA Vergleichsverfahren: Populationsgröße, Selektionsdruck, Lernrate, initiale Mutationsstärke, tolerierte Stagnationszeit, Wahrscheinlichkeit für Kantenreueverbindung

EA	μ	$\frac{\lambda}{\mu}$	τ	σ_{init}	s	β
(1+1)-ES	(1)	(1)	0 : 1	0.01:0.5	10:100	—
(μ, λ) -ES	5:150	3:10	0 : 1	0.01:0.5	1:20	—
swn-CEA	5:150	(1)	0 : 1	0.01:0.5	1:20	0:0.2

- Lassen sich systematische Veränderungen an den Parametern erkennen, die als Anpassung in eine bestimmte Richtung interpretiert werden können?

Nimmt man die durchschnittliche Zahl der Treffer im gewünschten Attraktionsbassin als Richtwert für die Performance, so fällt zunächst auf, dass die (1+1)-ES sowohl vor als auch nach der Parameteroptimierung den anderen beiden EA deutlich überlegen ist. Der swn-CEA wird soweit an das Problem angepasst, dass er ebenfalls eine beachtliche Performance erreicht. Die (μ, λ) -ES ist allerdings offenbar für das Problem ungeeignet. Hier kommt allerdings möglicherweise auch ein Problem fehlender Rückkopplung in der Parameteroptimierung zum Tragen. Da die Performanceunterschiede innerhalb des initialen Designs bei dieser Strategie sehr klein sind, enthält das von SPO intern verwandte Modell keine Information darüber, wo bessere Konfigurationen gefunden werden können. Das heißt nicht notwendigerweise, daß diese nicht existieren, sie sind dann aber sehr schwer zu finden.

Tabelle 2: Mittlere und beste gefundene EA-Parametrisierungen (siehe auch Tabelle 1), $\varnothing h_i$ bezeichnet die durchschnittliche Zahl der Bassin-Treffer pro 10000 Auswertungen

μ	$\frac{\lambda}{\mu}$	τ	σ_{init}	s	β	$\varnothing h_i$
(1+1)-ES, oben: mittlere Startkonfiguration, unten: beste SPO-Konfiguration						
(1)	(1)	0.635	0.385	61	—	4.13
(1)	(1)	0.18	0.350	10	—	7.50
(μ, λ) -ES, oben: mittlere Startkonfiguration, unten: beste SPO-Konfiguration						
13	6.89	0.125	0.066	11	—	0.00
7	3.24	0.020	0.493	18	—	0.53
swn-CEA, oben: mittlere Startkonfiguration, unten: beste SPO-Konfiguration						
77	(1)	0.075	0.110	7	0.035	0.33
5	(1)	0.033	0.500	1	0.140	4.00

Vergleicht man die erhaltenen besten Parameterwerte aus Tabelle 2 miteinander, fällt schnell auf, dass die verbesserten EA, vor allem (1+1)-ES und swn-CEA, sich durch extrem kleine Toleranzen gegenüber Stagnation auszeichnen. Desweiteren ist die Populationsgröße bei letzterem stark reduziert worden. Scheinbar ahmt der angepasste swn-CEA das Verhalten einer (1+1)-ES nach. Bei der (μ, λ) -ES ist ebenfalls ein Trend zu kleineren Populationen zu beobachten, der sich allerdings im Ergebnis wesentlich schwächer auswirkt.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass einige kanonische EA sich durch eine Parameteroptimierung an das Problem soweit anpassen lassen, dass sie das gesuchte Attraktionsbassin von Zeit zu Zeit treffen. Trotz aufwändiger Parameteroptimierung ist die erreichte Performance aber noch immer kaum zufriedenstellend. Außerdem soll angemerkt werden, dass die präzise Approximation des lokalen Optimums selbst innerhalb des Bassins für die (1+1)-ES relativ schwierig ist. Fehlerwerte unterhalb von 10^{-6} werden nur selten in vertretbarer Zeit erreicht.

3 Mehrkriterieller Lösungsansatz und Hybridisierung

Aus den soeben geschilderten Erfahrungen lässt sich ableiten, dass das Bassin irgendwie „größer gemacht“ werden muss, um häufiger Treffer in der Nähe der gesuchten (nichttrivialen) Optima zu platzieren. Dazu muss problemspezifisches Wissen bei der *Problemformulierung* geeignet eingearbeitet werden: Wir wissen bereits, dass auf der Raumdiagonalen $x_1 = x_2$ die nicht gewünschten, trivialen Optima liegen. Also könnte man mit Hilfe von Straffunktionen die Nähe einer Lösung zur Raumdiagonalen bestrafen, um den Algorithmus von den trivialen Lösungen fortzuleiten. Problematisch sind hier allerdings die zu wählenden Parameter bei der Straffunktion. Deshalb lag es nahe, hier einen mehrkriteriellen Ansatz zu verfolgen: Die erste Zielfunktion $f_1(\cdot, \cdot)$ bleibt das zu minimierende Fehlermaß aus Gleichung (2), während die zweite Zielfunktion die Ähnlichkeit der beiden Komponenten x_1 und x_2 durch

$$f_2(x_1, x_2) = 1 - |x_1 - x_2| \quad \text{mit } x_1, x_2 \in [0, 1] \quad (3)$$

minimiert. Wendet man darauf einen mehrkriteriellen evolutionären Algorithmus an, so erhält man eine Approximation der Paretofront. Die zugehörigen Urbilder stellen dann die Bandbreite der effizienten Kompromisse aus niedrigem Fehlermaß *und* der Größe der Entfernung zu den trivialen Lösungen dar. Folglich darf man erwarten, dass zumindest *einige* Approximationspunkte des mehrkriteriellen Verfahrens im Attraktionsbassin der nichttrivialen Lösungen liegen.

Diese Hypothese haben wir mit dem SMS-EMOA [3, 4] getestet. Dieses mehrkriterielle evolutionäre Verfahren nutzt intern die **S**-Metrik zur **S**elektion (SMS) von Individuen und erzielt so eine gleichmäßige Approximation der Paretofront. Abbildung 3 zeigt eine typische Approximation des SMS-EMOA nach 2500 Funktionsauswertungen bei einer Populationsgröße von 20 Individuen.

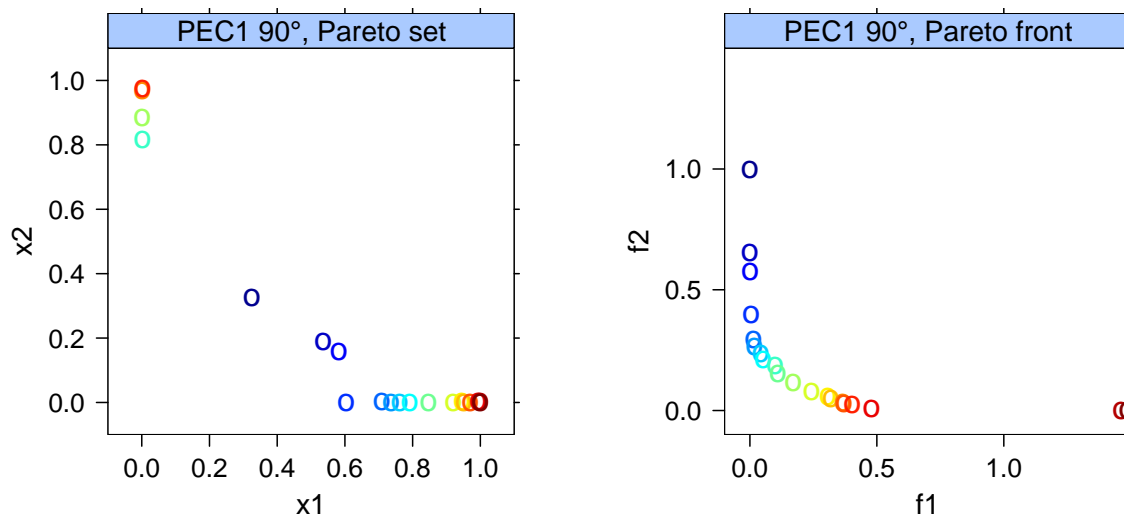


Bild 3: Links: Typische Approximation durch den SMS-EMOA. Links: Paretomenge. Rechts: Paretofront. Das interessierende Gebiet liegt entweder bei $x_1 = 0,65$ oder bei $x_2 = 0,65$.

Ganz offensichtlich ist es durch diesen Ansatz möglich, Lösungen in der Nähe der gesuchten Optima zu platzieren. Allerdings ist die Lokalisationsgenauigkeit dieser Optima noch nicht zufrieden stellend. Deshalb wird von jeder Lösung aus dem Lauf des SMS-EMOA eine lokale Suche gestartet, die die gefundenen Optima genauer lokalisieren soll. Für das

resultierende hybride Verfahren verwenden wir das direkte Suchverfahren von HOOKE & JEEVES [5], das ohne die Berechnung von Gradienten auskommt. Konkret setzen wir die C-Implementierung von Johnson [6] ein, welche auf dem ALGOL-Code in [7] sowie den numerischen Code-Verbesserungen in [8, 9] beruht.

Das lokale Verfahren wird abgebrochen, sobald $|x_1 - x_2| < 0,01$, da man dann von einem Lauf zu einer trivialen Lösung ausgehen kann. Ansonsten stoppt das Verfahren, sobald für die interne Schrittweite s die Bedingung $s < 10^{-10}$ gilt. Nach Beendigung der lokalen Suche gemäß letzterer Bedingung wurde die Suche als erfolgreich gewertet, wenn das Fehlermaß kleiner als 10^{-10} war.

4 Ergebnisse und Analyse

Die hier vorgestellten Ergebnisse erweitern die bereits in [10] beschriebenen Resultate. Das hybride Verfahren aus SMS-EMOA und direkter Suche nach HOOKE & JEEVES wurde 25 mal auf das Wasser/Pentanol-Problem jeweils für die Temperaturen $T = 40, 50, 60, 70, 80, 90$ Grad Celsius angewandt. Folglich wurden bei einer Populationsgröße von 20 Individuen nach Ende des SMS-EMOA genau 20 lokale Suchen mit je einem Individuum als initiale Lösung gestartet. Dabei haben wir *keinerlei* Parameter-tuning bei beiden Verfahren durchgeführt: Beim direkten Suchverfahren wurde der Schrittweitenkontraktionsfaktor auf $\rho = 0,5$ und die initiale Schrittweite auf $s = 0,001$ gesetzt. Der SMS-EMOA stoppte nach 2500 Funktionsauswertungen.

Tabelle 3 zeigt die aggregierten Leistungsdaten des hybriden Verfahrens. So waren etwa bei $T = 60^\circ\text{C}$ im Mittel 10 von 20 lokalen Suchen in *jedem* der 25 Läufe erfolgreich bei der Suche nach den nichttrivialen Lösungen. Selbst im schlechtesten Fall waren mindestens drei lokale Suchen erfolgreich, im besten Fall sogar 17.

Tabelle 3: Mittlere Erfolgsquoten für das hybride Verfahren mit jeweils 20 lokalen Suchen nach jeweils 25 Läufen je Temperatur.

Temperatur	Minimum	Maximum	Median	Mittelwert	Quote
40°C	2	14	7	$7,00 \pm 3,1$	35,0 %
50°C	4	14	7	$7,98 \pm 2,8$	39,9 %
60°C	3	17	10	$10,00 \pm 3,3$	50,0 %
70°C	7	16	11	$11,32 \pm 3,2$	56,6 %
80°C	7	18	13	$13,12 \pm 2,6$	65,6 %
90°C	9	19	15	$15,12 \pm 2,9$	75,6 %

Es gilt nun auszuschließen, dass dieses erfreuliche Verhalten maßgeblich durch das HOOKE & JEEVES Verfahren hervorgerufen wird. Deshalb haben wir $25 \times 20 = 500$ lokale Suchen von gleichverteilten Startpunkten in $[0, 1]^2$ gestartet und die gleichen Abbruchbedingungen wie beim hybriden Verfahren angewandt. Tabelle 4 zeigt deutlich, dass die hohen Erfolgsquoten beim hybriden Verfahren nicht durch das spezielle lokale Suchverfahren sondern durch die Generierung von Startlösungen mit Hilfe des mehrkriteriellen Ansatzes bedingt sind.

Zweifelsfrei stellt die Erhöhung der mittleren Erfolgsquote von höchstens 3% (bei 90°C) beim lokalen Multistartverfahren auf mindestens 35% (bei 40°C) beim hybriden Verfahren eine enorme Verbesserung dar. Zur genaueren Abschätzung der Verbesserung müssen

Tabelle 4: Mittlere Erfolgsquoten für HOOKE & JEEVES nach jeweils 500 Läufen bei gleichverteilten Startpunkten.

Temperatur	Läufe zur trivialen Lösung	Läufe zur gesuchten Lösung	Läufe mit vorzeitiger Konvergenz	mittlere Erfolgsquote
40°C	494	4	2	0,8 %
50°C	490	9	1	1,8 %
60°C	494	4	2	0,8 %
70°C	493	5	2	1,0 %
80°C	486	12	2	2,5 %
90°C	482	14	4	2,9 %

allerdings die 2500 Zielfunktionsauswertungen der mehrkriteriellen Phase hinzugerechnet werden. Tabelle 5 zeigt die mittlere Anzahl von Zielfunktionsaufrufen, die das lokale Verfahren benötigt, bis ein Abbruchkriterium greift. Zwei Dinge fallen auf:

Erstens: Für die Lokalisierung trivialer Lösungen wird eine Größenordnung weniger Auswertungen benötigt. Dies erklärt sich durch das effiziente Abbruchkriterium, das die offensichtlich erfolglose Suche frühzeitig beendet.

Tabelle 5: Mittlere Laufzeiten von HOOKE & JEEVES während des hybriden Verfahrens abhängig von der letztlich gefundenen Lösung.

Temperatur	Mittlere Anzahl von Zielfunktionsauswertungen für triviale Lösungen	Mittlere Anzahl von Zielfunktionsauswertungen für gesuchte Lösungen
40°C	198,4 ± 90,9	1680,3 ± 1706,8
50°C	209,1 ± 73,2	3073,4 ± 2129,3
60°C	182,1 ± 69,0	2246,3 ± 1553,7
70°C	173,0 ± 57,9	2475,3 ± 1750,8
80°C	149,9 ± 83,6	2413,9 ± 1372,2
90°C	130,4 ± 58,7	1241,4 ± 1100,0

Zweitens: Die Streuung bei der Anzahl der Auswertungen für die gesuchten, nichttrivialen Lösungen ist ziemlich hoch. Eine genauere Analyse zeigt, dass die Anzahl der benötigten Auswertungen signifikant davon abhängt, welches der beiden (zur Winkelhalbierenden symmetrischen) gesuchten Lösung letztlich lokalisiert wird. So zeigt sich etwa in Tabelle 6, dass Lösungen vom Typ 2 (mit $x_1 > 0,5$) unabhängig von der Temperatur mit einer gleichbleibend niedrigen Anzahl von rund 460 Auswertungen akkurat bestimmt werden können, während Lösungen von Typ 1 (mit $x_1 \leq 0,5$) eine temperaturabhängige, rund eine Größenordnung höhere Anzahl von Auswertungen benötigt. Da das Problem eigentlich symmetrisch sein sollte, sind die Gründe für diese unterschiedlichen Laufzeiten zur Zeit ungeklärt. Die Vermutung von numerischen Instabilitäten im Simulator liegt jedoch nahe.

Nach diesen vorbereitenden Analysen können wir uns nun der genaueren Beurteilung der Leistungsfähigkeit des hybriden Verfahrens widmen. Zunächst einmal halten wir fest, dass wir zuverlässig an einem hinreichend großen Wert von $|x_1 - x_2|$ bei einem Fehlermaß $< 10^{-10}$ erkennen können, ob wir eine gesuchte Lösung gefunden haben. In diesem Fall könnten wir das lokale Multistartverfahren oder das hybride Verfahren stoppen. Unter diesen Voraussetzungen und der Annahme, dass die Reihenfolge der Startlösungen im hybriden Verfahren zufällig permutiert wird, können wir aus unseren statistischen Daten

Tabelle 6: Mittlere Laufzeiten von HOOKE & JEEVES des hybriden Verfahrens abhängig von gefundener nichttrivialer Lösung.

Temperatur	Mittlere Anzahl von Zielfunktionsauswertungen für Lösungen Nr. 1	Mittlere Anzahl von Zielfunktionsauswertungen für Lösungen Nr. 2
40°C	4168,8 ± 1183,6	456,7 ± 30,3
50°C	5117,6 ± 1264,6	456,1 ± 20,8
60°C	3905,5 ± 465,4	459,9 ± 23,4
70°C	4254,6 ± 753,2	465,9 ± 31,7
80°C	3446,7 ± 472,4	470,8 ± 39,0
90°C	3300,2 ± 465,1	464,3 ± 24,7

eine erwartete Anzahl von Zielfunktionsauswertungen schätzen, die bis zum Auffinden einer gesuchten Lösung bei beiden Verfahren benötigt wird.

Seien s_L und s_H die mittleren Erfolgsquoten des lokalen Multistartverfahrens (L) bzw. des hybriden Verfahrens (H). Diese lassen sich aus der 6. Spalte von Tabelle 4 bzw. der 5. Spalte von Tabelle 3 ablesen. Weiter seien M_T und M_G die mittlere Anzahl von Zielfunktionsauswertungen, die das lokale Verfahren zur Lokalisierung der trivialen (T) bzw. gesuchten (G) Lösung benötigt. Diese Werte finden sich in der 2. bzw. 3. Spalte von Tabelle 5. Unter Verwendung dieser Kenngrößen benötigt der lokale Multistartansatz im Mittel

$$\frac{1}{s_L} \times M_T + M_G \quad (4)$$

und das hybride Verfahren

$$2500 + \frac{1}{s_H} \times M_T + M_G \quad (5)$$

Auswertungen bis zum Auffinden einer gesuchten Lösung. Setzt man die empirischen Werte aus den Tabellen in den Gleichungen (4) und (5) ein, so ergeben sich die in Tabelle 7 zusammengefassten Ergebnisse. Die Überlegenheit des hybriden Verfahrens, insbesondere bei den schwierigeren Problemen mit niedriger Temperatur, tritt deutlich hervor.

Tabelle 7: Mittlere Anzahl von Zielfunktionsauswertungen bis zum Auffinden einer nichttrivialen Lösung beim Multistartverfahren und beim hybriden Verfahren.

	40°C	50°C	60°C	70°C	80°C	90°C
Multistart	26480	14690	25009	19775	8410	5738
Hybrid	4747	6097	5111	5281	5142	3914

Ein weiterer Vorteil des hybriden Verfahrens liegt in der geringeren Varianz bei der Anzahl der Läufe bis zu einer gesuchten Lösung. Die Standardabweichung errechnet sich aus der Erfolgswahrscheinlichkeit s via $\sqrt{1-s}/s$, so dass bei etwa 40°C die Schwankung beim Multistartverfahren bei $\pm 124,5$ und beim hybriden Verfahren nur bei $\pm 2,3$ Läufe liegt.

5 Abschließende Bemerkungen

Das vermeintliche einfache, niedrigdimensionale Problem hat einige Schwächen von Standardversionen evolutionärer Algorithmen offenbart. Erst durch das Einbringen von pro-

blemspezifischem Wissen in die Problemformulierung samt dem mehrkriteriellen Ansatz konnte das Problem mit vertretbarem Aufwand gelöst werden.

Zur Zeit wird dieser Ansatz auch für mehr als zwei Phasen und mehr als zwei Komponenten weiter entwickelt. Dies erfordert eine Reformulierung des Optimierungsmodells und ggf. weitere Zielfunktionen. In diesem Rahmen werden auch die Parametrisierungen der einzelnen Algorithmen mit SPO [1] optimiert werden und alternative direkte Suchverfahren [11] zum Einsatz kommen.

Literatur

- [1] Bartz-Beielstein, T.: *Experimental Research in Evolutionary Computation – The New Experimentalism*. Natural Computing Series. Berlin: Springer. ISBN 3-540-32026-1. 2006.
- [2] Watts, D. J.; Strogatz, S. H.: Collective Dynamics of 'small-world' Networks. *Nature* 393 (1998), S. 440–442.
- [3] Emmerich, M.; Beume, N.; Naujoks, B.: An EMO algorithm using the hypervolume measure as selection criterion. In: *Evolutionary Multi-Criterion Optimization (EMO)* (Coello, C. A. C.; et al., Hg.), S. 62–76. Springer, Berlin. 2005.
- [4] Beume, N.; Naujoks, B.; Emmerich, M.: SMS-EMOA: Multiobjective selection based on dominated hypervolume. *European Journal of Operational Research* 181 (2007) 3, S. 1653–1669.
- [5] Hooke, R.; Jeeves, T. A.: Direct Search Solution of Numerical and Statistical Problems. *Journal of the ACM* 8 (1961) 2, S. 212–229.
- [6] Johnson, M. G.: Implementation of HOOKE & JEEVES Direct Search Algorithm in C. Online: <http://www.netlib.org/opt/hooke.c>. Feb. 1994.
- [7] Kaup Jr., A. F.: Algorithm 178 Direct Search. *Communications of the ACM* 6 (1963) 6, S. 313–314.
- [8] Bell, M.; Pike, M. C.: Remark on Algorithm 178 [E4] Direct Search. *Communications of the ACM* 9 (1966) 9, S. 684–685.
- [9] Tomlin, F. K.; Smith, L. B.: Remark on Algorithm 178 [E4] Direct Search. *Communications of the ACM* 12 (1969) 11, S. 637–638.
- [10] Preuss, M.; Rudolph, G.; Tumakaka, F.: Solving Multimodal Problems via Multiobjective Techniques with Application to Phase Equilibrium Detection. In: *Proceedings of the International Congress on Evolutionary Computation (CEC2007)*. Piscataway (NJ): IEEE Press. Im Druck. 2007.
- [11] Kolda, T. G.; Lewis, R. M.; Torczon, V. J.: Optimization by Direct Search: New Perspectives on Some Classical and Modern Methods. *SIAM Review* 45 (2003) 3, S. 385–482.