



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Multi-objective Bayesian global optimization for continuous problems and applications

Yang, K.

Citation

Yang, K. (2017, December 6). *Multi-objective Bayesian global optimization for continuous problems and applications*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/57791>

Version: Not Applicable (or Unknown)

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/57791>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/57791> holds various files of this Leiden University dissertation

Author: Yang, Kaifeng

Title: Multi-objective Bayesian global optimization for continuous problems and applications

Date: 2017-12-06

Nederlandse Samenvatting

Evolutionaire algoritmen (EAs) en *Bayesiaanse Globale Optimalisatie* (BGO) zijn de twee hoofdtakken op het gebied van optimalisatie voor meerdere doelstellingen. De eerstgenoemde tak is gebaseerd op het idee om berekeningen te beschrijven als natuurlijke evolutie, de tweede tak maakt gebruik van statistische modellen voor optimalisatie. Echter, op het gebied van optimalisatie voor meerdere doelstellingen, maken evolutionaire meerdere doelstellingen optimalisatie algoritmen (EMOA) in hun standaard vorm vaak gebruik van een groot aantal evaluaties van de doel-functies, waardoor deze aanpak inefficiënt is in het geval van dure evaluaties. Dit probleem kan worden verholpen door middel van de efficiënte Bayesiaanse Globale Optimalisatie methode. Bij het gebruik van deze methode in optimalisatie voor meerdere doelstellingen is er een nieuwe uitdaging: de executie tijd van *meerdere doelstellingen Bayesiaanse Globale Optimalisatie* (MOBGO) zelf is nog steeds te lang, ondanks dat er maar een klein aantal evaluaties nodig is. Er zijn twee redenen dat MOBGO duur is: ten eerste, voor MOBGO is het noodzakelijk dat een zogeheten opvul criterium vaak berekend wordt, maar tot nog toe is de reken complexiteit van een opvul criterium erg duur. Een tweede reden is dat de optimalisator, die met behulp van surrogaat modellen de optimale oplossing probeert te vinden, niet effectief genoeg is.

Om de efficiëntie te verbeteren van een van de meest voorkomende opvul criteria, *Verwachte Hypervolume Verbetering* (EHVI), wordt er in dit proefschrift een nieuw efficiënt algoritme voorgesteld. Dit nieuwe efficiënte algoritme is gebaseerd op een efficiënt partitionerings algoritme voor de niet-gedomineerde ruimte, en op een nieuw afgeleide formule om de EHVI te berekenen. De reken complexiteit van het voorgestelde algoritme voor precieze berekening van de EHVI is $O(n \log n)$, voor zowel twee als drie doelstellingen. Het wordt aangetoond dat de tijd-complexiteit niet verder verbeterd kan worden. In geval van drie doelstellingen is de executie tijd van het nieuwe algoritme bijna veertigduizend keer sneller dan het vorige algoritme. Bovendien kan dit algoritme ook uitgebreid worden voor

de exacte berekening van andere opvul criteria, bijvoorbeeld *Kans op Verbetering* (PoI) en *Getrunceerde Verwachte Hypervolume Verbetering* (TEHVI).

Om volledig gebruik te kunnen maken van a-priorische kennis van doel-functies, wanneer beschikbaar, wordt TEHVI in dit proefschrift voorgesteld als nieuw opvul criterium. In de definitie van TEHVI volgt de waarschijnlijkheidsdichtheidsfunctie een getrunceerde normaalverdeling, waar het getrunceerde deel afhangt van het bereik van de doel-functies. De precieze berekening van TEHVI is afgeleid van die van EHVI, en de reken complexiteit van TEHVI is $O(n \log n)$ voor twee doelstellingen. Aangezien TEHVI alleen niet-nul is in het valide getrunceerde domein kan het de optimalisator naar het valide domein in de doel-ruimte leiden, met het doel de optimale oplossing te vinden. Daardoor kan TEHVI, in verhouding tot EHVI, een betere Pareto-front benadering vinden. Verder kan TEHVI ook toegepast worden op voorkeur-gebaseerde meerdere doelstellingen optimalisatie problemen, wanneer het getrunceerde domein gedefinieerd wordt als de voorkeur regio in de doel-ruimte.

Om de effectiviteit van de optimalisator in MOBGO te verbeteren wordt er nog een opvul criterium geïntroduceerd in dit proefschrift, namelijk de *Verwachte Hypervolume Verbetering Gradiënt* (EHVIG). EHVIG is de gradiënt van EHVI, waardoor het mogelijk is een gradiënt stijgingsalgoritme, in plaats van een EA, als optimalisator te gebruiken in MOBGO. Echter, een bekend nadeel aan het gradiënt stijgingsalgoritme is dat het gemakkelijk kan blijven hangen in een lokaal optimum. Dit probleem wordt in dit proefschrift verholpen door EHVIG als een nieuw stopzettings criterium toe te passen in een EA. De kern van dit idee is simpel: wanneer de EHVIG van een individu in een EA heel dichtbij, of zelfs gelijk aan, nul is, kan dit individu als de optimale oplossing beschouwd worden, waardoor het onnodig wordt om verder te gaan met de iteraties van het EA.

In dit proefschrift zijn zowel state-of-the-art EMOAs (NSGA-II en SMS-EMOA) en MOBGO gebaseerde algoritmen geïmplementeerd en vergeleken in verschillende praktische toepassingen. Het betreft toepassingen voor het PID parameter afstellings probleem, het robuuste PID parameter afstellings probleem met verstoring, en het bio-gas fabriek optimalisatie probleem. Gezien de betere prestatie van de MOBGO gebaseerde algoritmen wordt er aanbevolen om TEHVI-EGO en EHVI-EGO te gebruiken voor praktische applicaties.