

Teil I Optimierungsprobleme

1	Einführung	3
1.1	Optimierungsprobleme in der realen Welt	3
1.2	Grundbegriffe der Optimierung	5
1.2.1	Globales und lokales Optimum	5
1.2.2	Umwandlung eines Maximierungsproblems in ein Minimierungsproblem und umgekehrt.	5
1.2.3	Notationen	6
1.2.4	Supremum und Infimum	6
1.2.5	Kontinuierliche, diskrete und kombinatorische Optimierung	7
2	Kontinuierliche Optimierungsprobleme	9
2.1	Graph einer Funktion	9
2.2	Optimierungen mit Nebenbedingungen	10
2.3	Anwendungsbeispiele	11
2.4	Unimodale und multimodale Funktionen	14
2.5	Konvexe und konkave Funktionen	14
2.6	Extrema konvexer und konkaver Funktionen	15
3	Kombinatorische Optimierungsprobleme	17
3.1	Einführende Beispiele	17
3.1.1	Problem des Handlungsreisenden	18
3.1.2	Rucksackproblem	19
3.2	Lösungspräsentationen	20
3.2.1	Kombinatorik	21
3.2.2	Graphen	23
3.3	Graphenprobleme	27
3.3.1	Knotenüberdeckungsproblem	28
3.3.2	Maximales Cliquesproblem	29
3.3.3	Stabilitätsproblem	30

3.3.4	Zusammenhang zwischen Stabilitäts-, Knotenüberdeckungs- und maximalem Cliquesproblem	32
3.3.5	Graphen-Färbungsproblem	33
3.3.6	Max-Cut-Problem	35
3.4	Vehicle-Routing-Probleme.	37
3.4.1	Einführendes Beispiel	37
3.4.2	Grundversion des VRP.	39
3.4.3	Varianten des VRP	40
3.5	Scheduling-Probleme.	41
3.5.1	Einführendes Beispiel	42
3.5.2	Grundversion des Scheduling-Problems	42
3.5.3	Klassifikation von Scheduling-Problemen.	44
3.5.4	Beispiele von Scheduling-Problemen	44
3.6	Zuschnittprobleme und Packungsprobleme.	45
3.6.1	Dimension von Zuschnitt- und Packungsproblemen	45
3.6.2	Bin-Packing-Problem.	46
3.6.3	Eindimensionale C&P-Probleme	46
3.6.4	Zweidimensionale C&P-Probleme	47
3.6.5	Dreidimensionale C&P-Probleme	49
	Literatur.	50
4	Lineare Optimierungsprobleme	51
4.1	Einführungsbeispiel (Produktionsproblem).	51
4.2	Standardform eines linearen Optimierungsproblems.	52
4.3	Anwendungsbeispiel (Transportproblem)	53
4.4	Ganzzahlige lineare Optimierungsprobleme	54
5	Multikriterielle Optimierungsprobleme	57
5.1	Definitionen	57
5.2	Multikriterielles Optimierungsproblem in der Grundversion	58
5.3	Einführendes Beispiel	59
5.4	Pareto-Dominanz	60
 Teil II Klassische Optimierungsmethoden		
6	Analytische Methoden	65
6.1	Grundbegriffe der Analysis	66
6.1.1	Definitionen	66
6.2	Der Satz vom Maximum und Minimum	67
6.3	Ableitung einer Funktion.	68
6.3.1	Sekanten- und Tangentensteigung	68
6.3.2	Ableitung einer Funktion.	69
6.3.3	Beispiele von Ableitungen und Ableitungsregeln	69

6.4	Extremwertbestimmung für Funktionen mit einer Variablen. . .	70
6.5	Extremwertbestimmung für Funktionen mit zwei Variablen. . .	72
6.5.1	Partielle Ableitungen	72
6.5.2	Notwendige Bedingung für ein Extremum	73
6.5.3	Hinreichende Bedingung für lokale Extrema.	76
6.6	Lagrange-Methode.	78
6.6.1	Gradient einer Funktion	78
6.6.2	Richtungsableitung.	79
6.6.3	Höhenlinie	80
6.6.4	Eigenschaften des Gradienten	81
6.6.5	Lagrange-Funktion.	81
6.6.6	Langrange-Methode.	83
6.6.7	Anwendungsbeispiel	83
6.6.8	Lagrange-Methode für Funktionen mit mehr als zwei Variablen	84
6.7	Gradientenverfahren.	84
6.7.1	Ablauf des Gradientenabstiegsverfahrens	85
6.7.2	Schrittweitenbestimmung.	86
6.7.3	Gradientenverfahren zur Bestimmung lokaler Maxima	87
7	Methoden zur Lösung kombinatorischer Optimierungsprobleme.	89
7.1	Enumerationsmethode	90
7.2	Branch-and-Bound-Verfahren	91
7.2.1	Die Methode des Branch-and-Bound-Verfahrens . . .	91
7.2.2	Branch-and-Bound-Verfahren für das TSP	92
7.3	Dynamische Programmierung	93
7.4	Greedy-Algorithmus	97
7.4.1	Greedy-Algorithmus für das Münzwechsel-Problem.	97
7.4.2	Greedy-Algorithmus für ein Rucksackproblem.	98
7.4.3	Dijkstra-Algorithmus	99
7.5	Einfache lokale Suche	102
7.5.1	Nachbarschaft einer Lösung.	102
7.5.2	Methode der einfachen lokalen Suche	103
7.6	Tabu-Suche.	106
7.6.1	Einführendes Beispiel (Rucksackproblem)	106
7.6.2	Grundversion der Tabu-Suche	108
7.6.3	Varianten der Tabu-Suche	109
	Literatur.	109
8	Lineare Optimierung	111
8.1	Graphische Methode	111
8.2	Simplexmethode	114
8.2.1	Standard-Maximierungsproblem	114

8.2.2	Schlupfvariable	115
8.2.3	Austauschverfahren	115
8.2.4	Strategie der Simplexmethode	117
9	Multikriterielle Optimierungsverfahren.	121
9.1	Methode der gewichteten Summe	121
9.2	Die ϵ -Constraint-Methode	123
9.3	Pareto-Optimierung mithilfe naturanaloger Optimierungsverfahren	124
10	Komplexität und heuristische/metaheuristische Verfahren	125
10.1	Komplexität	125
10.1.1	O-Notation	126
10.1.2	Beispiel (Suche in einer sortierten Liste)	126
10.1.3	Komplexität von Problemen	127
10.1.4	Polynomielle Algorithmen	128
10.1.5	Entscheidungsprobleme	128
10.1.6	Komplexitätsklassen P und NP	129
10.1.7	Polynomielle Reduzierbarkeit	129
10.1.8	Komplexitätsklasse NP-vollständig	131
10.1.9	NP-schwere Optimierungsprobleme	131
10.2	Heuristisches Verfahren	132
10.3	Metaheuristische Verfahren	133
10.4	Exploitation und Exploration	133
10.5	No Free Lunch Theorem	134
	Literatur	134

Teil III Naturanaloge Optimierungen

11	Physikbasierende Algorithmen	137
11.1	Simulated Annealing	137
11.1.1	Abkühlungsprozess beim Erhärten einer Metallschmelze	138
11.1.2	Simulated-Annealing-Algorithmus	139
11.2	Threshold-Accepting-Algorithmus	142
11.3	Sintflut-Algorithmus	144
11.4	Populationbasierende Algorithmen	145
	Literatur	146
12	Evolutionäre Algorithmen	147
12.1	Biologische Evolution	147
12.2	Genetische Algorithmen	149
12.2.1	Grundversion der genetischen Algorithmen	149
12.3	Varianten der genetischen Algorithmen	155
12.3.1	Varianten von Selektionsverfahren	155
12.3.2	Varianten von Rekombinationen	158
12.3.3	Varianten von Mutationen	159

12.3.4	Varianten der Ersetzung (Replacement)	160
12.4	Permutationscodierung	161
12.4.1	Rekombination für Permutationen	162
12.4.2	Mutationen für Permutationen	164
12.4.3	Beispiel: n-Damen-Problem.	165
12.5	Anwendungen genetischer Algorithmen	166
12.5.1	Optimierung kontinuierlicher Funktionen mit GA	166
12.5.2	Multikriterielle Optimierung mit GA	170
12.6	Evolutionsstrategien.	173
12.6.1	Der Grundalgorithmus der Evolutionsstrategie	174
12.6.2	Initialisierung	175
12.6.3	Rekombination	175
12.6.4	Mutationen	176
12.6.5	Selektion.	183
12.6.6	Abbruch	183
	Literatur.	184
13	Partikelschwarmalgorithmen	185
13.1	Schwarmverhalten	185
13.2	Boids	186
13.3	Grundversion des Partikelschwarmalgorithmus	187
13.3.1	Einführendes Beispiel	188
13.3.2	Grundversion des PSO-Algorithmus	188
13.3.3	Ablauf der Grundversion des PSO.	190
13.4	Varianten des PSO-Algorithmus	191
13.4.1	Maßnahmen beim Verlassen des Suchraumes	191
13.4.2	Nachbarschafts-Topologien	192
13.4.3	Trägheitsparameter.	194
13.4.4	Kontraktionsfaktor	195
13.4.5	Tabelle der wichtigsten Parameter des PSO-Verfahrens	196
13.5	Anwendungsbeispiel (Diagnostik).	196
13.6	Diskrete Partikelschwarmoptimierungen.	196
13.6.1	Binäres PSO-Verfahren	197
13.6.2	DPSO-Verfahren	199
13.7	Multikriterielle Partikelschwarmoptimierung	201
	Literatur.	207
14	Ameisenalgorithmen.	209
14.1	Ameisen in der Natur.	209
14.2	Grundprinzip des Ameisenalgorithmus	210
14.3	Die Grundversion des Ameisenalgorithmus	213
14.4	Der Algorithmus AS.	214
14.5	Unterschied zwischen realen und künstlichen Ameisen	216
14.6	Varianten des Ameisenalgorithmus AS	217

14.6.1	Elitist AS (EAS)	217
14.6.2	Rank based AS (ASrank)	218
14.6.3	MAX-MIN Ant-System (MMAS)	218
14.6.4	Ant Colony System (ACS)	219
14.7	Parameterwerte für ACO-Algorithmen	220
14.8	Anwendungen	220
14.8.1	Rucksackproblem	220
14.8.2	Generalised Assignment Problem	221
14.8.3	Routing in Netzwerken	223
14.8.4	Shortest Common Supersequence Problem	225
	Literatur	230
15	Bienenalgorithmen	231
15.1	Bienen in der Natur	231
15.1.1	Bienenvolk	231
15.1.2	Futtersuche der Bienen	232
15.2	Der BA-Algorithmus	234
15.2.1	Die Grundversion des BA-Algorithmus	234
15.2.2	Analogie zwischen natürlichen und künstlichen Bienen	235
15.2.3	Lokale und globale Suche	236
15.2.4	Anwendungsbeispiel	237
15.3	Der ABC-Algorithmus	239
	Literatur	241
16	Fledermausalgorithmen	243
16.1	Fledermäuse in der Natur	243
16.2	Grundversion des BAT-Algorithmus	244
16.2.1	Parameter des BAT-Algorithmus	244
16.2.2	BAT-Algorithmus in der Grundversion	245
16.2.3	Analogie zwischen natürlichen und künstlichen Fledermäusen	247
16.2.4	BAT-Algorithmus für das Problem des Handlungsreisenden	248
16.3	Binärer BAT-Algorithmus	250
16.4	Multikriterieller BAT-Algorithmus	251
	Literatur	252
17	Künstliche Immunsysteme	253
17.1	Natürliches Immunsystem	253
17.1.1	Angeborenes und erworbenes Immunsystem	254
17.1.2	Affinität	255
17.2	Positive und negative Selektion	256
17.2.1	Thymusmodell	257
17.2.2	Künstliche positive und negative Selektion	257

17.3	Klonaler Selektions-Algorithmus	260
17.3.1	Klonale Selektionstheorie	260
17.3.2	CLONALG für Mustererkennung	262
17.3.3	CLONALG für Optimierung	266
17.4	Immuner-Netzwerk-Algorithmus	270
17.4.1	Die Jernesche Netzwerktheorie	270
17.4.2	Der aiNet-Algorithmus	271
17.4.3	Anwendung (Clusteranalyse)	273
17.4.4	Der opt-aiNet -Algorithmus	274
	Literatur	277
18	Übersicht: Naturanaloge Optimierungen	279
18.1	Naturanaloge Optimierungen in diesem Buch	279
18.2	Übersicht weiterer naturanaloger Optimierungsmethoden	280
	Literatur	281
 Teil IV Neuronale kombinatorische Optimierung		
19	Neuronale Netze	285
19.1	Natürliches neuronales Netz	285
19.2	Das künstliche Neuron	286
19.3	Typen von Aktivierungsfunktionen	288
19.4	Das Perzeptron	288
19.5	Deltaregel	290
19.6	Das mehrschichtige Perzeptron	291
19.7	Klassifikation	293
19.8	Deep Learning	294
19.9	Backpropagation	294
19.10	Varianten der Gradientenverfahren	298
19.11	Ablauf des Backpropagation-Lernalgorithmus	298
19.12	Regression	300
19.13	Under- und Overfittung	301
19.14	Funktionsapproximation	302
19.15	Optimierung von KNN mit naturanalogen Optimierungsmethoden	304
19.16	Netztopologien	307
19.17	Lernen mit künstlichen neuronalen Netzen	307
	Literatur	308
20	Selbstorganisierende Karten	309
20.1	Kohonen-Karte	309
20.2	Einführendes Beispiel (SOM-Algorithmus)	310
20.3	SOM-Lernalgorithmus	311
20.4	Klassifizierung von Daten mit SOM	314
20.5	Lösung des TSP mit der SOM-Methode	315
	Literatur	316

21	Hopfield-Netze	317
21.1	Definition eines Hopfield-Netzes	317
21.2	Aktualisierung in Hopfield-Netzen	318
21.3	Energiefunktion	319
21.4	Speichern von Mustern	320
21.5	Wiederherstellung eines Musters	322
21.6	Hopfield-Algorithmus mit dem Simulated-Annealing-Verfahren	323
21.7	Anwendungen auf Optimierungsprobleme	324
	Literatur	328
22	Reinforcement Learning	331
22.1	Einführung	331
22.2	Menace	332
22.3	Formale Beschreibung von RL	333
22.4	Markovsche Entscheidungsprozesse	335
22.5	Return	336
22.6	Policy	337
22.7	State-Value-Funktion	338
	22.7.1 Definition der State-Value-Funktion	338
	22.7.2 Beispiel der State-Value-Funktion	338
22.8	Action-Value-Funktion	339
22.9	Optimale Policies und optimale Value-Funktionen	340
22.10	Q-Learning	340
22.11	DQN-Algorithmus	343
22.12	REINFORCE-Algorithmus	346
	22.12.1 Policy Gradient Theorem	346
	22.12.2 REINFORCE Algorithmus	347
	22.12.3 Beispiel (Vier Gewinnt)	348
	22.12.4 REINFORCE mit Baseline	349
	Literatur	350
23	Optimierungsmethoden in Deep Learning	351
23.1	Problem der verschwindenden und explodierenden Gradienten	351
23.2	Gradient Clipping	352
23.3	Momentum-Optimierung	352
23.4	Exponentiell gleitender Durchschnitt	354
23.5	RMSProp-Optimierung	354
23.6	Adam-Optimierung	355
	Literatur	356
24	Neuronale Optimierung mit dem Pointer-Netzwerk	357
24.1	Rekurrente neuronale Netze	357
24.2	Einführende Beispiele von RNN	358
24.3	Mathematische Beschreibung des RNN	359

24.4	Backpropagation Through Time	360
24.5	LSTM-Zellen	360
24.6	Seq2seq	362
24.7	Softmax-Funktion	362
24.8	Attention-Mechanismus	363
24.9	Stochastische Policy für das TSP	365
24.10	Pointer-Netzwerk	366
24.11	Trainierbare Zielfunktion für das TSP	367
24.12	Baseline	369
24.13	REINFORCE-Algorithmus für das TSP	369
24.14	Varianten der REINFORCE-Methode für Optimierungsprobleme	370
	Literatur	371
25	Neuronale Optimierung mit Transformer	373
25.1	Transformer	373
25.1.1	Encoder	373
25.1.2	Decoder	379
25.2	Greedy Rollout Baseline	382
25.3	REINFORCE mit Greedy Rollout Baseline	383
25.4	Testphase	384
	Literatur	384
26	Optimierung mit graphischen neuronalen Netzen	385
26.1	Graphische neuronale Netze	385
26.2	Grapheneinbettung	387
26.3	S2V-Einbettung	387
26.4	TSP als Markovscher Entscheidungsprozess	388
26.5	Parametrisierung der Action-Value-Funktion	389
26.6	S2V-DQN-Algorithmus für TSP	390
26.7	Testphase	391
26.8	Weitere Optimierungsverfahren mit GNN	392
	Literatur	392
27	Programmbibliotheken für Machine Learning	393
27.1	Programmbibliothek TensorFlow	393
27.2	Weitere Programmbibliotheken	394
	Literatur	397
	Stichwortverzeichnis	403