Agent-Based Configuration of (Metaheuristic) Algorithms

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Naturwissenschaften (doctor rerum naturalium)
im Fach Informatik

eingerichtet an der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät II
der Humboldt-Universität zu Berlin

von
Frau Master in Sciences Dagmar Monett Díaz
geboren am 03.04.1969 in Havanna, Kuba

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin
Prof. Dr. Jürgen Mlynek

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät II
Prof. Dr. Uwe Küchler

Gutachter:

1. Prof. Dr. Hans-Dieter Burkhard, Humboldt-Universität zu Berlin
2. Prof. Dr. Egmar Rödel, Humboldt-Universität zu Berlin
3. Prof. Dr. Pedro Larrañaga, University of the Basque Country

eingereicht am: 06.10.2004
Tag der mündlichen Prüfung: 25.02.2005

Berichte aus der Informatik

Dagmar Monett Díaz

Agent-Based Configuration of (Metaheuristic) Algorithms

Shaker Verlag
Aachen 2005

Bibliographic information published by Die Deutsche Bibliothek
Die Deutsche Bibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data is available in the internet at http://dnb.ddb.de.

Zugl.: Berlin, Humboldt-Univ., Diss., 2005

Printed in Germany.

ISBN 3-8322-4010-1
ISSN 0945-0807

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen
Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9
Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Zusammenfassung

Diese Arbeit stellt einen neuen, flexiblen Ansatz für die Konfiguration von Algorithmen vor, der besonders die agentenbasierte Konfiguration metaheuristischer Algorithmen berücksichtigt. Metaheuristiken sind heuristische Suchverfahren, die gute Lösungen durch das gezielte Ändern einer Menge von aktuellen Lösungen finden sollen. Sie sind in vielen Anwendungsgebieten erfolgreich eingesetzt worden. Metaheuristiken sind Beispiele für Algorithmen, in denen Parameter so gut wie möglich angepasst werden müssen, wie z.B. genetische Parameter in der Domäne der evolutionären Algorithmen. Allerdings ist die Auswahl der anzupassenden Parameter sowie die anschließende Anpassung und Spezifikation dieser Parameter für konkrete Problemstellungen oft kompliziert. Beides sind anerkannt schwierige Aufgaben im Forschungsgebiet der Metaheuristiken. Idealerweise sind Metaheuristiken selbst anpassungsfähig. Gewöhnlich wird aber die Anpassung von Steuerparametern, die von Natur aus zeitaufwendig ist, durch unzulängliche experimentelle Methoden oder *brute-force*-Mechanismen ausgeführt. Einige wenige Methoden zur Konfiguration metaheuristischer Algorithmen sind in der Literatur schon vorgeschlagen worden. Diese sind aber noch nicht für ein verteiltes Problemlösen geeignet. Andererseits gibt es zu dem Problem der Anpassung von Metaheuristiken sehr wenig publizierte Forschungsergebnisse. Alles in allem bleibt dieses Problem also eine aktuelle offene Forschungsfrage.

Die vorliegende Arbeit beschreibt einen agentenbasierten Ansatz zur Konfiguration von Algorithmen. Der Hauptfokus des Ansatzes, die +CARPS-Architektur (+CARPS: *Multi-Agent System for Configuring Algorithms in Real Problem Solving*), liegt darin, agentenbasierte Verfahren für die Anpassung algorithmischer Parameter anzuwenden. Vor allem wird die Parameterkonfiguration (d.h. die Anpassung der unbekannten Parameter) mittels verteilter, autonomer, kooperierender und spezialisierter Agenten erreicht. Die Hauptidee hinter dem vorgeschlagenen Ansatz liegt in der Vorstellung, Agenten mit der Fähigkeit zur "Anpassung metaheuristischer Parameter" in der Art auszustatten, wie dies ein Experte tun würde. Die agentenbasierte Konfiguration von Algorithmen ist ein passender, robuster und wirksamer Ansatz, der selbstständig das Verfahren der Konfiguration durchführt, wobei die Agenten die Algorithmen automatisch ausführen und konfigurieren.

Die Agenten führen ein Optimierungsverfahren aus. Es handelt sich hier-

bei um ein Verfahren, das Parameterkonfigurationen optimiert. Anfänglich werden Ausgangskonfigurationen, die Startwerte für die freien Parameter enthalten, erzeugt. Dann werden weitere notwendige Initialisierungen ausgeführt, z.B. jene der Agentenkommunikation. Anschließend werden neue Konfigurationen, die näher optimiert werden sollen, mit einem dazu angewendeten Konfigurationsalgorithmus erzeugt. Innerhalb dieses auf kooperativ interagierenden Agenten basierenden Verfahrens, werden potentiel gute Lösungen zwischen den Agenten ausgetauscht. Dies ermöglicht den Agenten jeweils eine neue Perspektive auf den Suchraum. Dieser Austausch von Zwischenergebnissen ist ein geeigneter und wesentlicher Schritt, lokale Optima zu vermeiden. Schließlich werden die besten Lösungen, die gefunden wurden, als Lösung des Konfigurationsprozesses präsentiert.

Die Dissertationsschrift umfaßt drei Hauptteile. Jeder Teil besteht aus mehreren Kapiteln. Der erste Teil beschäftigt sich mit den aus der Literatur bekannten metaheuristischen Ansätzen, sowie mit Gebieten der Künstlichen Intelligenz, die diese Arbeit unterstützen. Die Klassifikation der Beziehungen zwischen Metaheuristiken und Künstlicher Intelligenz ist ebenfalls eingeschlossen, wobei verschiedene Mechanismen beider Bereiche und deren Interaktion vorgestellt werden. Im zweiten Teil, dem Schwerpunkt der Arbeit, wird sowohl die Theorie über die Konfiguration von Metaheuristiken eingeführt, als auch ihre agentenbasierte Automatisierung beschrieben. Die Konzeption, Struktur, Implementierung und Realisation des Multiagenten-Systems, die +CARPS-Architektur, werden innerhalb dieses Teiles der Dissertation behandelt. Im dritten und letzten Teil werden verschiedene Experimente vorgestellt und die praktische Umsetzung des agentenbasierten Ansatzes zusammengefaßt.

+CARPS-Agenten entsprechen die FIPA-Spezifikationen und sind kooperierende JADE-Agenten, die in Java entwickelt wurden. Die stärksten Gründe für die Auswahl der JADE-Plattform waren ihre durchgängige Entwicklungsunterstützung und die anerkannten Vorteile als ein Projekt mit offenem Quell-Code, das den neuesten FIPA-Spezifikationen folgt. Die verteilte Agentenplattform, der Nachrichten-Transportmechanismus und die graphischen Werkzeuge zum Test der Multiagenten-Systeme, um ein paar Eigenschaften zu nennen, waren ebenfalls mitentscheidend.

+CARPS besteht aus verschiedenen Arten von Agenten, die die autonome Konfiguration von metaheuristischen Algorithmen unterstützen. Unter den wichtigsten Tätigkeiten der Agenten sind die folgenden: *user mediators* leiten den Benutzer bei der Anwendung von +CARPS an und helfen ihm bei der Auswahl und Vorgabe von Daten. Sie präsentieren die Ergebnisse in einer dem Anwender verständlichen Weise; *starting configuration builders* und *instantiation strategy managers* bestimmen die Werte für die notwendigen Parameter entweder bei den am Start erzeugten Konfigurationen oder während deren Anpassung; *algorithm configurators* überwachen und steuern den Ablauf des Konfigurationsalgorithmus und wählen passende Parameter für die nächsten Kalkulationen; *algorithm solvers*

führen selbständig die Algorithmen aus, rufen Daten ab und bearbeiten die erhaltenen Ergebnisse; und *solution managers* kontrollieren die Organisation und Klassifizierung der erhaltenen Lösungen, um sie den Benutzern zu präsentieren. Alle Agenten, die in der Architektur mit eingeschlossen werden, sowie ihre Kennzeichnung, Kommunikation und Interaktionsprotokolle werden beschrieben. Die Agenten erlauben es dem Benutzer, verschiedene Funktionen zu delegieren, die er andernfalls allein durchführen müßte. Der Anwender wird dabei weder mit der Komplexität der Algorithmen konfrontiert noch mit der Konfiguration und Anpassung der notwendigen Parameter.

Die Hauptbeiträge dieser Dissertation sind im Folgenden aufgelistet:

- Der Entwurf, die Entwicklung und die Implementierung eines Software-Prototyps, der die Konfiguration von (metaheuristischen) Algorithmen auf der Basis autonomer Agenten unterstützt. +CARPS, der agentenbasierte Ansatz zur Konfiguration von Algorithmen, einschließlich der zu Metaheuristiken, ist beschrieben, implementiert und getestet.

- Die theoretische Beschreibung und die Formalisierung des Konfigurationsproblems, welche die verbesserte Spezifikation und den Entwurf der verschiedenen Agenten sowie deren grundlegender Arbeitsprinzipien und Verhaltensweisen ermöglicht haben.

- Die Implementierung eines *Random-Restart Hill-Climbing* Algorithmus, den einige spezialisierte Agenten während des Konfigurationsverfahrens verwenden, um die Suche nach optimalen Konfigurationen zu automatisieren.

- Die Entwicklung und die Implementierung von neuen Interaktionsprotokollen, die den Kommunikationsbedingungen der Agenten in der Analysedomäne entsprechen.

- Die Konzeption und die Implementierung von Ontologien, Interaktionsprotokollen, Agentenverhalten, und verschiedenen Java-Klassen zur Unterstützung der Infrastruktur, die die agentenbasierte Konfiguration von Algorithmen benötigt.

+CARPS ist auch ein Mehrzwecksystem, in dem Steuerfaktoren von Algorithmen leicht überwacht werden können, was, zum Beispiel für Forscher, die das Verhalten der Parameter in Metaheuristiken studieren wollen, nützlich sein kann. Gleichzeitig ist +CARPS ein mächtiges und nützliches Werkzeug beim Durchführen von Experimenten mit diesen Algorithmen, sowie ein geeigneter Rahmen für das Monitoring der Experimenten.

Die Funktionalität der in dieser Arbeit vorgestellten Agentenarchitektur wird anhand einer Vielzahl von Experimenten veranschaulicht. Als Beispiele praktischer Anwendungen gelang bereits die Schätzung kinetischer Parameter in Prozessen der Copolymerisation mit Hilfe genetischer Algorithmen. Copolymerisationen bieten die Möglichkeit, Eigenschaften von Biomaterialien zu beeinflussen,

mit deren Hilfe die Entwicklung neuer biomedizinischer Substanzen unterstützt werden soll. Außerdem hat die Anpassung einer Evolutionsstrategie dazu geführt, wichtige Aspekte des agentenbasierten Konfigurationsprozesses optimieren zu können.

Der wichtiger Beitrag dieser Dissertation ist die Umsetzung eines agentenbasierten Ansatzes zur Algorithmenkonfiguration durch die +CARPS-Architektur, der eine neue und sinnvolle Alternative zu anderen Ansätzen bildet und der auf verteilten, kollaborativen JADE-Agenten beruht. Die Ergebnisse dieser Dissertation sind nicht nur wegen der vorgestellten konkreten +CARPS Architektur von Bedeutung, sondern auch wegen der konzipierten und implementierten Bausteine für eine verteilte, automatisierte und autonome Konfiguration von Algorithmen.

Abstract

An agent-based approach to the configuration of algorithms including, but not limited to, metaheuristics is proposed in this work. Metaheuristics are algorithmic techniques that look for good solutions by changing a current set of solutions from the search space. They are examples of algorithms where parameters need to be set up as good as possible, like genetic parameters in the Evolutionary Computation domain. Usually, control parameters are set by hand or in the spirit of brute-force mechanisms, which are inherently time-consuming. Yet the selection of the most adequate parameter values is a recognized arduous work in the metaheuristics community; furthermore, not all metaheuristics are auto-adaptive. Some methods for configuring metaheuristic algorithms have been already proposed in the literature. However, the problem of configuring metaheuristics continues being a very difficult problem with very few published research works, and therefore it remains a current open question.

Instead of requiring that users fine-tune metaheuristics' parameters by experimenting, which is costly in human and time resources, this thesis proposes for that purpose an agent-based approach, which is guided by cooperation among agents in a multiagent system. The agents carry out an optimization process: the process of configuring the metaheuristics through the fine-tuning of their parameters. The application of agent-based methods from Artificial Intelligence emerges as a valuable approach because it allows users and developers to delegate functions and efforts to the computers, thus automating or *semi*-automating the configuration of metaheuristics without a human supervision. Consequently, this thesis aims also to develop a flexible and easy-to-use multiagent system for these purposes, the practical aspects being its major contributions.

In pursuing these aims, a multiagent system (i.e. +CARPS: *Multi-Agent System for Configuring Algorithms in Real Problem Solving*) based on collaborative, distributed, FIPA-compliant JADE agents was designed, implemented and tested. +CARPS consists of different types of cooperatives agents that concurrently support the autonomous configuration of metaheuristic algorithms. Among the most important aspects concerning +CARPS agents' activities are the following: *user mediators* interact with the users to retrieve from the system data related to the problems to be solved, to the metaheuristics to be configured, among other information; *starting configuration builders* and *instantiation*

strategy managers determine the values for the parameters to fine-tune by constructing initial configurations and by applying different instantiation strategies, respectively; *algorithm configurators* apply optimization procedures to obtain and improve solutions to the configuration problem; *algorithm solvers* run the metaheuristics with the appropriate input information and retrieve results when their execution is finished; and *solution managers* control the process of organizing and classifying obtained solutions. All types of agents included in the architecture are introduced, as well as their characteristics, communication, and interaction protocols.

Other important contributions of this work are to provide the needed infrastructure to support the agent-based configuration of metaheuristics, as well as to develop a framework in which monitoring of their control factors becomes an easy task. At the same time, the agent architecture can be seen as a powerful tool, useful for conducting experiments when executing metaheuristic algorithms, but, in the first place, as a suitable approach that makes use of agent technology issues to contribute to the configuration of algorithms.

Acknowledgements

"Wir können nicht genug anerkennen,
wie nötig Mitteilung, Beihilfe, Erinnerung und Widerspruch sei,
um uns auf dem rechten Weg zu erhalten
und vorwärts zu bringen."
– Goethe

This doctoral thesis is the result of years of work and studies. Its materialization would not be possible without the support of many people, whose advice and encouragement allowed me to start it and finish it. I want to express my gratitude to all of them here.

My first very special thanks and love go to my parents, my brother, who revised different releases of this thesis, and my family in Cuba, for whom the long separation affected and affects them and me, but never stopped them from encouraging me to walk along this difficult road. My deepest love and thanks also go to my husband, Abel Martín, who patiently trusted me and unconditionally accompanied me during this journey.

A deep gratitude goes also to my supervisor and leader of the Artificial Intelligence Group at Computer Science Department, Humboldt University of Berlin, Prof. Hans-Dieter Burkhard, who gave me the possibility to come to Berlin to do my research and supervised it. I will be always grateful for his advice and helpful contributions during my research.

I appreciate very much the support of Dr. Lylia Esther Cuesta and Dr. Mathias Geldbrich for their exceptional help while revising different versions of the thesis, for their advice, for their friendship.

I want to thank all colleagues and PhD students from the Computer Science Department at the Humboldt University of Berlin with whom I directly or indirectly worked, as well as to those who helped me over my stay. Special mention to Dr. Gabriela Lindemann, who gave me her continuous support since my first visit to Berlin in 1997 and who revised part of the thesis, and to Mirjam Minor also for her comments and for her support.

I also want to thank Prof. Ingo Rechenberg and other colleagues from the Technical University of Berlin for allowing me to present my research at their group and for the helpful discussions that followed.

Thanks also goes to the main sponsors of this research, the German Academic Exchange Service (DAAD), the German Foundation Rosa Luxemburg, and the Woman Support Program from the Humboldt University of Berlin for their scholarships and financial support.

Last but not least, I want to thank all those who never stopped cheering me up and giving me their emotional support, as well as those who helped me during my stay in Germany.

To all of you, thank you very much for allowing me to make this dream come true.

Contents

List of Figures

List of Tables