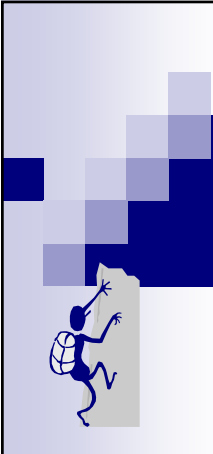


Sistemas de Apoio à Decisão– Optimização

V 1.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005




Métodos modernos de pesquisa e Optimização

Victor Lobo

Introdução

- Problema de **optimização**
 - Dada uma função $f(x)$
 - encontrar o seu óptimo (máximo ou mínimo)
- Problema de **pesquisa**
 - Seja x_0 um *ponto inicial*
 - Entre todos os candidatos x , encontrar um x_n que produz um valor $f(x_n)$ maior (menor) que qualquer outro (logo óptimo)
- Problema de **pesquisa em paralelo**
 - Seja um conjunto de *pontos iniciais*
 - Encontrar o óptimo da função $f(x)$



Cada um faz a sua pesquisa!!!

Importância para os SAD


- **Definir o caminho a tomar** depois de se ter “trabalhado os dados”
 - 1ª Fase: **Analisar** os dados disponíveis
 - Visualização
 - OLAP, relatórios
 - Clustering
 - 2ª Fase: **Prever** a evolução do sistema
 - Regressão
 - Classificação
 - 3ª Fase: **Escolher** a linha de acção “óptima”
 - Algoritmos de PESQUISA E OPTIMIZAÇÃO

Propriedades de $f(x)$

- Domínio
 - \mathfrak{R}^n
 - I^n
 - Sub conjunto de \mathfrak{R}^n ou de I^n
 - Símbolos
- Propriedades de $f(x)$
 - Diferenciável
 - Não diferenciável
- Optimização Matemática
 - Gradiente
- Optimização com restrições
 - Multiplicadores de Lagrange
- Optimização Inteira
 - Investigação operacional
- **Métodos heurísticos**
 - Hill-Climbing
 - Simulated Annealing
 - Algoritmos Genéticos
 - Tabu Search
 - ... e outros...

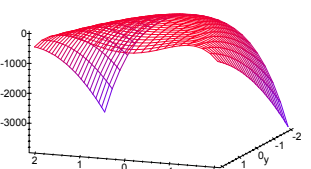
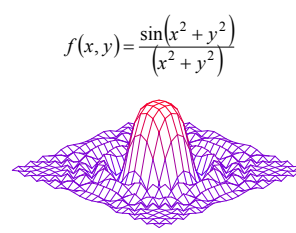
Métodos disponíveis para optimização

- Métodos matemáticos “clássicos”
 - Normalmente métodos de gradiente, por vezes com relaxação
- Método de Monte Carlo
- Stochastic Hill-Climbing
- Simulated Annealing
- Algoritmos Genéticos
- Tabu Search
- Swarm Computing
- Ant Systems
- ...



Tantos algoritmos novos!!!

Exemplos

$$f(x, y) = \frac{\sin(x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)}$$
$$g(x, y) = -100(x^2 - y) + (1 - x)^2$$


Sistemas de Apoio à Decisão– Optimização

V 1.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

Outros Exemplos

■ Problema das N-Rainhas

- Qual a função de optimização
- Problema de satisfação de restrições



$$\begin{cases} X_i = \{1, \dots, N\} \\ X_j \neq X_i \quad \forall j \neq i \\ X_j \neq X_i \pm (j-i) \quad \forall j > i \\ i, j \in \{1, \dots, N\} \end{cases}$$

■ “Assignment Problem”

- Um conjunto de n pessoas é capaz de realizar n tarefas. O custo da pessoa i fazer a tarefa j é c_{ij} . Encontrar a atribuição de tarefas (t_1, \dots, t_n) que minimize o custo

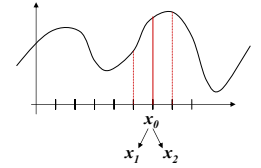
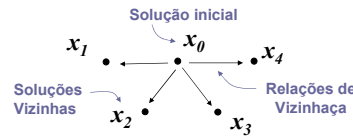
$$\text{mínimo} \sum_{i=1}^n c_{it_i}$$

Uma nova terminologia

Porquê!!!



- Estado → Solução
- Conjunto dos descendentes → Vizinhança
- Espaço de estados → Espaço de soluções



Mais exemplos

“0-1 Knapsack problem”

Um conjunto de “ n ” itens deve ser empacotado numa mochila com capacidade de C unidades. Existem v_i unidades de cada item “ i ” e usa c_i unidades de capacidade. Determine o subconjunto I de itens que podem ser empacotados de modo a maximizar

tal que

$$\begin{aligned} \text{máximo} \sum_{i \in I} v_i \\ \sum_{i \in I} c_i \leq C \end{aligned}$$

Tantos problemas giros!!!



Codificação dos estados e operadores

- Domínios em \mathfrak{R}^n
 - Codificação: vector com um ponto em \mathfrak{R}^n
 - Cálculo dos descendentes
 - Orientada: Método do gradiente
 - Não orientada: Adicionar vector aleatório por exemplo gaussiano
- Domínios simbólicos
 - Problema das N-rainhas
 - Exemplos de codificação
 - Vector de inteiros de 1 a N sem repetições
 - Exemplo do operador
 - Mudar duas das posições seleccionados aleatoriamente

Mais outro exemplo

■ Coloração de um grafo

- Um grafo é definido por um conjunto de nós, alguns dos quais estão ligados entre si através de arcos. Dois nós ligados por um arco são designados por adjacentes. O problema da coloração de um grafo é atribuir cores a cada um dos nós de tal modo que dois nós adjacentes não tenham a mesma cor.
- “O objectivo é encontrar o número mínimo de cores capazes de colorir um grafo.”

Método do gradiente

- Seja uma função $f(x_1, \dots, x_n)$ derivável.

$$X = X_0 \pm \eta \nabla f(X) \Big|_{X=X_0}$$

- O mínimo de $f(x_1, \dots, x_n)$ é dado por
- O máximo de $f(x_1, \dots, x_n)$ é dado por

$$\begin{cases} x_i^{t+1} = x_i^t - \eta \frac{\partial f(X)}{\partial x_i} \Big|_{X=X^t} \\ i = 1, \dots, n \wedge t = 0, \dots, T \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_i^{t+1} = x_i^t + \eta \frac{\partial f(X)}{\partial x_i} \Big|_{X=X^t} \\ i = 1, \dots, n \wedge t = 0, \dots, T \end{cases}$$

Matemática!!!



Sistemas de Apoio à Decisão– Optimização

V 1.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

Método do Gradiente

Problema: maximizar $f(X)$ em que $f(X)$ é derivável

Seleccionar uma solução inicial $X_0 \in \mathbb{R}^n$

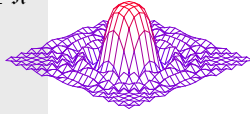
repita

$$X = X_0 + \eta \nabla f(X) \Big|_{X=X_0}$$

se $f(X) > f(X_0)$ então $X_0 = X$

até critério de paragem

X_0 é a solução.

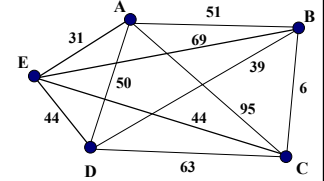


Exemplo do caixeiro viajante

■ Consideremos o espaço de soluções representados pela sequência de 6 letras, em que só a primeira e a última são repetidas.

■ O conjunto de vizinhança definida pela troca de duas letras

■ Considere o ponto inicial $ABCDEA$



Hill-Climbing (ou stochastic hill-climbing)



Solução

$ADBCEA$ ou $AECBDA$

Hill-Climbing

Problema: maximizar $f(s)$

Seleccionar uma solução inicial $s_0 \in S$

repita

Seleccionar aleatoriamente $s \in N(s_0)$ /* $N(s_0)$ é a vizinhança de s_0 */

se $f(s) > f(s_0)$

então $s_0 = s$; Contador = 0;

senão Contador = Contador + 1

até critério de paragem

s_0 é a solução.



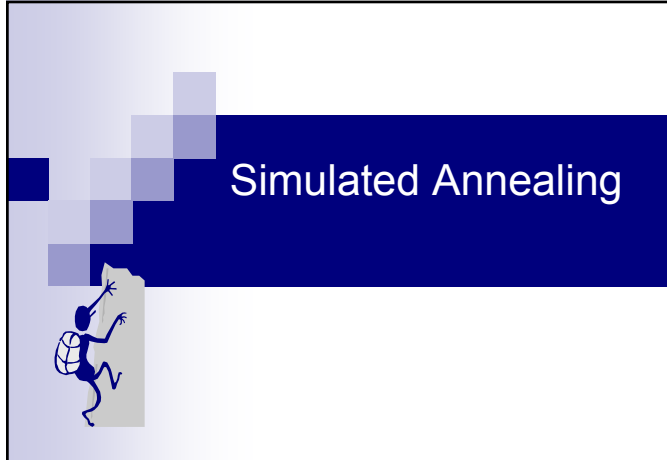
Problemas com o Hill-Climbing

■ Pára nas seguintes situações

- Máximos locais
- Planaltos
- Arestas.

Sistemas de Apoio à Decisão– Optimização

V 1.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005



Algoritmo de Metropolis (1953)

- Desenvolvido para simular a evolução de um sistema físico quente que tende para o estado de equilíbrio térmico.
- Em cada passo do algoritmo, um átomo do sistema é sujeito a um pequeno deslocamento aleatório.
- Calcula-se a variação ΔE da energia do sistema.
 - Se $\Delta E < 0$ o deslocamento é aceite. Se não o deslocamento só será aceite com uma probabilidade

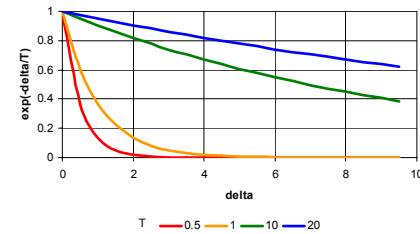
$$p(\Delta E) = e^{-\frac{\Delta E}{T}}$$

- onde T é a temperatura

Kirkpatrick (1983)

“When optimising a very large system (i.e. a system with many degrees of freedom), instead of “always” going downhill, try to go downhill “most of the time”.

Função $\exp(-\delta/T)$



Annealing

- Na física da matéria condensada refere-se como “annealing” o processo que se segue:
 - Um sólido num banho quente é aquecido, aumentando a temperatura até um valor máximo. A essa temperatura, todo o material encontra-se na fase líquida e as partículas arrumam-se aleatoriamente
 - A temperatura do banho quente é arrefecida suavemente, permitindo que todas as partículas se arrumem no estado de menor energia dessa estrutura.
- Em Português:
 - Arrefecimento Simulado, Resfriado Simulado, ...

Simulated annealing

Problema: minimizar $f(s)$

Selecionar uma solução inicial $s_0 \in S$; uma temperatura inicial $T > 0$; e uma função de redução de temperatura α .

repita

repita

Selecionar aleatoriamente $s \in N(s_0)$ /* $N(s_0)$ é a vizinhança de s_0 */

$\delta = f(s) - f(s_0)$

se $\delta < 0$ então $s_0 = s$; Contador = 0;

senão

seja x um número aleatório entre 0 e 1

se $x < \exp(-\delta/T)$ então $s_0 = s$; Contador = Contador + 1

até Contador = Nmax

$T = \alpha(T)$

até critério de paragem
 s_0 é a solução.



Sistemas de Apoio à Decisão– Optimização

V 1.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005



Operadores

- **Seleção** para reprodução
 - Uniforme
 - Roleta
 - Integral
 - Torneio
- **Reprodução** ou Cross-over
 - Depende do problema
 - Cruzamento 1 ponto
 - Cruzamento de n pontos
- **Mutação**
 - Depende do problema
 - Inversão
 - Troca de dois genes
- **Substituição**
 - Completa
 - Parcial com selecção
 - Uniforme
 - Roleta
 - Torneio

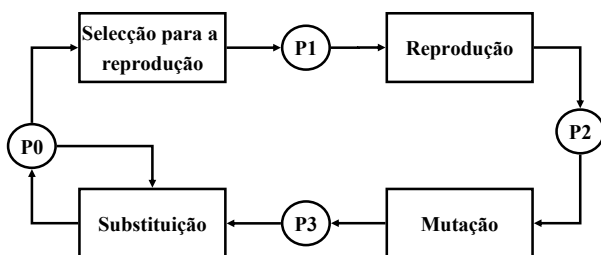
Algoritmos Genéticos

- Baseado na simulação da dinâmica de populações
- A pesquisa é baseada em populações
- Terminologia
 - *População* - conjunto de descrições de indivíduos
 - *Cromossoma* - descrição de um indivíduo
 - *Gene* - Posição dentro do cromossoma
 - *Alelo* - Valor existente no gene
 - *fitness* - medida de adaptação do indivíduo ao meio ambiente
- Parte da área de “Evolutionary Computation”

Seleção para a reprodução

- A hipótese de um indivíduo ser seleccionado para a reprodução é função do seu fitness
- Roleta
 - Escolha aleatória e directamente proporcional ao seu fitness
- Integral
 - Respeita a muito rigidamente o fitness relativo
- Torneio
 - Dois indivíduos seleccionados aleatoriamente disputam um torneio. O melhor passa.

Esquema básico



Um exemplo muito simples

- Encontrar o máximo da função $f(x) = x^2$ no domínio $[0, 31]$
- Exemplo de cromossomas
 - [00000] → $x = 0$
 - [01100] → $x = 12$
 - [11101] → $x = 29$
- Qual a função de fitness?
 - $f(x)$
- Como codificar?
 - Utilizaremos uma codificação binária de 5 bits

Sistemas de Apoio à Decisão– Optimização

V 1.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

Processo de selecção para o exemplo (1ª geração)

Desc.	Crom.	X	f(x)	$\frac{f_i}{\sum f}$	$\frac{f_i}{f}$	Selec.
1	01101	13	169	0.14	0.58	1
2	11000	24	576	0.49	1.97	2
3	01000	8	64	0.06	0.22	0
4	10011	19	361	0.31	1.23	1
Soma				1.00	4.0	
Média				0.25	1.0	
Máximo				0.49	1.97	

Processo de cruzamento para o exemplo (1ª para 2ª geração)

Cromos.	Cônjuge	Ponto de Cruzamento	Nova População	Valor x	f(x)
01101	2	4	01100	12	144
11000	1	4	11001	25	625
11000	4	2	11011	27	729
10011	3	2	10000	16	256
Soma					1754
Média					439
Máximo					729

Cruzamento

- 1 Ponto de cruzamento
 - Sejam dois cromossomas de dimensão "N". Seleccione-se aleatoriamente um ponto de corte do cromossoma (1...(N-1)). Cada um dos dois descendentes recebe informação genética de cada um dos pais

Exemplo

Cr 1 - 11101001

Cr 2 - 10101101

Seja o ponto de cruzamento 4

Cr 1 - 11101001

Cr 2 - 10101101

Descendentes

Desc 1 - 11101101

Desc 2 - 10101001

Processo de selecção para o exemplo (2ª geração)

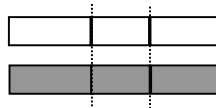
Desc.	Crom.	X	f(x)	$\frac{f_i}{\sum f}$	$\frac{f_i}{f}$	Selec.
1	01100	12	144	0,08	0,33	0
2	11001	25	625	0,36	1,43	1
3	11011	27	729	0,42	1,66	2
4	10000	16	256	0,15	0,58	1
Soma				1.00	4.0	
Média				0,25	1	
Máximo				0,42	1,66	

Cruzamento - Outro exemplo

- 2 pontos de cruzamento
 - Semelhante ao caso anterior mas agora com a escolha de dois pontos de corte

Exemplo

Dois cromossomas pais



Dois descendentes



Efeito de passagem de uma geração para outra

1ª Geração:

- 24, 19, 13, 8

2ª Geração

- 27, 25, 16, 12

.

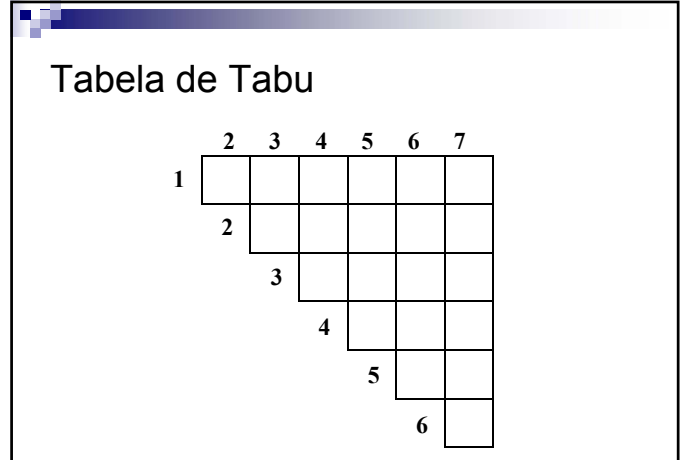
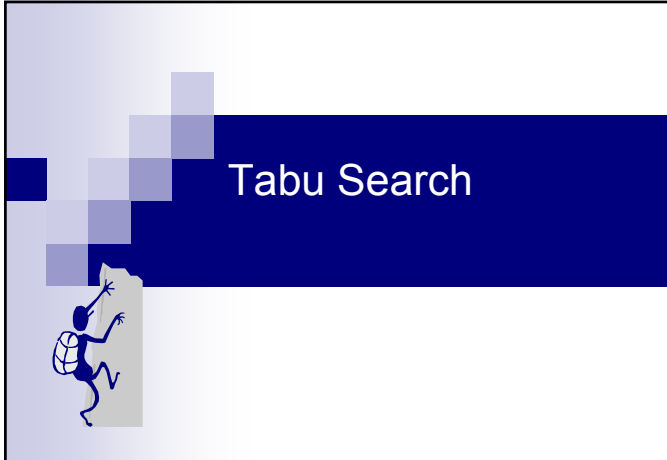
.

n-ésima Geração (c/ mutação)

- 31,31,30,27

Sistemas de Apoio à Decisão– Optimização

V 1.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005



Tabu Search

- Algoritmo de pesquisa com um único ponto
- Tem memória
 - Memoriza os últimos movimento
 - Tabela de Tabu
- Proposto por Fred Glover (1986, 1990)

Iteração 0

2	5	7	3	4	6	1
---	---	---	---	---	---	---

$f(X) = 10$

↓

2	4	7	3	5	6	1
---	---	---	---	---	---	---

$f(X) = 16$

Tabela de Tabu

	2	3	4	5	6	7
1						
	2					
		3				
			4			
				5		
					6	

N(X)	Δf
5,4	6
7,4	4
3,6	2
2,3	0
4,1	-1

←

Exemplo do “Tabu Search”

- Pretende-se construir um módulo de material isolante composto por 7 camadas de diferentes materiais
- Codificação

2	5	7	3	4	6	1
---	---	---	---	---	---	---
- Operador de vizinhança
 - Trocar dois módulos entre si

2	5	7	3	4	6	1
---	---	---	---	---	---	---

↪

2	4	7	1	5	6	3
---	---	---	---	---	---	---

Iteração 1

2	4	7	3	5	6	1
---	---	---	---	---	---	---

$f(X) = 16$

↓

2	4	7	1	5	6	3
---	---	---	---	---	---	---

$f(X) = 18$

Tabela de Tabu

	2	3	4	5	6	7
1						
	2					
		3				
			3			
				5		
					6	

N(X)	Δf
3,1	2
2,3	1
3,6	-1
7,1	-2
6,1	-4

←

Sistemas de Apoio à Decisão– Optimização

V 1.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

Iteração 2

2	4	7	1	5	6	3
---	---	---	---	---	---	---

$f(X) = 18$

↓

4	2	7	1	5	6	3
---	---	---	---	---	---	---

$f(X) = 14$

Tabela de Tabu

	2	3	4	5	6	7
1		3				
2						
3						
4			2			
5						
6						

N(X)	Δf	
1,3	-2	T
2,4	-4	←
7,6	-6	
4,5	-7	T
5,3	-9	

Bibliografia

- Colin R, Reeves, Modern Heuristic Techniques for Combinatorial Problems, McGraw-Hill
- David E. Goldberg, Genetic Algorithms in search Optimization & Machine Learning, Addison Wesley

Iteração 3 - Aspiration

4	2	7	1	5	6	3
---	---	---	---	---	---	---

$f(X) = 14$

↓

5	2	7	1	4	6	3
---	---	---	---	---	---	---

$f(X) = 20$

Tabela de Tabu

	2	3	4	5	6	7
1		2				
2			3			
3						
4			1			
5						
6						

N(X)	Δf	
4,5	6	T ←
5,3	2	
7,1	0	
1,3	-3	T
2,6	-6	

Iteração 4

5	2	7	1	4	6	3
---	---	---	---	---	---	---

$f(X) = 20$

Tabela de Tabu

	2	3	4	5	6	7
1		1				
2			2			
3						
4			3			
5						
6						

N(X)	Δf	
7,1	0	←
4,3	-3	
6,3	-5	
5,4	-6	T
2,6	-8	