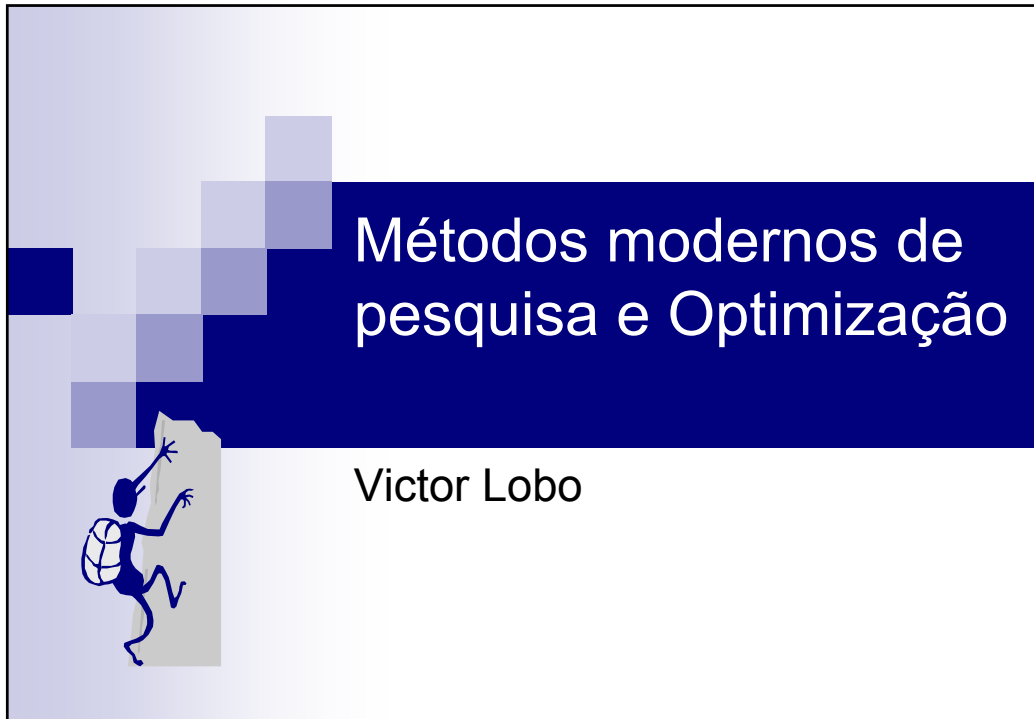


# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005



## T picos

- Introdu o
- M todos matem ticos
- M todo de Monte Carlo
- Hill- Climbing
- Simulated Annealing
- Algoritmos Gen ticos
- Tabu Search



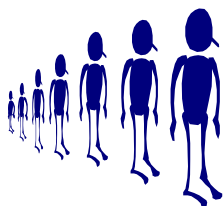
# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Introduç o

### ■ Problema de optimizaç o

- Dada uma funç o  $f(X)$
- encontrar o seu  ptimo (m ximo ou m nimo)



Cada um faz a sua pesquisa!!!

### Problema de pesquisa

- Seja um *ponto inicial*
- Encontrar o  ptimo da funç o  $f(X)$

### Problema de pesquisa

- Seja um conjunto de *pontos iniciais*
- Encontrar o  ptimo da funç o  $f(X)$

## Propriedades de $f(X)$

### ■ Dom nio

- $\mathfrak{R}^n$
- $\mathbb{I}^n$
- Sub conjunto de  $\mathfrak{R}^n$  ou de  $\mathbb{I}^n$
- S mbolos

### ■ Propriedades de $f(X)$

- Deriv vel
- N o deriv vel

### ■ Optimizaç o Matem tica

- Gradiente

### ■ Optimizaç o com restriç es

- Multiplicadores de Lagrange

### ■ Optimizaç o Inteira

- Investigaç o operacional

### ■ M todos heur sticos

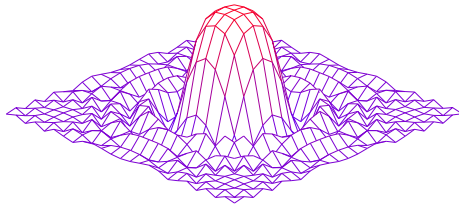
- Hill- Climbing
- Simulated Annealing
- Algoritmos Gen ticos
- Tabu Search

# Cap.7 - Optimizaç o

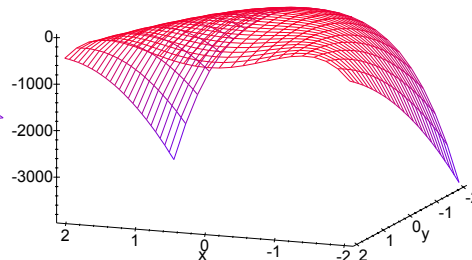
V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Exemplos

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



$$g(x, y) = -100(x^2 - y) + (1 - x)^2$$



## Outros Exemplos

### ■ Problema das N-Rainhas

- Qual a funç o de optimizaç o
- Problema de satisfaç o de restriç es



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

### ■ “Assignment Problem”

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

$$\text{m nimo} \sum_{i=1}^n c_{it_i}$$

# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Mais outro exemplo

- Colora o de um grafo
  - Um grafo   definido por um conjunto de n s, alguns dos quais est o ligados entre si atrav s de arcos. Dois n s ligados por um arco s o designados por adjacentes. O problema da colora o de um grafo   atribuir cores a cada um dos n s de tal modo que dois n s adjacentes n o tenham a mesma cor.
  - “O objectivo   encontrar o n mero m nimo de cores capazes de colorir um grafo.”

## 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*

$$\begin{aligned} &\text{m ximo } \sum_{i \in I} v_i \\ &\sum_{i \in I} c_i \leq C \end{aligned}$$

Tantos problemas giros!!!



# Cap.7 - Optimização

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Uma nova terminologia

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



## 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

# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## M todo do gradiente

- Seja uma funç o  $f(x_1, \dots, x_n)$  deriv vel.

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

- O m nimo de  $f(x_1, \dots, x_n)$    dado por
- O m ximo de  $f(x_1, \dots, x_n)$    dado por

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

Matem tica!!!



## M todo do Gradiente

Problema: maximizar  $f(X)$  em que  $f(X)$    deriv vel

Seleccionar uma soluç o inicial  $X_0 \in \mathfrak{R}^n$

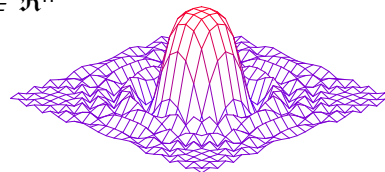
**repita**

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

**se**  $f(X) > f(X_0)$  **ent o**  $X_0 = X$

**at  crit rio de paragem**

$X_0$    a soluç o.



# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Hill-Climbing

Problema: maximizar  $f(s)$

Seleccionar uma soluç o inicial  $s_0 \in S$

repita

Seleccionar aleatoriamente  $s \in N(s_0)$

\*/

/\*  $N(s_0)$    a vizinhança de  $s_0$

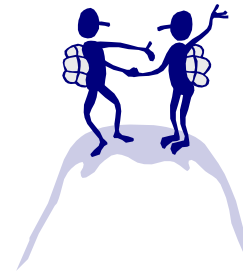
se  $f(s) > f(s_0)$

ent o  $s_0 = s$ ; Contador = 0;

sen o Contador = Contador + 1

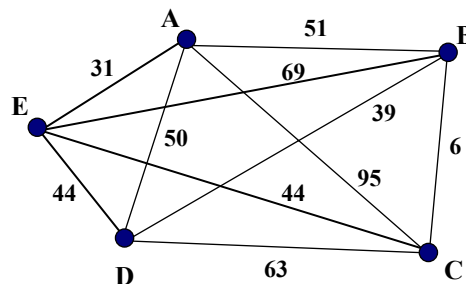
at  crit rio de paragem

$s_0$    a soluç o.



## Exemplo do caixeiro viajante

- Consideremos o espaço de soluç es representados pela sequ ncia de 6 letras, em que s  a primeira e a  ltima s o repetidas.
- O conjunto de vizinhança definida pela troca de duas letras
- Considere o ponto inicial  
*ABCDEA*



# Cap.7 - Optimizaçã

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Soluçã

*ADBCEA ou AECBDA*

## Problemas com o Hill-Climbing

- Pára nas seguintes situações
  - Máximos locais
  - Planaltos
  - Arestas.



# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## 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”.

## Annealing

- Na f sica da m teria condensada refere-se como “annealing” o processo que se segue:
  - Um s lido num banho quente   aquecido, aumentando a temperatura at  um valor m ximo. A essa temperatura, todo o material encontra-se na fase l quida e as part culas arruma-se aleatoriamente
  - A temperatura do banho quente   arrefecida suavemente, permitindo que todas as part culas se arrumem num estado “ground” que corresponde ao estado de menor energia dessa estrutura.

# Cap.7 - Optimizaç o

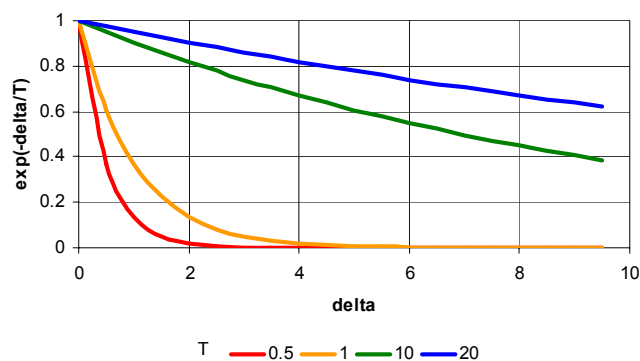
V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Algoritmo de Metropolis (1953)

- Desenvolvido para simular a evoluç o de um sistema f sico quente que tende para o estado de equil brio t rmico.
- Em cada passo do algoritmo, um  tomo do sistema   sujeito a um pequeno deslocamento aleat rio.
- Calcula-se a variaç o  $\Delta E$  da energia do sistema.
  - Se  $\Delta E < 0$  o deslocamento   aceite. Se n o o deslocamento s  ser  aceite com uma probabilidade

□ onde T   a temperatura  $p(\Delta E) = e^{-\frac{\Delta E}{T}}$

## Funç o $\exp(-\delta/T)$



# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Simulated annealing

Problema: minimizar  $f(s)$

Seleccionar uma soluç o inicial  $s_0 \in S$ ; uma temperatura inicial  $T > 0$ ; e uma funç o de reduç o de temperatura  $\alpha$

repita

repita

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

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

se  $\delta < 0$  ent o  $s_0 = s$ ; Contador = 0;

sen o

seja  $x$  um n mero aleat rio entre 0 e 1

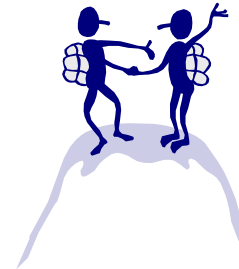
se  $x < \exp(-\delta/T)$  ent o  $s_0 = s$ ; Contador = Contador + 1

at  Contador = Nmax

$T = \alpha(T)$

at  crit rio de paragem

$s_0$    a soluç o.



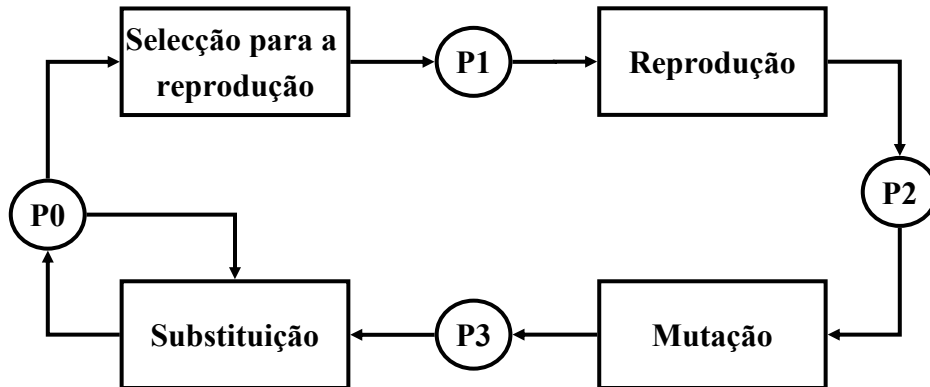
## Algoritmos Gen ticos

- Baseado na simulaç o da din mica de populaç es
- A pesquisa   baseada em populaç es
- Terminologia
  - *Populaç o* - conjunto de descriç es de indiv duos
  - *Cromossoma* - descriç o de um indiv duo
  - *Gene* - Posiç o dentro do cromossoma
  - *Alelo* - Valor existente no gene
  - *fitness* - medida de adaptaç o do indiv duo ao meio ambiente

# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Esquema b sico



## Um exemplo muito simples

- Encontrar o m ximo da funcc o  $f(x) = x^2$  no dom nio  $[0, 31]$
- Qual a funcc o de fitness?
  - $f(x)$
- Como codificar?
  - Utilizaremos uma codifica o bin ria de 5 bits
- Exemplo de cromossomas
  - $[00000] \rightarrow x = 0$
  - $[01100] \rightarrow x = 12$
  - $[11101] \rightarrow x = 29$

# Cap.7 - Optimização

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Operadores

### ■ Selecção para reprodução

- Uniforme
- Roleta
- Integral
- Torneio

### ■ Reprodução

*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*

## Selecção 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.

# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Processo de selec o para o exemplo

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	
M�dia				0.25	1.0	
M�ximo				0.49	1.97	

## Cruzamento

### ■ 1 Ponto de cruzamento

- Sejam dois cromossomas de dimens o "N". Selecciona-se aleatoriamente um ponto de corte do cromossoma (1...(N-1)). Cada um dos dois descendentes recebe informa o gen tica 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



# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

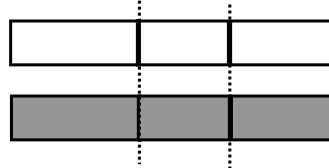
## Cruzamento - Outro exemplo

### ■ 2 pontos de cruzamento

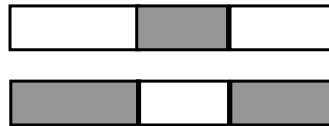
Semelhante ao caso anterior mas agora com a escolha de dois pontos de corte

### ■ Exemplo

Dois cromossomas pais



Dois descendentes



## Processo de cruzamento para o exemplo

Cromos.	C�njuge	Ponto de Cruzamento	Nova Popula�o	Valor x	f(x)
0 1 1 0 1	2	4	0 1 1 0 0	12	144
1 1 0 0 0	1	4	1 1 0 0 1	25	625
1 1 0 0 0	4	2	1 1 0 1 1	27	729
1 0 0 1 1	3	2	1 0 0 0 0	16	256
Soma					1754
M�dia					439
M�ximo					729

# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Tabu Search

- Algoritmo de pesquisa com um  nico ponto
- Proposto por Fred Glover
- Tem mem ria
  - Memoriza os  ltimos movimento
  - Tabela de Tabu

## Exemplo do “Tabu Search”

- Pretende-se construir um m dulo de material isolante composto por 7 camadas de diferentes materiais
- Codifica o
- Operador de vizinhan a
  - Trocar dois m dulos entre si



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

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





# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Tabela de Tabu

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

## Iteraç o 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)  $\Delta f$

5,4	6
7,4	4
3,6	2
2,3	0
4,1	-1



# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Itera o 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						
4		3				
5			5			
6				6		

N(X)	$\Delta f$
3,1	2
2,3	1
3,6	-1
7,1	-2
6,1	-4

## Itera o 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			5			
6				6		

N(X)	$\Delta f$
1,3	-2
2,4	-4
7,6	-6
4,5	-7
5,3	-9

T
T

# Cap.7 - Optimizaç o

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Itera o 3 - Aspira o

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	N(X)	$\Delta f$	
1		2					4,5	6	T ←
2			3				5,3	2	
3							7,1	0	
4				1			1,3	-3	T
					5		2,6	-6	
						6			

## Itera o 4

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

$$f(X) = 20$$

Tabela de Tabu

	2	3	4	5	6	7	N(X)	$\Delta f$	
1		1					7,1	0	←
2			2				4,3	-3	
3							6,3	-5	
4				3			5,4	-6	T
					5		2,6	-8	
						6			

# Cap.7 - Optimizaçã

V 3.0, V.Lobo, EN/ISEGI, 2005

## Bibliografia

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