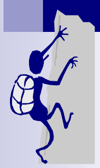
# Cap.7 - Optimização

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

## Métodos modernos de pesquisa e Optimização



Victor Lobo

## Tópicos

- Introdução
- Métodos matemáticos
- Método de Monte Carlo
- Hill- Climbing
- Simulated Annealing
- Algoritmos Genéticos
- Tabu Search


## Introdução

- Problema de optimização
  - Dada uma função *f(X)*
  - encontrar o seu óptimo (máximo ou mínimo)


Problema de pesquisa
- Seja um *ponto inicial*
- Encontrar o óptimo da função *f(X)*

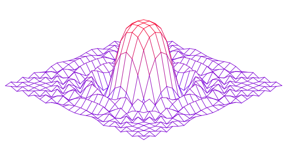
Problema de pesquisa
- Seja um conjunto de *pontos iniciais*
- Encontrar o óptimo da função *f(X)*

## Propriedades de f(X)

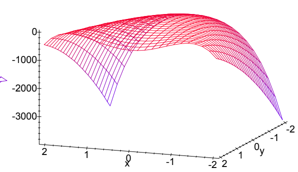
- Domínio
  - $\Re^n$
  - $I^n$
  - Sub conjunto de $\Re^n$ ou de $I^n$
  - Símbolos
- Propriedades de f(X)
  - Derivável
  - Não derivável
- Optimização Matemática
  - Gradiente
- Optimização com restrições
  - Multiplicadores de Lagrange
- Optimização Inteira
  - Investigação operacional
- Métodos heurísticos
  - Hill- Climbing
  - Simulated Annealing
  - Algoritmos Genéticos
  - Tabu Search

## Exemplos

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

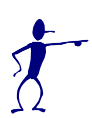


$$g(x,y)=-100\left(x^2-y\right)+(1-x)^2$$




## Outros Exemplos

- Problema das N-Rainhas
  - Qual a função de optimização
  - Problema de satisfação de restrições



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

- "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 $(t_1,\ldots,t_n)$que minimize o custo

$$mínimo \sum_{i=1}^{n} c_{it_i}$$

## 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."

## 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 items que podem ser empacotados de modo a maximizar*

$$máximo \sum_{i \in I} v_i$$

*tal que*

$$\sum_{i \in I} c_i \le C$$


## Uma nova terminologia

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


## Codificação dos estados e operadores

- Domínios em $\Re^n$
  - Codificação: vector com um ponto em $\Re^n$
  - 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

## Método do gradiente

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

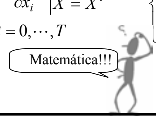
$$X = X_0 \pm \eta \nabla f(X)\Big|_{X=X_0}$$

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

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

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

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




## Método do Gradiente

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

Seleccionar uma solução inicial $X_0 \in \Re^n$

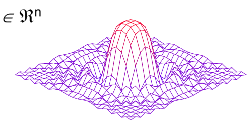
**repita**

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

**se** $f(X) > f(X_0)$ **então** $X_0 = X$

**até** *critério de paragem*

$X_0$ é a solução.

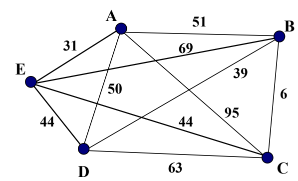


## Hill-Climbing

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 s0 */
  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.

## 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*




## Solução

*ADBCEA ou AECBDA*

## Problemas com o Hill-Climbing

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

## 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 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 arruma-se aleatoriamente
  - A temperatura do banho quente é arrefecida suavemente, permitindo que todas as partículas se arrumem num estado “ground” que corresponde ao estado de menor energia dessa estrutura.

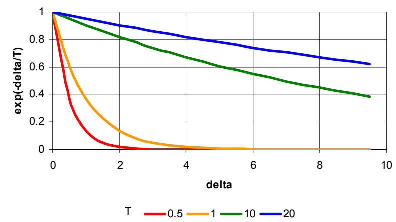
# Cap.7 - Optimização

V 3.0, 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 $\Delta E$ da energia do sistema.
  - Se $\Delta E < 0$ o deslocamento é aceite. Se não o deslocamento só será aceite com uma probabilidade
  - onde T é a temperatura $p(\Delta E) = e^{-\frac{\Delta E}{T}}$

## Função exp(-δ/T)




## Simulated annealing

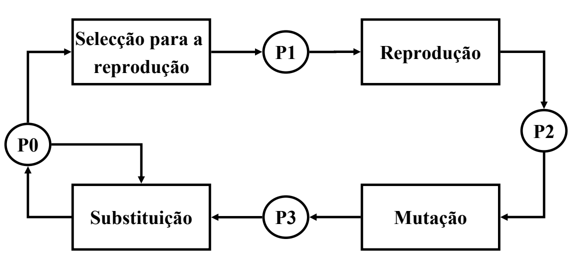
Problema: minimizar f(s)
Seleccionar uma solução inicial s0 ∈ S; uma temperatura inicial T > 0; e uma função de redução de temperatura α

```
repita
    repita
        Seleccionar aleatoriamente s ∈N(s0)    /* N(s0) é a vizinhança de s0 */
        δ = f(s) - f(s0)
        se δ < 0 então s0 =  s; Contador = 0;
            senão
                seja x um um número aleatório entre 0 e 1
                se x < exp(- δ/T) então s0 =  s ; Contador = Contador + 1
    até Contador = Nmax
    T = α(T)
até critério de paragem
s0 é a solução.
```

## 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 individuo ao meio ambiente*

## Esquema básico




## Um exemplo muito simples

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

## 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.

## Processo de selecção para o exemplo

| Desc. | Crom. | X | *f(x)* | $\frac{f_i}{\sum f}$ | $\frac{f_i}{\bar{f}}$ | 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 | |

## 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

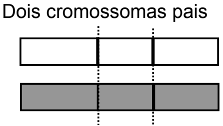
Desc 2 - 10101001

## 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

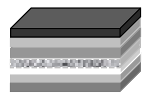
| Cromos. | Cônjuge | Ponto de Cruzamento | Nova População | Valor x | f(x) |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 1 1 0 1 | 2 | 4 | 0 1 1 0 0 | 12 | 144 |
| 1 1 0 0 0 | 1 | 4 | 1 1 0 0 1 | 25 | 625 |
| 1 1 0 0 0 | 4 | 2 | 1 1 0 1 1 | 27 | 729 |
| 1 0 0 1 1 | 3 | 2 | 1 0 0 0 0 | 16 | 256 |
| Soma | | | | | 1754 |
| Média | | | | | 439 |
| Máximo | | | | | 729 |

## Tabu Search

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

## 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 |

## Tabela de Tabu

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

## 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) | $\Delta f$ |
|---|---|
| 5,4 | 6 |
| 7,4 | 4 |
| 3,6 | 2 |
| 2,3 | 0 |
| 4,1 | -1 |

## 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 | | | | | | |
| 4 | | | | 3 | | |
| 5 | | | | | | |
| 6 | | | | | | |

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

## 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) | $\Delta f$ | |
|---|---|---|
| 1,3 | -2 | T |
| 2,4 | -4 | |
| 7,6 | -6 | |
| 4,5 | -7 | T |
| 5,3 | -9 | |

## Iteração 3 - Aspiração

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 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) | $\Delta f$ | |
|---|---|---|
| 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) | $\Delta f$ | |
|---|---|---|
| 7,1 | 0 | |
| 4,3 | -3 | |
| 6,3 | -5 | |
| 5,4 | -6 | T |
| 2,6 | -8 | |

## Bibliografia


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