

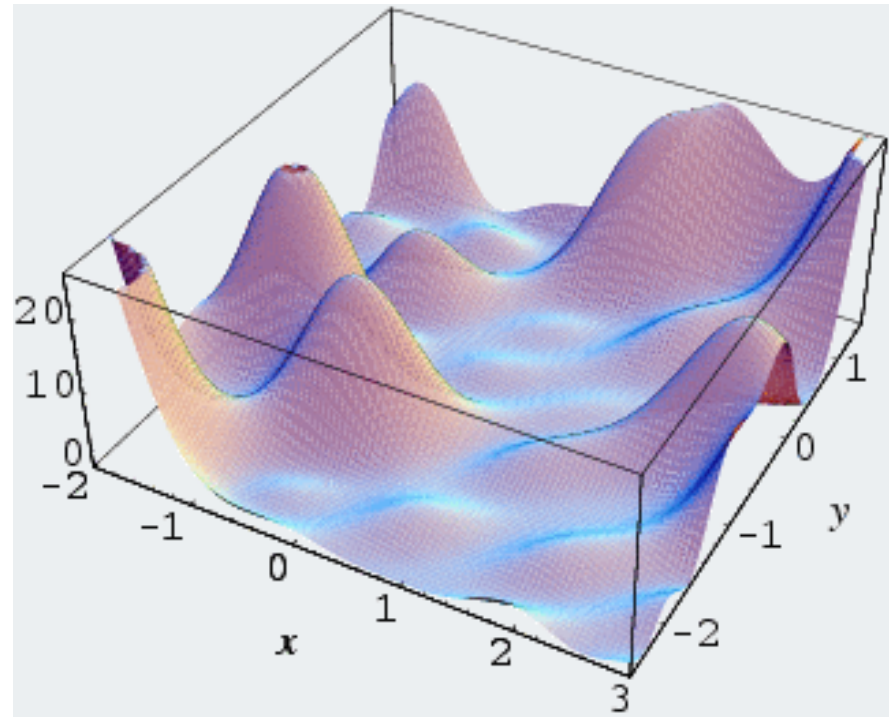
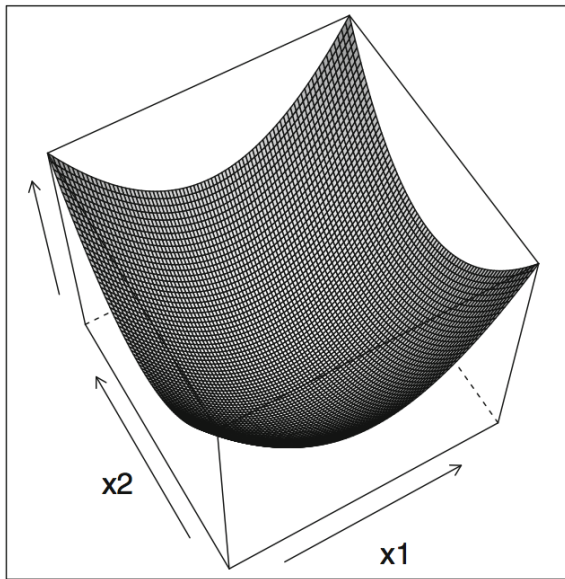
Otimização

OBJECTIVOS:

- Introdução à Resolução de Problemas que envolvam uma otimização

Otimização

•pretende-se “otimizar” (minimizar ou maximizar) um ou mais **objetivos**. Cada solução válida está associada a um ou mais objetivos, existindo soluções óptimas (locais ou globais) e soluções de qualidade diversa (interessantes, razoáveis, fracas, etc...)



Objetivos:

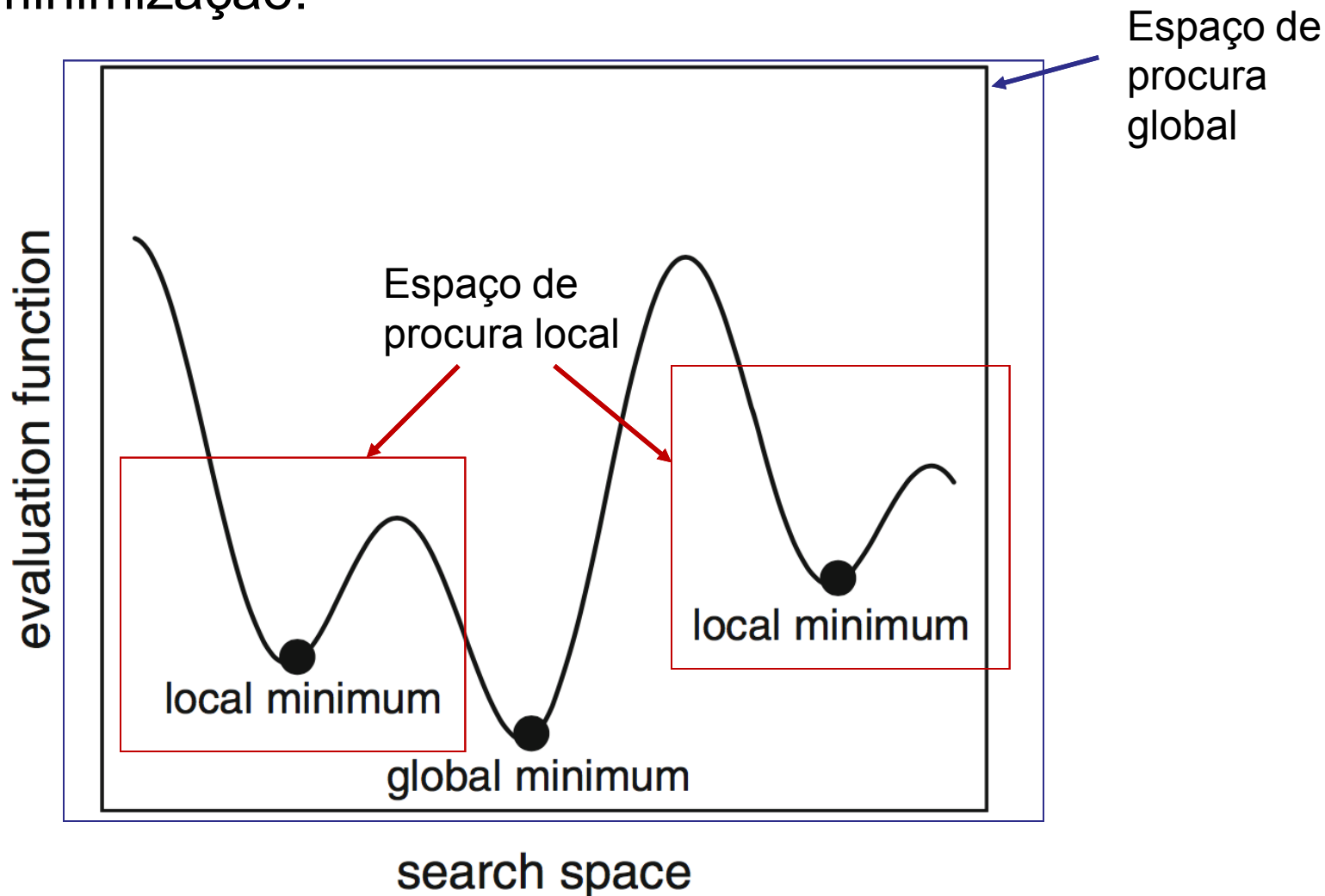
- Assume-se que cada transição de estado implica uma determinada quantidade ou quantidades (custo, benefício, gasto, distância, ...).
- Dependendo do tipo de quantidade, o objetivo é **maximizar** ou **minimizar** algo.

Exemplos:

- Custo unitário para cada movimento de um bloco no problema das caixas (Blocks) – objetivo: minimizar movimentos.
- Encontrar caminho entre 2 cidades da Roménia – objetivo: minimizar distância, minimizar custo de combustível, maximizar o valor turístico da viagem, ...
- Elaborar horários, minimizando a ocupação de salas e maximizando a compactação de aulas (evitando furos).
- Sentar convidados num casamento, maximizando relações boas e minimizando conflitos.

Objetivos:

- Procura/ótimo local versus procura/ótimo global, exemplo de minimização:





Exemplo: Problema max sin

Seja x_i uma sequência de números binários (0 ou 1) com comprimento de D . Pretende-se maximizar o valor de f , de acordo com:

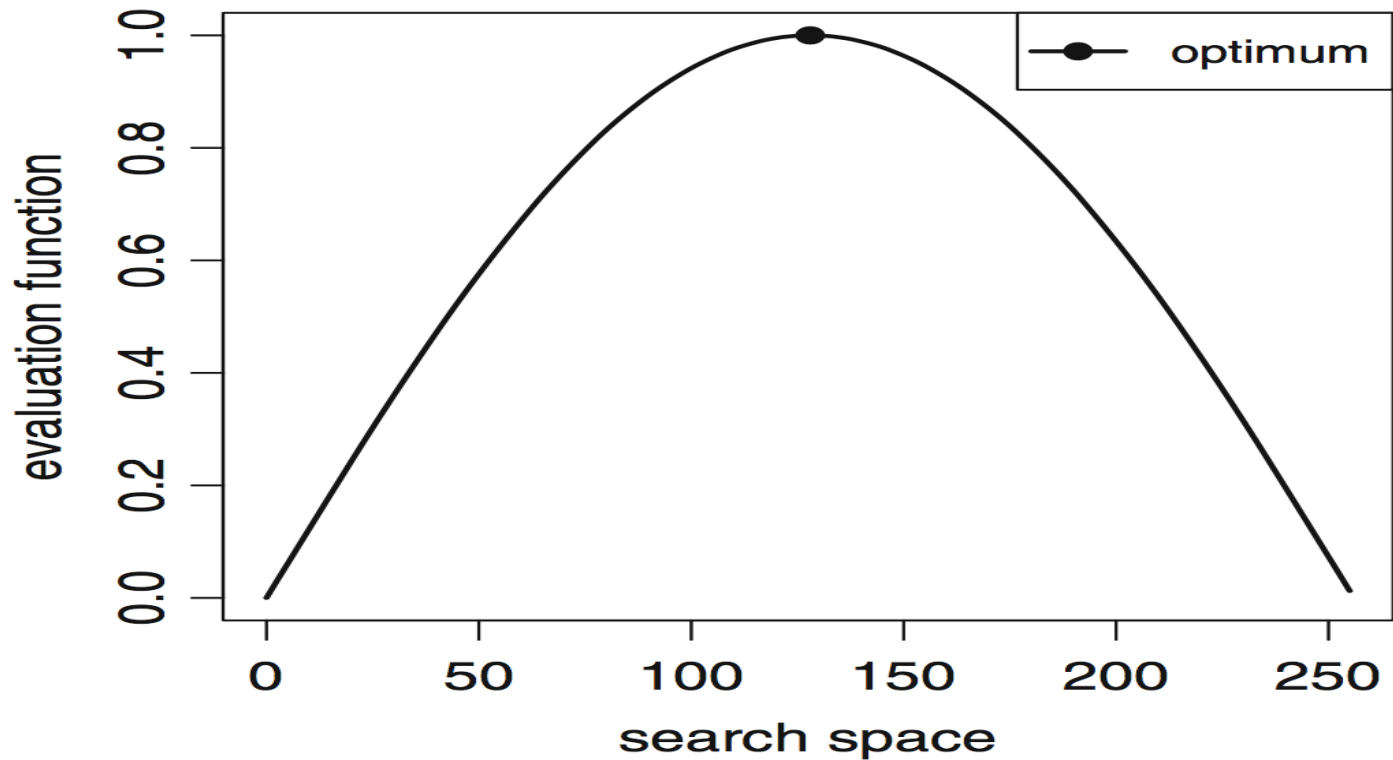
$$x' = \sum_{i=1}^D x_i 2^{i-1}$$
$$f_{\max \sin}(\mathbf{x}) = \sin\left(\pi \frac{x'}{2^D}\right)$$

Onde x' é a representação inteira de x_i (por exemplo: para $x_i=[0,1,1,1]$, $D=4$ e $x'=7$).

Q1: Qual sequência binária ótima para $D=4$?

Exemplo: Problema max sin

Para $D=8$, se eixo dos x for x' , tem-se:



O valor ótimo é: $x_i=[1,0,0,0,0,0,0,0]$, $x'=128$, $f(x')=1.0$.

Métodos/Algoritmos de Otimização:

- Baseados em **Procura Cega**: depth-first, breadth-first, Monte-Carlo, ... (analizados na aula passada)
- Baseados em **Procura e Heurísticas**: best-first search, A^* , IDA*, RBFS
- **Iterativos**:
 - baseados numa **única solução** a melhorar (procura local): Hill-climbing, Stochastic Hill-climbing, Simulated Annealing, Tabu Search, ...
 - baseados numa **população de soluções** (procura global): Evolutionary Computation (Genetic and Evolutionary Algorithms), Differential Evolution, Particle Swarm Optimization, Estimation of Distribution Algorithm, ...

Métodos Iterativos

- Também conhecidos por **Otimização Moderna** ou **Metaheurísticas**.
- Parte-se de **uma solução ou população** de soluções iniciais.
- Cada solução **S** tem uma dada forma de representação (conjunto de números, lista de estados, árvore,
- Para cada solução, é possível medir a qualidade (objetivo) via uma função de **avaliação/fitness/eval**: $f(\mathbf{S})$.
- A pesquisa **é iterativa**, via uma procura guiada, onde novas soluções são criadas a partir da solução ou população atual.

Métodos Iterativos de Otimização Moderna

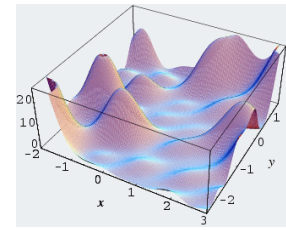
Algorithm 1 Generic modern optimization method

```
1: Inputs:  $f, C$                                 ▷  $f$  is the evaluation function,  $C$  includes control parameters
2:  $S \leftarrow initialization(C)$                                 ▷  $S$  is a solution or population
3:  $i \leftarrow 0$                                 ▷  $i$  is the number of iterations of the method
4: while not  $termination\_criteria(S, f, C, i)$  do
5:    $S' \leftarrow change(S, f, C, i)$                                 ▷ new solution or population
6:    $B \leftarrow best(S, S', f, C, i)$                                 ▷ store the best solution
7:    $S \leftarrow select(S, S', f, C, i)$                                 ▷ solution or population for next iteration
8:    $i \leftarrow i + 1$ 
9: end while
10: Output:  $B$                                 ▷ the best solution
```

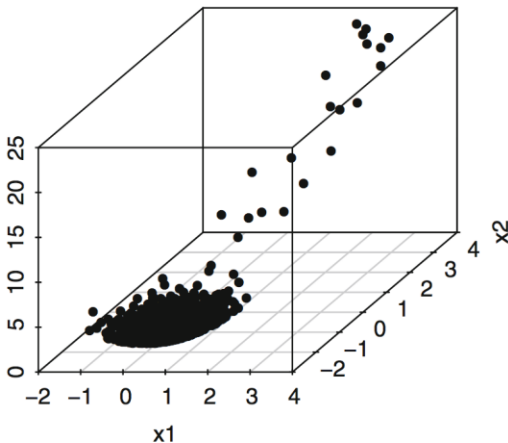
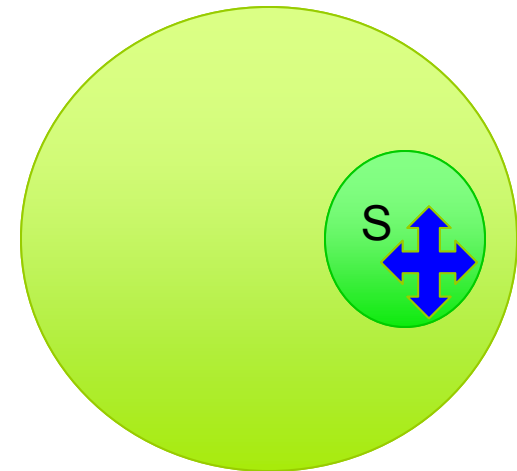
Métodos Iterativos

- **Single-state**: procura sobretudo local, partem de uma solução inicial que é melhorada
- **Population-based**: procura mais global, partem de uma população de soluções.
- **Vantagens**: **métodos genéricos**, usam pouco conhecimento do domínio (tipicamente de modo indireto, via a função de avaliação), facilmente aplicáveis a qualquer problema, tendem a encontrar boas soluções (ou de qualidade) com um uso razoável de esforço computacional.
- **Desvantagens**: não garantem que a solução ótima (global) é encontrada.

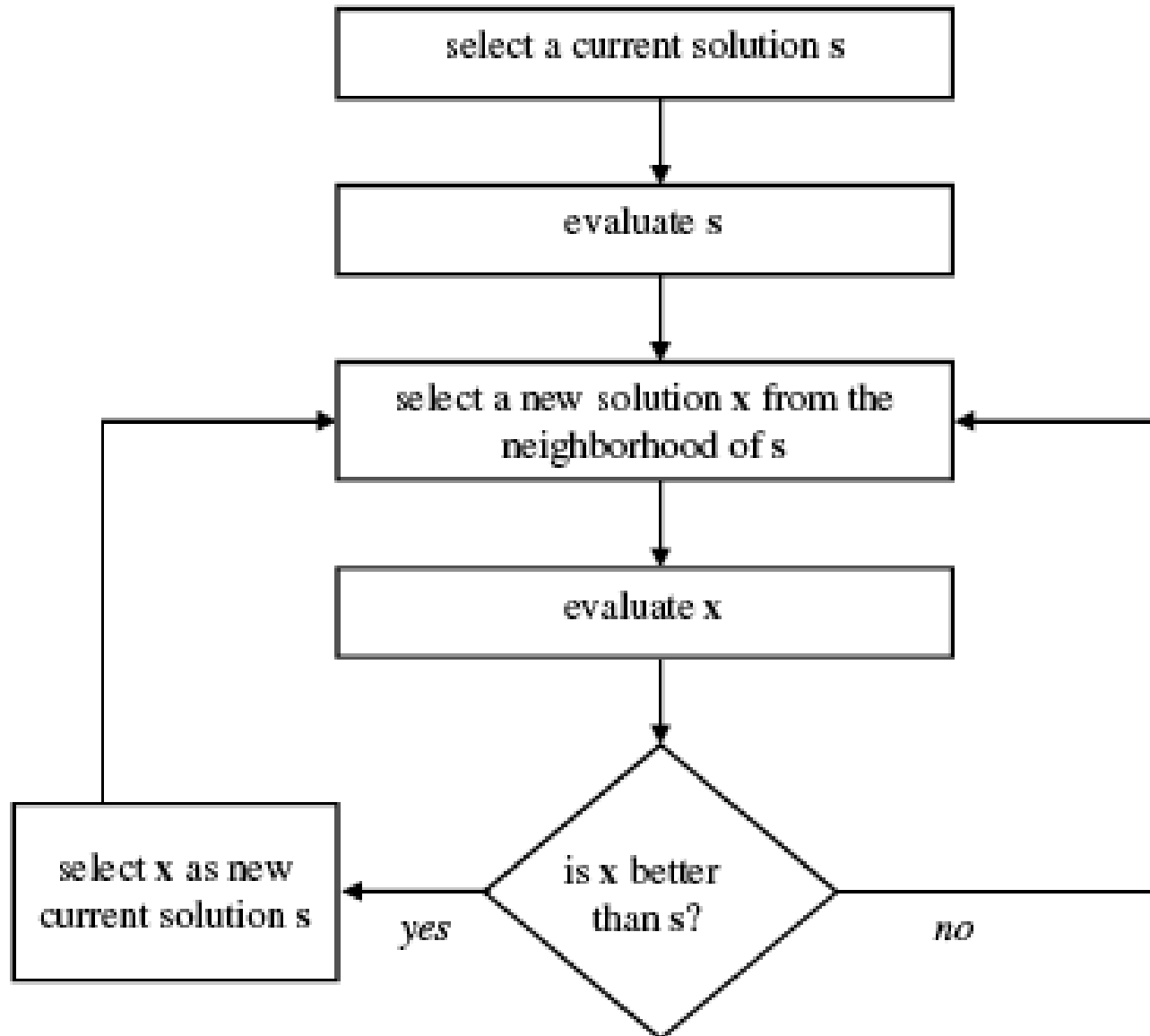
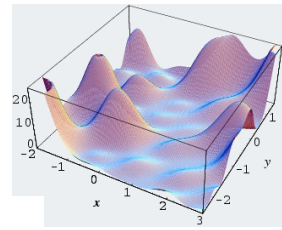
Hill Climbing



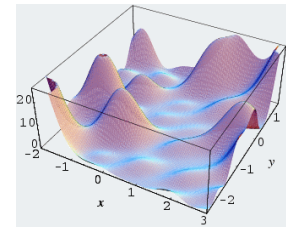
- **performs local search**, searches from a given initial point (S)
- + easy to implement;
- - **may get stuck in local minima/maxima;**
- **Algorithms/Variants:**
 - Gradient descent;
 - Stochastic Hill-climbing;
 - Simulated Annealing;
 - Tabu search
 - ...



Simple Hill Climbing



Simple Hill Climbing



Algorithm 2 Pure hill climbing optimization method

- 1: **Inputs:** S, f, C \triangleright S is the initial solution, f is the evaluation function, C includes control parameters
 - 2: $i \leftarrow 0$ \triangleright i is the number of iterations of the method
 - 3: **while** not *termination_criteria*(S, f, C, i) **do**
 - 4: $S' \leftarrow \text{change}(S, C)$ \triangleright new solution
 - 5: $B \leftarrow \text{best}(S, S', f)$ \triangleright best solution for next iteration
 - 6: $S \leftarrow B$ \triangleright deterministic select function
 - 7: $i \leftarrow i + 1$
 - 8: **end while**
 - 9: **Output:** B \triangleright the best solution
-

Complexidade Algorítmica

- O método de hill climbing tem uma complexidade proporcional ao número de iterações: $O(N) \times O(\text{Eval}(S))$



Valor em geral constante

- Não garante a obtenção do valor ótimo.
- O pure hill climbing pode ficar preso em mínimos locais.
- Variantes: **Stochastic Hill Climbing**, com o parâmetro Prob, onde a nova solução é aceite se $\text{Prob} < \text{random}(0,1)$ ou se é melhor do que a solução atual.
- O Stochastic Hill Climbing é menos propenso a ficar preso em mínimos locais.

Criação de um SBC para Optimização via Hill Climbing

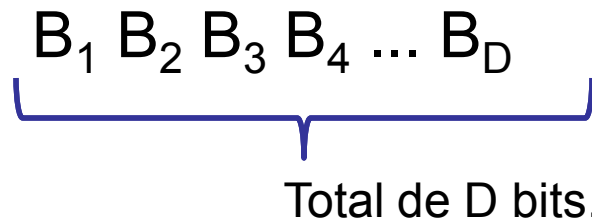
1. Pensar numa forma Prolog para representação de uma solução **S**.
2. Definir uma função de avaliação da qualidade da solução: **eval(S,Q)**
3. Definir uma função que com base numa solução atual cria outra na sua vizinhança local:
change(S1,S2)

Representação de uma solução **S**

- A ideia é com base em **S** conseguir ter uma solução que faça sentido para o problema a analisar.
- Diversas possibilidades: números binários, inteiros, reais, mistura de binários com inteiros e reais, árvores, gramáticas,

Representação de uma solução S

- Representação binária com uma dimensão de D bits



onde B_i é 0 ou 1.

Exemplo:

- Escolher uma equipa qualquer de seres humanos para um dado projeto, de entre a Ana, Carlos, Iva e Rui ($D=4$), exemplos de soluções:
 - 1,0,1,0 (Ana e Iva)
 - 1,0,1,1 (Ana, Iva e Rui)
 - 0,1,1,1 (Carlos, Iva e Rui)

Representação de uma solução S

- Representação com inteiros e dimensão D

$$\underbrace{N_1 \ N_2 \ N_3 \ N_4 \ \dots \ N_D}_{\text{Total de D inteiros.}}$$

onde $N_i=0,1,2,3,\dots$

Exemplo:

- Escolher o preço (em euros) para $D=5$ produtos, preço entre 1 e 100:
 - 5,10,83,99,4
 - 100,1,90,45,34

Função de Avaliação da Solução $\text{eval}(S)$

- Função que devolve um valor numérico com a qualidade da solução S , algo a minimizar ou maximizar.
- Em muitos problemas, tem-se:

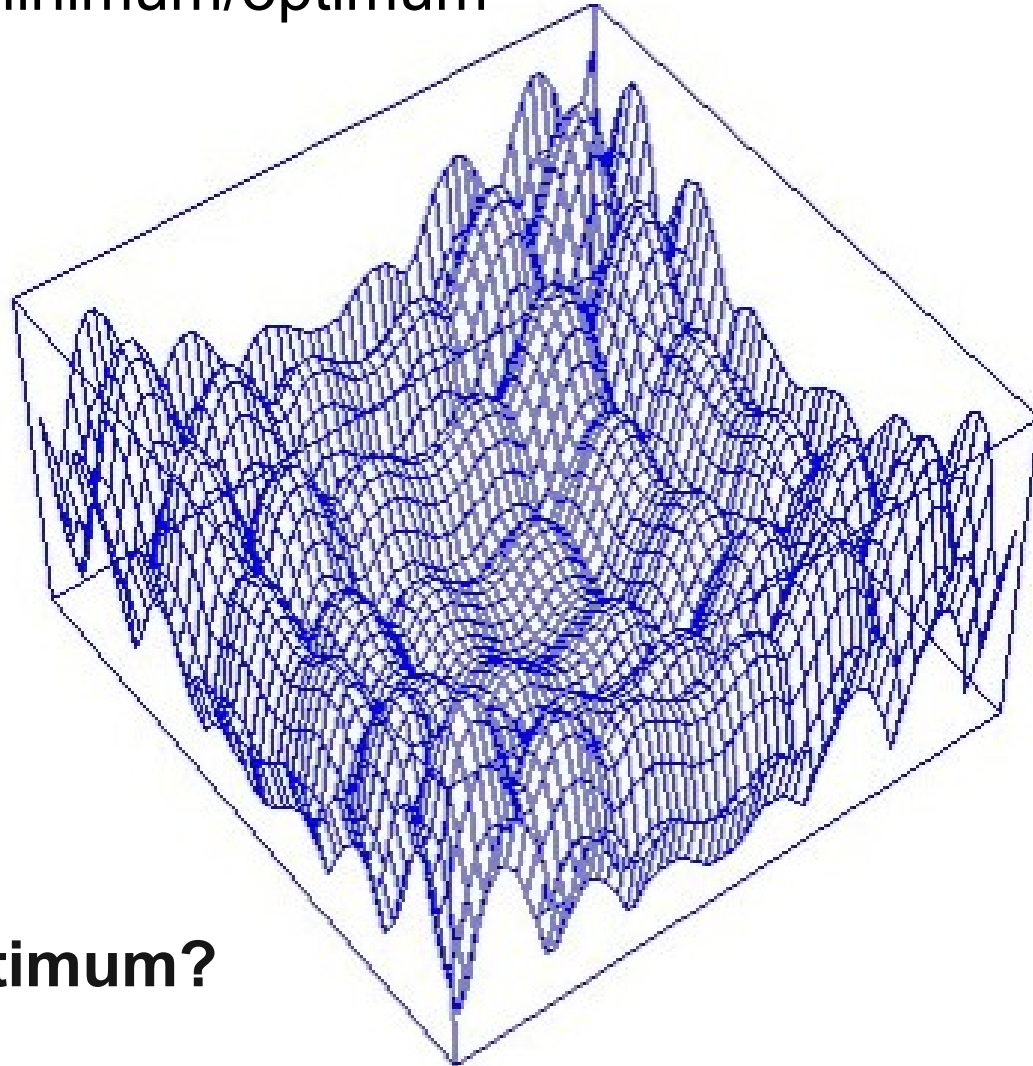
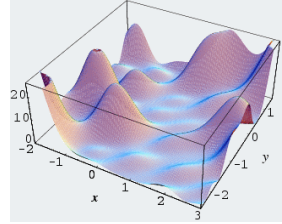
$$\text{eval}(S) = \text{objetivo}(S) - \text{penalização}(S)$$

- Exemplo:

$$\text{eval}(S) = \text{lucro}(S) = \text{ganho}(S) - \text{custo}(S)$$

> Evaluation function

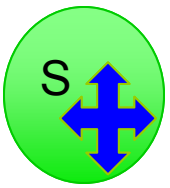
- Local vs Global minimum/optimum



- What is the optimum?

Soluções inválidas (restrições)

- Por vezes uma solução pode não ser válida. Para lidar com estas soluções existem 2 possibilidades (entre outras):
 - **Death Penalty:** atribuir uma avaliação proibitiva (demasiado má).
 - **Reparar:** transformar uma solução inválida em válida (**melhor**)
- Exemplo: Escolher visitar até 3 cidades, de entre um total de 5. Se a representação for binária (0 – não visita, 1 visita), podemos ter estas soluções
 - 1,0,0,0,0 -> solução válida
 - 1,0,1,1,0 -> solução válida.
 - 1,0,1,1,1 -> solução inválida. O que fazer?
 - $\text{eval}(1,0,1,1,1) = 1.0\text{Inf}$ (“infinito”, se objetivo é minimizar).
 - Uma estratégia de reparação: selecionar as 3 primeiras cidades a contar da esquerda para a direita:
1,0,1,1,1 -> reparar -> 1,0,1,1,0



Vizinhança local: $\text{change}(S1, S2)$

- Função que com base em $S1$, cria uma nova solução $S2$ que está na "vizinhança" de $S1$.
- Função determinística (alteração sempre igual) ou estocástica (perturbação aleatória de um parâmetro de $S1$).

Exemplos estocásticos:

- Solução binária $S1$: escolher um bit de modo aleatório e inverter o seu valor.
- Solução de inteiros $S1$: escolher um inteiro de modo aleatório e com 50% de probabilidade aumentar ou diminuir esse inteiro em 1 unidade.
- Solução de reais $S1$: escolher um valor real de modo aleatório e perturbá-lo, adicionando um valor aleatório.

Hill Climbing

```
% hill climbing
% Prob=0 is pure hill climbing, Prob>0 means Stochastic Hill Climbing
% S0 is the initial solution, Control is a list with the number of iterations,
verbose in console, probability and type of optimization.
hill_climbing(S0,[Iter,Verbose,Prob,Opt],S1):-
    eval(S0,E0),
    show(0,Verbose,S0,E0,_,_),
    hill_climbing(S0,E0,0,Iter,Verbose,Prob,Opt,S1).

hill_climbing(S,_,Iter,Iter,_,_,_,S).
hill_climbing(S1,E1,I,Iter,Verbose,Prob,Opt,SFinal):-
    change(S1,SNew),
    best(Prob,Opt,S1,E1,SNew,_,S2,E2),
    I1 is I+1,
    show(I1,Verbose,S1,E1,S2,E2),
    hill_climbing(S2,E2,I1,Iter,Verbose,Prob,Opt,SFinal).
```

Hill Climbing

```
demo:- hill_climbing([a,b,c],[20,1,0.5,max],S),write(S).

% assumes eval(Solution,Result)
% assumes change(S1,S2)

% return SR, the best value of S1 and S2: SR (solution) and ER (eval)
best(Prob,Opt,S1,E1,S2,E2,SR,ER):-
    eval(S2,E2),
    best_opt(Prob,Opt,S1,E1,S2,E2,SR,ER).

best_opt(Prob,_,_,_,S2,E2,S2,E2):-
    random(X), % random from 0 to 1,
    X < Prob. % accept new solution

best_opt(_,Opt,S1,E1,S2,E2,SR,ER):- % else, select the best one
    ( (Opt=max,max_list([E1,E2],ER));(Opt=min,min_list([E1,E2],ER)) ),
    ( (ER==E1,SR=S1); (ER==E2,SR=S2) ).

% show evolution:
show(final,Verbose,S1,E1,_,_):-
    Verbose>0,
    write('final:'),write(' S:'),write(S1),write(' E:'),write(E1),nl.
show(0,Verbose,S1,E1,_,_):-
    Verbose>0,
    write('init:'),write(' S0:'),write(S1),write(' E0:'),write(E1),nl.
show(I,Verbose,S1,E1,S2,E2):-
    0 is I mod Verbose,
    write('iter:'),write(I),write(' S1:'),write(S1),write(' E1:'),
    write(E1),write(' S2:'),write(S2),write(' E2:'),write(E2),nl.
show(_____,_____).
```