#### Celso Carneiro Ribeiro

# Introdução aos Modelos e Métodos de Otimização em Pesquisa Operacional

Parte III – Heurísticas



Operador Nacional do Sistema Elétrico

2004

#### Parte III – Heurísticas

- Origens
- Motivação
- Algoritmos construtivos
- Métodos de melhoria ou de busca local
- Metaheurísticas:
  - Algoritmos genéticos
  - GRASP, ...
- Aplicações:
  - Programação de tabelas de campeonatos
  - Engenharia de tráfego e roteamento na Internet

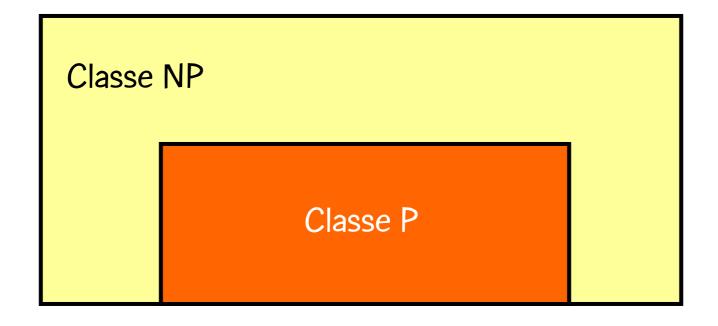
### **Origens**

- Algoritmos aproximados para o problema do caixeiro viajante: métodos construtivos, busca local 2-opt, heurística de Lin-Kernighan (1973)
- Técnicas de inteligência artificial para problemas de busca em grafos:
  - Demonstração automática de teoremas, trajeto de robôs, problemas de otimização vistos como busca em grafos
  - Algoritmo A\* ("versão" IA de B&B): Nilsson (1971)
  - Aplicações pioneiras no SE brasileiro (anos 70): modelos TANIA (expansão da transmissão) e VENUS (planejamento da expansão)

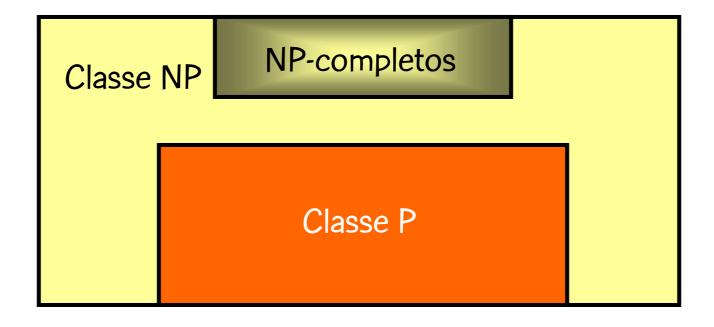
Visão simplificada do "mundo" dos problemas de decisão:

Classe P

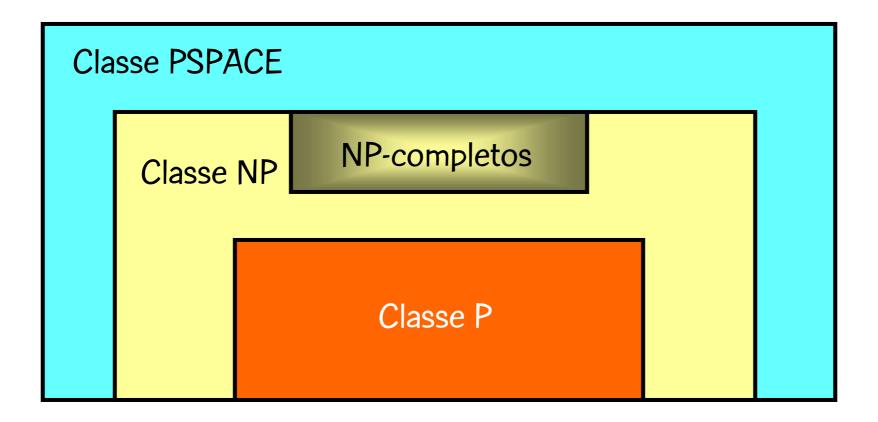
Visão simplificada do "mundo" dos problemas de decisão:



Visão simplificada do "mundo" dos problemas de decisão:



Visão simplificada do "mundo" dos problemas de decisão:



- Como tratar na prática os problemas NP-completos?
- Métodos exatos de complexidade super-polinomial (branch-and-bound, cortes, enumeração, programação dinâmica): se for necessário e se o porte dos problemas assim o permitir.
- 2. Processamento paralelo: clusters e grids permitem acelerações significativas na prática, utilizando recursos computacionais básicos e com custo reduzido.

- Como tratar na prática os problemas NP-completos?
- 3. Heurísticas: qualquer método aproximado projetado com base nas propriedades estruturais ou nas características das soluções dos problemas, com complexidade reduzida em relação à dos algoritmos exatos e fornecendo, em geral, soluções viáveis de boa qualidade (sem garantia de qualidade)
  - Métodos construtivos
  - Busca local
  - Metaheurísticas

- Avanços no estudo e desenvolvimento de heurísticas buscam:
  - Resolver problemas maiores
  - Resolver problemas em tempos menores
  - Obter melhores soluções
- Heurísticas e metaheurísticas permitem resolver problemas de grande porte em tempos realistas, fornecendo sistematicamente soluções ótimas ou muito próximas da otimalidade:
  - Exemplo: problema do caixeiro viajante com milhões de cidades

### Bibliografia

- N. Nilsson, "Problem-solving methods in artificial intelligence", 1971
- N. Nilsson, "Principles of artificial intelligence", 1982
- J. Pearl, "Heuristics: Intelligent search strategies for computer problem solving", 1985
- E. Lawler, J. Lenstra, A. Rinnooy Kan e D. Shmoys (eds.),
   "The traveling salesman problem", 1985
- C. Reeves (ed.), "Modern heuristic techniques for combinatorial problems", 1993

#### Bibliografia

- J. Teghem e M. Pirlot (eds.), "Optimisation approchée en recherche opérationnelle", 2002
- C. Ribeiro e P. Hansen (eds.), "Essays and surveys in metaheuristics", 2002
- F. Glover e G. Kochenberger (eds.), "Handbook of metaheuristics", 2003
- C. Ribeiro, "Notas de aula do curso de metaheurísticas",
   http://www.inf.puc-rio.br/~celso/grupo\_de\_pesquisa.htm

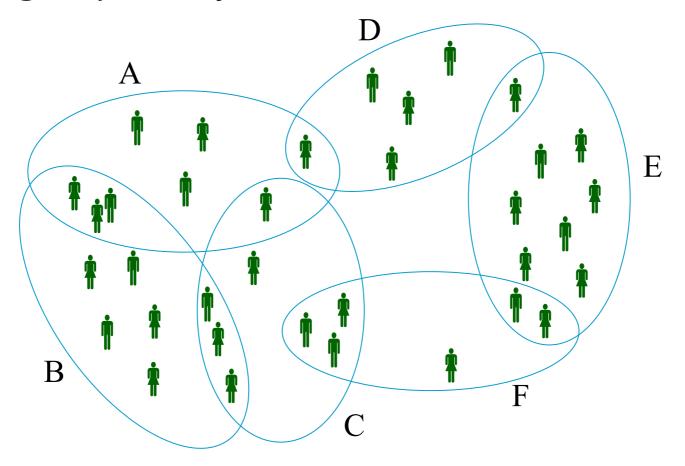
#### Problema:

- Alunos cursam disciplinas.
- Cada disciplina tem uma prova.
- Há um único horário em que são marcadas provas em cada dia.
- Provas de duas disciplinas diferentes não podem ser marcadas para o mesmo dia se há alunos que cursam as duas disciplinas.

#### Montar um calendário de provas:

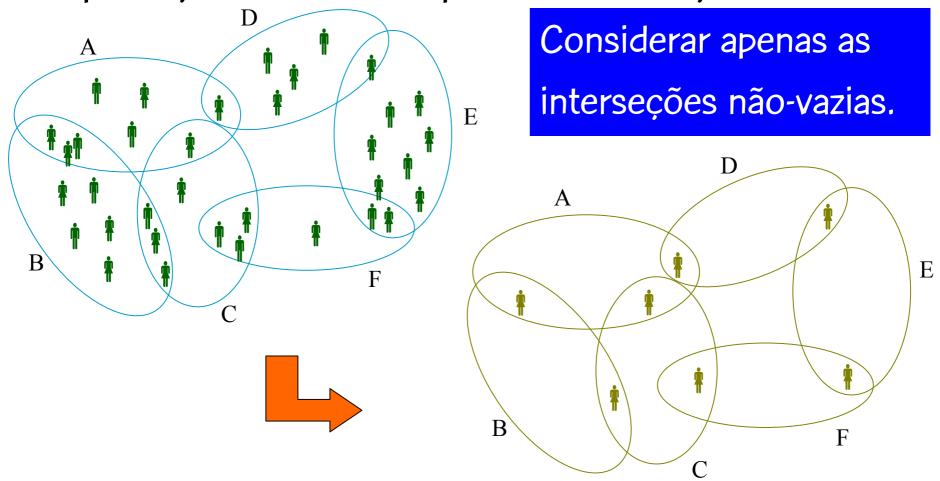
- satisfazendo as restrições de conflito e ...
- ... minimizando o número de dias necessários para realizar todas as provas.

Modelagem por conjuntos:

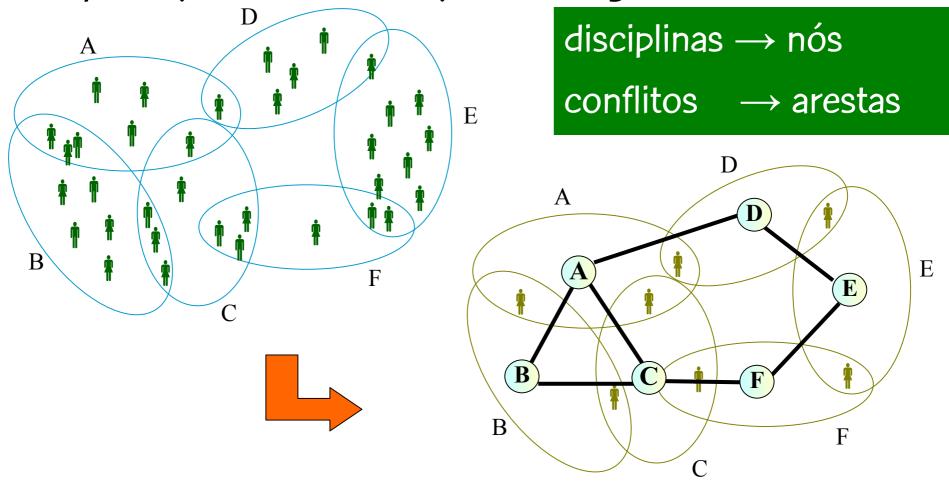


- Os alunos que fazem apenas uma disciplina influem na modelagem?
  - Não!
- O número de alunos que cursam simultaneamente um par de disciplinas influi na modelagem?
  - Não!
  - E se o objetivo fosse minimizar o número de alunos "sacrificados"?
  - Neste caso, sim!
- Este modelo pode ser simplificado?

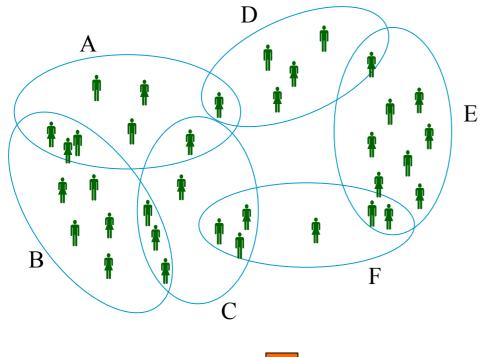
Simplificação tratando-se apenas as interseções:



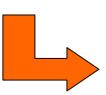
Simplificação com a utilização de um grafo de conflitos:

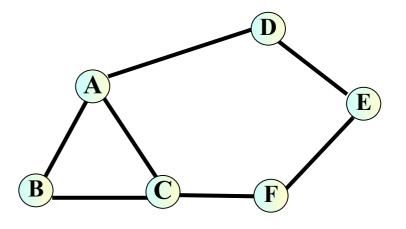


Simplificação com a utilização de um grafo de conflitos:

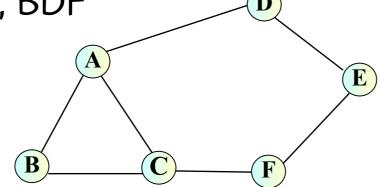


disciplinas → nós conflitos → arestas



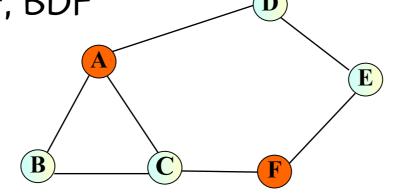


- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF

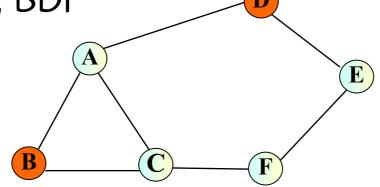


- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF

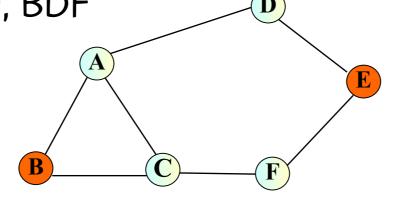
- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF



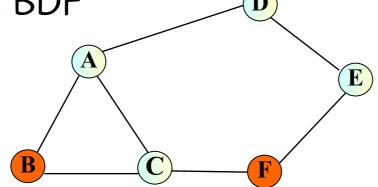
- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF



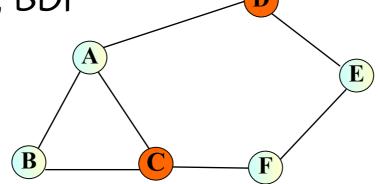
- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF



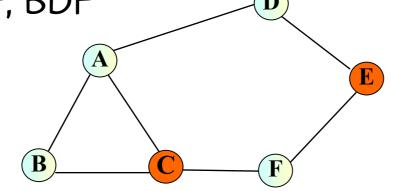
- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF



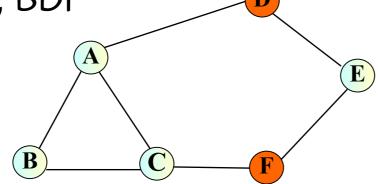
- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF



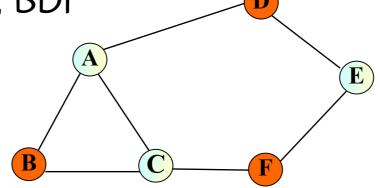
- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF



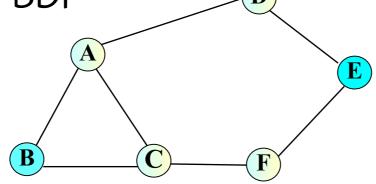
- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF



- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF



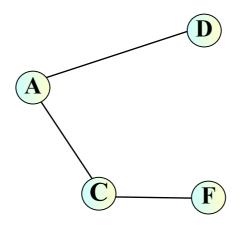
- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF

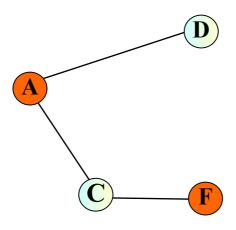


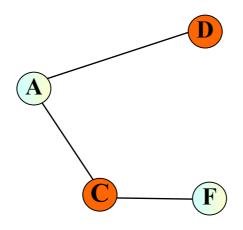
 Escolher por exemplo o par de disciplinas B e E para o primeiro dia e retirá-las do grafo.

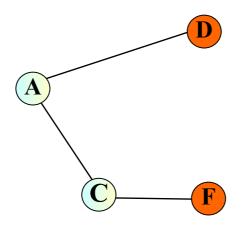
- Como montar um calendário satisfazendo as restrições de conflito?
- Marcar para o primeiro dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, B, C, D, E, F, AE, AF, BD, BE, BF, CD, CE, DF, BDF

 Escolher por exemplo o par de disciplinas B e E para o primeiro dia e retirá-las do grafo.

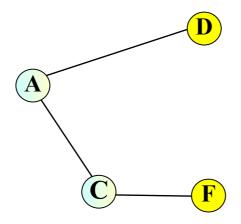






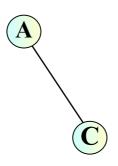


 Marcar para o segundo dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, C, D, F, AF, CD, DF



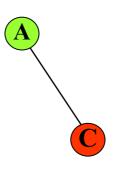
 Escolher por exemplo o par de disciplinas D e F para o segundo dia e retirá-las do grafo.

 Marcar para o segundo dia qualquer combinação de disciplinas sem conflitos: A, C, D, F, AF, CD, DF

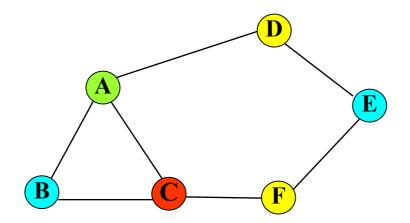


 Escolher por exemplo o par de disciplinas D e F para o segundo dia e retirá-las do grafo.

Marcar A ou C para o terceiro dia e a que sobrar para o quarto dia:

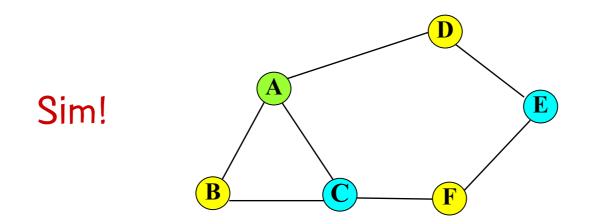


A solução assim construída utiliza quatro dias: B-E no primeiro dia, D-F no segundo dia, A no terceiro e C no quarto:



 Uma solução com quatro dias corresponde a colorir os nós do grafo de conflitos com quatro cores!

- Esta solução utiliza o menor número possível de dias? ou ...
- É possível montar uma solução com menos dias? ou ...
- É possível colorir o grafo de conflitos com três cores?

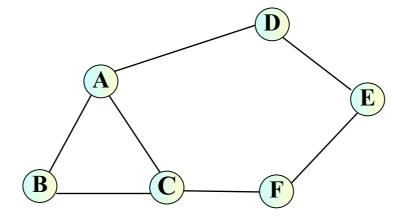


 É impossível colorir o grafo de conflitos com menos de três cores! (por que?)

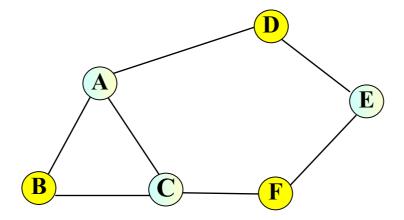
- Como montar um escalonamento com o menor número possível de dias?
- Recordando: um subconjunto independente de um grafo é um subconjunto de nós sem nenhuma aresta entre eles.
- Logo, um conjunto de disciplinas que forma um subconjunto independente dos nós do grafo de conflitos pode ter suas provas marcadas para o mesmo dia.
- Os nós deste subconjunto independente podem receber a mesma cor.

- Quanto mais disciplinas forem marcadas para o primeiro dia, menos disciplinas sobram para os dias seguintes e, portanto, serão necessários menos dias para realizar as provas das disciplinas restantes.
- Então, marcar para o primeiro dia as provas das disciplinas correspondentes a um subconjunto independente máximo.
- Retirar os nós correspondentes a estas disciplinas do grafo de conflitos.
- Continuar procedendo da mesma maneira, até as provas de todas as disciplinas terem sido marcadas.

Subconjunto independente máximo no grafo de conflito?
 BDF

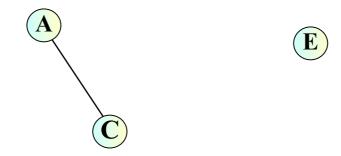


Subconjunto independente máximo no grafo de conflito?
 BDF



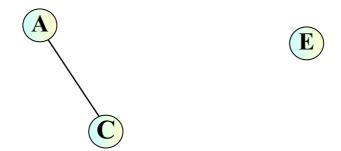
Eliminar os nós B, D e F do grafo de conflitos.

Subconjunto independente máximo no grafo de conflito?
 BDF

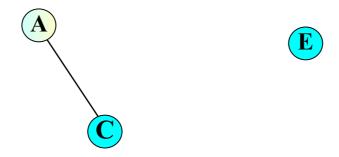


Eliminar os nós B, D e F do grafo de conflitos.

Subconjunto independente máximo no grafo de conflito?
 CE



Subconjunto independente máximo no grafo de conflito?
 CE



Eliminar os nós C e E do grafo de conflitos.

Subconjunto independente máximo no grafo de conflito?
 CE

A

Eliminar os nós C e E do grafo de conflitos.

Subconjunto independente máximo no grafo de conflito?

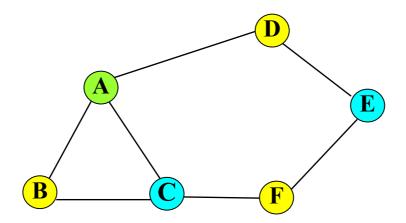


Subconjunto independente máximo no grafo de conflito?
 A



- Eliminar o nó A do grafo de conflitos.
- Solução completa (todos nós coloridos).

A solução encontrada usa o número mínimo de cores para colorir o grafo, logo o número de dias para aplicar todas as provas é mínimo:

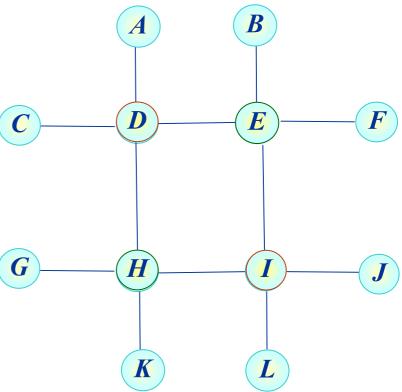


 Foi então proposto um algoritmo para colorir um grafo com o menor número de cores.

- O passo básico deste algoritmo corresponde a determinar um subconjunto independente máximo.
- Entretanto, este subproblema a ser resolvido a cada iteração já é um problema NP-completo por si só, ou seja, cada subproblema é computacionalmente difícil.
- Além deste procedimento ser computacionalmente difícil, é possível garantir que este algoritmo sempre encontra a solução ótima com o número mínimo de cores?
  - Ou demonstrar que sim, ou dar um contra-exemplo.

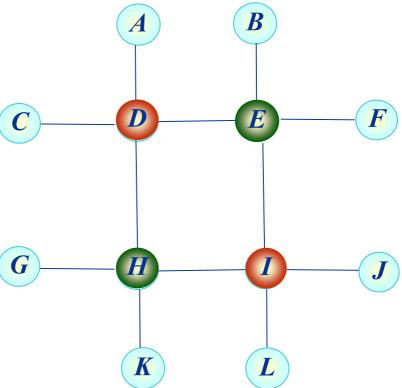
Considerando-se o grafo abaixo, qual solução seria encontrada pelo algoritmo?

Os oito nós externos formam um subconjunto independente de cardinalidade máxima e podem todos ser coloridos com a mesma cor.



Considerando-se o grafo abaixo, qual solução seria encontrada pelo algoritmo?

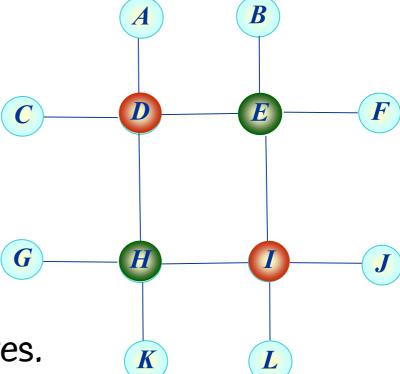
Os oito nós externos formam um subconjunto independente de cardinalidade máxima e podem todos ser coloridos com a mesma cor.



Considerando-se o grafo abaixo, qual solução seria encontrada pelo algoritmo?

Esta solução é ótima, ou é possível colorir este grafo com menos cores?

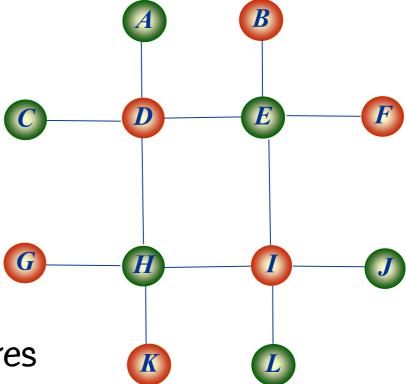
Sim: o grafo pode ser colorido com apenas duas cores.



Considerando-se o grafo abaixo, qual solução seria encontrada pelo algoritmo?

Esta solução é ótima, ou é possível colorir este grafo com menos cores?

Sim: o grafo pode ser colorido com apenas duas cores



- O algoritmo proposto nem sempre encontra a solução ótima (isto é, uma solução com o número mínimo de cores).
- Este algoritmo é então um algoritmo aproximado ou uma heurística para o problema de coloração de grafos.
- Algoritmos exatos vs. algoritmos aproximados:
  - qualidade da solução
  - tempo de processamento

- Problema de otimização combinatória: Dado um conjunto finito  $E = \{1,2,...,n\}$  e uma função de custo  $c: 2^E \rightarrow R$ , encontrar  $S^* \in F$  tal que  $c(S^*) \le c(S) \ \forall S \in F$ , onde  $F \in 2^E$  é o conjunto de soluções viáveis do problema (minimização).
- Conjunto discreto de soluções (vetores de variáveis 0-1, caminhos, ciclos, ...) com um número finito de elementos.
- Construção de uma solução: selecionar sequencialmente elementos de E, eventualmente descartando alguns já selecionados, de tal forma que ao final se obtenha uma solução viável, i.e. pertencente a F.

Exemplo: problema da mochila

E: conjunto de itens

F: subconjuntos de E que satisfazem à restrição  $\Sigma_{e \in S} a_e \le b$ 

$$c(S) = \sum_{e \in S} c_e$$

c<sub>e</sub>: lucro do item e

a<sub>e</sub>: peso do item e

b: capacidade da mochila

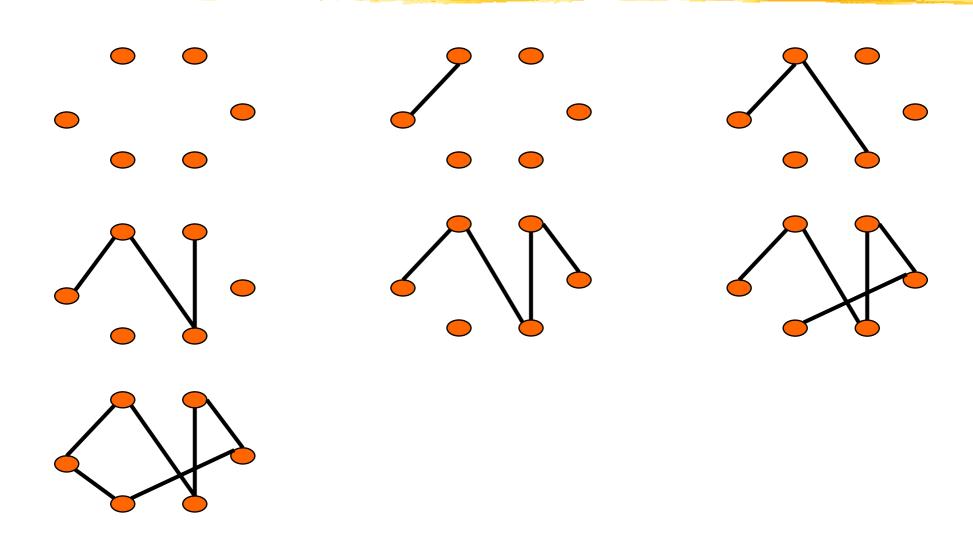
Exemplo: problema do caixeiro viajante

E: conjunto de arestas

F: subconjuntos de arestas que formam um circuito hamiltoniano (isto é, que visita cada cidade exatamente uma única vez)

$$c(S) = \sum_{e \in S} c_e$$

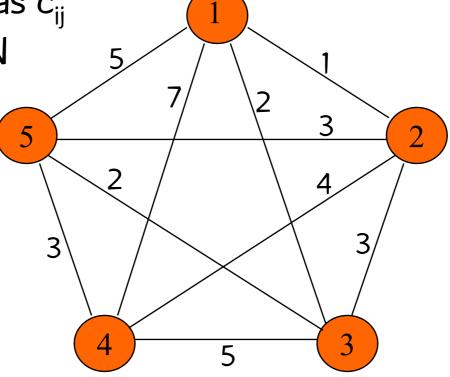
 $c_e$ : custo (comprimento) da aresta e = (i,j)



Matrix de distâncias c<sub>ij</sub>

Conjunto de nós N

|N| = 5



Algoritmo do vizinho mais próximo:

```
Escolher o nó inicial i e fazer N \leftarrow N-\{i\}.

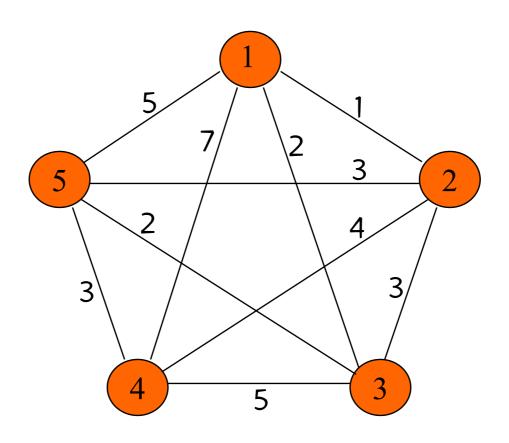
Enquanto N \neq \emptyset fazer:

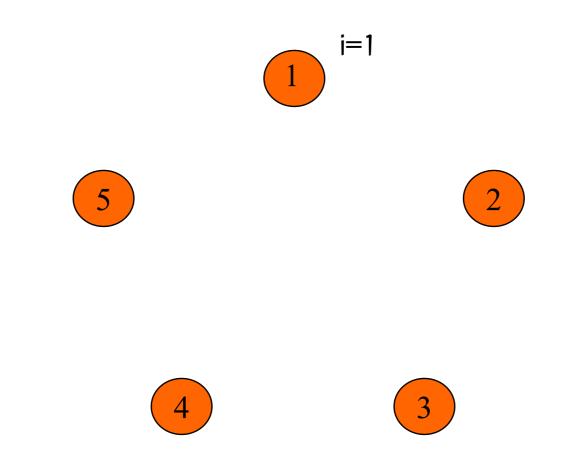
Obter j \in N tal que c_{i,j} = \min_{k \in N} \{c_{i,k}\}.

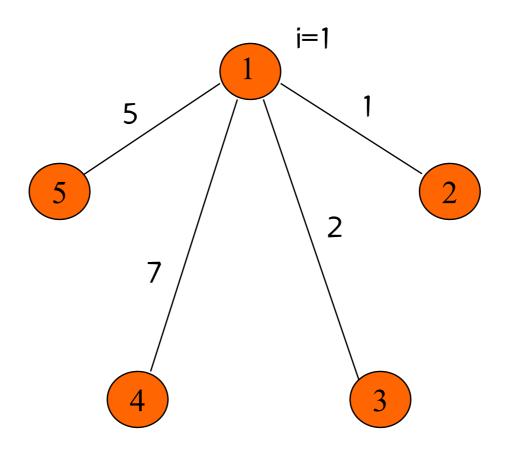
N \leftarrow N-\{j\}

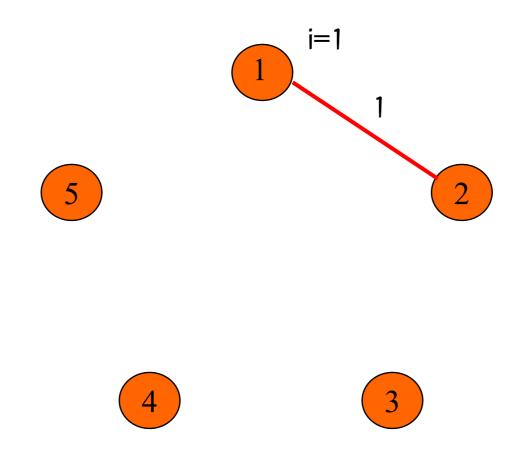
i \leftarrow j

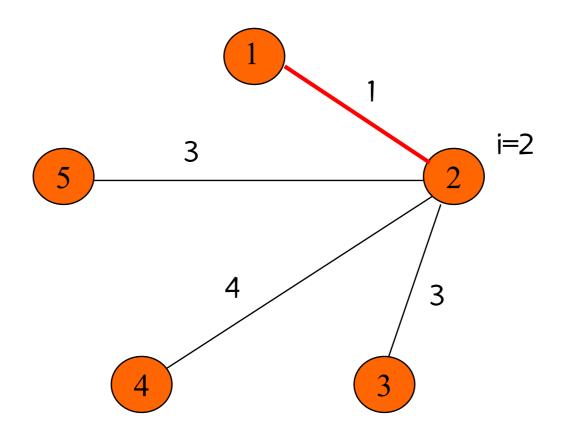
Fim-enquanto
```

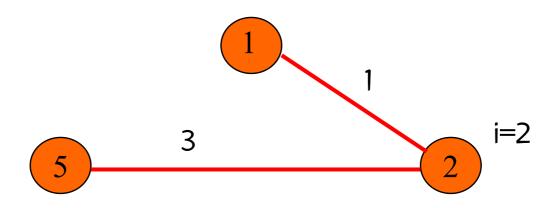






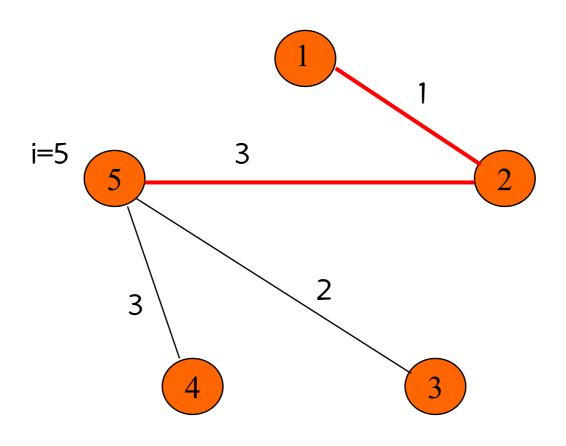


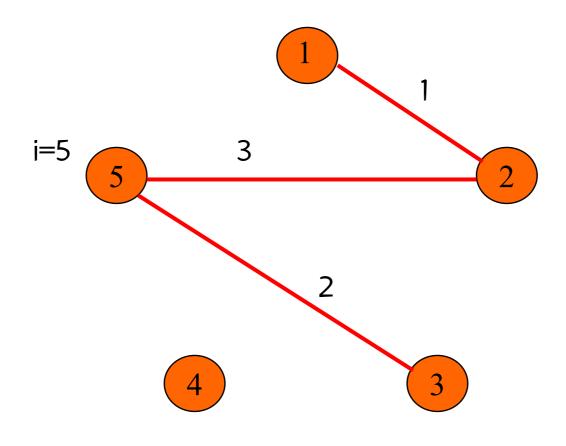


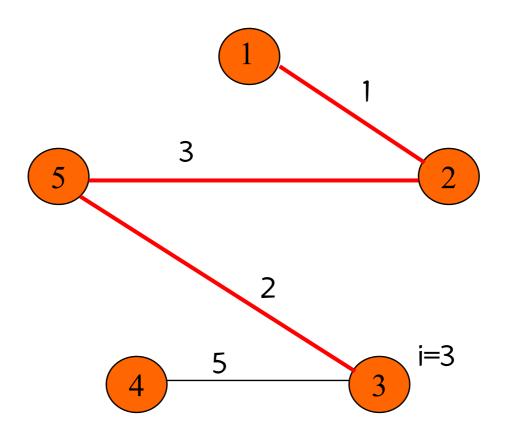


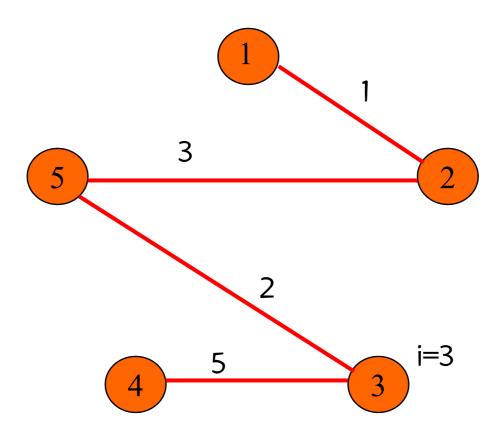


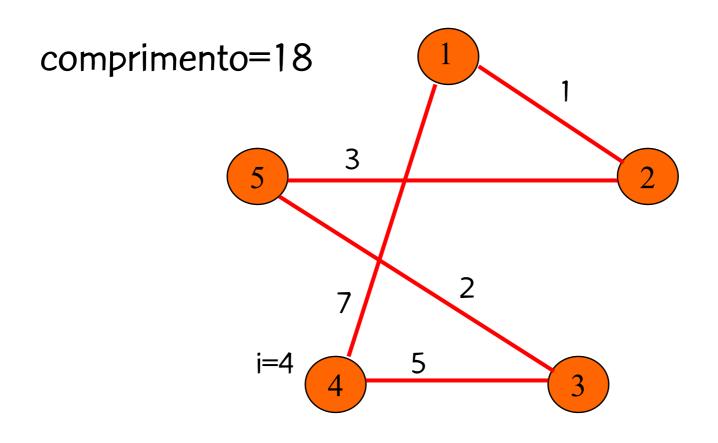




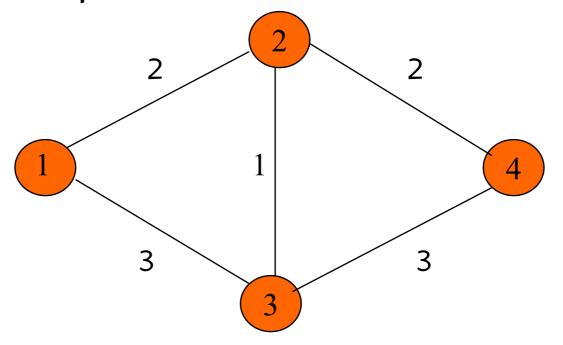








 Algoritmos construtivos simples podem falhar mesmo para casos muito simples:

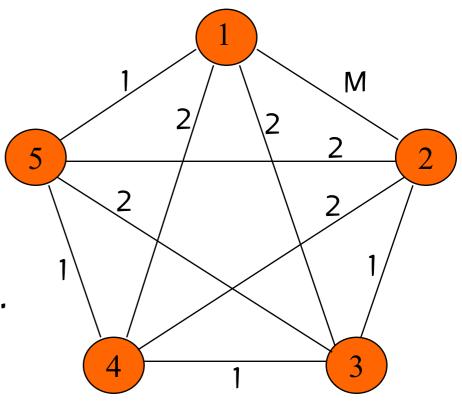


Podem encontrar soluções arbitrariamente ruins:

Heurística (1-5-4-3-2-1): M+4

Ótimo (1-5-2-3-4-1): 7

A solução ótima é encontrada se o algoritmo começa do nó 5.

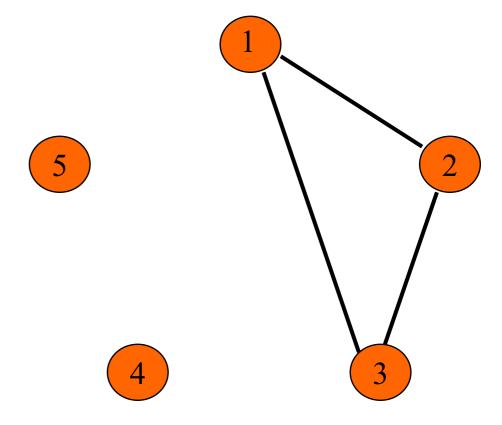


- Extensões e melhorias simples:
  - Repetir a aplicação do algoritmo a partir de cada nó do grafo e selecionar a melhor solução obtida.
    - > Melhores soluções, mas tempo de processamento multiplicado por n.
  - A cada iteração selecionar a aresta mais curta a partir de alguma das extremidades em aberto do circuito, e não apenas a partir da última extremidade inserida: solução de comprimento 15 (tempos multiplicados por dois).
  - Critérios mais elaborados para (1) seleção do novo nó incorporado ao circuito a cada iteração e para (2) seleção da posição onde ele entra no circuito: algoritmo baseado no crescimento de um circuito até completá-lo.

- Escolha do novo nó a ser incorporado ao circuito a cada iteração:
  - Selecionar o nó k fora do circuito parcial corrente, cuja aresta de menor comprimento que o liga a este circuito parcial corrente é mínima → algoritmo de inserção mais próxima
  - Selecionar o nó k fora do circuito parcial corrente, cuja aresta de menor comprimento que o liga a este circuito parcial corrente é máxima → algoritmo de inserção mais afastada

 Escolha do novo nó a ser incorporado ao circuito a cada iteração pela inserção mais próxima

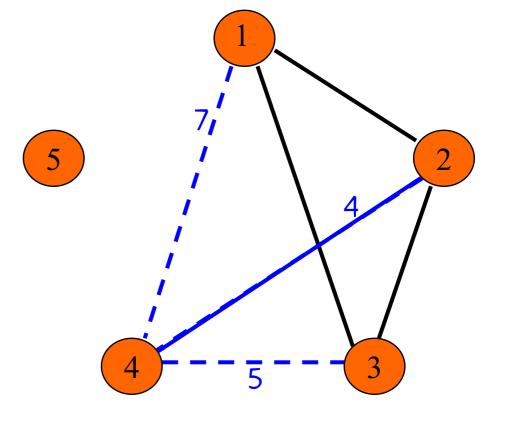
Seleção do nó:



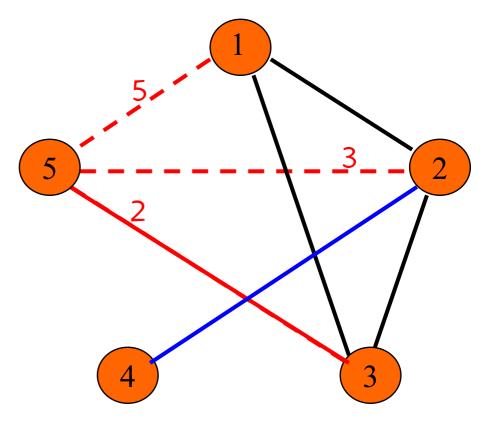
 Escolha do novo nó a ser incorporado ao circuito a cada iteração pela inserção mais próxima

Seleção do nó:

Distância mínima do nó 4: 4



- Escolha do novo nó a ser incorporado ao circuito a cada iteração pela inserção mais próxima
- Seleção do nó:
  - Distância mínima do nó 4: 4
  - Distância mínima do nó 5: 2



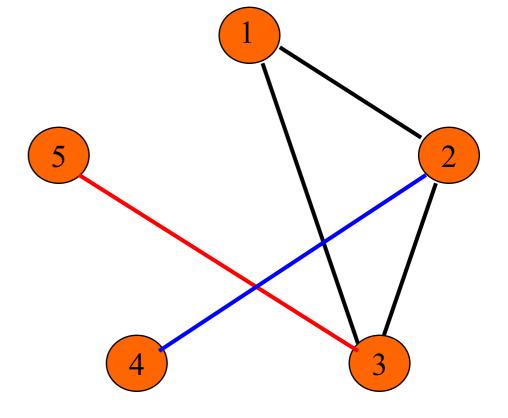
 Escolha do novo nó a ser incorporado ao circuito a cada iteração pela inserção mais próxima

Seleção do nó:

Distância mínima do nó 4: 4

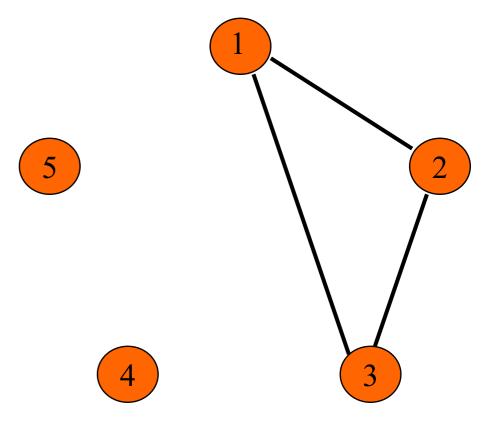
Distância mínima do nó 5: 2

Nó selecionado: 5



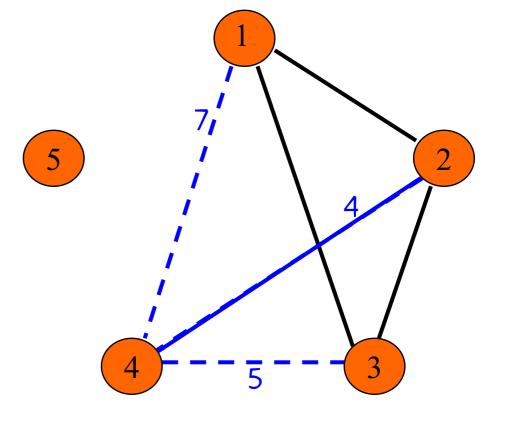
 Escolha do novo nó a ser incorporado ao circuito a cada iteração pela inserção mais afastada

Seleção do nó:

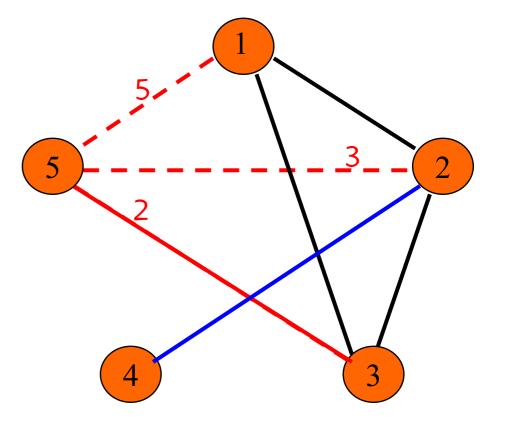


 Escolha do novo nó a ser incorporado ao circuito a cada iteração pela inserção mais afastada

- Seleção do nó:
  - Distância mínima do nó 4: 4

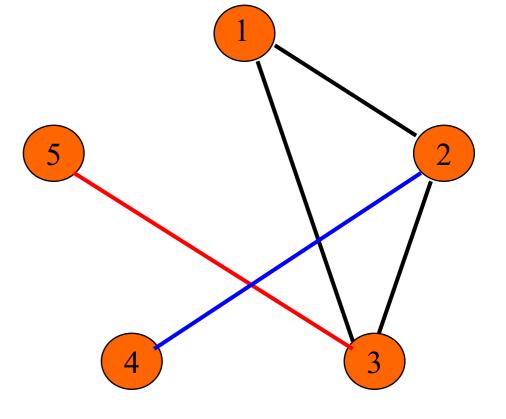


- Escolha do novo nó a ser incorporado ao circuito a cada iteração pela inserção mais afastada
- Seleção do nó:
  - Distância mínima do nó 4: 4
  - Distância mínima do nó 5: 2



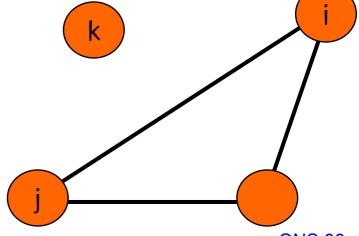
 Escolha do novo nó a ser incorporado ao circuito a cada iteração pela inserção mais afastada

- Seleção do nó:
  - Distância mínima do nó 4: 4
  - Distância mínima do nó 5: 2
  - Nó selecionado: 4



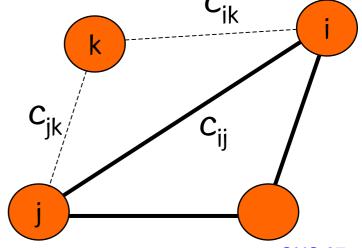
- Escolha da posição onde o nó selecionado entra no circuito:
  - Suponha a entrada do nó k entre o nó i e o nó j.
  - Devem ser inseridas as areastas (i,k) e (j,k) no circuito parcial corrente, substituindo a aresta (i,j).
  - A variação no comprimento do circuito parcial corrente é dada

 $\operatorname{por} \Delta_{ii}(k) = c_{ik} + c_{ik} - c_{ii}.$ 



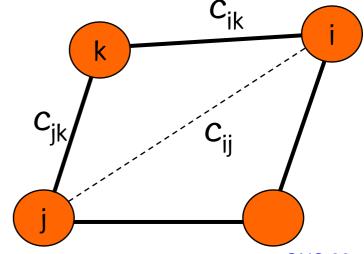
- Escolha da posição onde o nó selecionado entra no circuito:
  - Suponha a entrada do nó k entre o nó i e o nó j.
  - Devem ser inseridas as areastas (i,k) e (j,k) no circuito parcial corrente, substituindo a aresta (i,j).
  - A variação no comprimento do circuito parcial corrente é dada

 $\operatorname{por} \Delta_{ii}(k) = c_{ik} + c_{ik} - c_{ii}.$ 



- Escolha da posição onde o nó selecionado entra no circuito:
  - Suponha a entrada do nó k entre o nó i e o nó j.
  - Devem ser inseridas as areastas (i,k) e (j,k) no circuito parcial corrente, substituindo a aresta (i,j).
  - A variação no comprimento do circuito parcial corrente é dada

 $\operatorname{por} \Delta_{ii}(k) = c_{ik} + c_{ik} - c_{ii}.$ 

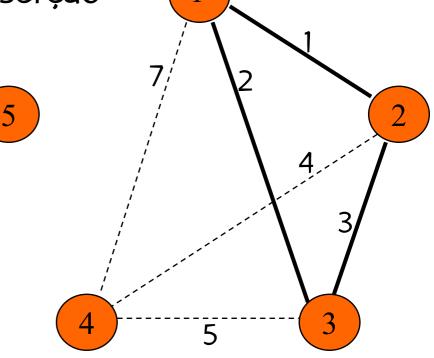


Escolha da posição onde o nó selecionado entra no circuito parcial corrente

Exemplo: nó 4 escolhido para inserção

$$\Delta_{12}(4) = 7+4-1 = 10$$
  
 $\Delta_{13}(4) = 7+5-2 = 10$   
 $\Delta_{23}(4) = 5+4-3 = 6$ 



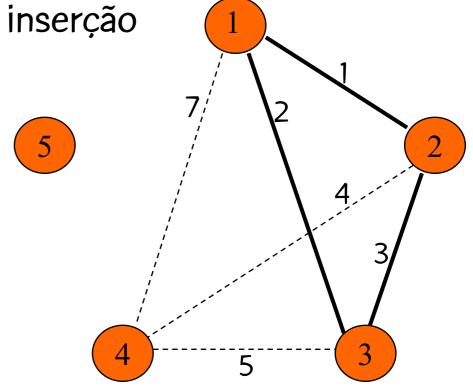


 Escolha da posição onde o nó selecionado entra no circuito parcial corrente

Exemplo: nó 4 escolhido para inserção

$$\Delta_{12}(4) = 7+4-1 = 10$$
  
 $\Delta_{13}(4) = 7+5-2 = 10$   
 $\Delta_{23}(4) = 5+4-3 = 6$ 

Inserção mais próxima:
 entre os nós 2 e 3

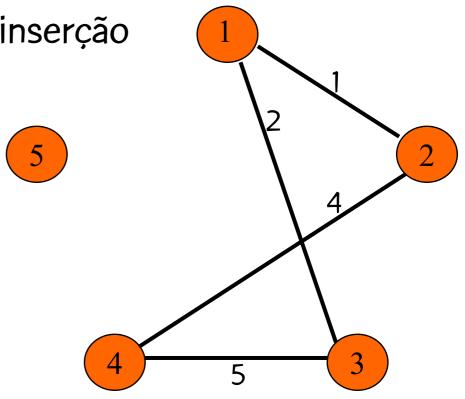


 Escolha da posição onde o nó selecionado entra no circuito parcial corrente

Exemplo: nó 4 escolhido para inserção

$$\Delta_{12}(4) = 7+4-1 = 10$$
  
 $\Delta_{13}(4) = 7+5-2 = 10$   
 $\Delta_{23}(4) = 5+4-3 = 6$ 

Inserção mais próxima:
 entre os nós 2 e 3



Algoritmo de inserção mais próxima:

Escolher o nó inicial i, inicializar um circuito apenas com o nó i e fazer  $N \leftarrow N$ -{i}.

Enquanto N  $\neq \emptyset$  fazer:

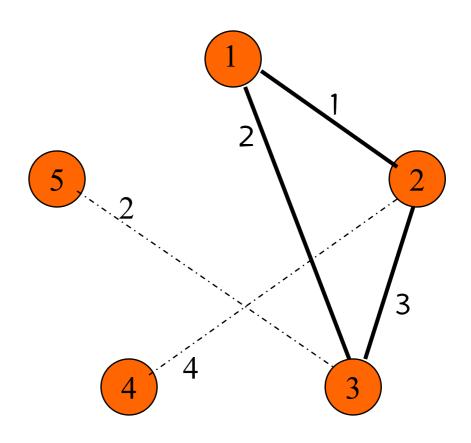
Encontrar o vértice k fora do circuito corrente cuja aresta de menor comprimento que o liga a ele é mínima.

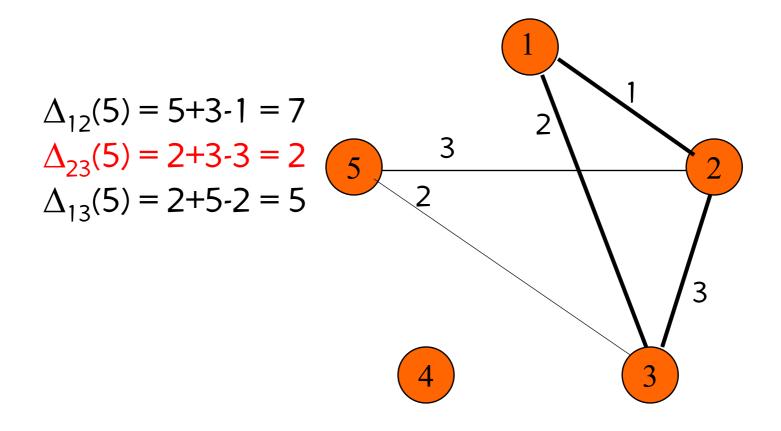
Encontrar o par de arestas (i,k) e (j,k) que ligam o vértice k ao ciclo minimizando  $\Delta_{ij}(k) = c_{ik} + c_{jk} - c_{ij}$ .

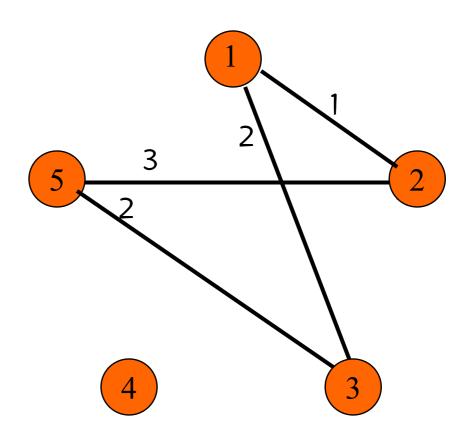
Inserir as arestas (i,k) e (j,k) e retirar a aresta (i,j).

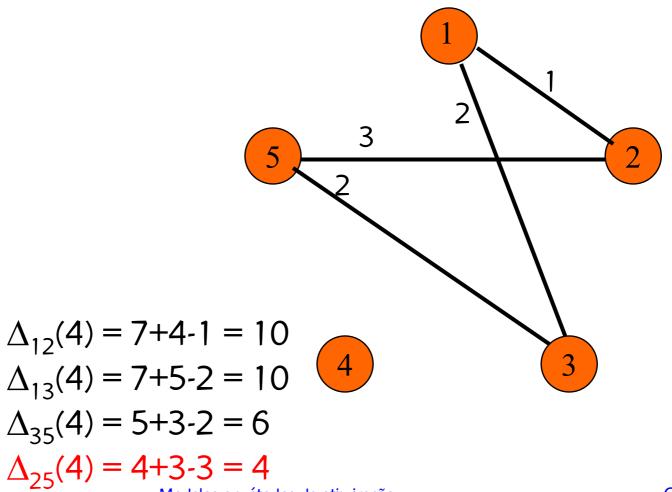
Fazer  $N \leftarrow N-\{k\}$ .

#### Fim-enquanto

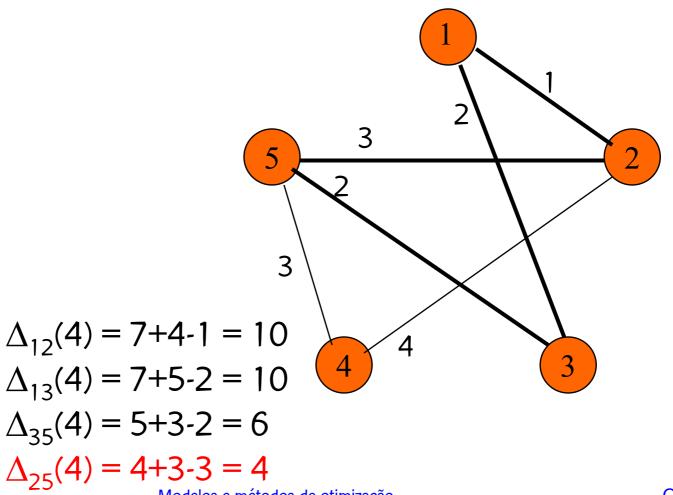






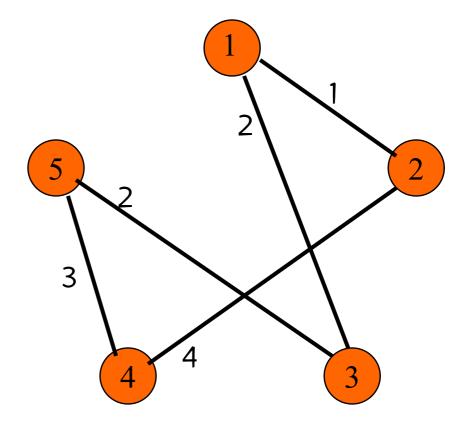


Abril-agosto 2004



Abril-agosto 2004

comprimento = 12



- Comparação: na prática, o método de inserção mais afastada alcança melhores resultados do que o de inserção mais próxima.
- Melhoria simples: método de inserção mais barata
  - Por que separar em dois passos (1) a seleção do novo nó incorporado ao circuito a cada iteração e (2) a seleção da posição onde ele entra no circuito?
  - Fazer a escolha da melhor combinação em conjunto.
  - Melhores soluções, mas tempos de processamento maiores (cerca de n vezes maiores).

Algoritmo de inserção mais barata:

Escolher o nó inicial i, inicializar um circuito apenas com o nó i e fazer N ← N-{i}.

Enquanto N  $\neq \emptyset$  fazer:

Encontrar o vértice k fora do circuito corrente e o par de arestas (i,k) e (j,k) que ligam o vértice k ao ciclo minimizando  $\Delta_{ii}(k) = c_{ik} + c_{ik} - c_{ii}$ .

Inserir as arestas (i,k) e (j,k) e retirar a aresta (i,j).

Fazer  $N \leftarrow N-\{k\}$ .

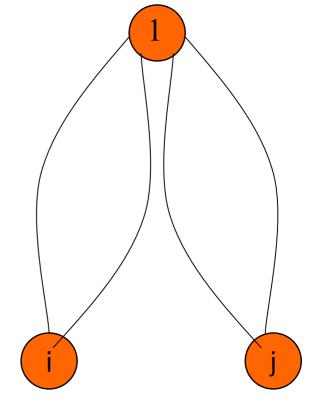
#### Fim-enquanto

Outra idéia diferente: considerar a fusão de subcircuitos

Considerar dois subcircuitos passando pelo nó 1 e pelos

nós i e j.

 Conectá-los diretamente através da aresta (i,j).



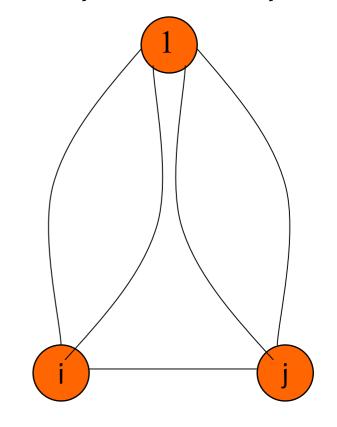
Outra idéia diferente: considerar a fusão de subcircuitos

Considerar dois subcircuitos passando pelo nó 1 e pelos

nós i e j.

 Conectá-los diretamente através da aresta (i,j).

Remover as arestas (1,i) e (1,j).



Outra idéia diferente: considerar a fusão de subcircuitos

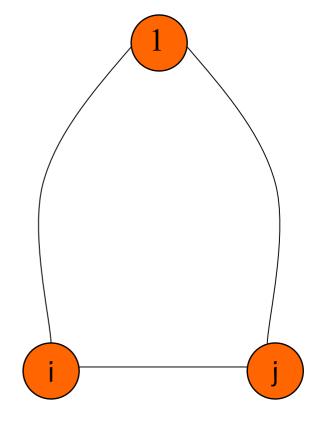
Considerar dois subcircuitos passando pelo nó 1 e pelos

nós i e j.

 Conectá-los diretamente através da aresta (i,j).

- Remover as arestas (1,i) e (1,j).
- Economia realizada:

$$s_{ij} = c_{1i} + c_{1j} - c_{ij}$$



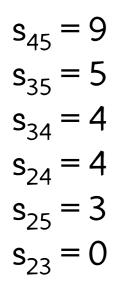
Algoritmo das <u>economias</u>:

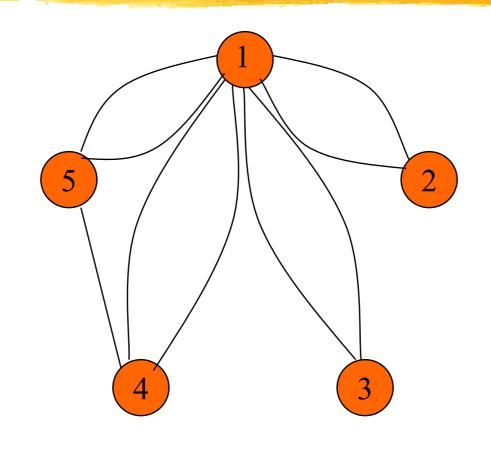
Escolher um nó inicial i (e.g., i = 1).

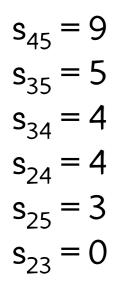
Construir subcircuitos de comprimento 2 envolvendo o nó inicial (e.g., i = 1) e cada um dos demais nós de N.

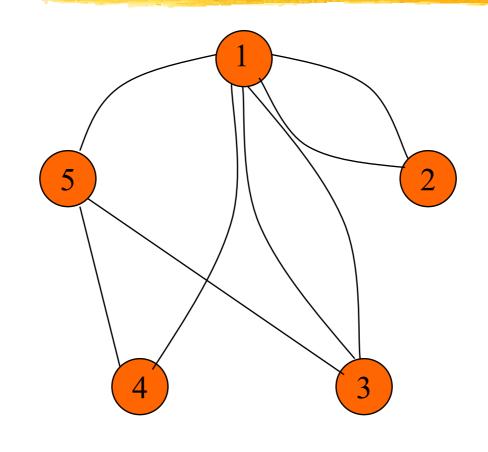
Calcular as economias  $s_{ij} = c_{1i} + c_{1j} - c_{ij}$  obtidas pela fusão dos subcircuitos contendo i e j e ordená-las em ordem decrescente.

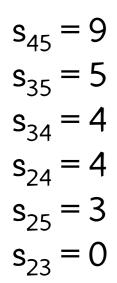
Percorrer a lista de economias e fundir os subcircuitos possíveis: a cada iteração, maximizar a distância economizada sobre a solução anterior, combinando-se dois subcircuitos e substituindo-os por uma nova aresta.

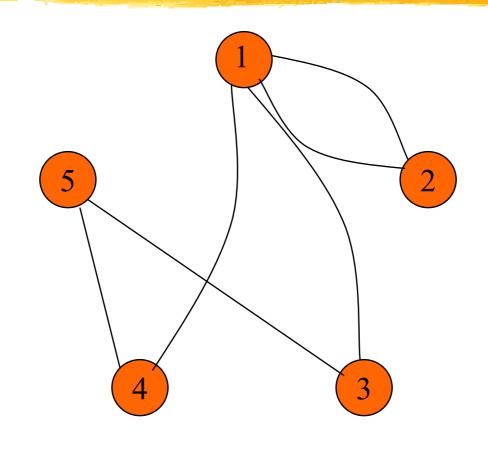


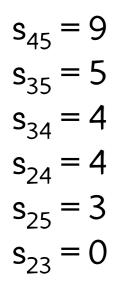


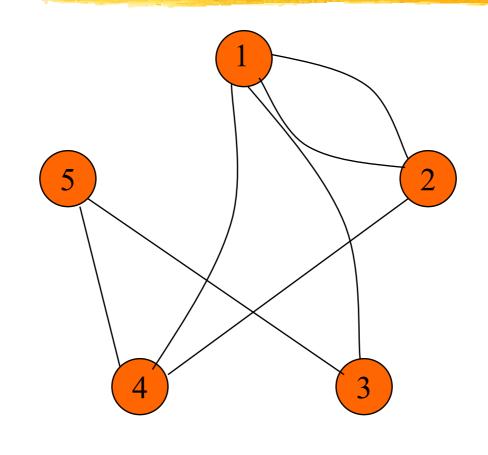


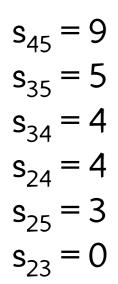


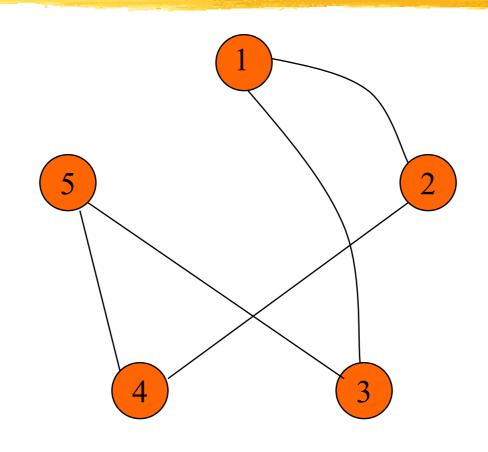












comprimento = 12

Grafo não-orientado G=(V,E)

V: vértices

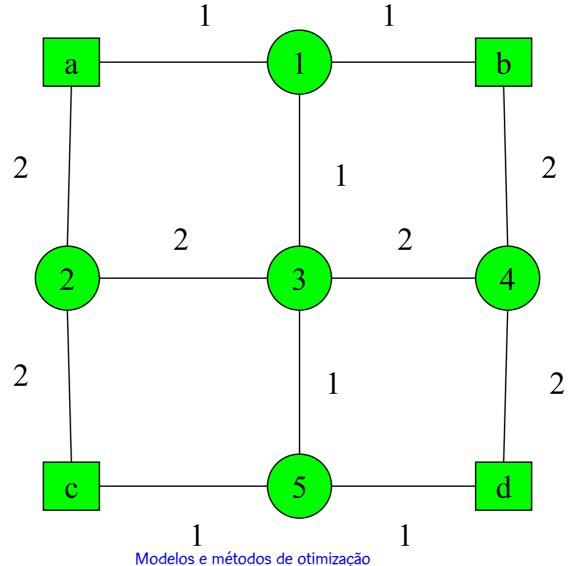
E: arestas

T: vértices terminais (obrigatórios)

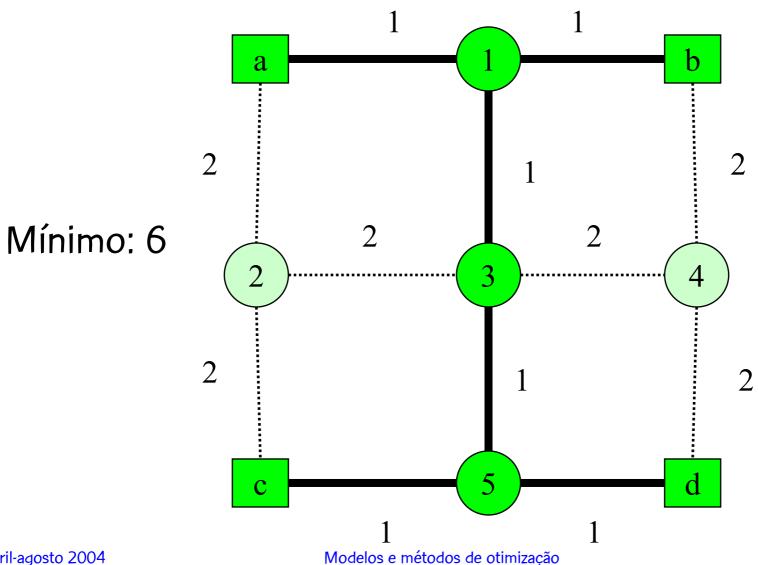
 $c_e$ : peso (positivo) da aresta  $e \in E$ 

 Problema: conectar os nós terminais com custo (peso) mínimo, eventualmente utilizando os demais nós como passagem.

- Vértices de Steiner: vértices opcionais que fazem parte da solução ótima
- Aplicações: projeto de redes de computadores (conectar um conjunto de clientes através de concentradores, cujos locais devem ser determinados), redes de telecomunicações, problema da filogenia em biologia, etc.



Abril-agosto 2004



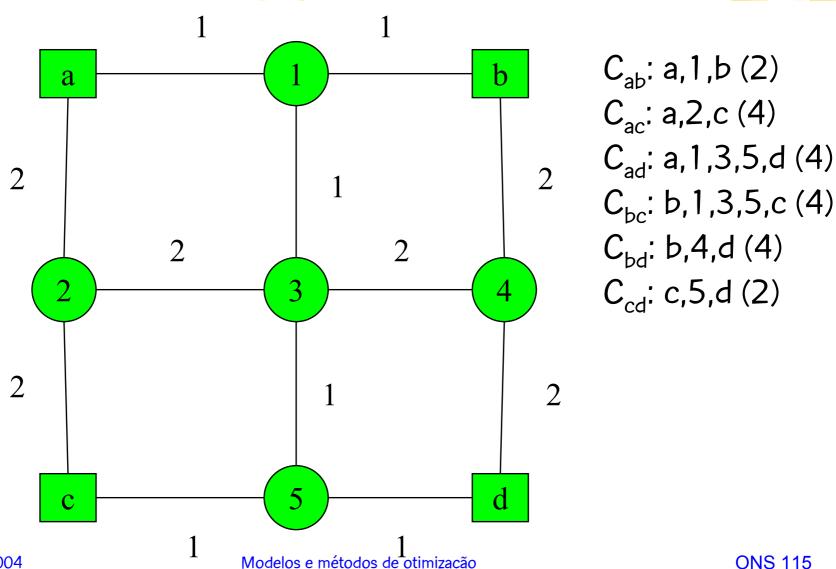
Heurística da rede de distâncias:

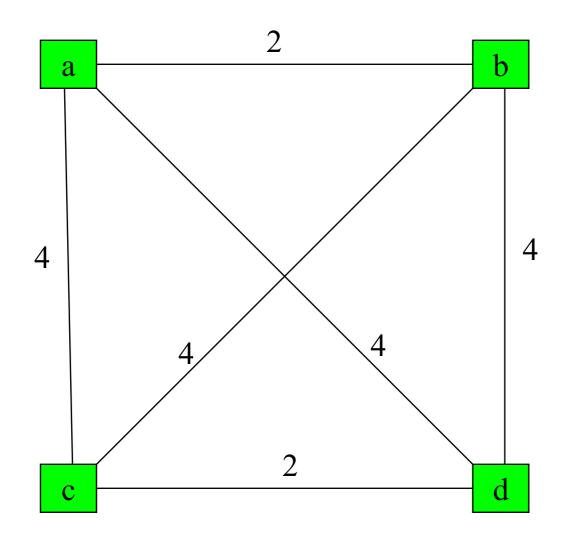
Calcular os caminhos mais curtos entre cada par de terminais do grafo.

Criar a rede de distâncias formada pelos nós obrigatórios e pelas arestas correspondentes aos caminhos mais curtos.

Obter a árvore geradora de peso mínimo dos nós da rede de distâncias.

Expandir as arestas da árvore geradora.





 $C_{ab}$ : a,1,b (2)

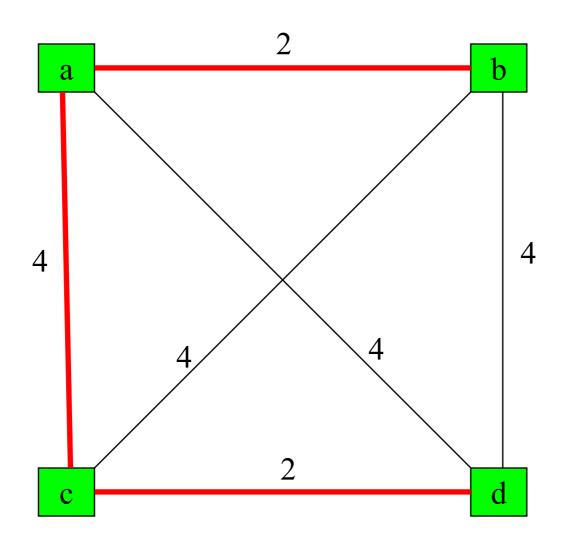
 $C_{ac}$ : a,2,c (4)

 $C_{ad}$ : a,1,3,5,d (4)

 $C_{bc}$ : b,1,3,5,c (4)

 $C_{bd}$ : b,4,d (4)

 $C_{cd}$ : c,5,d (2)



$$C_{ab}$$
: a,1,b (2)

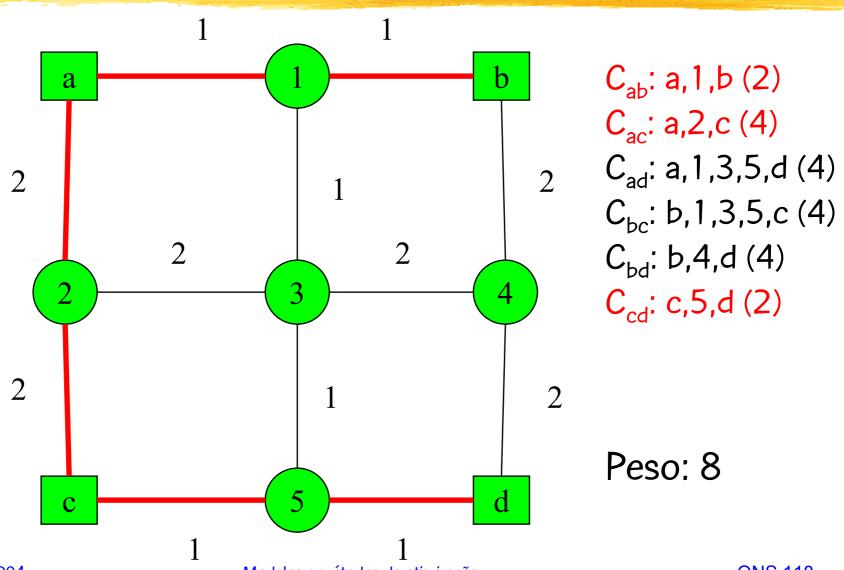
$$C_{ac}$$
: a,2,c (4)

$$C_{ad}$$
: a,1,3,5,d (4)

$$C_{bc}$$
: b,1,3,5,c (4)

$$C_{bd}$$
: b,4,d (4)

$$C_{cd}$$
: c,5,d (2)



Abril-agosto 2004

Modelos e métodos de otimização

Heurística dos caminhos mais curtos:

Calcular o caminho mais curto de entre cada par de terminais.

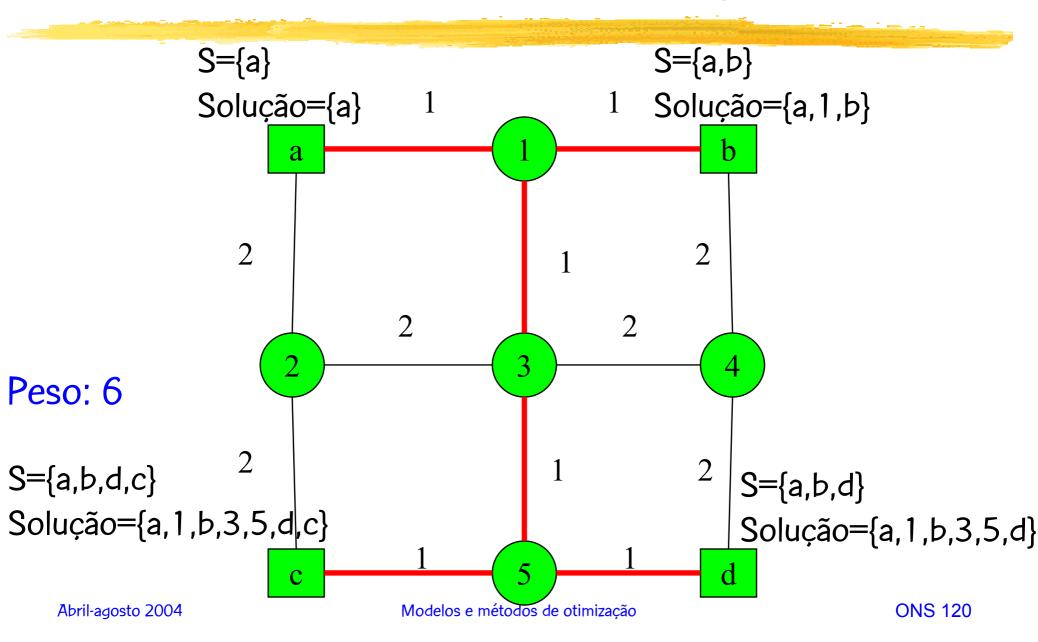
Sejam s um nó terminal, Solução  $\leftarrow$  {s}, S  $\leftarrow$  {s}, k  $\leftarrow$  0.

Enquanto  $S \neq T$  fazer:

Obter o terminal s mais próximo de Solução e o caminho correspondente C.

Fazer  $S \leftarrow S \cup \{s\}$  e Solução  $\leftarrow$  Solução  $\cup$  C.

Fim-enquanto



## Algoritmos gulosos

#### Algoritmos gulosos:

A construção de uma solução gulosa consiste em selecionar sequencialmente o elemento de E que minimiza o incremento no custo da solução parcial mantendo sua viabilidade, terminando quando se obtém uma solução viável (problema de minimização).

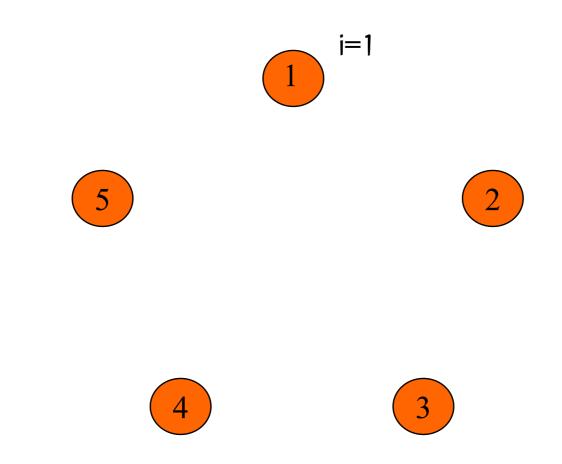
O incremento no custo da solução parcial é chamado de função gulosa.

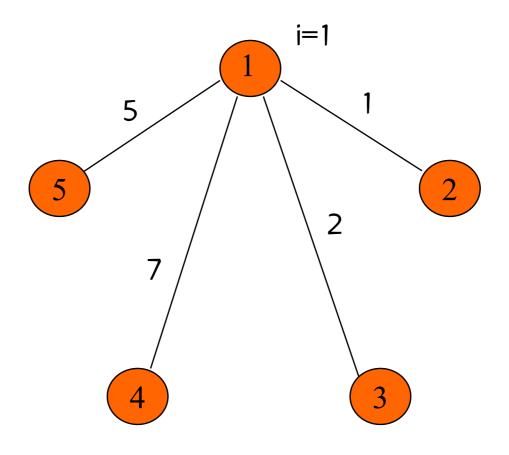
## Algoritmos gulosos

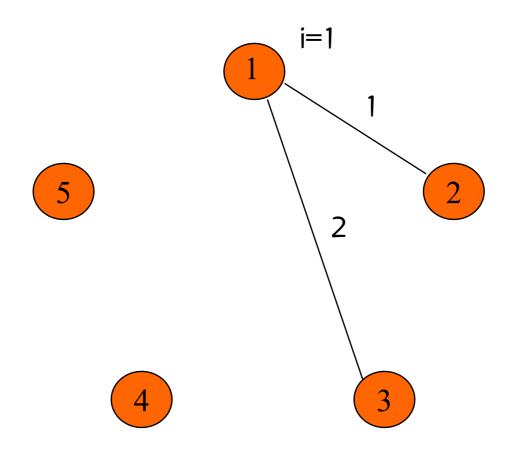
- Cada elemento que entra na solução, nela permanece até o final.
- Algoritmo guloso para o problema da mochila:
  - Ordenar os itens em ordem decrescente da razão c<sub>i</sub>/a<sub>i</sub>.
  - Selecionar os itens que cabem na mochila segundo esta ordem.
- Algoritmo do vizinho mais próximo para o PCV
- Cuidado: nem sempre encontram a solução ótima exata,
   são portanto heurísticas para estes problemas!

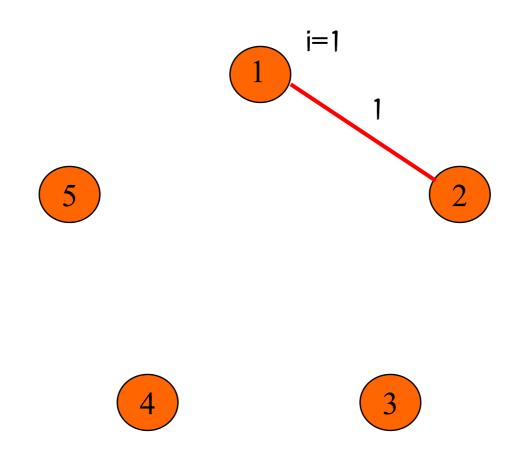
## Algoritmos gulosos randomizados

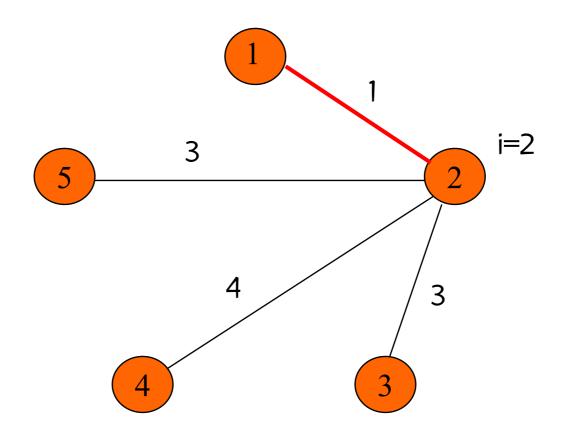
- Um algoritmo guloso encontra sempre a mesma solução para um dado problema.
- Randomização das escolhas gulosas permite alcançar diversidade nas soluções encontradas, se o algoritmo for aplicado diversas vezes.
- Algoritmo guloso randomizado:
  - Criar uma lista de candidatos a cada iteração com os melhores elementos ainda não selecionados e fazer uma escolha aleatória entre eles.
- Aplicar o algoritmo repetidas vezes, obtendo soluções diferentes a cada aplicação e salvando a melhor.

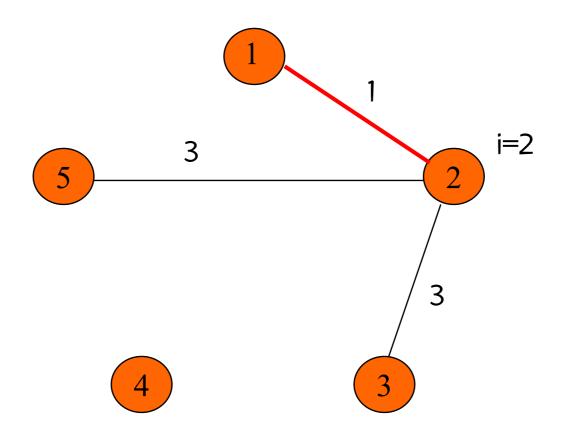


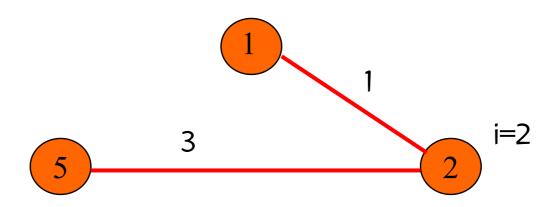






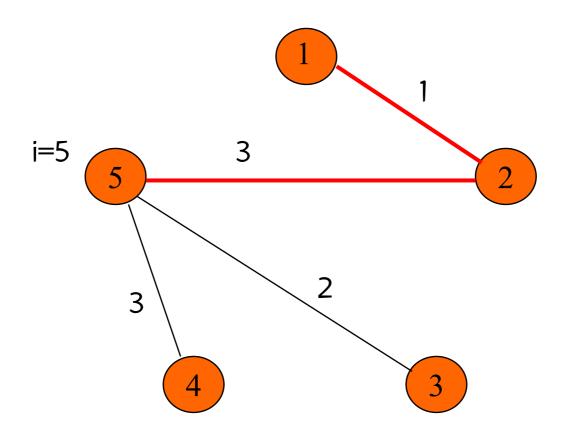


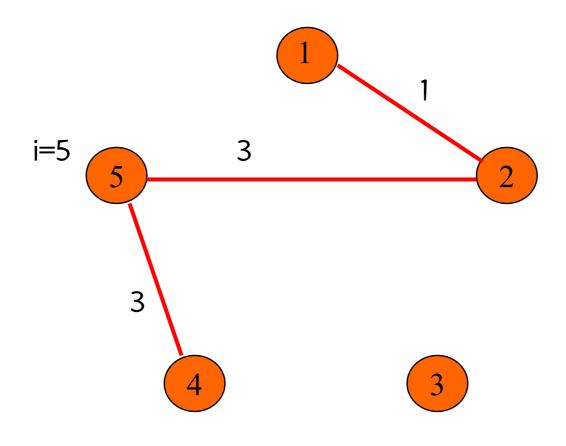


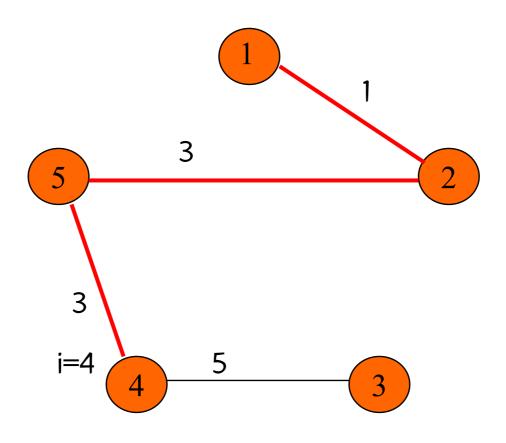


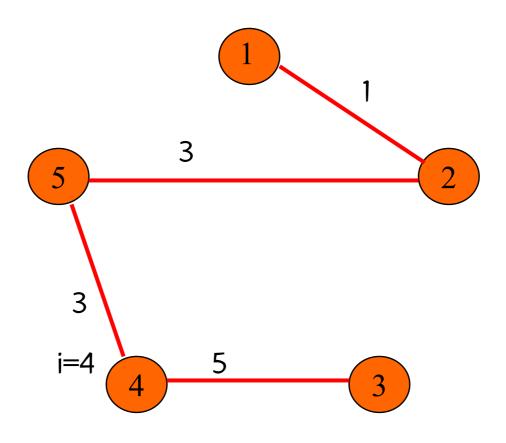


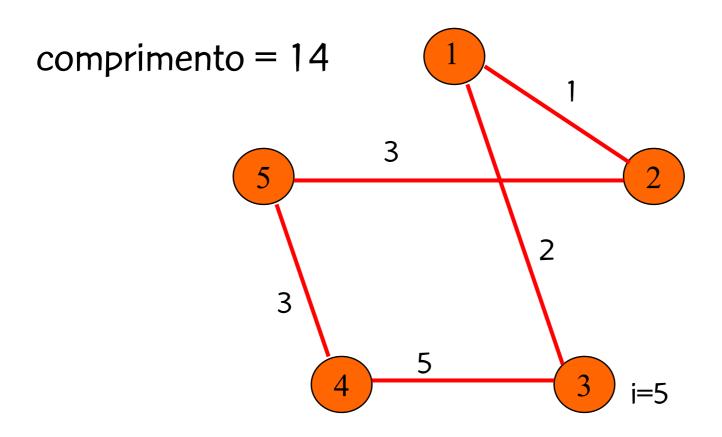
3

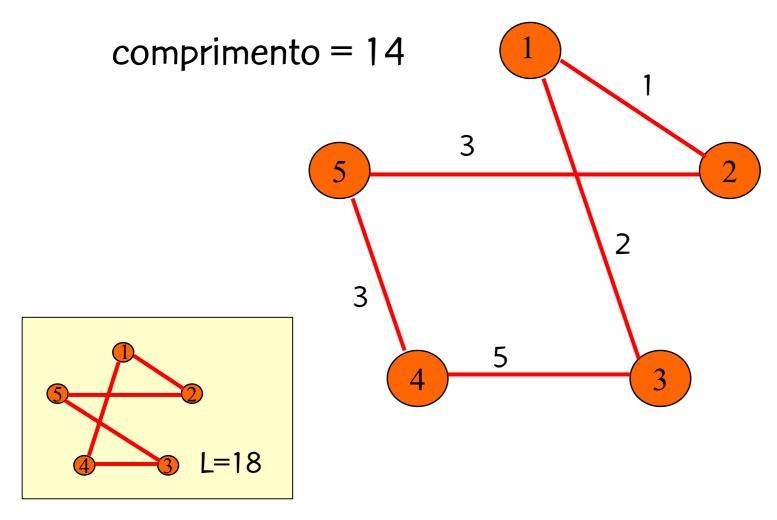












# Algoritmos gulosos randomizados

- A qualidade da solução obtida depende da qualidade dos elementos na lista de candidatos.
- A diversidade das soluções encontradas depende da cardinalidade da lista de candidatos.
- Casos extremos:
  - algoritmo guloso puro (o candidato único é o melhor)
  - solução gerada de forma completamente aleatória (todos os elementos pendentes são candidatos)

## Algoritmos gulosos randomizados

- Quanto maior for o número de aplicações do algoritmo, maior a probabilidade de encontrar soluções melhores.
  - Melhores soluções, mas tempos de processamento maiores.
- Ajuste de parâmetros na implementação: equilibrar qualidade e diversidade

- Técnica de exploração do espaço de soluções.
- Conjunto F de soluções (viáveis) formado por subconjuntos de um conjunto E (suporte/base) de elementos que satisfazem determinadas condições.
- Representação de uma solução: indicar quais elementos de E estão presentes e quais não estão.

<u>Exemplo</u>: problema da mochila n itens

Solução é um vetor 0-1 com n posições.

 $x_i = 1$  se o item j é selecionado

 $x_i = 0$  caso contrário

n = 5

solução x = (1,0,0,1,1): itens 1, 4 e 5 selecionados

Exemplo: problema do caixeiro viajante

E: conjunto de arestas

F: subconjuntos de E que formam um circuito hamiltoniano

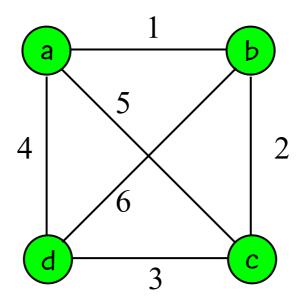
Solução é um vetor de m = |E| posições.

 $v_e = 1$ , se a aresta e pertence ao circuito hamiltoniano

 $v_e = 0$ , caso contrário.

Soluções viáveis (64 vetores possíveis):

(1,1,1,1,0,0), (1,0,1,0,1,1), (0,1,0,1,1,1)



Outra representação para as soluções do PCV: representar cada solução pela ordem em que os vértices são visitados, isto é, como uma permutação circular dos n vértices (já que o primeiro vértice é arbitrário)

(a)bcd

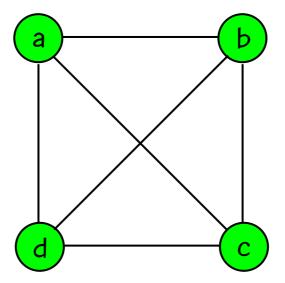
(a)bdc

(a)cbd

(a)cdb

(a)dbc

(a)dcb



- Indicadores 0-1 de pertinência:
  - Problema da mochila
  - Problema de Steiner em grafos
  - Problemas de recobrimento e de particionamento, ...
- Indicadores gerais de pertinência:
  - Coloração de grafos
  - Localização, ...
- Permutações:
  - Problemas de escalonamento
  - Problema do caixeiro viajante, ...

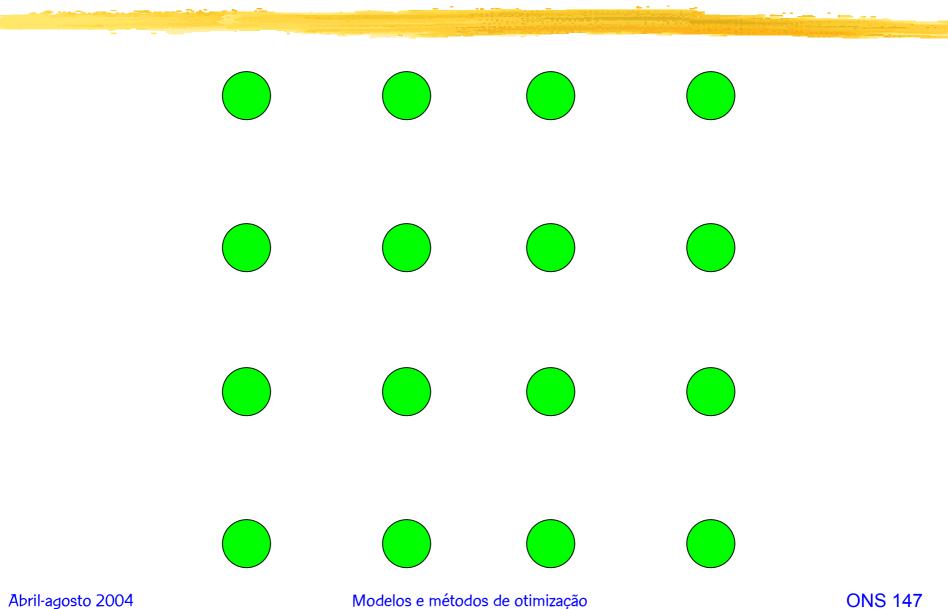
Problema de otimização combinatória:

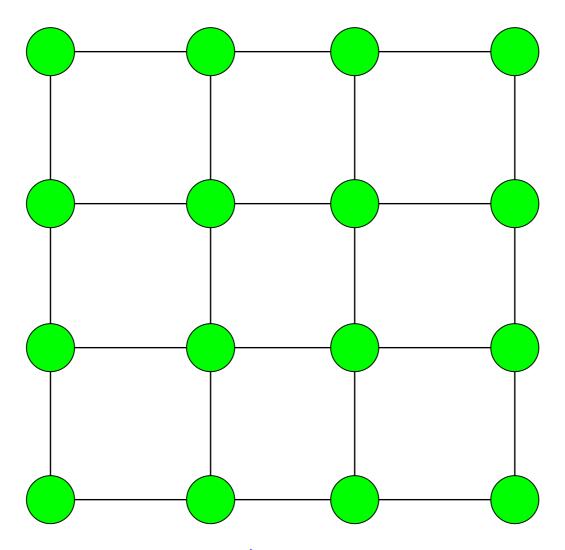
```
f(s^*) = minimo \{f(s): s \in S\}
S é um conjunto discreto de soluções
```

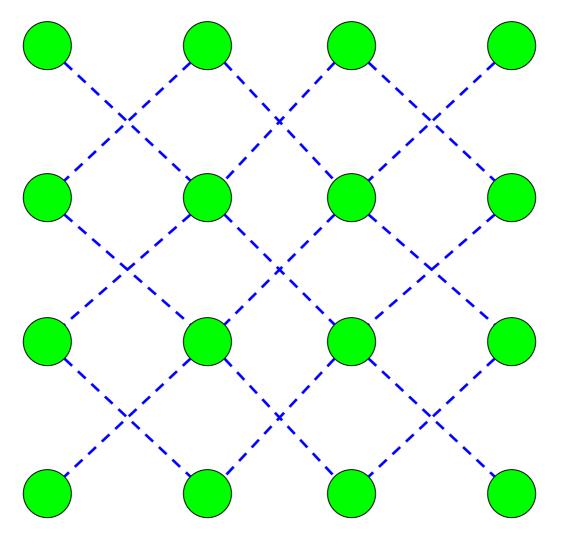
- Vizinhança: elemento que introduz a noção de proximidade entre as soluções de S.
- Uma vizinhança é um mapeamento que associa cada solução s a um conjunto de soluções (vizinhos).

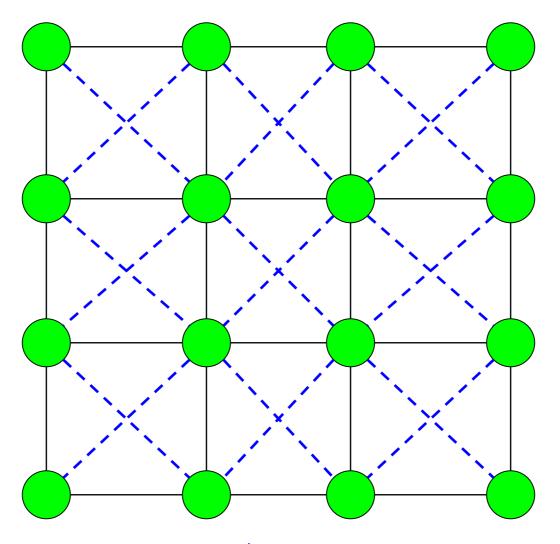
 $N(s) = \{s_1, s_2, ..., s_k\}$ : soluções vizinhas de s

Boas vizinhanças permitem representar de forma compacta o conjunto de soluções vizinhas de uma solução s qualquer e percorrer (visitar, explorar) de maneira eficiente o conjunto de soluções.







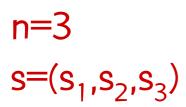


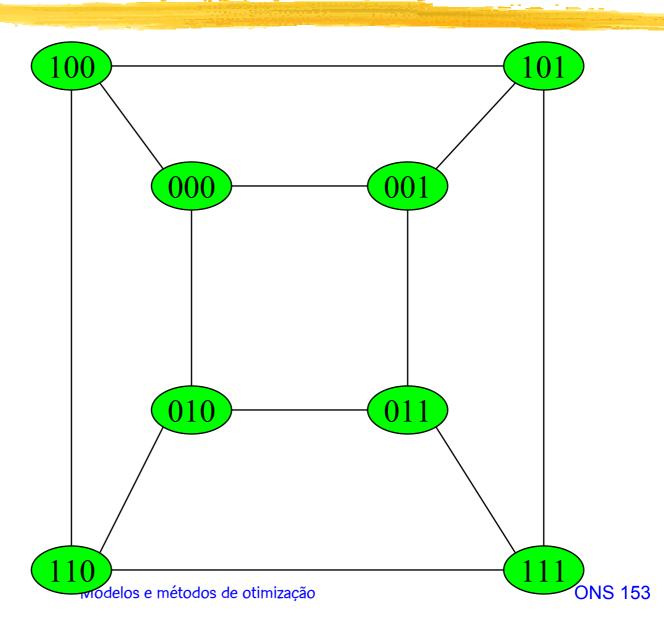
- Espaço de busca: definido pelo conjunto de soluções S e por uma vizinhança N
- Representação por um grafo:
  - Nós → soluções
  - Arestas → soluções vizinhas

 Exemplo: problema da mochila vetor de pertinência 0-1

Solução 
$$s = (s_1,...,s_i,...,s_n)$$
  $s_i \in \{0,1\}, i=1,...,n$   
 $N(s) = \{(s_1,...,1-s_i,...,s_n): i=1,...,n\}$ 

```
Vizinhos de (1,0,1,1)= \{(0,0,1,1),(1,1,1),(1,0,0,1),(1,0,1,0)\}
```





- Exemplo: problema do caixeiro viajante (permutações)
  - Solução  $\pi = (\pi_1, ..., \pi_{i-1}, \pi_i, \pi_{i+1}, ..., \pi_i, ..., \pi_n)$
- $N_1(\pi) = \{(\pi_1, ..., \pi_{i+1}, \pi_i, ..., \pi_n) : i=1, ..., n-1\}$

Troca da posição de duas cidades consecutivas:

vizinhos de 
$$(1,2,3,4) = \{(2,1,3,4),(1,3,2,4),(1,2,4,3)\}$$

$$\pi = (\pi_1, \dots, \pi_{i-1}, \pi_i, \pi_{i+1}, \dots, \pi_n)$$

$$\pi' = (\pi_1, \dots, \pi_{i-1}, \pi_{i+1}, \pi_1, \dots, \pi_n)$$

<u>Exemplo</u>: problema do caixeiro viajante (permutações)

Solução 
$$\pi = (\pi_1, ..., \pi_{i-1}, \pi_i, \pi_{i+1}, ..., \pi_i, ..., \pi_n)$$

•  $N_2(\pi) = \{(\pi_1, ..., \pi_j, ..., \pi_n): i=1, ..., n-1; j=i+1, ..., n\}$ 

Troca da posição de duas cidades quaisquer:

vizinhos de 
$$(1,2,3,4)$$
=  $\{(2,1,3,4),(1,3,2,4),(1,2,4,3),(3,2,1,4),(1,4,3,2),(4,2,3,1)\}$ 

$$\pi = (\pi_1, ..., \pi_i, ..., \pi_j, ..., \pi_n)$$

$$\pi' = (\pi_1, ..., \pi_i, ..., \pi_i, ..., \pi_n)$$

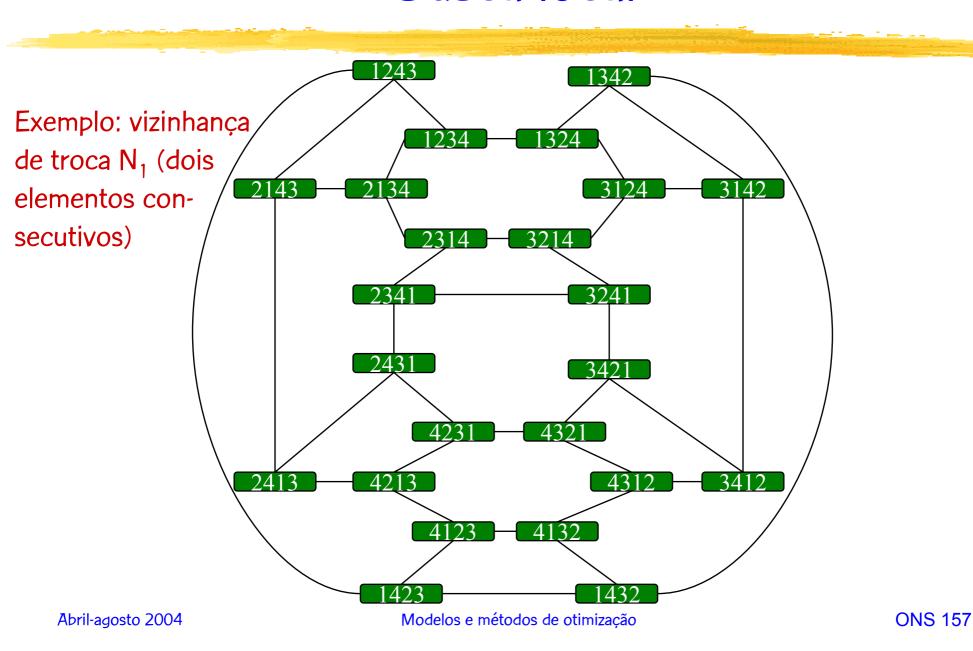
- <u>Exemplo</u>: problema do caixeiro viajante (permutações)
  - Solução  $\pi = (\pi_1, ..., \pi_{i-1}, \pi_i, \pi_{i+1}, ..., \pi_i, ..., \pi_n)$
- $N_3(\pi) = \{(\pi_1, ..., \pi_{i-1}, \pi_{i+1}, ..., \pi_j, \pi_i, ..., \pi_n): i=1, ..., n-1; j=i+1, ..., n\}$

Inserção de uma cidade em uma posição qualquer:

vizinhos de 
$$(1,2,3,4)=\{(2,1,3,4),(2,3,1,4),(2,3,4,1),(1,3,2,4),(1,3,4,2),(1,2,4,3)\}$$

$$\pi = (\pi_1, \dots, \pi_{i-1}, \pi_i, \pi_{i+1}, \dots, \pi_j, \pi_{j+1}, \dots, \pi_n)$$

$$\pi' = (\pi_1, \dots, \pi_{i-1}, \pi_{i+1}, \dots, \pi_i, \pi_i, \pi_i, \pi_{i+1}, \dots, \pi_n)$$



- O espaço de busca pode ser visto como um grafo cujos vértices são as <u>soluções</u> e no qual existem arestas entre pares de vértices associados a soluções <u>vizinhas</u>.
- Este espaço pode ser visto como uma superfície com vales e cumes definidos pelo valor e pela proximidade (vizinhança) das soluções.
- Um <u>caminho</u> no espaço de busca consiste numa seqüência de soluções, onde duas soluções consecutivas quaisquer são vizinhas.

- <u>Ótimo local</u>: solução tão boa ou melhor do que qualquer solução vizinha
- Problema de minimização:

s<sup>+</sup> é um ótimo local

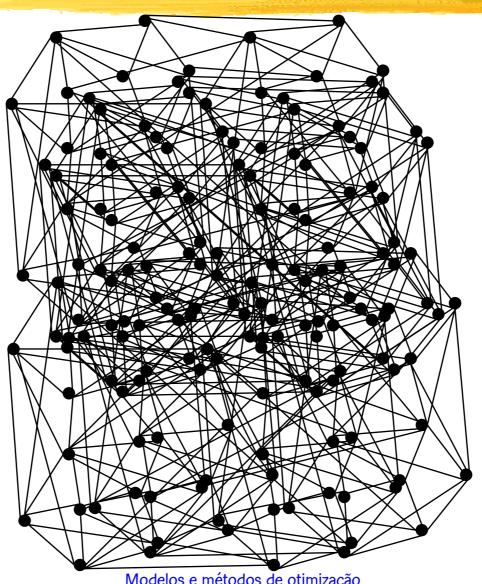
$$\uparrow \downarrow \downarrow$$

$$f(s^+) \leq f(s), \forall s \in N(s^+)$$

Ótimo global ou solução ótima s\*:

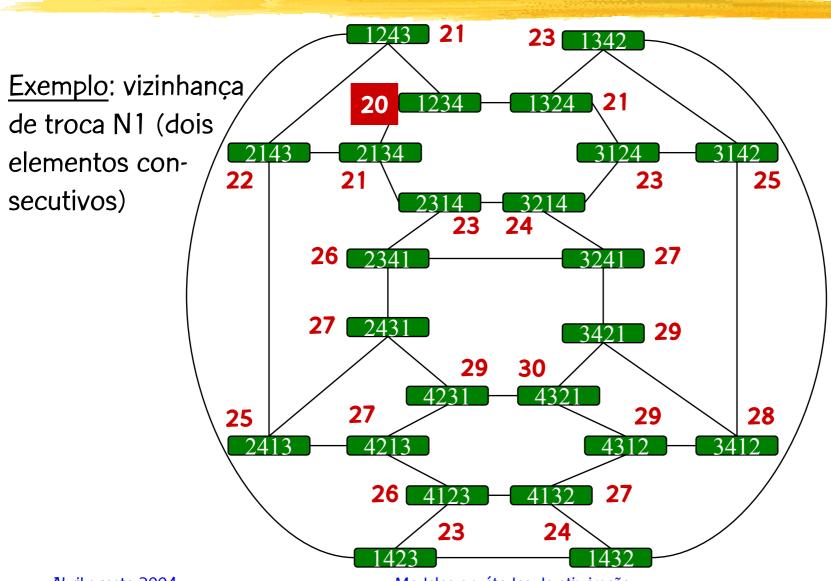
$$f(s^*) \le f(s), \forall s \in S$$

- Algoritmos de busca local são construídos como uma estratégia de exploração do espaço de busca.
- <u>Partida</u>: solução inicial obtida através de um método construtivo
- Iteração: melhoria sucessiva da solução corrente através de uma busca na sua vizinhança
- Parada: primeiro ótimo local encontrado (não existe solução vizinha aprimorante)
- Heurística subordinada utilizada para obter uma solução aprimorante na vizinhança



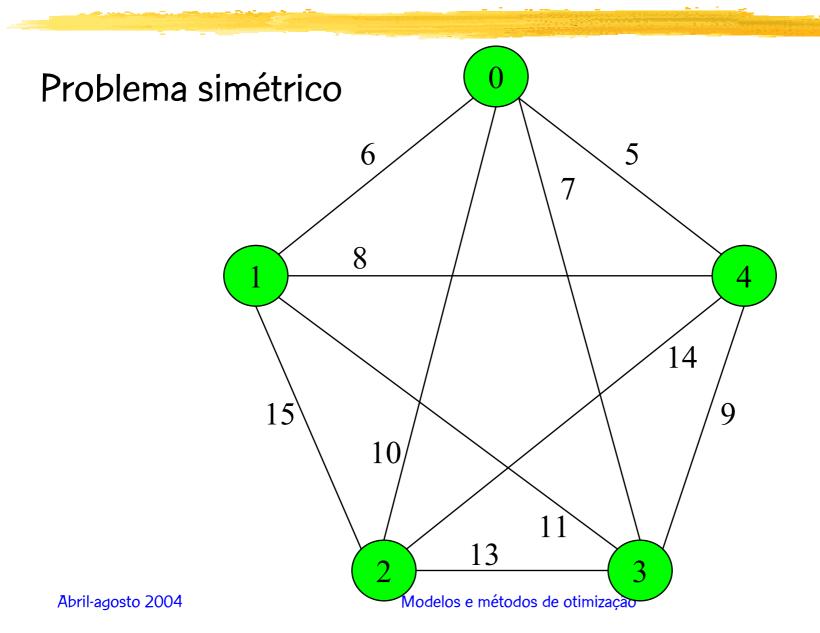
- Questões fundamentais:
  - Solução inicial
  - Definição da vizinhança
  - Estratégia de busca na vizinhança:
    - Melhoria iterativa: a cada iteração, selecionar qualquer (eventualmente a primeira) solução aprimorante na vizinhança
    - Descida mais rápida: a cada iteração, selecionar a melhor solução aprimorante na vizinhança

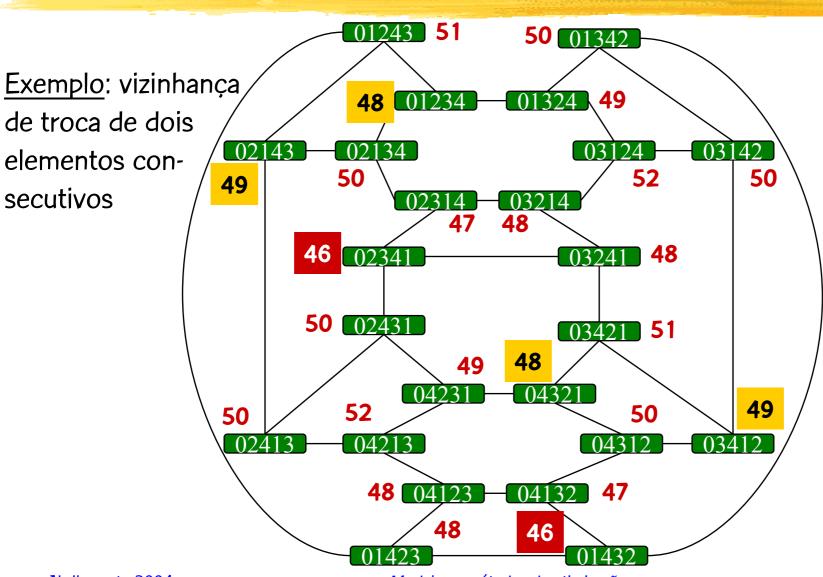
- Questões fundamentais:
  - Complexidade de cada iteração:
    - Proporcional ao tamanho da vizinhança
    - Eficiência depende da forma como é calculada a função objetivo para cada solução vizinha: algoritmos eficientes são capazes de atualizar os valores quando a solução corrente se modifica, evitando cálculos repetitivos e desnecessários da função objetivo.



Abril-agosto 2004

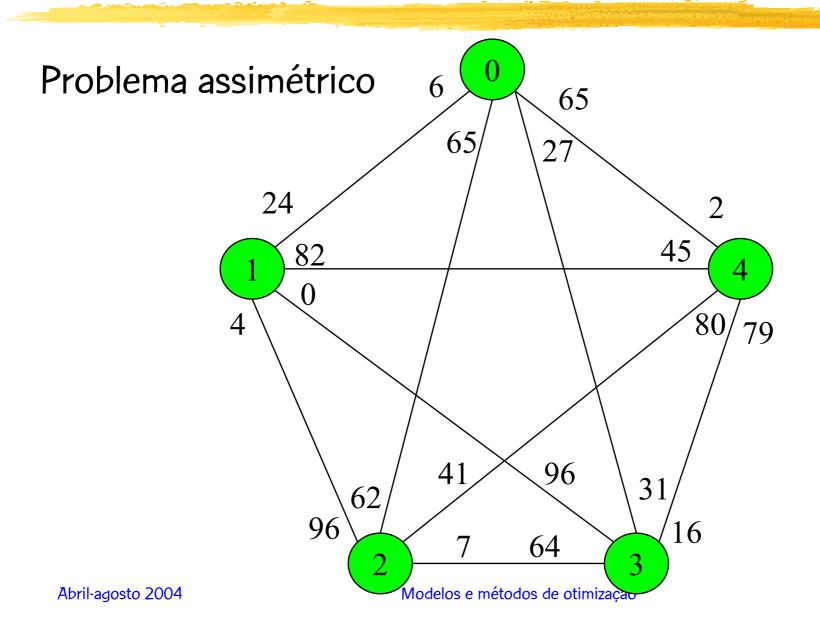
Modelos e métodos de otimização

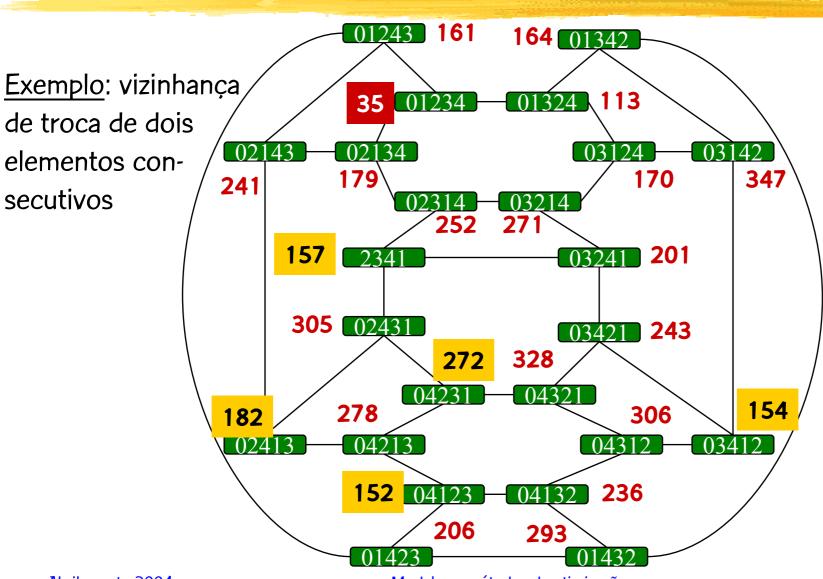




Abril-agosto 2004

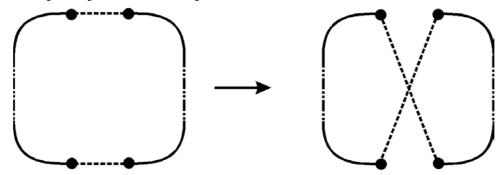
**ONS 167** 



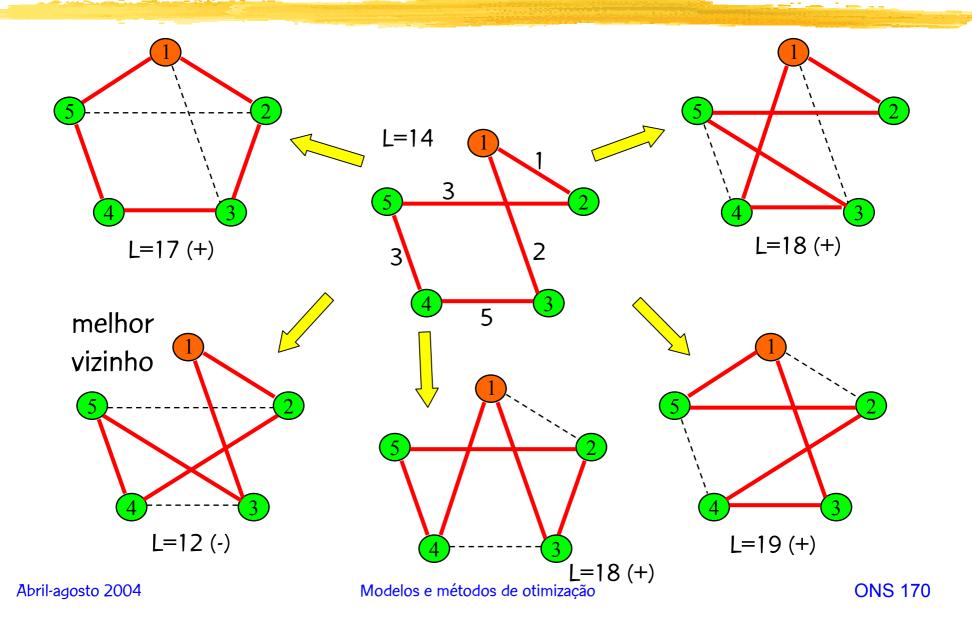


Abril-agosto 2004

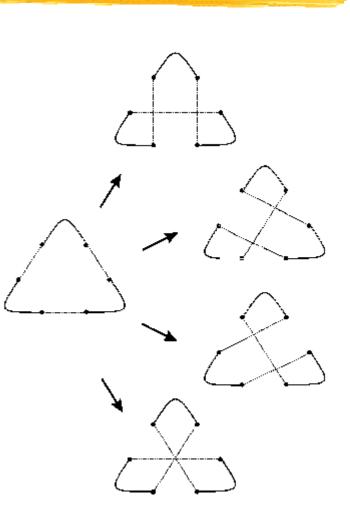
Vizinhança 2-opt para o problema do caixeiro viajante:



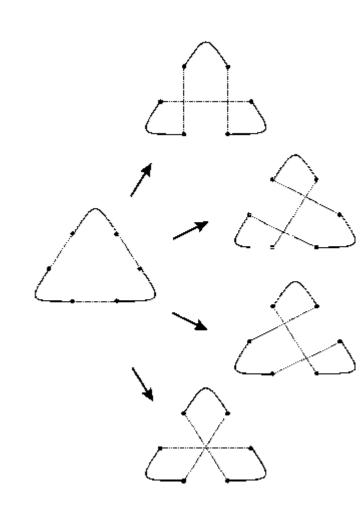
- Escolher duas arestas quaisquer, eliminá-las e substituílas por outro par (único) de arestas de modo a formar novo circuito.
- Há da ordem de n² soluções vizinhas.
- O custo de cada solução vizinha pode ser facilmente recalculado.



- Vizinhança 3-opt para o problema do caixeiro viajante:
- Escolher três arestas quaisquer, eliminá-las e substituí-las por três outras arestas, de modo a formar novo circuito.
- Há da ordem de n³ soluções vizinhas.
- O custo de cada solução vizinha continua podendo ser facilmente recalculado.



- Vizinhança k-opt para o problema do caixeiro viajante:
- Extensão até n-opt corresponderia a uma busca exaustiva do espaço de soluções!
- A complexidade (tempo) de cada iteração aumenta com k, enquanto o ganho possível diminui.



- Diferentes aspectos do espaço de busca influenciam o desempenho da busca local:
  - Conexidade: deve existir um caminho no espaço de busca entre qualquer par de soluções
  - Distância: número de soluções visitadas ao longo do caminho mais curto entre duas soluções
  - Diâmetro: distância entre as duas soluções mais afastadas (diâmetros reduzidos)

- Dificuldades e problemas do método de busca local:
  - Término no primeiro ótimo local encontrado
  - Sensível à solução de partida
  - Sensível à vizinhança escolhida
  - Sensível à estratégia de busca
  - Pode exigir um número exponencial de iterações!
- Como melhorar seu desempenho?

- Extensões e melhorias:
  - Multipartida: iniciar a busca a partir de diferentes soluções iniciais.
  - Redução da vizinhança: explorar parcialmente a vizinhança (aleatorização, soluções mais promissoras, etc.).
  - Multivizinhanças: explorar novas vizinhanças, por exemplo após atingir um ótimo local segundo uma delas.
  - •
  - Metaheurísticas: estratégias para escapar de ótimos locais

### Metaheurísticas

- Metaheurísticas:
  - Simulated annealing
  - Busca tabu
  - GRASP
  - VNS (Variable Neighborhood Search)
  - Algoritmos genéticos
  - Scatter search
  - Colônias de formigas
- Freqüentemente inspiradas em paradigmas da natureza (processos físicos e biológicos)

### Metaheurísticas

- Diferentes estratégias para percorrer o espaço de busca e para escapar de ótimos locais
- Quase todas utilizam-se de diferentes maneiras dos mesmos componentes básicos comuns:
  - construções gulosas
  - randomização
  - busca local
  - multiplicidade de vizinhanças
  - memória
  - intensificação
  - diversificação, etc.

- GRASP: Greedy Randomized Adaptive Search Procedures
- Princípio: combinação de um algoritmo construtivo (randomizado) com busca local, em um procedimento iterativo com <u>iterações independentes</u>
  - (a) construção de uma solução
  - (b) busca local
  - (c) atualização da melhor solução

Algoritmo básico (minimização):

$$f(s^*) \leftarrow +\infty$$

Para i = 1,...,MaxIterações faça:

Construir uma solução s usando um algoritmo guloso randomizado

Aplicar um procedimento de busca local a partir de s, obtendo a solução s'

Se  $f(s') < f(s^*)$ , então fazer  $s^* \leftarrow s'$ 

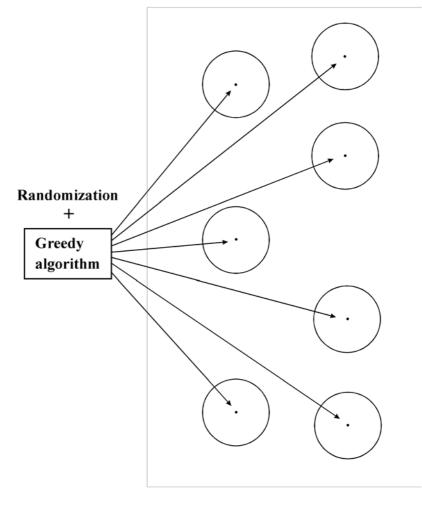
Fim-enquanto

- Fase de construção: aplicar um algoritmo guloso randomizado
- Cada iteração da fase de construção:
  - Avaliar o benefício de cada elemento fora da solução, usando uma função gulosa.
  - Criar uma lista de candidatos formada pelos melhores elementos.
  - Selecionar aleatoriamente um elemento da lista de candidatos

- Restrição dos elementos na lista de candidatos baseada:
  - ... no número máximo de elementos na lista
  - ... na qualidade dos elementos na lista (em relação à escolha puramente gulosa)
- Seleção aleatória feita entre os melhores elementos da lista de candidatos (não necessariamente o melhor, como no caso guloso):
  - A qualidade média das soluções encontradas depende da qualidade dos elementos na lista.
  - A diversidade das soluções construídas depende do número de elementos na lista.

- Diversificação baseada em randomização controlada: diferentes soluções construídas em diferentes iterações GRASP
- Fase de busca local: melhorar as soluções construídas
- A utilização de um algoritmo guloso randomizado na fase de construção permite acelerar muito cada aplicação da busca local (soluções próximas de um ótimo local).
- É comprovadamente mais rápido e encontra soluções melhores do que um método multi-partida simples.

 Pode ser visto como uma técnica de amostragem no espaço de busca:



Solution space

- Implementação simples: algoritmo guloso e busca local
- Heurísticas gulosas são simples de projetar e implementar.
- Poucos parâmetros a serem ajustados:
  - restritividade da lista de candidatos
  - número de iterações
- Depende de boas soluções iniciais: baseado apenas na randomização de uma iteração para outra, cada iteração se beneficia da qualidade de sua solução inicial.

- Problema: falta de "memória"
  - Em uma determinada iteração, não são utilizadas informações sobre as soluções construídas e visitadas nas iterações precedentes.
  - Esta dificuldade pode ser superada por implementações mais avançadas, que incorporam memória:
    - GRASP reativo: controle automático do nível apropriado de randomização durante a fase de construção
    - > Reconexão por caminhos: explorar trajetórias entre a solução atual e boas soluções construídas nas iterações precedentes

- Extensões e melhorias:
  - Uso de filtros: aplicar busca local apenas...
  - ... à melhor solução construída ao longo de uma seqüência de aplicações do algoritmo guloso randomizado (já que a busca local é a componente mais cara em termos de tempo de processamento).
  - ... às soluções construídas que satisfazem um determinado limiar de aceitação (soluções potencialmente boas).
- Processamento paralelo: a estrutura do algoritmo é altamente favorável a implementações paralelas eficientes com acelerações lineares em clusters.

# Exercício – Avaliação

- Implementar três (ou mais) heurísticas para o problema do caixeiro viajante e compará-las em termos da qualidade das soluções encontradas e dos tempos de processamento.
- Algumas idéias:
  - Usar instâncias conhecidas publicadas na literatura.
  - Implementar as diferentes heurísticas usando a mesma linguagem e compilador.
  - Testar todas as heurísticas na mesma máquina.
  - Usar gráficos.
  - Comparar os métodos entre si e com as soluções ótimas.

# Exercício – Avaliação

 Descrição de instâncias e soluções ótimas para o problema do caixeiro viajante:

http://www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/comopt/software/TSPLIB95/

Estudo comparativo de heurísticas para o problema do caixeiro viajante:

http://www.research.att.com/~dsj/chtsp/

Em particular, página com gráficos comparativos:

http://www.research.att.com/~dsj/chtsp/testform2.html

Referência: Lawler, Lenstra, Rinnooy Kan e Shmoys (eds.),
 "The traveling salesman problem", 1985 (entre outras)