
Introdução a Otimização por Metaheurísticas

Otimização Matemática

Douglas Rodrigues

São Paulo State University - UNESP
School of Sciences / Department of Computing
Bauru, SP - Brazil

Introdução

O que é otimização?

Definição (Otimização)

Otimização é o processo de resolução de um problema de otimização, ou seja, encontrar soluções adequadas para isso.

O que é otimização?

Definição (Problema de Otimização: Visão Economica)

Um problema de otimização é uma situação que requer a decisão por uma escolha entre um conjunto de alternativas possíveis, a fim de alcançar um benefício predefinido/requerido com custos mínimos.

O que é otimização?

Definição (Problema de Otimização: Visão Economica)

Um problema de otimização é uma situação que requer a decisão por uma escolha entre um conjunto de alternativas possíveis, a fim de alcançar um benefício predefinido/requerido com custos mínimos.

Definição (Problema de Otimização: Visão Matemática)

Resolver um problema de otimização requer encontrar um valor de entrada x^* para o qual uma função matemática f assume o menor valor possível (embora geralmente obedeça a algumas restrições nos valores possíveis de x^*).

O que é otimização?

- Alguns problemas de otimização são muito complicados para encontrar a solução (ótima) perfeita (em tempo razoável).

O que é otimização?

- Alguns problemas de otimização são muito complicados para encontrar a solução (ótima) perfeita (em tempo razoável).
- Então, queremos encontrar soluções aproximadas: soluções que sejam “as melhores possíveis” dentro de um prazo viável.

O que é otimização?

- Alguns problemas de otimização são muito complicados para encontrar a solução (ótima) perfeita (em tempo razoável).
- Então, queremos encontrar soluções aproximadas: soluções que sejam “as melhores possíveis” dentro de um prazo viável.
- Isso é o que os algoritmos de otimização metaheurística fazem.

- Muitas questões no mundo real podem ser modelados como sendo problemas de otimização.

- Muitas questões no mundo real podem ser modelados como sendo problemas de otimização.
 - Encontrar o caminho mais curto para um vendedor visitar um determinado conjunto de cidades.

- Muitas questões no mundo real podem ser modelados como sendo problemas de otimização.
 - Encontrar o caminho mais curto para um vendedor visitar um determinado conjunto de cidades.
 - Preciso transportar n itens daqui para outra cidade, mas eles são grandes demais para serem transportados todos de uma vez. Como posso carregá-los em meu carro de maneira a minimizar o número de viagens?

- Muitas questões no mundo real podem ser modelados como sendo problemas de otimização.
 - Encontrar o caminho mais curto para um vendedor visitar um determinado conjunto de cidades.
 - Preciso transportar n itens daqui para outra cidade, mas eles são grandes demais para serem transportados todos de uma vez. Como posso carregá-los em meu carro de maneira a minimizar o número de viagens?
 - Encontrar os mínimos de funções matemáticas complexas e multidimensionais.

Classificação dos Tipos de Problemas

Muitos problemas são combinatórios ou numéricos:

Definição (Problema de Otimização Combinatória)

Problemas de otimização combinatória são problemas que possuem soluções finitas e discretas.

Classificação dos Tipos de Problemas

Muitos problemas são combinatórios ou numéricos:

Definição (Problema de Otimização Combinatória)

Problemas de otimização combinatória são problemas que possuem soluções finitas e discretas.

- cadeias de bits (ou seja, muitas decisões sim-não); ou
- permutações de elementos.

Classificação dos Tipos de Problemas

Muitos problemas são combinatórios ou numéricos:

Definição (Problema de Otimização Combinatória)

Problemas de otimização combinatória são problemas que possuem soluções finitas e discretas.

- cadeias de bits (ou seja, muitas decisões sim-não); ou
- permutações de elementos.

Definição (Problema de Otimização Numérica)

Problemas de otimização numérica são problemas definidos ao longo de domínios numéricos ou envolvimento de variáveis de decisão com valor real.

O que é um algoritmo de otimização?

Definição (Algoritmo)

Um algoritmo é um conjunto finito de instruções bem definidas para realizar alguma tarefa. Começa em algum estado inicial e geralmente termina em um estado final.

O que é um algoritmo de otimização?

Definição (Algoritmo)

Um algoritmo é um conjunto finito de instruções bem definidas para realizar alguma tarefa. Começa em algum estado inicial e geralmente termina em um estado final.

- Um algoritmo nos diz o que podemos fazer para resolver uma determinada tarefa.

O que é um algoritmo de otimização?

Definição (Algoritmo)

Um algoritmo é um conjunto finito de instruções bem definidas para realizar alguma tarefa. Começa em algum estado inicial e geralmente termina em um estado final.

- Um algoritmo nos diz o que podemos fazer para resolver uma determinada tarefa.

Definição (Algoritmo de Otimização)

Um algoritmo de otimização é um algoritmo adequado para resolver problemas de otimização.

O que é um algoritmo de otimização?

Definição (Algoritmo)

Um algoritmo é um conjunto finito de instruções bem definidas para realizar alguma tarefa. Começa em algum estado inicial e geralmente termina em um estado final.

- Um algoritmo nos diz o que podemos fazer para resolver uma determinada tarefa.

Definição (Algoritmo de Otimização)

Um algoritmo de otimização é um algoritmo adequado para resolver problemas de otimização.

- Os algoritmos de otimização nos dizem como encontrar soluções classificadas como melhores (ou pelo menos bem) em um conjunto de soluções possíveis, para uma classe geral de problemas.

Definição (Heurística)

Heurísticas são estratégias práticas que diminuem o tempo de tomada de decisão e permitem que as pessoas funcionem sem parar constantemente para pensar em seu próximo curso de ação.

Definição (Heurística)

Heurísticas são estratégias práticas que diminuem o tempo de tomada de decisão e permitem que as pessoas funcionem sem parar constantemente para pensar em seu próximo curso de ação.

- Derivado da palavra grega *heuriskein*, que significa descobrir.

Definição (Heurística)

Heurísticas são estratégias práticas que diminuem o tempo de tomada de decisão e permitem que as pessoas funcionem sem parar constantemente para pensar em seu próximo curso de ação.

- Derivado da palavra grega *heuriskein*, que significa descobrir.
- Método de investigação baseado na aproximação progressiva de um dado problema.

Definição (Heurística)

Heurísticas são estratégias práticas que diminuem o tempo de tomada de decisão e permitem que as pessoas funcionem sem parar constantemente para pensar em seu próximo curso de ação.

- Derivado da palavra grega *heuriskein*, que significa descobrir.
- Método de investigação baseado na aproximação progressiva de um dado problema.
- Conjunto de regras e métodos que conduzem à descoberta, à invenção e à resolução de problemas.

Definição (Heurística)

Heurísticas são estratégias práticas que diminuem o tempo de tomada de decisão e permitem que as pessoas funcionem sem parar constantemente para pensar em seu próximo curso de ação.

- Derivado da palavra grega *heuriskein*, que significa descobrir.
 - Método de investigação baseado na aproximação progressiva de um dado problema.
 - Conjunto de regras e métodos que conduzem à descoberta, à invenção e à resolução de problemas.
- ⇒ Tomar decisões gastando menos tempo e empreendendo menos esforços, por meio de atalhos.

- Heurísticas são frequentemente algoritmos especializados.

- Heurísticas são frequentemente algoritmos especializados.
- No entanto, existem diferentes problemas de otimização.

- Heurísticas são frequentemente algoritmos especializados.
- No entanto, existem diferentes problemas de otimização.
- Deveríamos desenvolver um método completamente novo para cada problema?

- Heurísticas são frequentemente algoritmos especializados.
- No entanto, existem diferentes problemas de otimização.
- Deveríamos desenvolver um método completamente novo para cada problema?
- Não. Queremos algoritmos gerais que possam ser adaptados a diferentes problemas.

Definição (Metaheurística)

Uma metaheurística é um método para resolver classes de problemas muito gerais. Combina funções objetivas ou heurísticas de uma forma abstrata e, esperançosamente, eficiente, geralmente tratando-as como procedimentos de caixa preta.

Algoritmos de otimização (meta-)heurísticos tentam encontrar soluções que sejam **tão boas quanto possível, o mais rápido possível**.

- O desempenho do algoritmo tem duas dimensões: qualidade da solução e tempo de execução necessário.
 - Algoritmos *anytime* são métodos de otimização que mantêm uma solução aproximada a qualquer momento durante sua execução e melhoram iterativamente essa estimativa.
 - Todas as metaheurísticas são algoritmos *anytime*.
- ⇒ **Consequência:** A maioria dos algoritmos de otimização produzem soluções aproximadas de diferentes qualidades em diferentes pontos durante o processo.

Algoritmos de otimização (meta-)heurísticos tentam encontrar soluções que sejam **tão boas quanto possível, o mais rápido possível**.

- O desempenho do algoritmo tem duas dimensões: qualidade da solução e tempo de execução necessário.
- Algoritmos *anytime* são métodos de otimização que mantêm uma solução aproximada a qualquer momento durante sua execução e melhoram iterativamente essa estimativa.
- Todas as metaheurísticas são algoritmos *anytime*.

⇒ **Consequência:** A maioria dos algoritmos de otimização produzem soluções aproximadas de diferentes qualidades em diferentes pontos durante o processo.

Algoritmos de otimização (meta-)heurísticos tentam encontrar soluções que sejam **tão boas quanto possível, o mais rápido possível**.

- O desempenho do algoritmo tem duas dimensões: qualidade da solução e tempo de execução necessário.
- Algoritmos *anytime* são métodos de otimização que mantêm uma solução aproximada a qualquer momento durante sua execução e melhoram iterativamente essa estimativa.
- Todas as metaheurísticas são algoritmos *anytime*.

⇒ **Consequência:** A maioria dos algoritmos de otimização produzem soluções aproximadas de diferentes qualidades em diferentes pontos durante o processo.

Algoritmos de otimização (meta-)heurísticos tentam encontrar soluções que sejam **tão boas quanto possível, o mais rápido possível**.

- O desempenho do algoritmo tem duas dimensões: qualidade da solução e tempo de execução necessário.
 - Algoritmos *anytime* são métodos de otimização que mantêm uma solução aproximada a qualquer momento durante sua execução e melhoram iterativamente essa estimativa.
 - Todas as metaheurísticas são algoritmos *anytime*.
- ⇒ **Consequência:** A maioria dos algoritmos de otimização produzem soluções aproximadas de diferentes qualidades em diferentes pontos durante o processo.

- Podemos dividir os algoritmos em: determinísticos e estocásticos.

- Podemos dividir os algoritmos em: determinísticos e estocásticos.

Definição (Algoritmos Determinísticos)

Em cada etapa de execução de um algoritmo determinístico existe no máximo uma maneira de proceder. Se não existir nenhuma maneira de prosseguir, o algoritmo foi encerrado.

Exemplo: Testar todas as soluções possíveis uma por uma e, assim, encontrar a solução ótima.

- Podemos dividir os algoritmos em: determinísticos e estocásticos.

Definição (Algoritmos Estocásticos)

Um algoritmo aleatório ou estocástico inclui pelo menos uma instrução que atua com base em números aleatórios. Em outras palavras, um algoritmo estocástico viola a restrição do determinismo.

Exemplo: continue criando soluções aleatoriamente até o tempo acabar, lembre-se da melhor (Amostragem Aleatória).

- Podemos dividir os algoritmos em: determinísticos e estocásticos.
- Lidaremos principalmente com algoritmos estocásticos.

- Podemos dividir os algoritmos em: determinísticos e estocásticos.
- Lidaremos principalmente com algoritmos estocásticos.
- Os problemas mais interessantes não podem ser resolvidos de forma otimizada.

- Problemas e algoritmos de otimização podem ser divididos em otimização de objetivo único e multiobjetivo.

Definição (Otimização de Objetivo Único)

Dada uma única função objetivo f para avaliar a qualidade da solução, queremos encontrar as soluções onde f assume valores mínimos (ou máximos).

- Problemas e algoritmos de otimização podem ser divididos em otimização de objetivo único e multiobjetivo.

Definição (Otimização Multiobjetivos)

Dado um conjunto \vec{f} de diferentes critérios de otimização, onde $f_i \in \vec{f}, i = 1 \dots n$, queremos encontrar soluções que representem um bom compromisso.

- Problemas e algoritmos de otimização podem ser divididos em otimização de objetivo único e multiobjetivo.
- Lidaremos principalmente com otimização de objetivo único.

Vantagens e Desvantagens

- **Vantagens:**

Vantagens e Desvantagens

- **Vantagens:**
 - Encontram soluções sub-ótimas.

Vantagens e Desvantagens

- **Vantagens:**

- Encontram soluções sub-ótimas.
- Ideal para resolver problemas difíceis (complexidade alta) em tempo relativamente hábil.

Vantagens e Desvantagens

- **Vantagens:**

- Encontram soluções sub-ótimas.
- Ideal para resolver problemas difíceis (complexidade alta) em tempo relativamente hábil.
- Utiliza procedimentos de busca local com mecanismos para evitar ficar preso em ótimos locais.

Vantagens e Desvantagens

- **Vantagens:**

- Encontram soluções sub-ótimas.
- Ideal para resolver problemas difíceis (complexidade alta) em tempo relativamente hábil.
- Utiliza procedimentos de busca local com mecanismos para evitar ficar preso em ótimos locais.
 - diversificação \times intensificação;

Vantagens e Desvantagens

- **Vantagens:**

- Encontram soluções sub-ótimas.
- Ideal para resolver problemas difíceis (complexidade alta) em tempo relativamente hábil.
- Utiliza procedimentos de busca local com mecanismos para evitar ficar preso em ótimos locais.
 - diversificação \times intensificação;

- **Desvantagens:**

Vantagens e Desvantagens

- **Vantagens:**

- Encontram soluções sub-ótimas.
- Ideal para resolver problemas difíceis (complexidade alta) em tempo relativamente hábil.
- Utiliza procedimentos de busca local com mecanismos para evitar ficar preso em ótimos locais.
 - diversificação \times intensificação;

- **Desvantagens:**

- Não garante solução ótima;

Vantagens e Desvantagens

- **Vantagens:**

- Encontram soluções sub-ótimas.
- Ideal para resolver problemas difíceis (complexidade alta) em tempo relativamente hábil.
- Utiliza procedimentos de busca local com mecanismos para evitar ficar preso em ótimos locais.
 - diversificação \times intensificação;

- **Desvantagens:**

- Não garante solução ótima;
- Não garante convergir para o mesmo ponto em 2 execuções diferentes.

Diversificação e Intensificação

De grande importância na aplicabilidade de uma metaheurística é o balanço dinâmico entre **diversificação** e **intensificação**:

- Diversificação (*Exploration*): exploração diversificada, busca em largura ou simplesmente exploração;
- Intensificação (*Exploitation*): exploração focada, busca em profundidade ou intensificação.

Encontrar o equilíbrio entre diversificação e intensificação!

Diversificação e Intensificação

De grande importância na aplicabilidade de uma metaheurística é o balanço dinâmico entre **diversificação** e **intensificação**:

- **Diversificação (Exploration)**: exploração diversificada, busca em largura ou simplesmente exploração;
- **Intensificação (*Exploitation*)**: exploração focada, busca em profundidade ou intensificação.

Encontrar o equilíbrio entre diversificação e intensificação!

Diversificação e Intensificação

De grande importância na aplicabilidade de uma metaheurística é o balanço dinâmico entre **diversificação** e **intensificação**:

- **Diversificação (Exploration)**: exploração diversificada, busca em largura ou simplesmente exploração;
- **Intensificação (Exploitation)**: exploração focada, busca em profundidade ou intensificação.

Encontrar o equilíbrio entre diversificação e intensificação!

Diversificação e Intensificação

De grande importância na aplicabilidade de uma metaheurística é o balanço dinâmico entre **diversificação** e **intensificação**:

- **Diversificação (Exploration)**: exploração diversificada, busca em largura ou simplesmente exploração;
- **Intensificação (Exploitation)**: exploração focada, busca em profundidade ou intensificação.

Encontrar o equilíbrio entre diversificação e intensificação!

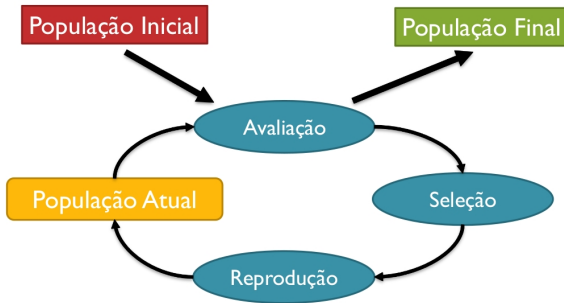
Algoritmos Evolutivos

- Classe de técnicas de otimização metaheurísticas.
- Baseados na teoria da evolução.
- **Ideia:**
 - Gerar uma população de indivíduos que evoluem em direção à melhor solução.

- Classe de técnicas de otimização metaheurísticas.
- Baseados na teoria da evolução.
- **Ideia:**
 - Gerar uma população de indivíduos que evoluem em direção à melhor solução.
 - Emprega ideias de cruzamento, mutação genética e seleção natural.

- Algoritmos Evolutivos são compostos, no geral, por 4 etapas:
 - **Inicialização da população:** Cada indivíduo é inicializado com valores aleatórios dentro do espaço de busca;
 - **População:** Conjunto de indivíduos, onde cada um representa um ponto no espaço de busca, ou uma solução;
 - **Crossover:** Cruzamento de características entre 2 indivíduos, que formaram um novo indivíduo para a nova geração;
 - **Mutação:** Mutação aleatória de indivíduos, a fim de evitar que a convergência fique presa em mínimos locais;
 - **Seleção:** Funciona como a seleção natural, onde os indivíduos competem e os mais aptos sobrevivem e se reproduzem;

Algoritmos Evolutivos



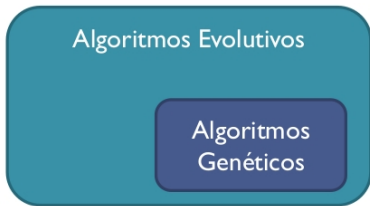
Algorithm 1: Algoritmo Evolutivo Padrão

Input: pc , pm
1 Inicializa \mathbf{P} ;
2 \mathbf{f} = Avaliação(\mathbf{P});
3 **while** ! *critério de parada* **do**
4 \mathbf{P} = Seleção(\mathbf{P} , \mathbf{f});
5 \mathbf{P} = Crossover(\mathbf{P} , \mathbf{f} , pc);
6 \mathbf{P} = Mutação(\mathbf{P} , pm);
7 \mathbf{f} = Avaliação(\mathbf{P});
8 **end**
9 **Retorne** melhor indivíduo de \mathbf{P} ;

- \mathbf{P} é a população atual, pc é a probabilidade de crossover, pm é a probabilidade de mutação, e \mathbf{f} é o valor da avaliação de cada indivíduo (fit).

Algoritmo Genético

- Caso especial de algoritmos evolutivos;
- Utiliza conceitos e vocábulos da genética natural.



Algoritmo Genético

- Soluções ou indivíduo são chamados de cromossomos;
- Cromossomos são compostos por um vetor onde cada posição (parâmetro a ser representado) é um gene;
- Cada gene assume um valor binário, que pode ser combinado para representar valores inteiros ou reais;
- OBS: Utilizar código de Grey para conversão.

◦ Cromossomo:



◦ Alelos: {0,1}

Locus

Gene

Inicialização

- Inicializa cada cromossomo da população com valores aleatórios;
- Genes assumem valores 0 ou 1;

- Cromossomo:



- Alelos: {0,1}

Locus

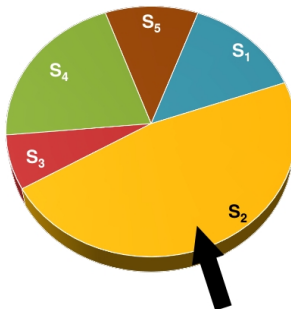
Gene

- Função de custo (*fitness function*):
 - Avalia cada cromossomo e retorna um valor para cada um;
- Valor representa a saída da função que se deseja otimizar;
- **Ex:**
 - Acurácia de uma rede MLP dado os parametros representados pelo cromossomo;

Seleção

- Favorece os indivíduos mais aptos para reprodução;
- Proporciona novas gerações mais aptas;
- Permite indivíduos menos aptos serem selecionados:
 - com uma probabilidade mais baixa;
 - mantém a diversidade;
- Maneira mais comum: **Roleta:**

Indivíduo (S_i)	Aptidão $f(S_i)$	Aptidão Relativa
S_1 10110	2,23	0,14
S_2 11000	7,27	0,47
S_3 11110	1,05	0,07
S_4 01001	3,35	0,21
S_5 00110	1,69	0,11



Crossover

- Operador genético que combina os genes de 2 pais para formar novos indivíduo;
- Pode ser executado com um ponto, dois pontos, ou de modo uniforme:

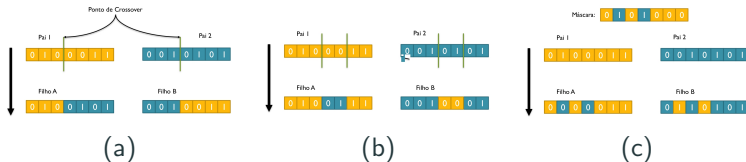
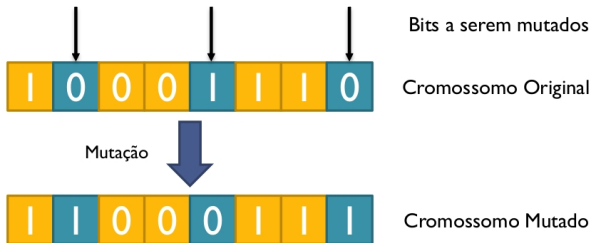


Figura 1: Um ponto (a), dois pontos (b) e uniforme (c).

Mutação

- Operador genético que altera aleatoriamente um ou mais genes de um cromossomo;
- Introduz uma diversidade genética;
- Assugura probabilidade de atingir qualquer ponto no espaço de busca.



- Elitismo, pode ser aplicado para garantir que o melhor indivíduo seja automaticamente selecionado para a próxima geração;
- Utilizado para que melhor indivíduo não desapareça da população;
 - Proporcionaria um retrocesso no resultado;

Critério de Parada

- Número máximo de iterações/gerações;
- Valor de aptidão mínimo/médio;
- Convergência (não houve melhora nas últimas k iterações);



RECOGNA
LABORATORY

d.rodriques@unesp.br