CAP 254

CAP 254

Otimização Combinatória

Professor: **Dr. L.A.N. Lorena**

Assunto: Metaheurísticas

Antonio Augusto Chaves

Conteúdo

C01 – Simulated Annealing (20/11/07).

C02 – Busca Tabu (22/11/07).

C03 – Colônia de Formigas (27/11/07).

C04 - GRASP e VNS (29/11/07).

C05 – Metaheurísticas Híbridas – CS (04/12/07).

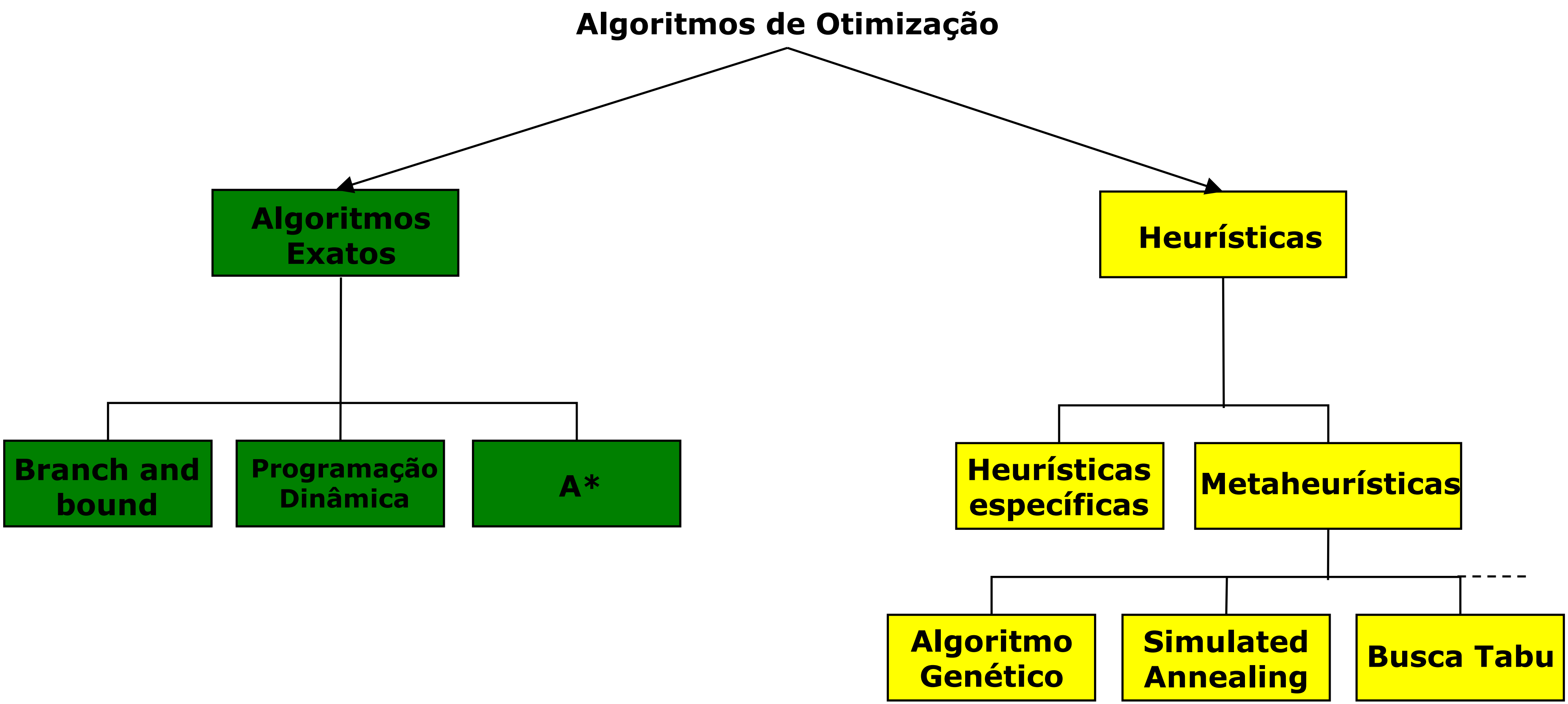
Métodos de Otimização

Métodos de Otimização

- **Algoritmos Exatos**
  - Fundamentação: na matemática
  - Vantagem: garantem a solução ótima (menor custo)
  - Desvantagens:
    - Modelagem mais complexa
    - Podem gastar um tempo proibitivo para gerar a solução ótima
    - Nem sempre conseguem produzir uma (boa) solução viável rapidamente

- **Heurísticas**
  - Fundamentação: na Inteligência Artificial
  - Vantagens:
    - De fácil implementação
    - Produzem boas soluções rapidamente
  - Desvantagem:
    - Não garantem a otimalidade da solução obtida

Métodos de Otimização



Heurísticas

- Processo de otimização busca encontrar a **melhor** solução viável, considerando o objetivo do problema e o conjunto de restrições.

- Os problemas podem ser modelados como problemas de **maximizar** ou **minimizar** uma função cujas variáveis estão sujeitas a certas restrições.

- Encontrar soluções ótimas ou mesmo aproximadas para problemas NP-difíceis é um desafio nem sempre fácil de ser alcançado.

- A partir deste cenário, as heurísticas surgem como uma ferramenta eficiente (rápida) para resolver problemas reais.

Heurísticas

- Em otimização, heurísticas são definidas como sendo uma técnica que procura **boas** soluções (próximas da otimalidade) a um custo computacional razoável, sem, no entanto, estar capacitada a garantir a otimalidade, bem como garantir quão próxima uma determinada solução está da solução ótima.

- A grande desvantagem das heurísticas reside na dificuldade de escapar de ótimos locais, o que deu origem à outra metodologia, chamada de **metaheurística**, que possui ferramentas que possibilitam sair destes ótimos locais, permitindo a busca em regiões mais promissoras.

- O grande desafio da Otimização Combinatória é produzir, em tempo competitivo, soluções tão próximas quanto possíveis da solução ótima.

Como representar uma solução de um problema?

- Problema da Mochila:

Representação de uma solução

Objeto	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
	0	1	0	1	1	0	0	1	0	0

- Problema do Caixeiro Viajante:

Representação de uma solução

Cidades	1	6	3	5	9	7	2	10	8	4

O que é Vizinhança?

- Um vizinho s' de uma solução s é uma solução na qual foi aplicado um movimento (definido a priori) modificando a solução corrente

Objeto	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
(s)	0	1	0	1	1	**0**	0	1	0	0

Aplicar um movimento de trocar bit

Objeto	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
(s')	0	1	0	1	1	**1**	0	1	0	0

Metaheurísticas

- Metaheurísticas:
  - Solução única: Simulated Annealing, Busca Tabu (Tabu Search), GRASP, VNS...
  - População: Algoritmos Evolutivos, Scartter Search, Colônia de Formigas

Simulated Annealing (SA)

Fundamentação do método

- Simulated Annealing (Recozimento Simulado)
- Proposto por Scoot Kirkpatrick et al. (1983)

  S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt and M. P. Vecchi
  Optimization by Simulated Annealing, Science,
  Vol 220, Number 4598, p. 671-680, 1983.
  http://citeseer.ist.psu.edu/kirkpatrick83optimization.html.
- Simular o processo de recozimento de metais;
- Resfriamento rápido conduz a produtos meta-estáveis, de maior energia interna;
- Resfriamento lento conduz a produtos mais estáveis, estruturalmente fortes, de menor energia;
- Durante o recozimento o material passa por vários estados possíveis
- Num tempo suficientemente longo um elemento qualquer do *ensemble* passa por todos os seus estados acessíveis

Fundamentação do método

- **Annealing Físico:**
  - Sólido aquecido alem do seu ponto de fusão e resfriado lentamente
  - Se o resfriamento e suficientemente lento obtêm-se uma estrutura cristalina livre de imperfeições (estado de baixa energia)

- **Annealing Simulado:**
  - Algoritmo de Metropolis (Gibbs, 1953) empregado numa seqüência de temperaturas decrescentes para gerar soluções de um problema de otimização
  - O processo começa com um valor T elevado e a cada T geram-se soluções ate que o equilíbrio àquela temperatura seja alcançado
  - A temperatura é então rebaixada e o processo prossegue ate o congelamento (ou seja, não se obtêm mais uma diminuição de custo)
  - A seqüência de temperaturas empregada, juntamente com o numero de iterações a cada temperatura, constitui uma prescrição de annealing que deve ser definida empiricamente

Fundamentação do método

- Analogia com um problema combinatório:
  - Os estados possíveis de um metal correspondem a soluções do espaço de busca;
  - A energia em cada estado corresponde ao valor da função objetivo;
  - A energia mínima (se o problema for de minimização ou máxima, se de maximização) corresponde ao valor de uma solução ótima local, possivelmente global.

Fundamentação do método (problema de minimização)

- A cada iteração do método, um novo estado é gerado a partir do estado corrente por uma modificação aleatória neste;

- Se o novo estado é de energia menor que o estado corrente, esse novo estado passa a ser o estado corrente;

- Se o novo estado tem uma energia maior que o estado corrente em Δ unidades, a probabilidade de se mudar do estado corrente para o novo estado é:

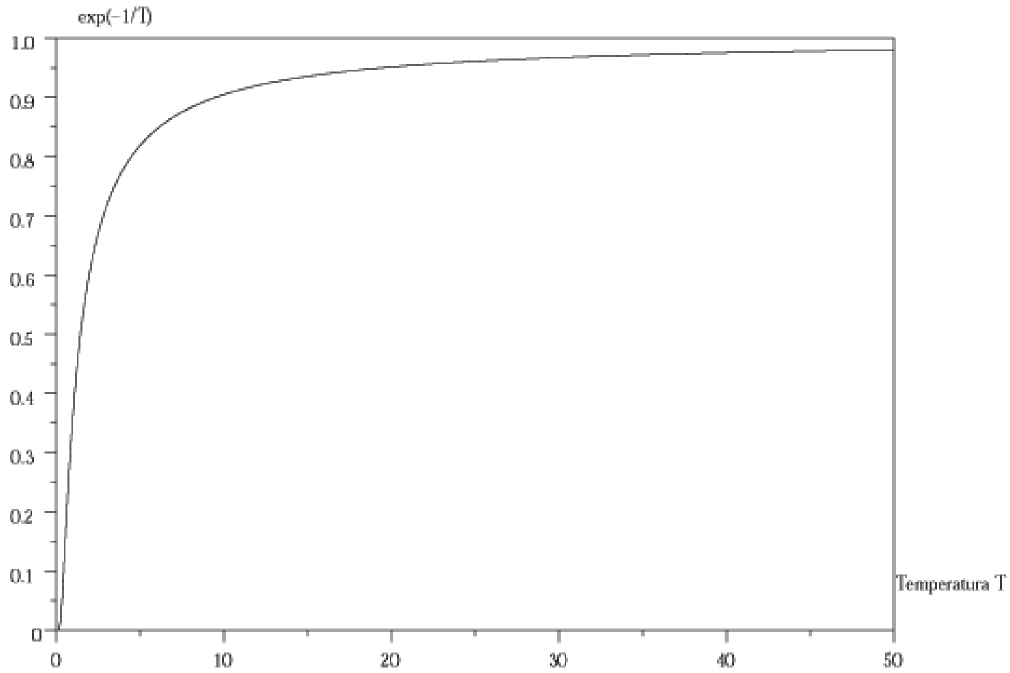
$e^{-\Delta/(kT)}$, onde k = constante de Boltzmann

é a constante física que relaciona temperatura e energia de moléculas

- Este procedimento é repetido até se atingir o equilíbrio térmico (algoritmo de Metropolis)

Probabilidade de aceitação de um movimento de piora (problema de minimização)

- Baseada na fórmula: P(aceitação) = $e^{-\Delta / T}$
- Δ = variação de custo (valor da FO); T = temperatura



- Temperatura ↑ ⇒ Probabilidade de aceitação ↑
- Temperatura ↓ ⇒ Probabilidade de aceitação ↓

Fundamentação do método

- A probabilidade de um dado estado com energia f_i ser o estado corrente é:
  - $e^{-fi/(kT)} / \sum_j e^{-fj/(kT)}$ (Densidade de Boltzmann)
- A altas temperaturas, cada estado tem (praticamente) **a mesma chance** de ser o estado corrente;
- A baixas temperaturas, somente estados com **baixa energia** têm **alta probabilidade** de se tornar o estado corrente;
- Atingido o equilíbrio térmico em uma dada temperatura, esta é diminuída e aplica-se novamente o passo de Metropolis.
- O método termina quando a temperatura se aproxima de zero.

Fundamentação do método

- No início do processo, a temperatura é elevada e a probabilidade de se aceitar soluções de piora é maior;
- As soluções de piora são aceitas para escapar de ótimos locais;
- A probabilidade de se aceitar uma solução de piora depende de um parâmetro, chamado temperatura;
- Quanto menor a temperatura, menor a probabilidade de se aceitar soluções de piora;

Fundamentação do método

- Atingido o equilíbrio térmico, a temperatura é diminuída;
- A taxa de aceitação de movimentos de piora é, portanto, diminuída com o decorrer das iterações;
- No final do processo, praticamente não se aceita movimentos de piora e o método se comporta como o método da descida/subida;
- O final do processo se dá quando a temperatura se aproxima de zero e nenhuma solução de piora é mais aceita, evidenciando o encontro de um ótimo local.

Algoritmo Simulated Annealing

```
procedimento SA (f(.), N(.), α, SAmax, T₀, s)
    s* ← s          {Melhor solução obtida até então}
    IterT ← 0       {Número de iterações na temperatura T}
    T ← T₀          {temperatura corrente}
    enquanto (T > 0.0001)
        enquanto (IterT < SAmax) faça
            IterT ← IterT + 1
            Gerar um vizinho (s') aleatoriamente na vizinhança N^k(s)
            Δ = f(s') – f(s)
            se (Δ < 0) então
                s ← s'
                se (f(s') < f(s*)) então s* ← s'
            senão
                Tome x ∈ [0,1]
                se (x < e^(-Δ/T)) então
                    s = s'
            fim-se
        fim-enquanto
        T = T x α
        IterT = 0
    fim-enquanto
    retorne s*
fim-procedimento
```

Prescrições para o resfriamento

- Geométrico:

  $T_k = \alpha T_{k-1}, \ \forall k \geq 1$

  onde T_k representa a temperatura na iteração k do método, isto é, na k-ésima vez em que há alteração no valor da temperatura e α uma constante tal que $0 < \alpha < 1$

- SA normalmente incluem reaquecimento, seguido de novo resfriamento, quando a quantidade de movimentos consecutivamente rejeitados é alta

- É comum trabalhar nas temperaturas mais altas com uma taxa de resfriamento menor e aumenta-lá quando a temperatura reduzir-se

Prescrições para determinar a temperatura inicial

- Pela média dos custos das soluções vizinhas:
  - Gerar uma solução inicial qualquer
  - Gerar um certo número de vizinhos
  - Para cada vizinho, calcular o respectivo custo
  - Retornar como temperatura inicial o maior custo das soluções vizinhas

- Por simulação
  - Gerar uma solução inicial qualquer
  - Partir de uma temperatura inicial baixa
  - Contar quantos vizinhos são aceitos em $\mathrm{SA}max$ iterações nessa temperatura
  - Se o número de vizinhos aceitos for alto (por exemplo, 95%) retornar a temperatura corrente como a temperatura inicial do SA
  - Caso contrário, aumentar a temperatura (por exemplo, em 10%) e repetir o processo

Considerações Finais

- Número máximo de iterações em uma dada temperatura deve ser calculado com base na dimensão do problema;

- Temperatura de congelamento do sistema: quando se atingir, p.ex., T = 0,001 ou quando a taxa de aceitação de movimentos cair abaixo de um valor predeterminado;

- Os parâmetros mais adequados para uma dada aplicação só podem ser obtidos por **EXPERIMENTAÇÃO**.

Implementação do Simulated Annealing

- **Decisões Genéricas: Prescrição de Annealing**

  Temperatura Inicial, Temperatura Final, Taxa de Resfriamento e a Condições de Parada

- **Temperatura Inicial**: Deve ser alta o bastante para permitir movimentos livres entre soluções vizinhas
  - Pode ser escolhida a partir do conhecimento da variação media de custo entre soluções vizinhas
  - Alternativamente pode ser obtida por *simulação,* eg., fixando-se uma taxa de aceitação mínima de movimentos

- **Taxa de Resfriamento**: O equilíbrio térmico deve ser aproximado a cada temperatura (em teoria o número de iterações requerido cresce exponencialmente com o tamanho do problema)

  a) Resfriamento Geométrico $T = \alpha T$, $\alpha < 1$
    - Resfriamento lento ($0.8 < \alpha < 0.99$)
    - O numero de iterações a cada T pode ser variável, eg., ligado a uma taxa fixa de aceitação de movimentos: alta T → poucas iterações

Implementação do Simulated Annealing

b) $T = T / (1+\beta T)$, com β pequeno
   - Resfriamento rápido uma só iteração por temperatura

c) Prescrição de Hajek: $T = c / [\log (1+k)]$, $k \equiv$ iteração
   - Resfriamento muito lento
   - Para c da ordem da profundidade do mínimo local mais profundo, a convergência do algoritmo esta garantida se $k \to \infty$

- **Temperatura Final:** Em teoria a temperatura final deve ser zero. Na prática é suficiente chegar a uma temperatura próxima a zero devido a precisão limitada da implementação computacional
  - Especifica-se um numero máximo de iterações do algoritmo garantindo que ele atinja baixas temperaturas
  - Alternativamente identifica-se o congelamento do processo quando a taxa de aceitação de movimentos cai abaixo de um valor predeterminado

- **Regra Geral:** *Os parâmetros mais adequados para uma dada aplicação do algoritmo só podem ser estabelecidos por **experimentação***

Implementação do Simulated Annealing

- **Decisões Específicas do Problema**

  Espaço de Soluções, Estrutura de Vizinhança, Função Custo

  - Do resultado de **Hajek**: Espaço de soluções com topografia acidentada deve ser evitado, espaço com grandes áreas planas também, já que prejudica a evolução do algoritmo
  - Estrutura de vizinhança deve garantir que qualquer solução seja alcançável a partir de qualquer outra, para garantir convergência
  - Soluções não-plausíveis devem ser preferencialmente penalizadas ao invés de mantidas fora do espaço de soluções, para garantir a condição acima e também para facilitar o cálculo da função objetivo

Conteúdo do Curso

C01 – Simulated Annealing (20/11/07).

C02 – Busca Tabu (22/11/07).

C03 – Colônia de Formigas (27/11/07).

C04 - GRASP e VNS (29/11/07).

C05 – Metaheurísticas Híbridas – CS (04/12/07).