Algoritmos Numéricos de Busca em Otimização

Introdução e Motivação

- **Algoritmos de busca**
  - não informados (depth-first, breadth-first, variações)
  - informados (hill-climbing, beam search, best-first)
- **Características dos algoritmos de busca**
  - otimização (branch and bound, discrete dynamic programming, SA)
  - heurísticos (A, A*, outros)
- **Aplicações:** KBS, seqüenciamento de produção, busca internet, etc.
- **Questões:** busca é a melhor maneira de resolver o problema?

  quais algoritmos de busca resolvem o problema?

  qual algoritmo é o mais eficiente para um dado problema?

Busca em Otimização

- **Solução de um modelo de otimização**
  - uma escolha para os valores das variáveis de decisão
  - em geral uma solução é um vetor do R^n
- **Características dos algoritmos de busca**
  - mehoram soluções factíveis ao longo de direções factíveis
  - baseiam-se em informações sobre a vizinhança da solução corrente
  - vizinhanças dão uma natureza local às soluções

- **Vizinhança**

$$N_\varepsilon(x) = \{y : \|y - x\| < \varepsilon\}, \quad x \in R^n,\ \varepsilon > 0$$

$$\|x\| = \sqrt{(x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2)}$$

$\|x\|$ norma (comprimento) de x

- **Ponto interior**

$$S \subseteq R^n,\ x \in S \ \text{interior se} \ \exists N_\varepsilon(x) \subset S$$

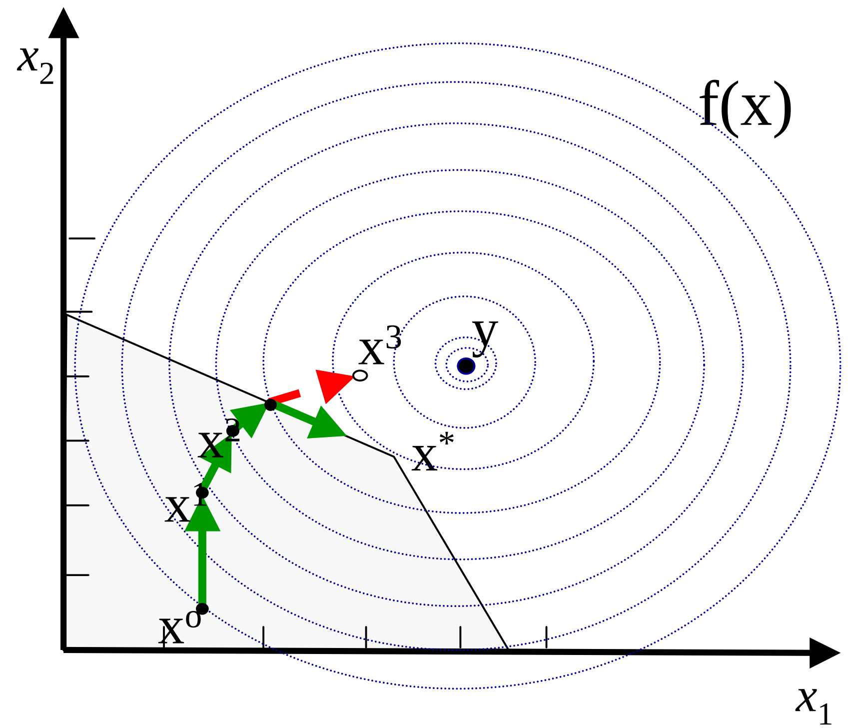
$$\Downarrow$$

$$\exists \varepsilon > 0 \mid \|y - x\| < \varepsilon \Rightarrow \ y \in S$$

Algoritmos numéricos de busca

$$\begin{array}{lllll} \min & (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 4)^2 & & & \\ \text{sujeito a} & 1.7\,x_1 & + \; 3.0\,x_2 & \leq & 15 \\ & 2.2\,x_1 & + \; 0.9\,x_2 & \leq & 10 \\ & x_1, x_2 \geq 0 & & & \end{array}$$

procedimentos que se iniciam em uma solução factível para um modelo de otimização e prossegue ao longo de uma trajetória formada por pontos factíveis que sempre melhoram o valor da função objetivo.



$$x^{t+1} \leftarrow x^{t} + \lambda \Delta x \quad \Rightarrow \quad f(x^{t+1}) \leq f(x^{t}) \quad \lambda > 0$$

- **Problemas de maximização**

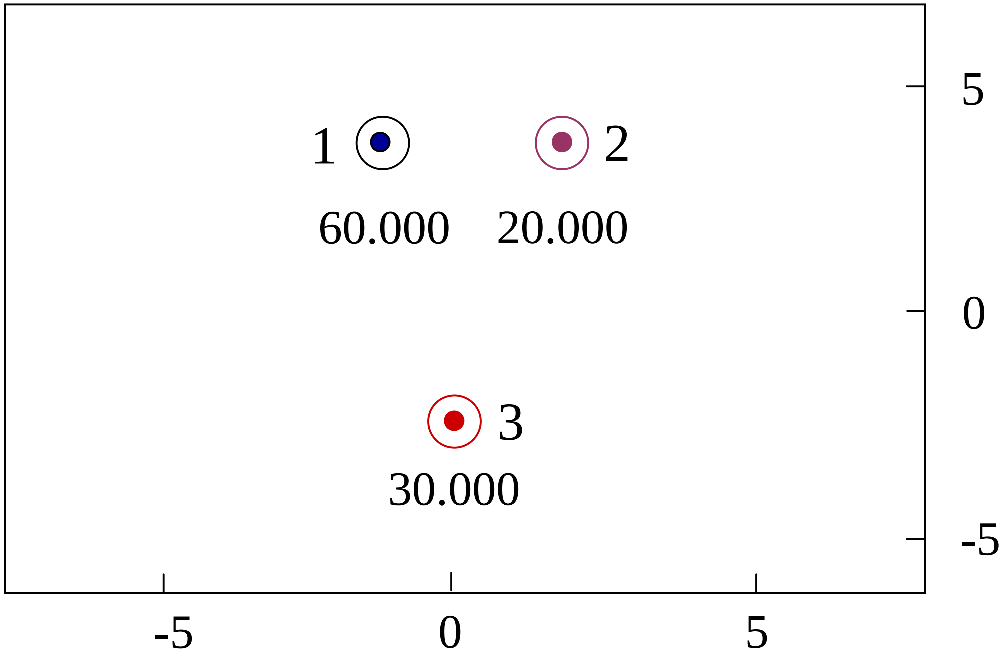
$$\begin{aligned} \max \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & x \in D \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad f(x^*) \geq f(x) \begin{cases} \forall x \in (D \cap N_\varepsilon(x)) & \text{local} \\ \forall x \in D & \text{global} \end{cases}$$

- **Problemas de minimização**

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.a.} \quad & x \in D \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad f(x^*) \leq f(x) \begin{cases} \forall x \in (D \cap N_\varepsilon(x)) & \text{local} \\ \forall x \in D & \text{global} \end{cases}$$

- Ótimo local pode ser ótimo global
- Modelos mais tratáveis: ótimo local ≡ ótimo global
- Em geral ótimo local não é global
  - executar algoritmos de busca independentes
  - melhor solução local ≡ solução ótima
  - ótimo aproximado, heurístico

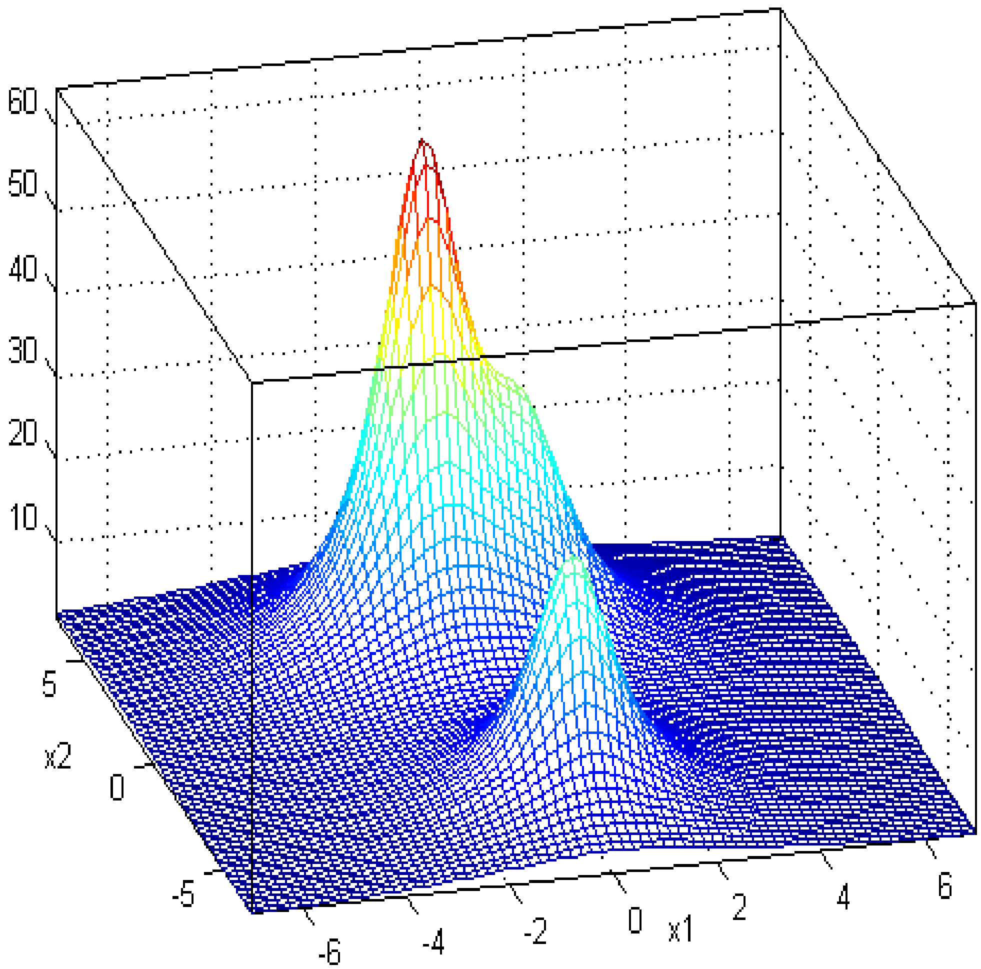
Exemplo: problema de alocação

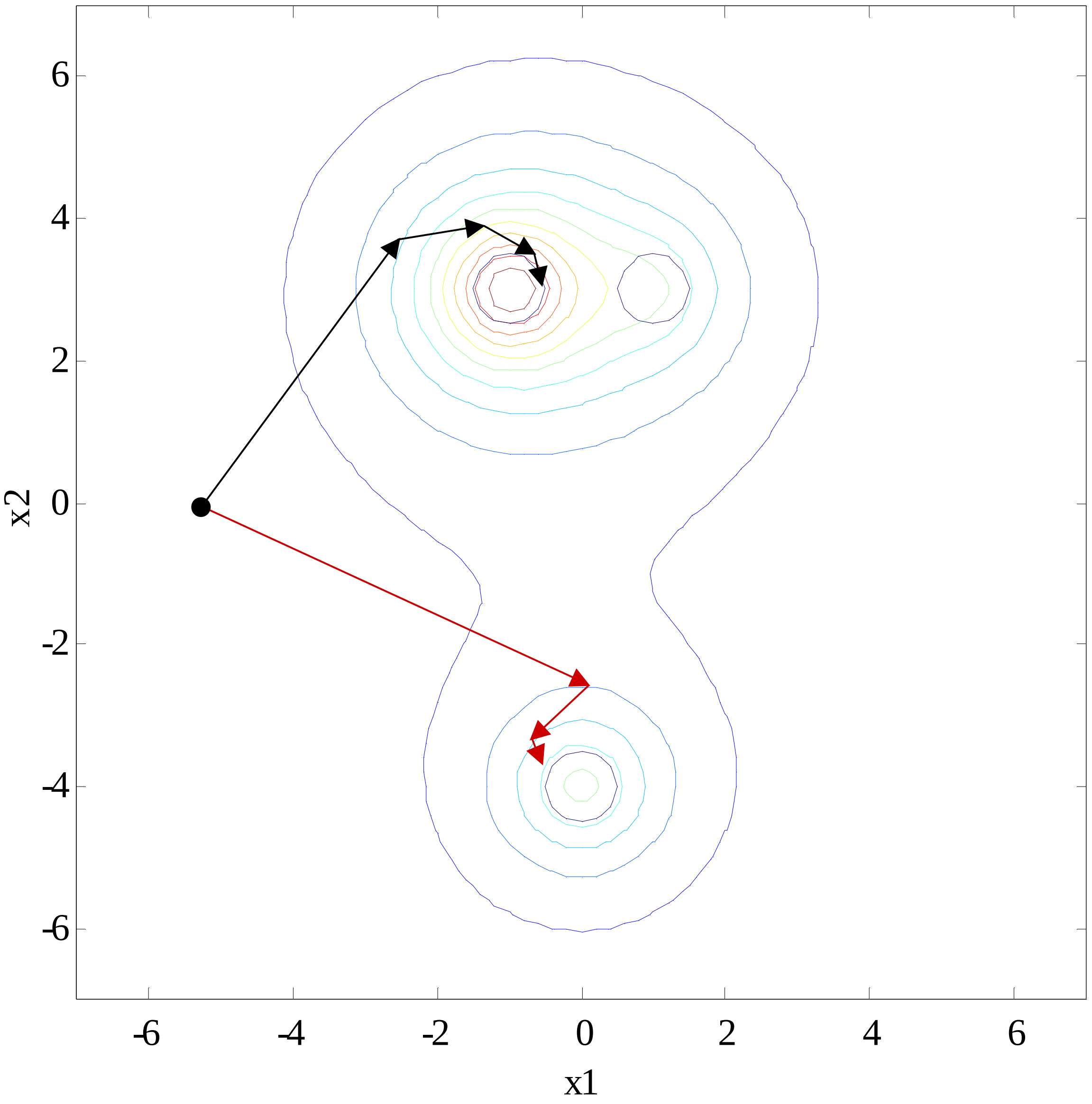


$$\max \ f(x_1, x_2) = \frac{60}{1+(x_1+1)^2+(x_2-3)^2} + \frac{20}{1+(x_1-1)^2+(x_2-3)^2} + \frac{30}{1+(x_1)^2+(x_2+4)^2}$$

$$\begin{aligned} \text{s.a.} \quad & (x_1+1)^2+(x_2-3)^2 \geq 0.25 \\ & (x_1-1)^2+(x_2-3)^2 \geq 0.25 \\ & (x_1)^2+(x_2+4)^2 \geq 0.25 \end{aligned}$$

$$f(x_1, x_2)$$

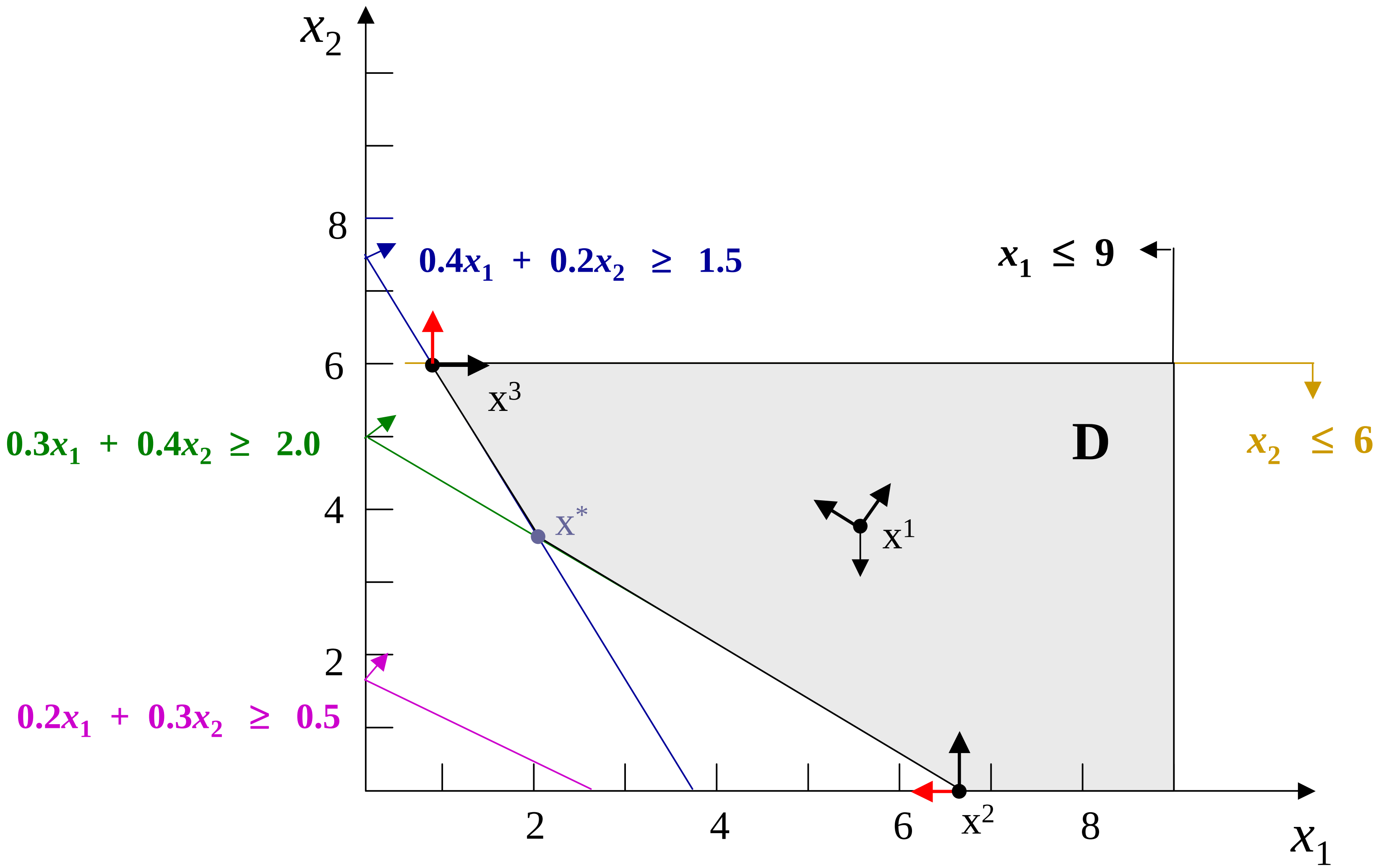



6
4
2
0
-2
-4
-6
x2
-6
-4
-2
0
2
4
6
x1

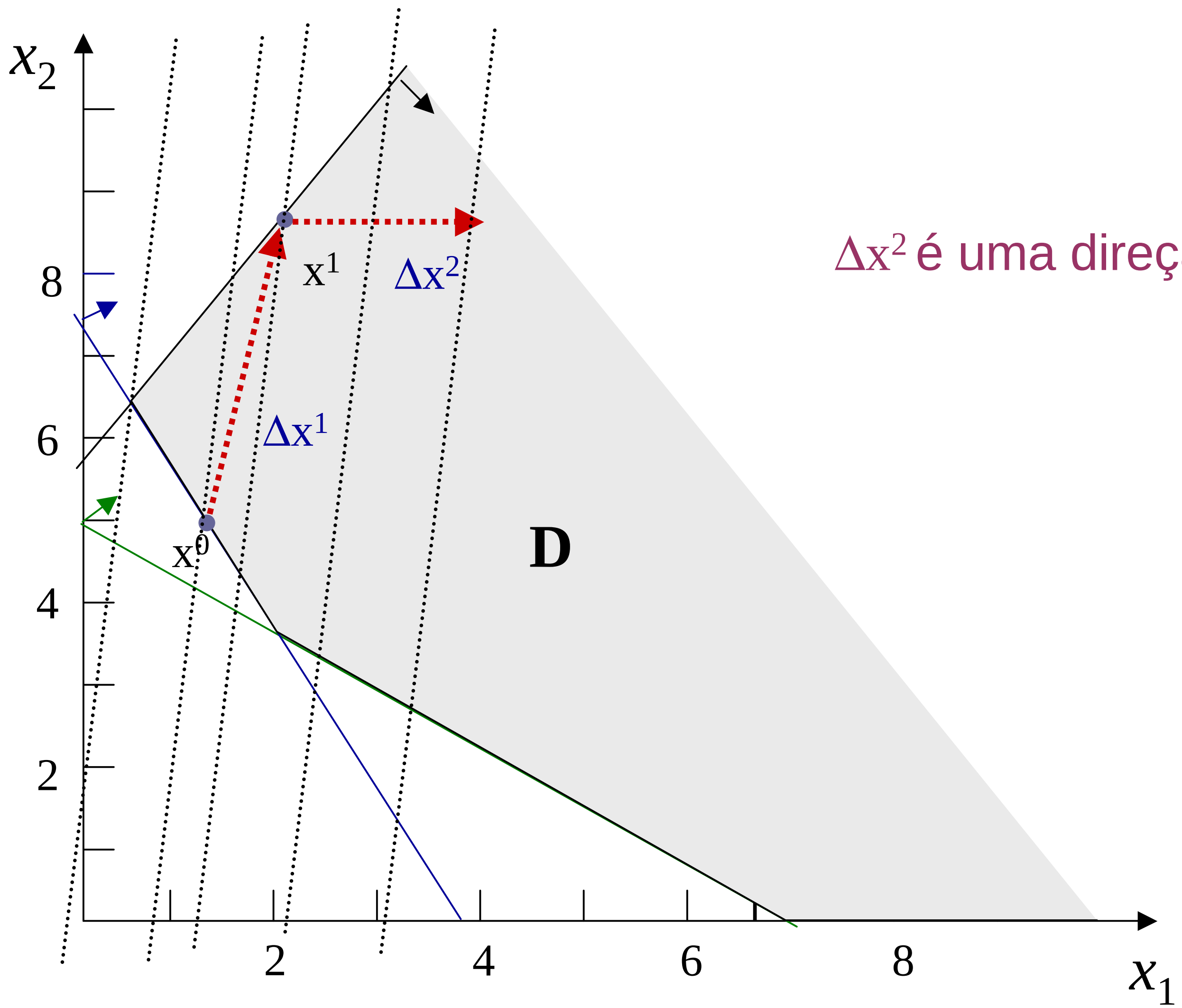
Direção Factível

Δx **é uma direção factível em** x^t **se** $x^t + \lambda\, \Delta x \in D$, $\lambda > 0$ **e suf. pequeno.**

λ **= passo na direção** Δx



Modelos ilimitados



Δx^2 é uma direção ilimitada

Condições algébricas: melhor direção

$$\text{Gradiente de } f(x) \text{ em } x: \nabla f(x) = (\partial f/\partial x_1 \ldots \partial f/\partial x_j \ldots \partial f/\partial x_n)$$

$$f(x^t + \lambda \Delta x) \approx f(x^t) + \lambda \nabla f(x^t)' \Delta x = f(x^t) + \lambda \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{x_j} \right) \Delta x_j$$

$$\Delta f = \lambda \nabla f(x^t)' \Delta x$$

$$\nabla f(x)' \Delta x > 0 \quad \text{melhora para } \textit{maximizar}$$

$$\nabla f(x)' \Delta x < 0 \quad \text{melhora para } \textit{minimizar}$$

Se escolhemos $\Delta x = \nabla f(x), \ \nabla f(x) \neq 0$:

$\nabla f(x)' \nabla f(x) > 0$ em geral (nem sempre) melhora para *maximizar*

Se escolhemos $\Delta x = -\nabla f(x)$

$\nabla f(x)' \nabla f(x) < 0$ em geral (nem sempre) melhora para *minimizar*

Nota: 1) por convenção consideraremos vetores colunas

2) ' denota transposto (às vezes denotado também por T)

3) para simplificar notação às vezes omitimos ' ou T

Algoritmo Busca Local

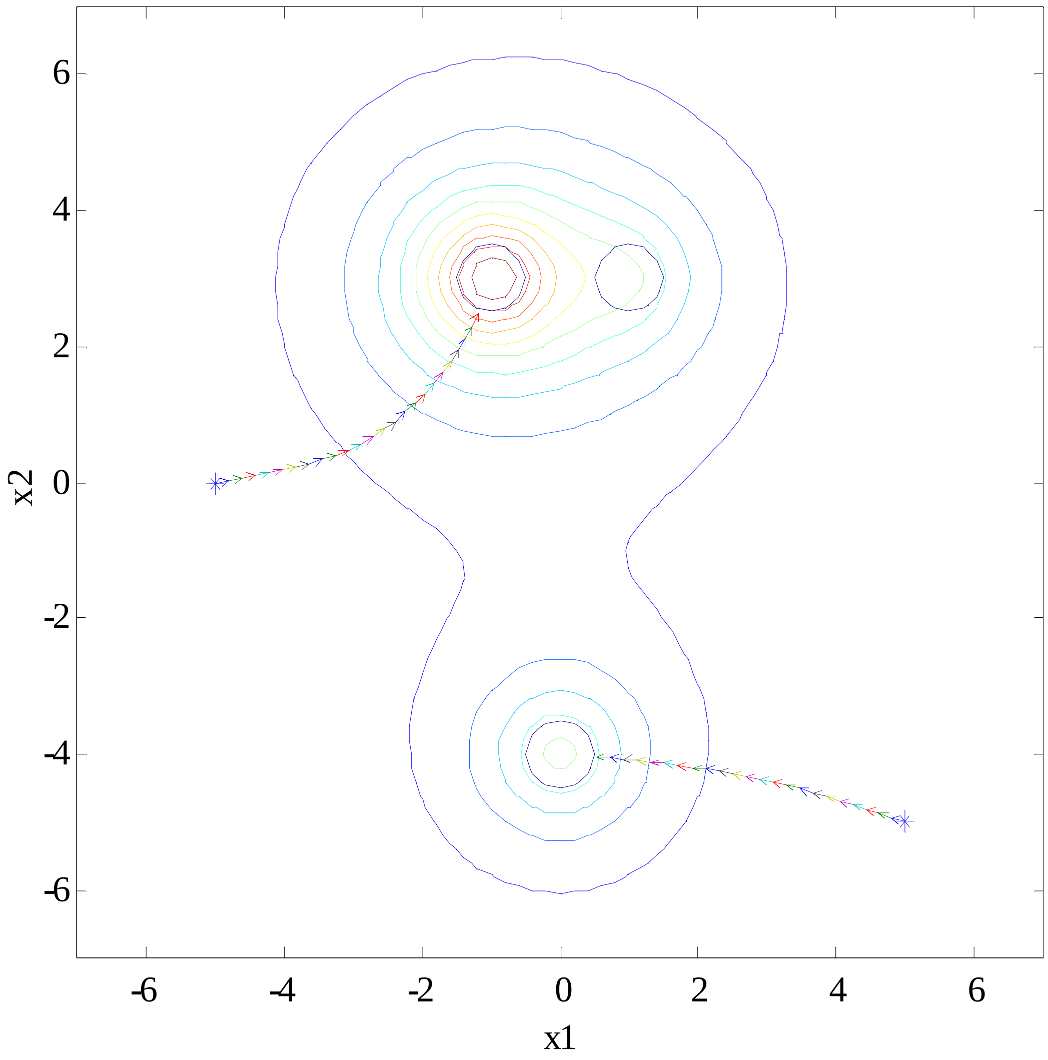
Passo 0 Inicialização: com solução a factível x^0 , $t \leftarrow 0$;

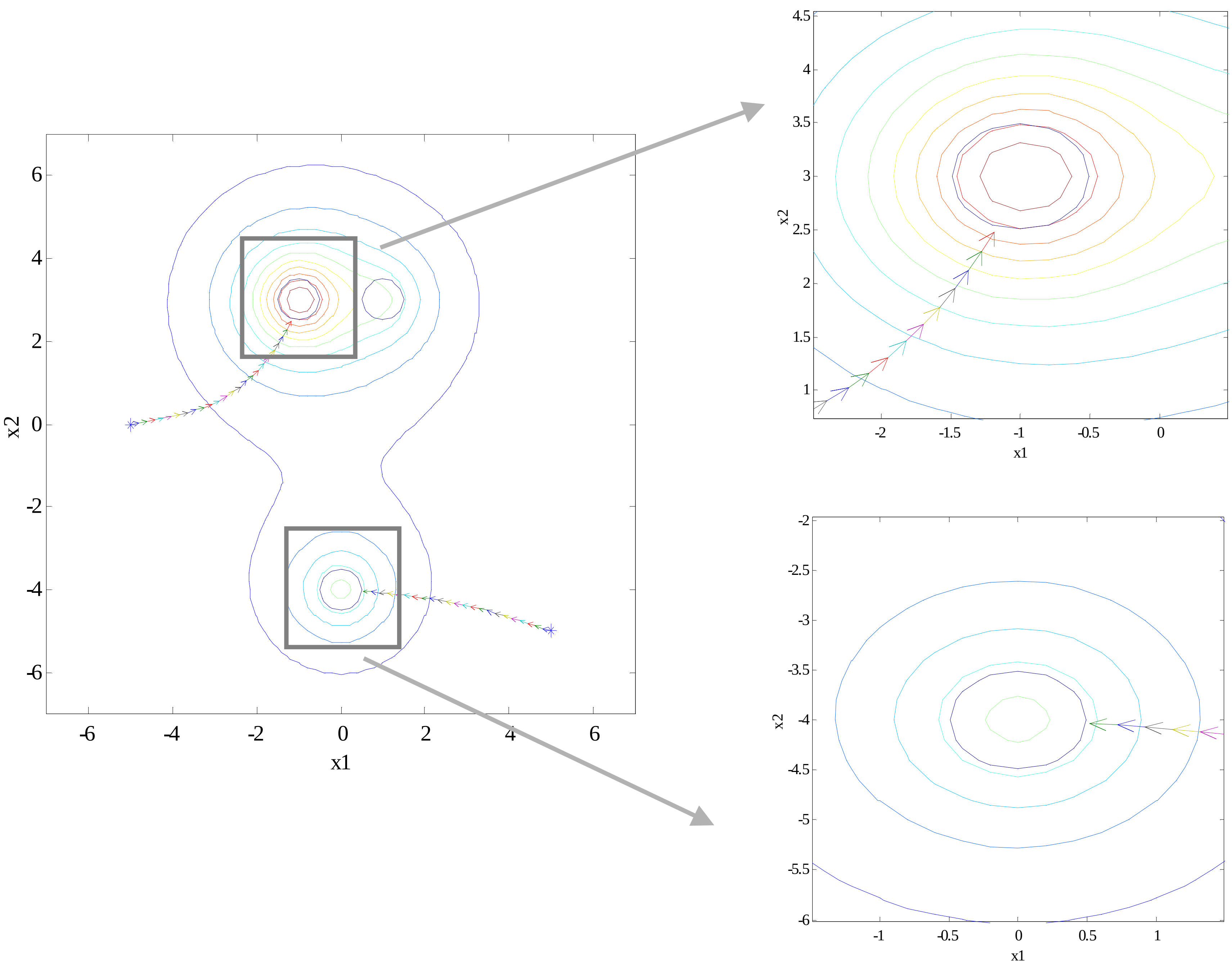
Passo 1 **Direção e otimalidade**: construir direção factível Δx^{t+1} em x^t; se direção factível não existir, então parar; x^t é um ótimo local;

Passo 2 **Passo**: se existir limites para valor de λ para o qual a função objetivo mehora, mantendo a factibilidade na direção Δx , então escolher o maior valor λ^{t+1}; senão parar, o modelo é ilimitado;

Passo 4 **Avanço**: determinar nova solução $x^{t+1} = x^t + \lambda \Delta x^{t+1}$; $t = t + 1$; ir para o Passo 1;

Exemplo: problema de alocação





ProfFernandoGomide

Condições algébricas: factibilidade

Caso Linear

$$\mathrm{a}^{'}\mathrm{x} = \sum_{j=1}^{n} a_j x_j \geq b;\ \ \Delta\mathrm{x}\ \text{ factível} \Leftrightarrow \mathrm{a}^{'}\Delta\mathrm{x} = \sum_{j=1}^{n} a_j \Delta x_j \geq 0$$

$$\mathrm{a}^{'}\mathrm{x} = \sum_{j=1}^{n} a_j x_j \leq b;\ \ \Delta\mathrm{x}\ \text{ factível} \Leftrightarrow \mathrm{a}^{'}\Delta\mathrm{x} = \sum_{j=1}^{n} a_j \Delta x_j \leq 0$$

$$\mathrm{a}^{'}\mathrm{x} = \sum_{j=1}^{n} a_j x_j = b;\ \Delta\mathrm{x}\ \text{ factível} \Leftrightarrow \mathrm{a}^{'}\Delta\mathrm{x} = \sum_{j=1}^{n} a_j \Delta x_j = 0$$

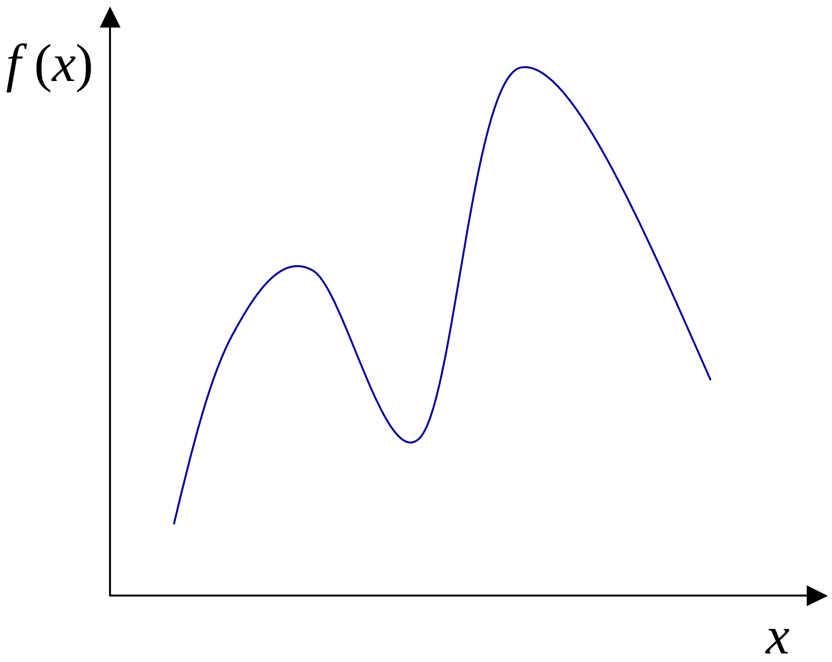
Restrições ativas

Unimodalidade e convexidade

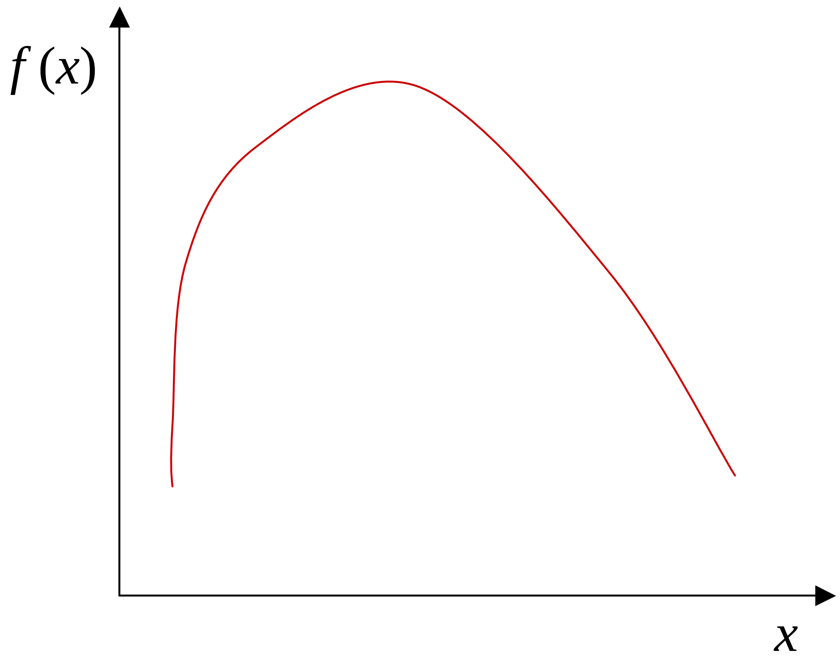
- **Tratabilidade**
  - conveniência para análise de um modelo
- **Características importantes do modelo**
  - convexidade
  - unimodalidade

Funções unimodais

$$\forall x^1, x^2, \quad f(x^2) \text{ melhor que } f(x^1) \quad \Rightarrow \Delta x = x^2 - x^1 \text{ melhora em } x^1$$



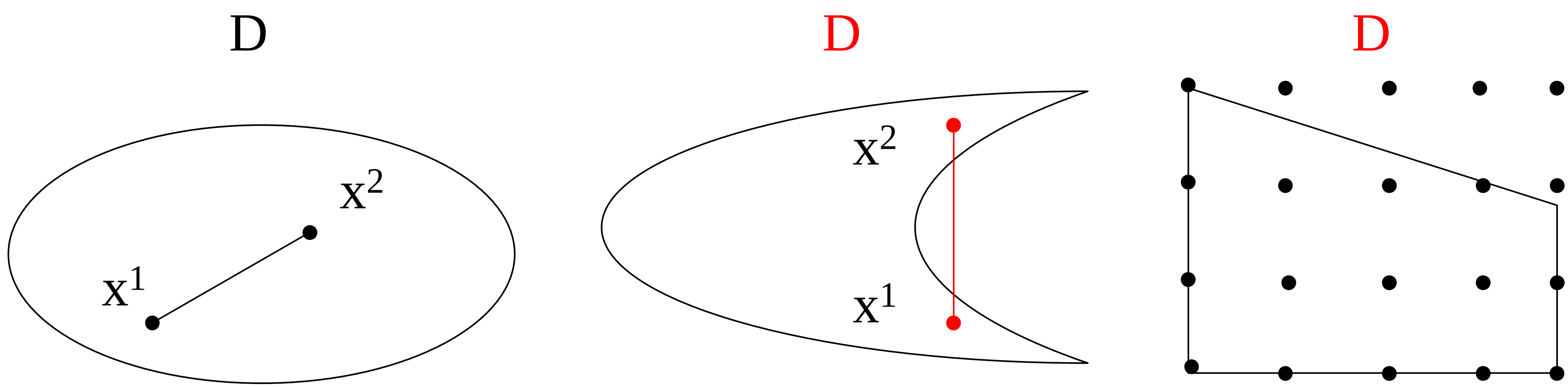
não unimodal para max e min



unimodal para max
não unimodal para min

Conjuntos convexos

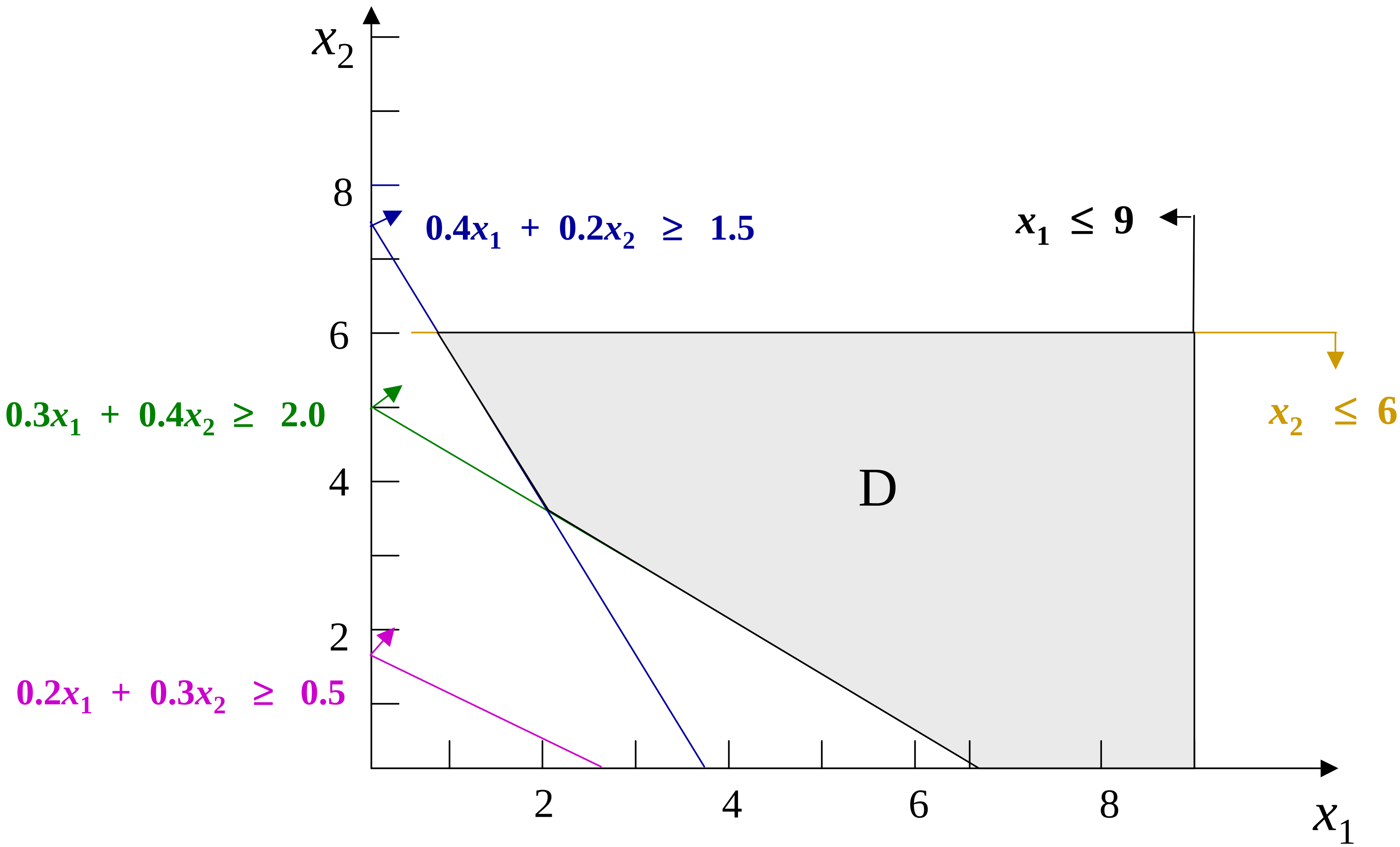
$$\forall\, x^1, x^2 \in D,\;\; x^1 + \lambda\,(x^2 - x^1) \in D,\;\; 0 \le \lambda \le 1$$



Convexo

Não convexos

Todas restrições lineares ⇒ conjunto (espaço) factível convexo



D é convexo

- Ótimos locais são ótimos globais para funções objetivo unimodais e quando os problemas não tem restrições

- Ótimos locais são ótimos globais quando a função objetivo é unimodal e as restrições formam um conjunto convexo

  – modelos lineares

  – modelos quadráticos

Soluções factíveis iniciais

Método de duas fases

0 - **Modelo artificial**: escolher uma solução inicial conveniente para o modelo original e construir modelo da fase I adicionando (subtraindo) variáveis artificiais não negativas em cada uma das rstrições violadas

1 - **Fase I:** Atribuir valores para as variáveis artificiais para obter uma solução inicial factível para o modelo artificial. Resolver problema de minimizar a soma das variáveis artificiais

2 -**Teste de factibilidade**: se a Fase I termina com soma = 0, ir para o passo 3 pois a solução original é factível. Se sum > 0, parar: modelo original é infactível. Caso contrário, repetir Fase 1 com diferentes valores iniciais.

3 - **Fase II:** Construir solução inicial factível para o problema original eliminando as componentes artificias do ótimo da Fase I.

Método de duas fases: exemplo

- Modelo da Refinaria de Petrolinea

$$
\begin{array}{lrcrcl}
\min & 20x_1 & + & 15x_2 & & \\
\\
\text{sujeito a} & 0.3x_1 & + & 0.4x_2 & \geq & 2.0 \\
& 0.4x_1 & + & 0.2x_2 & \geq & 1.5 \\
& 0.2x_1 & + & 0.3x_2 & \geq & 0.5 \\
& x_1 & & & \leq & 9 \\
& & & x_2 & \leq & 6 \\
& x_1, x_2 \geq 0 & & & &
\end{array}
$$

- Escolhendo: $x_1 = x_2 = 0$

- Viola todas as três restrições principais

• Modelo Artificial

$$\min \quad x_3 + x_4 + x_5$$

$$
\begin{array}{lrcl}
\text{sujeito a} & 0.3x_1 + 0.4x_2 + x_3 & \geq & 2.0 \\
& 0.4x_1 + 0.2x_2 + x_4 & \geq & 1.5 \\
& 0.2x_1 + 0.3x_2 + x_5 & \geq & 0.5 \\
& x_1 & \leq & 9 \\
& x_2 & \leq & 6 \\
& x_1, x_2 \geq 0 & &
\end{array}
$$

• Fase I: depois de fixar variáveis do problema original nos valores escolhidos, inicializar as variáveis artificiais atribuindo-as os menores valores necessários para obter factibilidade

$$
\begin{array}{lcl}
0.3\,(0) + 0.4\,(0) + x_3 \geq 2 & \Rightarrow & x_3 = 2 \\
0.4\,(0) + 0.2\,(0) + x_4 \geq 1.5 & \Rightarrow & x_4 = 1.5 \\
0.2\,(0) + 0.3\,(0) + x_5 \geq 0.5 & \Rightarrow & x_5 = 0.5
\end{array}
$$

Solução da Fase I: (4 4 0 0 0) factível $\Rightarrow$ (4 4) solução inicial para Fase II

Método Big-M

1 - **Modelo auxiliar**: max f - M (soma das variáveis artificiais) ou
min f + M (soma das variáveis artificiais)

1 - **Teste I:** Se Big-M termina em uma solução local com todas as variáveis artificiais nulas, então os componentes restantes constituem uma solução ótima para o problema original

2 -**Teste II**: se M é suficientemente grande e Big-M termina em um solução ótima global com alguma variável artificial positiva, então o problema original é infactível

3 - **Teste III:** se M é suficientemente grande e Big-M termina em um solução ótima local, com alguma variável artificial positiva, ou o muliplicador M não é grande o suficicente, nada se pode dizer. Repetir algoritmo ou com valor M maior, ou com outra solução inicial.

Método Big-M: exemplo

- min $\quad 20x_1 + 15x_2 + M\,(x_3 + x_4 + x_5)$

  sujeito a
$$\begin{aligned}
0.3x_1 + 0.4x_2 + x_3 &\geq 2.0\\
0.4x_1 + 0.2x_2 + x_4 &\geq 1.5\\
0.2x_1 + 0.3x_2 + x_5 &\geq 0.5\\
x_1 &\leq 9\\
x_2 &\leq 6\\
x_1, x_2 &\geq 0
\end{aligned}$$

- $x^o = (\ 0\ \ 0\ \ 2\ \ 1.5\ \ 0.5\ )$

- $M = 10.000 \Rightarrow x^* = (\ 2\ \ 3.5\ \ 0\ \ 0\ \ 0\ )$

Observação

Este material refere-se às notas de aula do curso EA 044 Planejamento e Análise de Sistemas de Produção da Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação da Unicamp. Não substitui o livro texto, as referências recomendadas e nem as aulas expositivas. Este material não pode ser reproduzido sem autorização prévia dos autores. Quando autorizado, seu uso é exclusivo para atividades de ensino e pesquisa em instituições sem fins lucrativos.