Métodos de Otimização Discreta

Introdução e Motivação

- Métodos de otimização discreta
  - enumeração
  - relaxação
  - busca
- Maioria dos problemas práticos requer uso de heurísticas
- Busca: determinística e estocástica

Enumeração

Enumeração total: resolve problemas de otimização discreta comparando e verificando a factibilidade de todos os valores possíveis das variáveis de decisão (combinações dos valores discretos das variáveis de decisão).

$$
\begin{aligned}
\max \quad & 7x_1 + 4x_2 + 19x_3 \\
\text{s.a.} \quad & x_1 + x_3 \leq 1 \\
& x_2 + x_3 \leq 1 \\
& x_1, x_2, x_3 = 0 \text{ ou } 1
\end{aligned}
$$

solução	objetivo
(0, 0, 0)	0
(0, 0, 1)	19
(0, 1, 0)	4
(0, 1, 1)	infactível
(1, 0, 0)	7
(1, 0, 1)	infactível
(1, 1, 0)	11
(1, 1, 1)	infactível

solução ótima

- Problema com a enumeração total:
  - explosão combinatorial
  - k variáveis de decisão (binárias) $\rightarrow$ 2^k soluções !
- $k = 100 \rightarrow 2^{100} \approx 10^{30}$
- computador que verifique 1 trilhão de soluções/segundo = 10^{12}
  - $10^{30} / 10^{12} = 10^{18}$ segundos
  - 10^{18} segundos $\approx$ 400 milhões de séculos !!

Relaxação de Modelos Discretos

- Modelo $\underline{P}$ é uma relaxação (de restrições) do modelo P se toda solução factível de P também é uma solução factível de $\underline{P}$ e ambos modelos possuem a mesma função objetivo

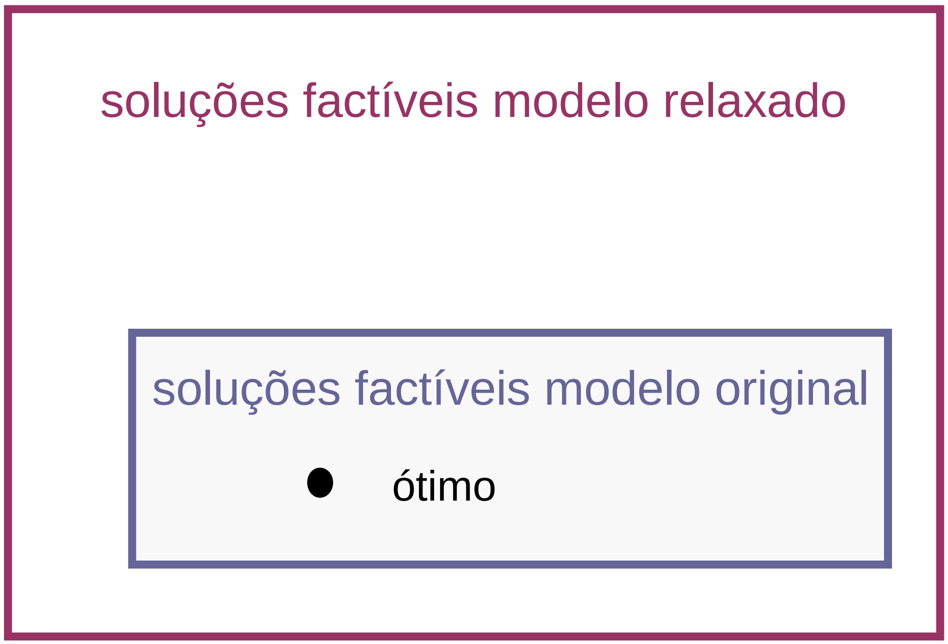
- Relaxações devem ser significativamente mais tratáveis que modelos originais.

$$
\begin{aligned}
\max \quad & 20x_1 + 30x_2 - 550y_1 - 720y_2 \\
\text{s.a.} \quad & 1.5x_1 + 4x_2 \leq 300 \\
& x_1 \leq 200y_1 \\
& x_2 \leq 75y_2 \\
& x_1, x_2 \geq 0 \\
& y_1, y_2 \in \{0,1\}
\end{aligned}
$$

$$
\boxed{
\begin{aligned}
& x_1^* = 200, \; x_2^* = 0 \\
& y_1^* = 1, \quad y_2^* = 0 \\
& v^* = 3450
\end{aligned}
}
$$

Restrições Revisadas	Discussão
$1.5x_1 + 4x_2 \leq 600$ $x_1 \leq 400y_1$ $x_2 \leq 150y_2$ $x_1, x_2 \geq 0$ $y_1, y_2 \in \{0,1\}$	• dobra capacidades ótimo: $\underline{x}_1 = 400$, $\underline{x}_2 = 0$, $\underline{y}_1 = 1$, $\underline{y}_2 = 0$ $v = 7450$ • não é significativamente mais tratável
$x_1 \leq 200y_1$ $x_2 \leq 75y_2$ $x_1, x_2 \geq 0$ $y_1, y_2 \in \{0,1\}$	• elimina primeira restrição ótimo: $\underline{x}_1 = 200$, $\underline{x}_2 = 75$, $\underline{y}_1 = 1$, $\underline{y}_2 = 1$ $v = 4980$ • eliminação desacopla restrições
$1.5x_1 + 4x_2 \leq 300$ $x_1 \leq 200y_1$ $x_2 \leq 75y_2$ $x_1, x_2 \geq 0$ $y_1, y_2 \in [0,1]$	• relaxa para modelo linear ótimo: $\underline{x}_1 = 200$, $\underline{x}_2 = 0$, $\underline{y}_1 = 1$, $\underline{y}_2 = 0$ $v = 3450$ • Relaxação PL

Soluções de Relaxação



Soluções ótimas de relaxações

– maximização: limitante superior

– minimização: limitante inferior

- **se a solução ótima do problema relaxado é factível para o problema original, então ela é também a solução ótima do problema original.**

- **se o modelo relaxado é infactível, o modelo original também é.**

Arredondamento de Soluções de Relaxação

$\lceil x \rceil$ = menor inteiro maior ou igual a x

$\lfloor x \rfloor$ = maior inteiro menor ou igual a x

problemas com restrições de igualdade

maximização: solução factível (inteira) fornece limitante inferior
para o valor da função objetivo

minimização: solução factível (inteira) fornece limitante superior
para o valor da função objetivo

$$\begin{array}{llll}
\max \; 40x_1 + 2x_2 + 18x_3 & \tilde{x} = (1,\ 0,\ \frac{3}{7}) & v = 47.71 & \text{limitante superior} \\
\text{s.a.} \quad 2x_1 + 11x_2 + 7x_3 \le 5 & \bar{x} = (1,\ 0,\ 0) & v = 40 & \text{limitante inferior} \\
\quad x_1 + x_2 + x_3 \le 2 & & & \\
\quad x_1, x_2, x_3 \in \{0,1\} & & &
\end{array}$$

Relaxação Forte

Se relaxação é uma boa aproximação do modelo original, então:

- detecta infactibilidade rapidamente
- obtém limitantes mais precisos
- tem maior chance de fornecer a solução ótima
- arredondamento mais fácil

Relaxação é forte se:

- seu valor ótimo é mais próximo do valor ótimo do modelo original

- sua solução ótima é mais próxima da solução ótima do modelo original

1

$$
\begin{aligned}
\max \quad & x_1 + x_2 + x_3 \\
\text{s.a.} \quad & x_1 + x_2 \le 1 \\
& x_1 + x_3 \le 1 \\
& x_2 + x_3 \le 1 \\
& x_1, x_2, x_3 \in \{0,1\}
\end{aligned}
$$

2

$$
\begin{aligned}
\max \quad & x_1 + x_2 + x_3 \\
\text{s.a.} \quad & x_1 + x_2 \le 1 \\
& x_1 + x_3 \le 1 \\
& x_2 + x_3 \le 1 \\
& x_1 + x_2 + x_3 \le 1 \\
& x_1, x_2, x_3 \in \{0,1\}
\end{aligned}
$$

soluções factíveis (para ambos): x = (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)

soluções modelos relaxados: $x^1 = (1/2, 1/2, 1/2)$, $x^2 = (1, 0, 0)$

limitantes modelos relaxados: $v^1 = 3/2$ e $v^2 = 1$

relaxação 2 mais forte

Desigualdades Válidas

- desigualdade é válida para um modelo de otimização discreta se ela é satisfeita para todas soluções factíveis (inteiras) do modelo

- para obter uma relaxação forte, uma desigualdade válida deve "cortar" (tornar infactíveis) algumas soluções factíveis do modelo relaxado que não são factíveis para o modelo original

$$\begin{aligned} \max \quad & 3x_1 + 14x_2 + 18x_3 \\ \text{s.a.} \quad & 3x_1 + 5x_2 + 6x_3 \leq 10 \\ & x_1, x_2, x_3 \in \{0,1\} \end{aligned}$$

$$\bar{x} = (0, \tfrac{4}{5}, 1) \quad \text{solução relaxada}$$

$$\text{desigualdade}: \quad x_2 + x_3 \leq 1$$

$$\left.\begin{matrix} \\ \\ \end{matrix}\right\} \quad \bar{x}_2 + \bar{x}_3 \ \textit{não é} \ \leq 1 \quad \left.\begin{matrix} \\ \\ \end{matrix}\right\}$$

fortalece relaxação

Relaxação Lagrangeana

$$L = \text{função objetivo original} + \cdots + v_i\left(b_i - \sum_j a_{ij}x_j\right) + \cdots$$

$$\text{maximização:} \;\; \text{Se} \;\; \sum_j a_{ij}x_j \geq b_i \;\; \rightarrow \;\; v_i \leq 0$$

$$\text{Se} \;\; \sum_j a_{ij}x_j \leq b_i \;\; \rightarrow \;\; v_i \geq 0$$

$$\text{minimização:} \;\; \text{Se} \;\; \sum_j a_{ij}x_j \geq b_i \;\; \rightarrow \;\; v_i \geq 0$$

$$\text{Se} \;\; \sum_j a_{ij}x_j \leq b_i \;\; \rightarrow \;\; v_i \leq 0$$

Restrições a dualizar são escolhidas para tornar o modelo relaxado ainda discreto, mas com estrutura mais tratável

$$
\begin{aligned}
\max \quad & 20x_1 + 30x_2 - 550y_1 - 720y_2 \\
\text{s.a.} \quad & 1.5x_1 + 4x_2 \le 300 \\
& x_1 \le 200y_1 \\
& x_2 \le 75y_2 \\
& x_1, x_2 \ge 0 \\
& y_1, y_2 \in \{0,1\}
\end{aligned}
$$

$$
\boxed{
\begin{aligned}
\max \quad & 20x_1 + 30x_2 - 550y_1 - 720y_2 + v_1(0 - x_1 + 200y_1) + v_2\{0 - x_2 + 75y_2) \\
\text{s.a.} \quad & 1.5x_1 + 4x_2 \le 300 \\
& x_1, x_2 \ge 0 \\
& y_1, y_2 \in \{0,1\} \\
& \\
& v_1, v_2 \ge 0
\end{aligned}
}
$$

solução ótima de relaxação Lagrangeana é um limitante superior para maximização e inferior para minimização

Algoritmo (Busca) *Branch and Bound*

Exemplo 1

	Gerador, j			
	1	2	3	4
custo de operação	7	12	5	14
potência	300	600	500	1600

$$x_j = \begin{cases} 1 & \text{se gerador } j \text{ é ligado} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \min \quad & 7x_1 + 12x_2 + 5x_3 + 14x_4 \\ \text{s.a.} \quad & 300x_1 + 600x_2 + 500x_3 + 1600x_4 \geq 700 \\ & x_1,\ x_2,\ x_3, x_4 \in \{0,1\} \end{aligned}$$

solução ótima
geradores:1 e 3
custo: $ 12.000

Árvore de Busca

- **soluções parciais**: possuem algumas das variáveis fixas, outras livres

  variáveis livres denotadas por #

$x = (1, \#, 0, \#)$ especifica solução parcial com $x_1 = 1$ e $x_3 = 0$ fixos, x_2 e x_4 livres

- **completamento de uma solução parcial**: soluções completas que são

  consistentes com a solução parcial e todas as

  componentes fixadas.

$$x = (1, \#, \#, 0) \rightarrow (1, 0, 0, 0),\ \underbrace{(1, 0, 1, 0),\ (1, 1, 0, 0),\ (1, 1, 1, 0)}_{\text{factíveis}}$$

nós: soluções parciais

arcos: indicam como as variáveis são fixadas nas soluções parciais

raiz: solução parcial $x^{(0)} = (\#, ..., \#)$

nós ativos: soluções parciais não analisadas

branch and bound

1-*termina* soluções parciais quando ou identifica um melhor complementamento, ou não pode produzir a solução ótima para o modelo

2-se uma solução parcial não pode ser terminada, ela é ramificada (*branch*) criando duas novas soluções parciais a partir da solução parcial atual e as variáveis livres que ela contém.

***branch and bound* pára**: quando todas soluções parciais já foram terminadas ou ramificadas.

estratégia de busca: em profundidade (*depth first*), a mais simples

solução incumbente: $\hat{x}, \hat{v}$

é a melhor (em termos da função objetivo) solução factível conhecida até então

se *branch and bound* pára com todas as soluções parciais terminadas ou ramificadas, a solução incumbente final é um ótimo global, se esta existir, caso contrário o modelo é infactível.

problema candidato: associado à uma solução parcial, é a versão restrita do modelo, obtida quando as variáveis são fixadas como na solução parcial problema candidato associado à solução parcial $x = (\#, 1, \#, 0)$

$$\begin{aligned} \min \;& 7x_1 + 12x_2 + 5x_3 + 14x_4 \\ \text{s.a.} \;& 300x_1 + 600x_2 + 500x_3 + 1600x_4 \geq 700 \\ & x_1,\ x_3, \in \{0,1\} \\ & x_2 = 1,\ x_4 = 0 \end{aligned}$$

completamentos factíveis de soluções parciais são as soluções factíveis do problema candidato correspondente

valor da função objetivo do melhor completamento factível é o valor ótimo do problema candidato

1-se uma relaxação de um problema candidato é infactível, então a solução parcial associada pode ser terminada porque não existem completamentos factíveis.

2-se uma relaxação de um problema candidato possui valor da função objetivo pior do que o valor da solução incumbente, então a solução parcial pode ser terminada porque nehum complementamento factível terá valor melhor do que o da solução incumbente.

3-se uma solução ótima de uma relaxação do problema candidato é factível para o modelo original, então ela é o melhor completamento associado à solução parcial.

4-esta solução, após comparação com outra, se existir, pode ser terminada

Algoritmo *Branch and Bound* PLI {0,1} Básico

Passo 0 Inicialização: com solução parcial $x^0 = (\#,...,\#)$, $t \leftarrow 0$;
ou com solução incumbente (x, v) se disponível;

Passo 1 Parada: se $\exists$ solução partial, selecionar uma delas x^t; ir para Passo 2;
senão, se $\exists$ solução incumbente, ela é ótima; senão modelo infactível

Passo 2 Relaxação: resolver relaxação PL problema candidado x^t;

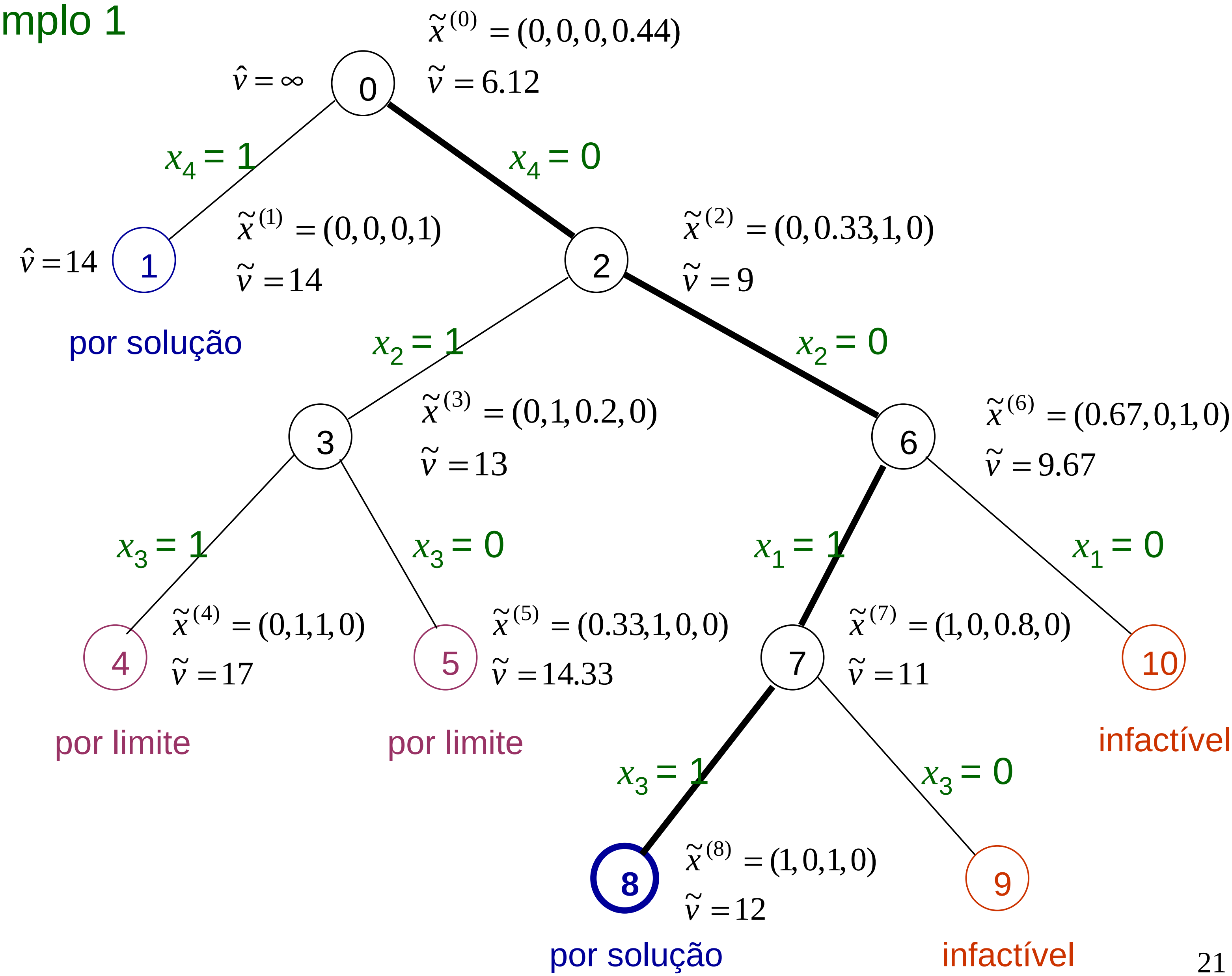
Passo 3 Termina por infactibilidade: se relaxação PL infactível, não $\exists$ complementamentos factíveis para x^t; terminar, $t \leftarrow t + 1$; ir para Passo 1;

Passo 4 Termina por limite: solução ótima PL relaxado tem valor pior do que a solução incumbente corrente, então terminar; $t = t + 1$; ir para Passo 1;

Passo 5 Termina por solução: solução ótima PL relaxado satisfaz restrições binárias modelo original $\rightarrow$ melhor complementamento factível de x^t;
nova solução incumbente; termina x^t; $t = t + 1$; ir para Passo 1;

Passo 6 Ramificação: escolher variável livre fracionária no PL relaxado ótimo;
criar dois novos arcos; $t = t + 1$; ir para Passo 1;

Exemplo 1

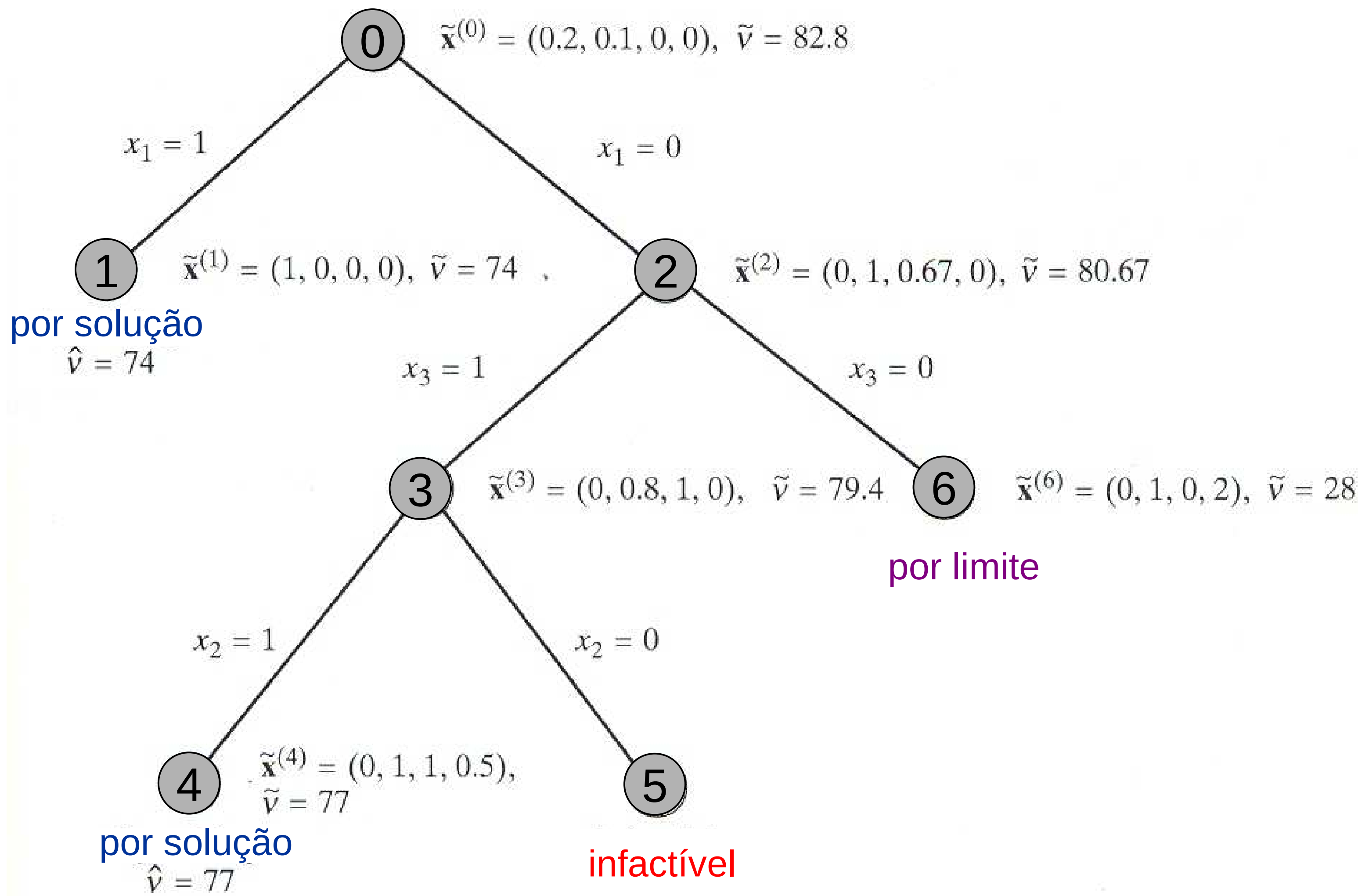


$\tilde{x}^{(0)} = (0,0,0,0.44)$
$\hat{v} = \infty$
0
$\tilde{v} = 6.12$
$x_4 = 1$
$x_4 = 0$
$\hat{v} = 14$
1
$\tilde{x}^{(1)} = (0,0,0,1)$
$\tilde{v} = 14$
por solução
2
$\tilde{x}^{(2)} = (0,0.33,1,0)$
$\tilde{v} = 9$
$x_2 = 1$
$x_2 = 0$
3
$\tilde{x}^{(3)} = (0,1,0.2,0)$
$\tilde{v} = 13$
6
$\tilde{x}^{(6)} = (0.67,0,1,0)$
$\tilde{v} = 9.67$
$x_3 = 1$
$x_3 = 0$
$x_1 = 1$
$x_1 = 0$
4
$\tilde{x}^{(4)} = (0,1,1,0)$
$\tilde{v} = 17$
por limite
5
$\tilde{x}^{(5)} = (0.33,1,0,0)$
$\tilde{v} = 14.33$
por limite
7
$\tilde{x}^{(7)} = (1,0,0.8,0)$
$\tilde{v} = 11$
10
infactível
$x_3 = 1$
$x_3 = 0$
8
$\tilde{x}^{(8)} = (1,0,1,0)$
$\tilde{v} = 12$
por solução
9
infactível

Exemplo 2

Problema de maximização, $x_1, x_2, x_3 = 0$ ou 1 ; $x_4 \geq 0$

x_1	x_2	x_3	$\tilde{\mathbf{x}}$	$\tilde{v}$	x_1	x_2	x_3	$\tilde{\mathbf{x}}$	$\tilde{v}$
#	#	#	(0.2, 1, 0, 0)	82.80	0	0	1	Infeasible	—
#	#	0	(0.2, 1, 0, 0)	82.80	0	1	#	(0, 1, 0.67, 0)	80.67
#	#	1	(0, 0.8, 1, 0)	79.40	0	1	0	(0, 1, 0, 2)	28.00
#	0	#	(0.7, 0, 0, 0)	81.80	0	1	1	(0, 1, 1, 0.5)	77.00
#	0	0	(0.7, 0, 0, 0)	81.80	1	#	#	(1, 0, 0, 0)	74.00
#	0	1	(0.4, 0, 1, 0)	78.60	1	#	0	(1, 0, 0, 0)	74.00
#	1	#	(0.2, 1, 0, 0)	82.80	1	#	1	(1, 0, 1, 0)	63.00
#	1	0	(0.2, 1, 0, 0)	82.80	1	0	#	(1, 0, 0, 0)	74.00
#	1	1	(0, 1, 1, 0.5)	77.00	1	0	0	(1, 0, 0, 0)	74.00
0	#	#	(0, 1, 0.67, 0)	80.67	1	0	1	(1, 0, 1, 0)	63.00
0	#	0	(0, 1, 0, 2)	28.00	1	1	#	(1, 1, 0, 0)	62.00
0	#	1	(0, 0.8, 1, 0)	79.40	1	1	0	(1, 1, 0, 0)	62.00
0	0	#	Infeasible	—	1	1	1	(1, 1, 1, 0)	51.00
0	0	0	Infeasible	—					



0
$\tilde{\mathbf{x}}^{(0)} = (0.2, 0.1, 0, 0)$, $\tilde{v} = 82.8$
$x_1 = 1$
$x_1 = 0$
1
$\tilde{\mathbf{x}}^{(1)} = (1, 0, 0, 0)$, $\tilde{v} = 74$
por solução
$\hat{v} = 74$
2
$\tilde{\mathbf{x}}^{(2)} = (0, 1, 0.67, 0)$, $\tilde{v} = 80.67$
$x_3 = 1$
$x_3 = 0$
3
$\tilde{\mathbf{x}}^{(3)} = (0, 0.8, 1, 0)$, $\tilde{v} = 79.4$
6
$\tilde{\mathbf{x}}^{(6)} = (0, 1, 0, 2)$, $\tilde{v} = 28$
por limite
$x_2 = 1$
$x_2 = 0$
4
$\tilde{\mathbf{x}}^{(4)} = (0, 1, 1, 0.5)$,
$\tilde{v} = 77$
por solução
$\hat{v} = 77$
5
infactível

23

Algoritmo *Branch and Bound* PLI: Detalhes

• uso de arrendondamento

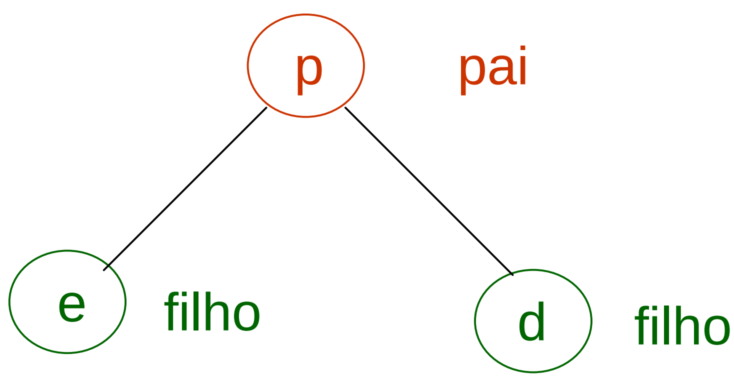
• limitantes superiores proporcionados por nós pais

• sequência de enumeração: estratégias de busca

• parada prematura

• uso de desigualdades válidas

Árvore Busca →



Exemplo 3

$$\max \quad 200x_1 + 3x_2 + 20x_3 + 50x_4 + 70x_5 + 20x_6 + 5x_7 + 10x_8 + 200x_9 + 150x_{10} + 18x_{11} + 8x_{12} + 300x_{13} + 185x_{14}$$

s.a.

$$6x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 1x_7 + 4x_9 + 5x_{12} \leq 10 \qquad (2000-2004)$$

$$3x_2 + 5x_3 + 5x_5 + 8x_7 + 5x_9 + 8x_{10} + 7x_{12} + 1x_{13} + 4x_{14} \leq 12 \qquad (2005-2009)$$

$$8x_5 + 1x_6 + 4x_{10} + 2x_{11} + 4x_{13} + 5x_{14} \leq 14 \qquad (2010-2014)$$

$$8x_6 + 5x_8 + 7x_{11} + 1x_{13} + 3x_{14} \leq 14 \qquad (2015-2020)$$

$$10x_4 + 4x_6 + 1x_{13} + 3x_{14} \leq 14 \qquad (2020-2024)$$

$$x_4 + x_5 \leq 1$$

$$x_8 + x_{11} \leq 1 \qquad \text{exclusão mútua}$$

$$x_9 + x_{14} \leq 1$$

$$x_{11} \leq x_2$$

$$x_4 \leq x_3$$

$$x_5 \leq x_3 \qquad \text{dependência}$$

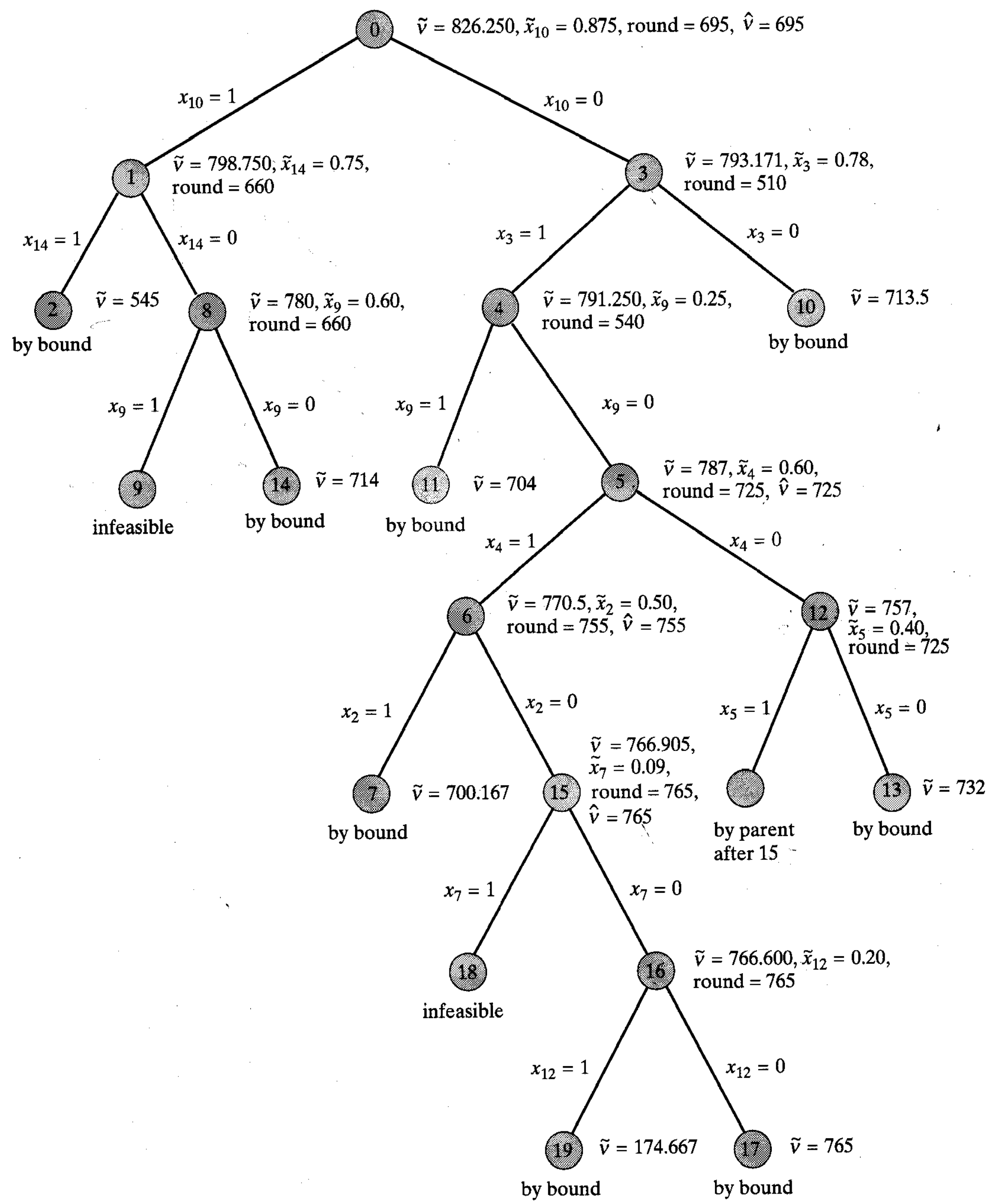
$$x_6 \leq x_3$$

$$x_7 \leq x_3$$

$$x_1, \cdots, x_{14} \in \{0, 1\}$$

- arredondamento de soluções relaxadas parciais:
  - quando aplicável, ajuda a encontrar incumbentes
  - arredondamento feito antes de ramificar
  - pode fornecer ótimo aproximado
- arredondamento não garante obtenção de novas incumbentes

Exemplo 3



0 ṽ = 826.250, x̃10 = 0.875, round = 695, v̂ = 695
x10 = 1
x10 = 0
1 ṽ = 798.750, x̃14 = 0.75, round = 660
3 ṽ = 793.171, x̃3 = 0.78, round = 510
x14 = 1
x14 = 0
x3 = 1
x3 = 0
2 ṽ = 545 by bound
8 ṽ = 780, x̃9 = 0.60, round = 660
4 ṽ = 791.250, x̃9 = 0.25, round = 540
10 ṽ = 713.5 by bound
x9 = 1
x9 = 0
x9 = 1
x9 = 0
9 infeasible
14 ṽ = 714 by bound
11 ṽ = 704 by bound
5 ṽ = 787, x̃4 = 0.60, round = 725, v̂ = 725
x4 = 1
x4 = 0
6 ṽ = 770.5, x̃2 = 0.50, round = 755, v̂ = 755
12 ṽ = 757, x̃5 = 0.40, round = 725
x2 = 1
x2 = 0
x5 = 1
x5 = 0
7 ṽ = 700.167 by bound
15 ṽ = 766.905, x̃7 = 0.09, round = 765, v̂ = 765
by parent after 15
13 ṽ = 732 by bound
x7 = 1
x7 = 0
18 infeasible
16 ṽ = 766.600, x̃12 = 0.20, round = 765
x12 = 1
x12 = 0
19 ṽ = 174.667 by bound
17 ṽ = 765 by bound

Exemplo 3

t	Relax Value	Relaxation Solution[a]	Round Value	Action
0	826.250	$(1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0.875, 0, 0, 1, 1)$	695	First incumbent $\hat{\mathbf{x}} \leftarrow$ $(1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1)$ branch on x_{10}
1	798.750	$(1 ,0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, \underline{1}, 0, 0, 1, 0.750)$	660	Branch on x_{14}
2	545.000	$(1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, \underline{1}, 0, 0, 0, \underline{1})$	—	Terminate by bound
3	793.171	$(1, 0, 0.780, 0.463, 0.537, 0.780, 0, 1, 0.415, \underline{0}, 0, 0, 1, 0.585)$	510	Branch on x_3
4	791.250	$(1, 0, \underline{1}, 0.650, 350, 1, 0, 0.550, 0.250, \underline{0}, 0, 1, 0.750)$	540	Branch on x_9
5	787.000	$(1, 0, \underline{1}, 0.600, 0.400, 1, 0, 0.400, \underline{0}, \underline{0}, 0, 0, 1, 1)$	725	New incumbent $\hat{\mathbf{x}} \leftarrow$ $(1, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)$ branch on x_4
6	770.500	$(1, 0.500, \underline{1}, \underline{1}, 0, 0, 0, 0.500, \underline{0}, \underline{0}, 0.500, 0, 1, 1)$	755	New incumbent $\hat{\mathbf{x}} \leftarrow$ $(1, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)$ branch on x_2
7	700.167	$(0.833, \underline{1}, \underline{1}, \underline{1}, 0.188, 0, 0, \underline{0}, \underline{0}, 1, 0, 1, 0.750)$	—	Terminate by bound
8	780.000	$(1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0.600, \underline{1}, 0, 0, 1, \underline{0})$	660	Branch on x_9
9	Infeasible	None	—	Terminate by infeasible
10	713.500	$(1, 1, \underline{0}, 0, 0, 0, 0, 0, 0.500, \underline{0}, 1, 0, 1, 0.500)$	—	Terminate by bound
11	704.000	$(0.500, 0, \underline{1}, 0.800, 0.200, 1, 0, 1, \underline{1}, \underline{0}, 0, 0, 1, 0)$	—	Terminate by bound
12	757.000	$(1, 0, \underline{1}, \underline{0}, 0.400, 1, 0, 0.400, \underline{0}, \underline{0}, 0, 0, 1, 1)$	725	Branch on x_5
13	732.000	$(1, 0.462, \underline{1}, \underline{0}, \underline{0}, 0.846, 0, 0.077, 0, \underline{0}, \underline{0}, 0.462, 0, 1, 1)$	—	Terminate by bound
14	714.000	$(1, 0, 0.600, 0.600, 0, 0.600, 0, 0, 1, \underline{0}, \underline{1}, 0, 0, 1, \underline{0})$	—	Terminate by bound
15	766.909	$(1, \underline{0}, \underline{1}, \underline{1}, 0, 0, 0.091, 1, \underline{0}, \underline{0}, 0, 0.182, 1, 1)$	765	New incumbent $\hat{\mathbf{x}} \leftarrow$ $(1, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1)$ branch on x_7
16	766.600	$(1, \underline{0}, \underline{1}, \underline{1}, 0, 0, \underline{0}, 1, \underline{0}, \underline{0}, 0, 0.200, 1, 1)$	765	Branch on x_{12}
17	765.000	$(1, \underline{0}, \underline{1}, \underline{1}, 0, 0, \underline{0}, 1, \underline{0}, \underline{0}, 0, \underline{0}, 1, 1)$	—	Terminate by bound
18	Infeasible	None	—	Terminate by infeasible
19	174.667	$(0.333, \underline{0}, \underline{1}, \underline{1}, 0, 1, \underline{0}, 1, \underline{0}, \underline{0}, 0, \underline{1}, 0, 0)$	—	Terminate by bound

[a] Underlined values are fixed in the partial solution.

- nós pai fornecem limitantes: valor ótimo da relaxação associado a nós pai de soluções parciais

  – limitante superior para problemas de maximização

  – limitante inferior para problemas de minimização

- sempre que *branch and bound* acha uma nova solução incumbente

↓

qualquer solução parcial ativa cujo limitante fornecido pelo nó pai não é melhor que o valor da nova solução pode ser *terminada*

Parada Prematura

- maximização: máximo dos valores ótimos das relaxações de nós pais de soluções parciais sempre fornece limitante superior para o valor ótimo do problema original

- minimização: mínimo dos valores ótimos das relaxações de nós pais de soluções parciais sempre fornece limitante inferior para o valor ótimo do problema original

Exemplo: nós ativos após exploração do nó 6 , exemplo 2: {8,10,11,12, 7, 15}

pais de {8,10,11,12, 7, 15} $\rightarrow$ {1, 3, 4, 5, 6}

melhor possível: max {798, 75, 793,17, 791,25, 787,,00, 770,50) = 798,75

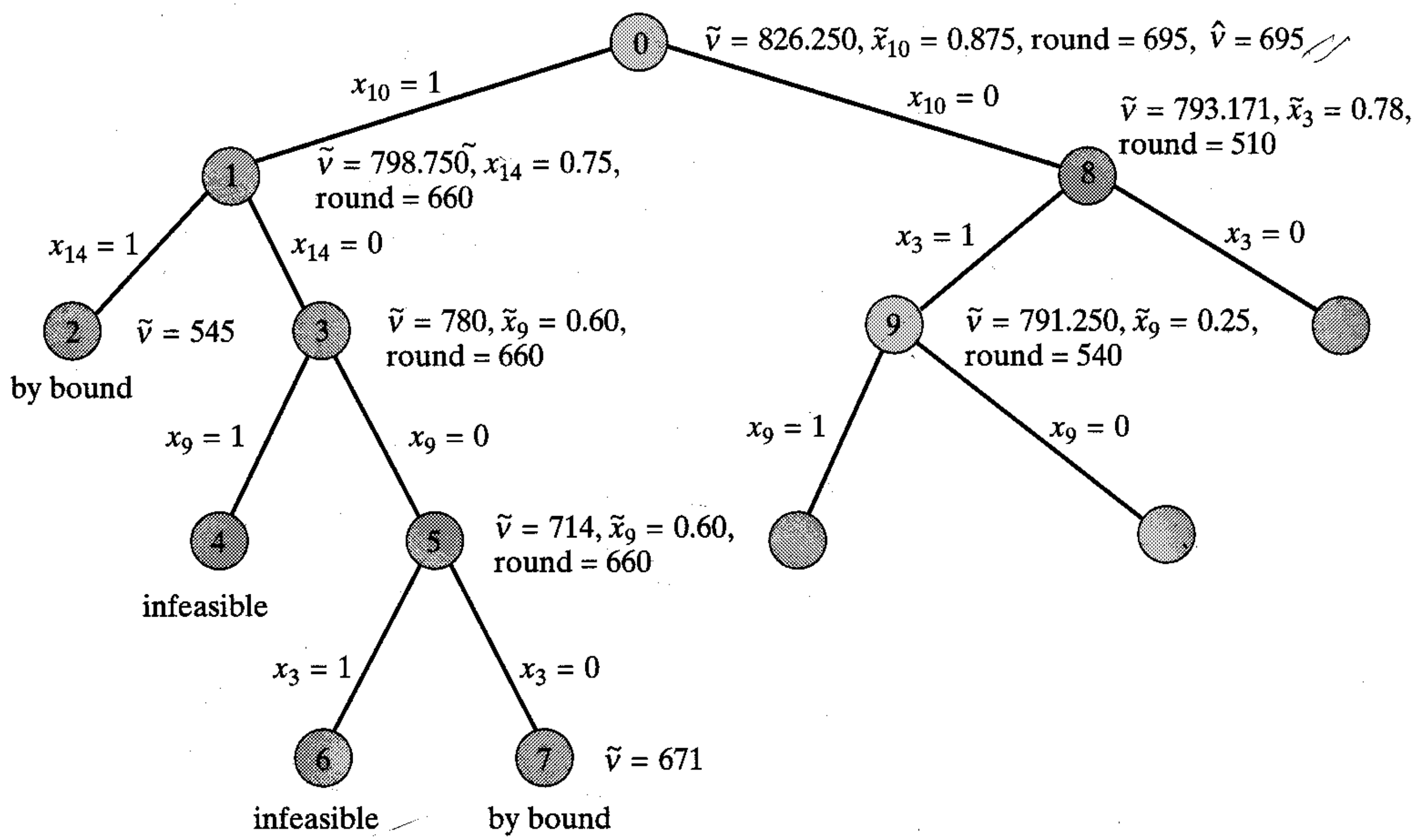
melhor solução incumbente até então : nó 6, valor = 755

erro aproximação: (798.75 - 755) / 755 = 0.58 $\rightarrow$ 5,8 %

Estratégias de Busca e de Desempate

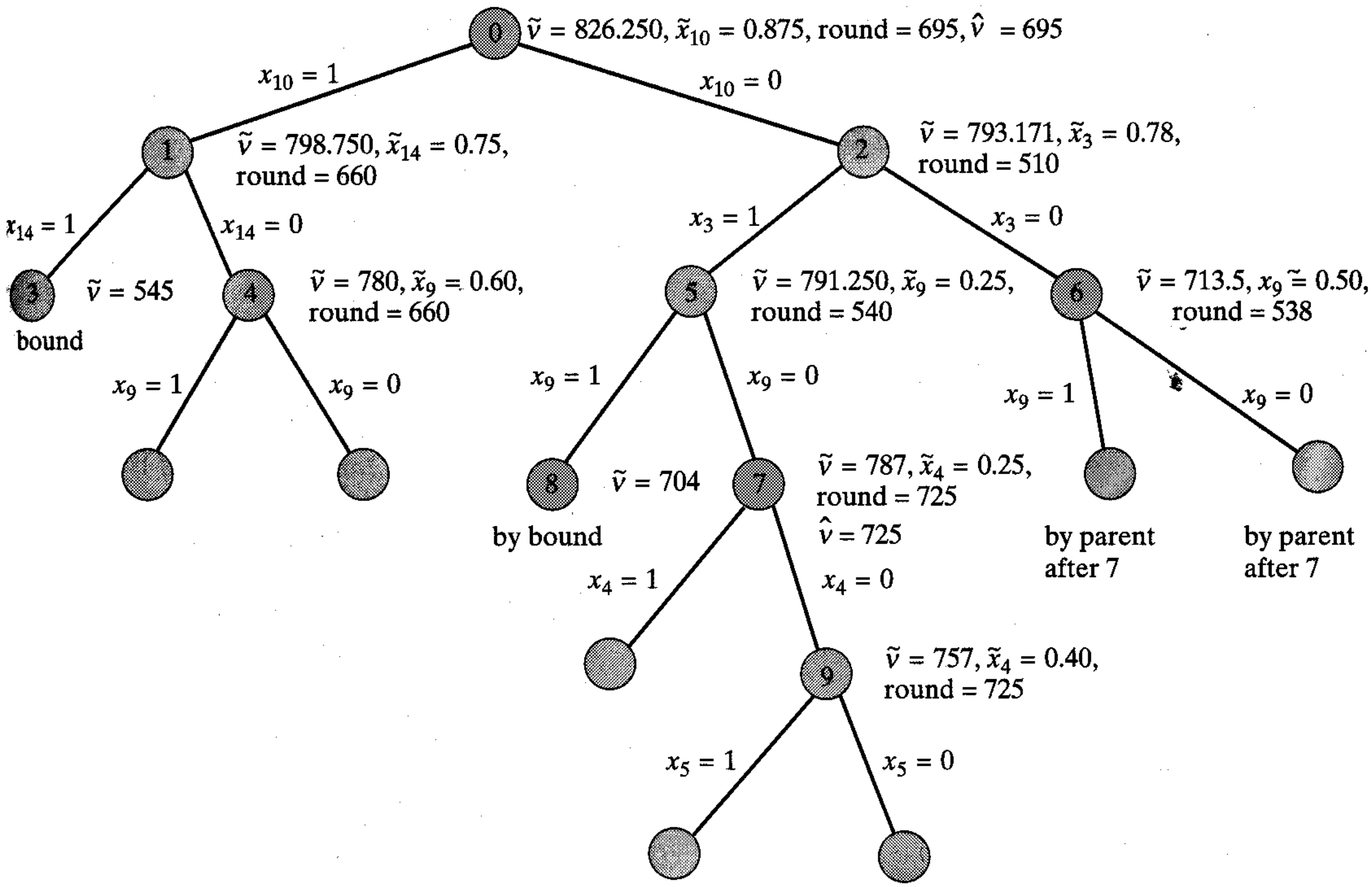
- primeiro em profundidade (*depth fist*):
  - maior número componentes solução parcial fixos
- primeiro melhor (*best first*):
  - solução ativa com melhor limitante estabelecido pelo pai
- *depth forward best back*:
  - procede em profundidade; quando termina uma solução parcial, decide pelo primeiro melhor.
- desempate: decide pelo filho mais próximo

Exemplo 3



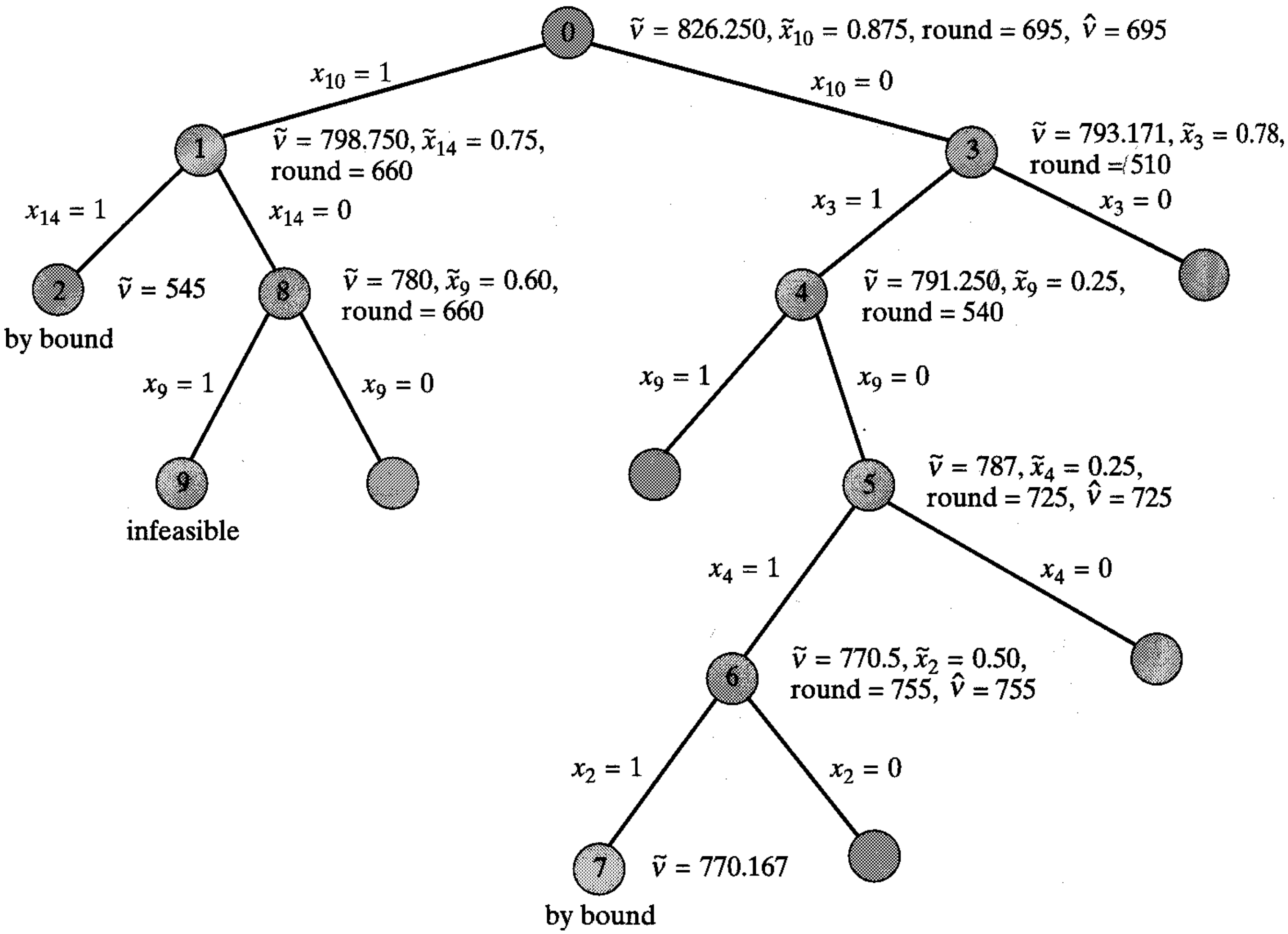
(a) *Depth first*

Exemplo 3



(b) *Best first*

Exemplo 3



(c) *Depth forward best back*

Algoritmo *Branch and Cut* PLI {0,1}

Passo 0 Inicialização: com solução parcial $x^0 = (\#,...,\#)$, $t \leftarrow 0$;
ou com solução incumbente (x, v) se disponível;

Passo 1 Parada: se $\exists$ solução partial, selecionar uma delas x^t; ir para Passo 2;
senão, se $\exists$ solução incumbente, ela é ótima; senão modelo infactível

Passo 2 Relaxação: resolver relaxação PL problema candidado x^t;

Passo 3 Termina por infactibilidade: idem *branch and bound* básico;

Passo 4 Termina por limite: idem *branch and bound* básico;

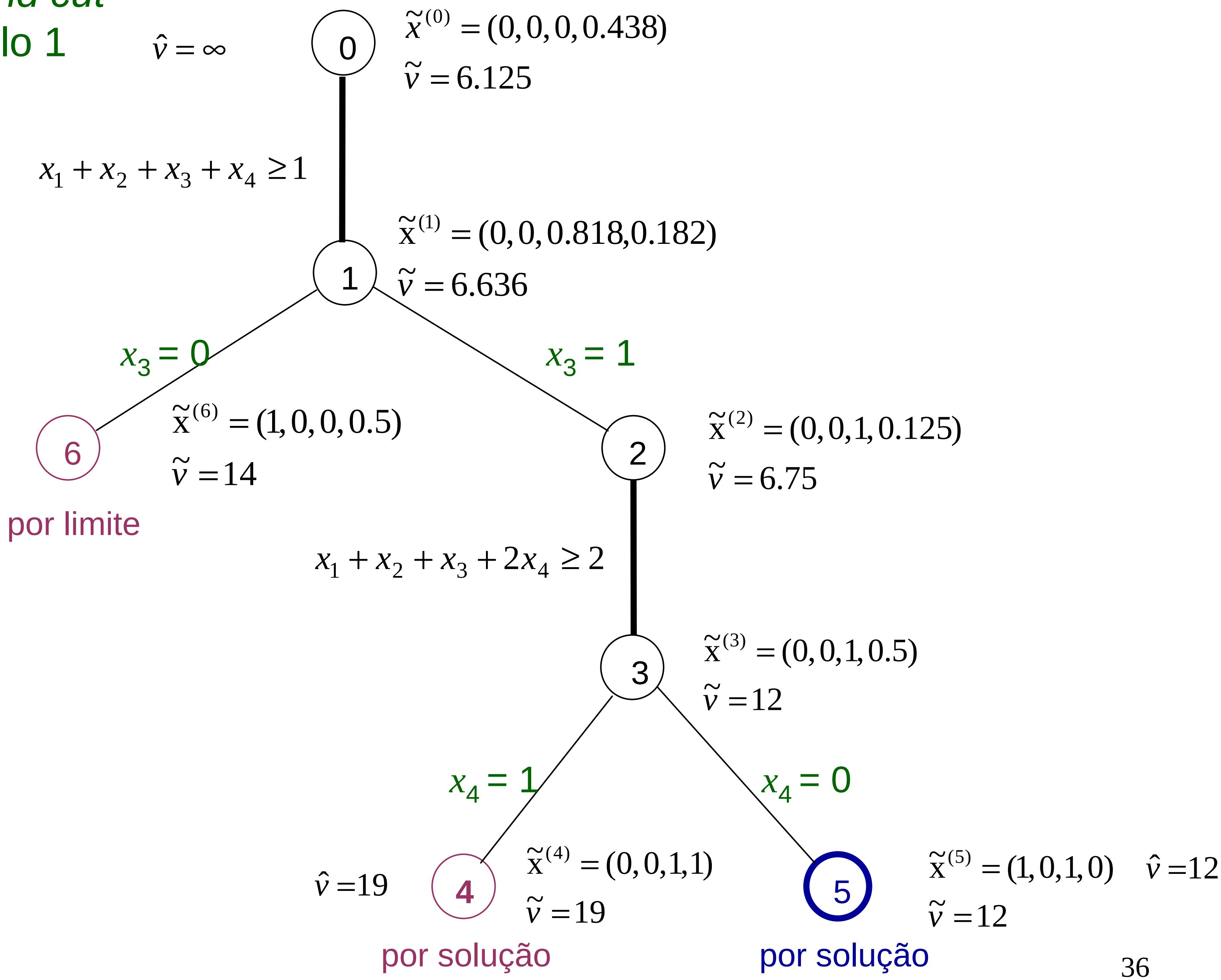
Passo 5 Termina por solução: idem *branch and bound* básico;

Passo 6 Desigualdade válida: verificar se podemos identificar uma restrição de desigualdade válida para o problema original que é violada pela solução ótima corrente do problema relaxado; sucesso: incluir restrição no modelo original; $t = t + 1$; ir para Passo 2;

Passo 6 Ramificação: idem *branch and bound* básico;

branch and cut

Exemplo 1



Algoritmos Heurísticos

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

Passo 1 Ótimo local: se nenhuma direção Δx de M melhora a função objetivo ou não é factível em x^t, então parar; x^t é ótimo local;

Passo 2 Move: escolher direção factível que melhora função objetivo $\Delta x \in M \rightarrow \Delta x^{t+1}$;

Passo 3 Atualiza: $x^{t+1} \leftarrow x^t + \Delta x^{t+1}$;

Passo 4 Incrementa: $t = t + 1$; ir para Passo 1;

- eficiência depende de como se determina M
- busca + inicializações múltiplas

Exemplo

$$\begin{aligned} \min\ & 18x_1 + 25x_2 + 11x_3 + 14x_4 \\ \text{s.a.}\ & 2x_1 + 2x_2 + x_3 + x_4 \leq 3 \\ & x_1, x_2, x_3, x_4 \in \{0,1\} \end{aligned}$$

- Vizinhança: complemento simples da melhor solução em t
  (troca valor de uma única componente $0 \leftrightarrow 1$)
- $x^o = (1, 0, 0, 0)$
- se mais de um elemento de M é factível, selecionar o melhor

- $x^o = (1, 0, 0, 0)$, $f(x^o) = 18$
- $M = \{(0, 0, 0, 0), (1, 0, 1, 0), (1, 0, 0, 1)\}$ $(f = 0,\ f = 29,\ f = 32)$
- $x^1 = (1, 0, 0, 1)$, $f(x^1) = 32$
- $M = \{(0, 0, 0, 1), (1, 0, 0, 0)\}$ $(f = 14,\ f = 18)$
- não melhora e algoritmo pára com
  - $x^* = x^1 = (1, 0, 0, 1)$
  - $f(x^*) = 32$

$$\min \sum_{k=1}^{10}\sum_{i=1}^{10}\sum_{j=1}^{10} d_{ij}\, y_{ki}\, y_{k+1\,j} \qquad \text{distância total}$$

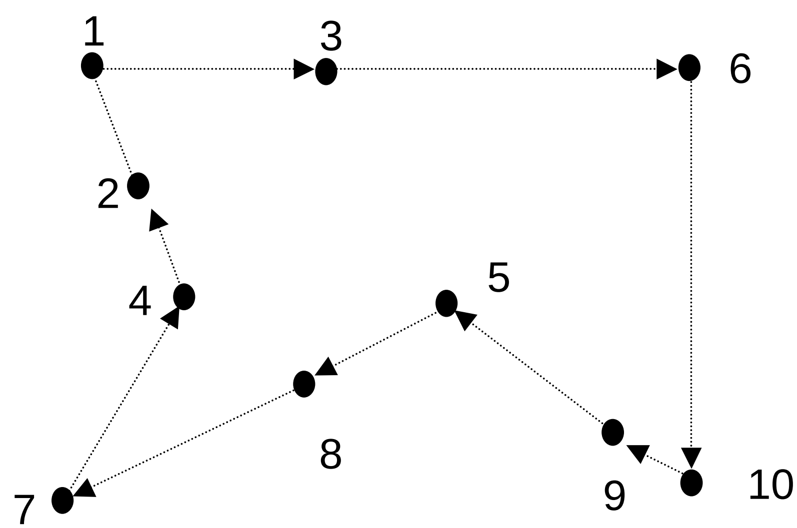
$$\text{s.a.} \quad \sum_{i=1}^{10} y_{ki} = 1 \qquad \forall k \qquad \text{ordem de perfuração}$$

$$\sum_{k=1}^{10} y_{ki} = 1 \qquad \forall i \qquad \text{todos furos}$$

$$y_{ki} \in \{0,1\} \qquad \forall k, i$$

$$y_{ki} = \begin{cases} 1 & \text{se k – ésima perfuração é a do i – ésimo furo} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

M : { pares (k, l) de trocasde posições k, l }



• alternativa quando não existem soluções factíveis que melhoram o valor da função objetivo é permitir movimentos ao longo de direções não factíveis para “escapar” de ótimos locais

• problema: movimentos não factíveis causam ciclagem

↓

• **Busca Tabu**: proibe temporariamente a consideração de direções que levam à soluções recentemente visitadas

↓

lista tabu

Busca Tabu

Passo 0 Inicialização: com solução factível x^0; número máximo iterações t_{max};
solução incumbente $x^\wedge \leftarrow x^0$; nenhuma direção é tabu; $t \leftarrow 0$;

Passo 1 Parada: se nenhuma direção não tabu Δx de M leva a um vizinho de x^t factível, ou $t = t_{max}$, então parar; solução incumbente $x^\wedge$ é ótima aproximada;

Passo 2 Move: escolher direçãofactível não tabu $\Delta x \in M \rightarrow \Delta x^{t+1}$;

Passo 3 Atualiza: $x^{t+1} \leftarrow x^t + \Delta x^{t+1}$;

Passo 4 Solução incumbente: se valor função objetivo para x^{t+1} é melhor que a solução incumbente $x^\wedge$, então x^{t+1} é solução incumbente corrente;

Passo 5 Lista tabu: remover direções da lista que já estão há um número de iterações;
acrescentar direções que levam x^{t+1} de volta à x^t;

Passo 6 Incrementa: $t = t + 1$; ir para Passo 1;

Busca Estocástica: *Simulated Annealing*

Passo 0 Inicialização: com solução factível x^0; número máximo iterações t_{max};
solução incumbente $x^\wedge \leftarrow x^0$; temperatura q > 0 grande; $t \leftarrow 0$;

Passo 1 Parada: se nenhuma direção Δx de M leva a um vizinho de x^t factível, ou se $t = t_{max}$, então parar; solução incumbente $x^\wedge$ é ótima aproximada;

Passo 2 Move: escolher aleatoriamente direção factível $\Delta x \in M \rightarrow \Delta x^{t+1}$; calcular variação Δobj ao mover de x^t para x^{t+1} (Δobj não positivo $\Rightarrow$ piora);

Passo 3 Aceita: Se ou x^{t+1} melhora ou se Δobj < 0 com probabilidade $e^{\Delta obj/q}$, então aceitar e atualizar $x^{t+1} \leftarrow x^t + \Delta x^{t+1}$; caso contrário ir para o Passo 2;

Passo 4 Solução incumbente: se valor função objetivo para x^{t+1} é melhor que para solução incumbente $x^\wedge$, então x^{t+1} é solução incumbente corrente;

Passo 5 Redução temperatura: após um número suficiente de iterações depois da última mudança de temperatura, reduzir temperatura q;

Passo 6 Incrementa: $t = t + 1$; ir para Passo 1;

Busca Estocástica: Algoritmos Genéticos

$P(t)$: população de soluções candidatas ($x^1, x^2, ..., x^p$) no passo t

procedimento algoritmoGenético

início
$t \leftarrow 0$;
inicializar $P(t)$;
enquanto $t \leq t_{max}$ fazer
    inicio
        avaliar $P(t)$;
        selecionar pares de soluções de acordo com função objetivo;
        produzir filhos de acordo com operadores genéticos;
        atualizar população;
        $t \;\; t+1$;
    fim;
fim

- AG é um algoritmo de busca inspirado nos mecanismos da seleção natural e da genética.

- Combina melhores indivíduos de uma população através de um mecanismo estruturado, mas aleatório, de troca de informações para fornecer novas soluções.

- Métodos de otimização
  - cálculo: diretos e indiretos
  - enumeração
  - estocásticos

- AG é um algoritmo de busca estocástico

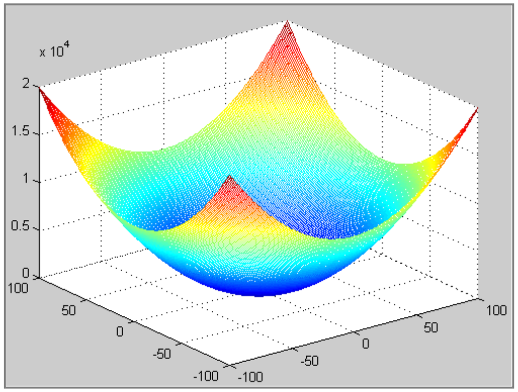
- Algoritmos genéticos × métodos clássicos de otimização

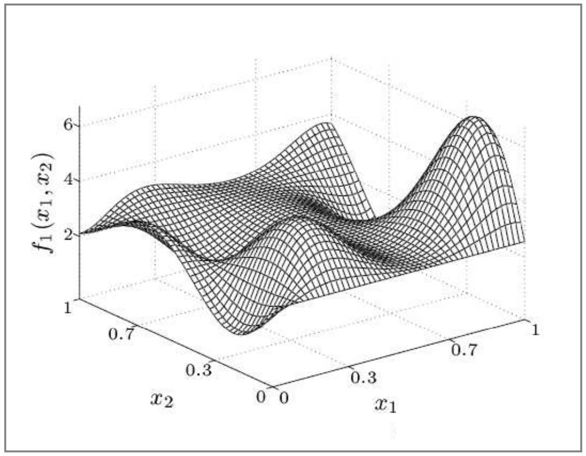
    – AG usa codificação e não as variáveis de decisão diretamente

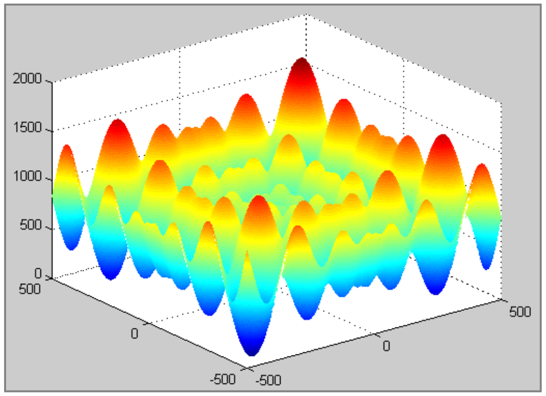
    – AG realiza busca utilizando população ao invés de um ponto

    – AG usa valores da função e não dependem de derivadas

    – AG usa regras de transição probabilísticas







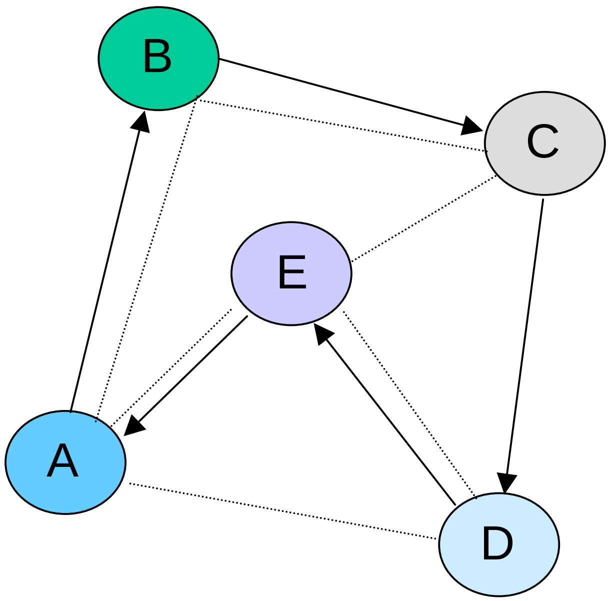
- Analogia entre genética natural e AG

– cromossoma	cadeias (*strings*)
– gen	elemento de uma cadeia
– alelo	valor do gen
– locus	posição na cadeia
– genótipo	estrutura cromossômica
– fenótipo	solução
– epistasis	não linearidade
– fitness	função objetivo

- Codificação
  - binária
  - alfanumérica
  - real
  - Grey

- Operadores genéticos
  - seleção
  - produzir filhos (recombinação (*crossover*))
  - mutação

Exemplo

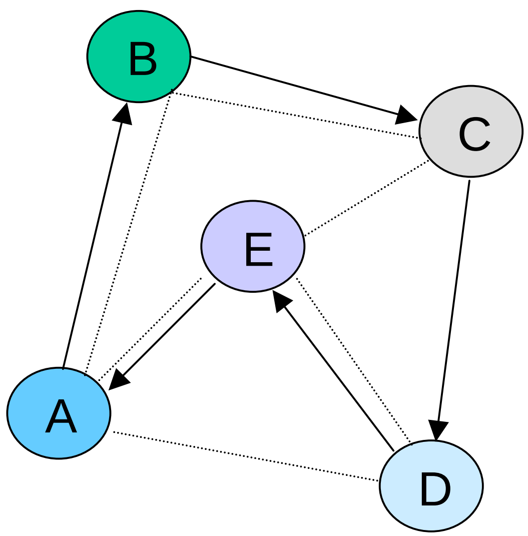


Menor caminho ???

Cromossoma = [A B C E D]

Comprimento caminho = fitness

Exemplo



[A B C E D] **individuo**

Caminho **fitness**

Menor caminho ???

Operadores Básicos

Pais **Offspring**

[A B C D E] → **[C B A D E]**

pontos mutação

mutação

[A B C D E]

[C B A E D]

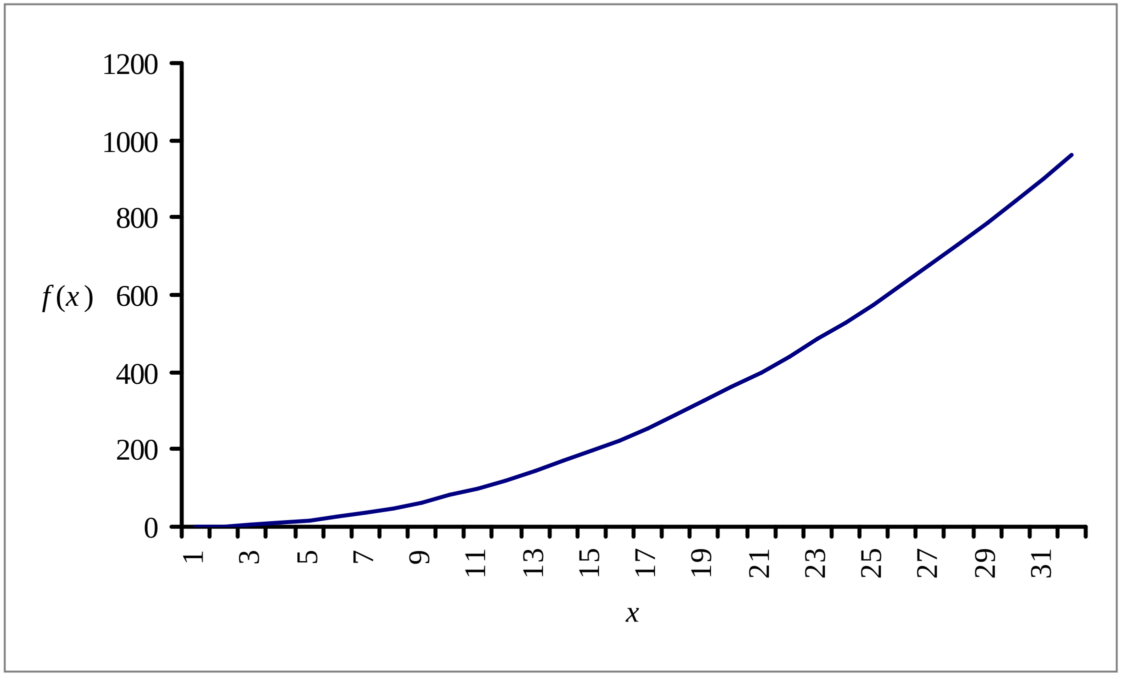
→ **[A B C E D]**

x-over

Exemplo

$\max f(x) = x^2$

$x \in S = \{0, 1, 2, \ldots, 31\}$



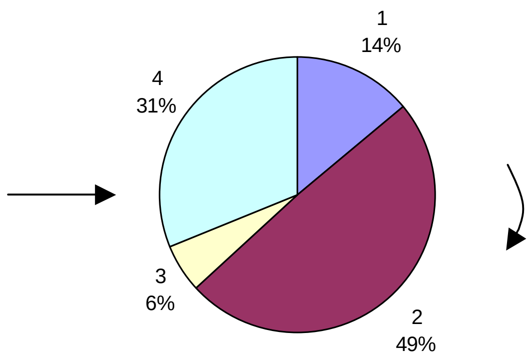
0	0
1	1
2	4
3	9
4	16
5	25
6	36
7	49
8	64
9	81
10	100
11	121
12	144
13	169
14	196
15	225
16	256
17	289
18	324
19	361
20	400
21	441
22	484
23	529
24	576
25	625
26	676
27	729
28	784
29	841
30	900
31	961

Codificação: número binário de 5 bits

Fitness: $f(x) = x^2$

População inicial:

No	Cadeia	$f(x)$	% Total
1	01101	169	14
2	11000	576	49
3	01000	64	6
4	10011	361	31
Total		1170	100



Crossover

Pais		Filhos
11|000	→	11011
10|011		10000

Mutação

Antes		Depois
11000	→	10011

String No	População Inicial	Valor x	$f(x)$	$fi/\Sigma fi$	$fi/\bar{f}$	Contagem Real Roleta
1	01101	13	169	0.14	0.58	1
2	11000	24	576	0.49	1.97	2
3	01000	8	64	0.06	0.22	0
4	10011	19	361	0.31	1.23	1
Soma			11770	1.00	4.00	4.00
Média			293	0.25	1.00	1.00
Max			576	0.49	1.97	2.00

População	Par	Posição x-over	Nova População	Valor x	$f(x)$	$f(x)$
110|1	2	4	1100	12	144	1
1100|0	1	4	11001	25	625	2
10|00	4	2	11011	27	729	0
10|011	3	2	10000	16	256	1
Soma						1754.00
Média						439.00
Max						729.00

Busca Heurística Construtiva

Passo 0 Inicialização: com solução parcial $x^0 = (\#,...,\#)$, $t \leftarrow 0$;

Passo 1 Parada: se todas componentes de x^t estão fixas, então parar; $x^\wedge \leftarrow x^t$;
$x^\wedge$ solução ótima aproximada;

Passo 2 Avança: escolher uma componente livre x_p da solução parcial x^t e um valor para ela que sugira completamentos factíveis plausíveis; avançar para solução parcial x^{t+1} identica à x^t exceto em x_p;

Passo 3 Incrementa: $t = t + 1$; ir para Passo 1;

Observação