2.2-Métodos 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
  - exatos (*branch and bound*, *discrete dynamic programming*)
  - heurísticos (A, A*, outros)
  - metaheurísticas (algoritmos genéticos, PSA, SA, sistemas imunes, ACO)

- Aplicações
  - KBS
  - programação de produção
  - busca internet
  - GIS
  -

- 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
  - é uma escolha para os valores das variáveis de decisão
  - em geral uma solução é um vetor do R^n

- Características dos algoritmos de busca
  - melhora soluções factíveis ao longo de direções factíveis
  - usa informação sobre a vizinhança da solução corrente
  - vizinhança $\Rightarrow$ 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

1. iniciar com uma solução factível

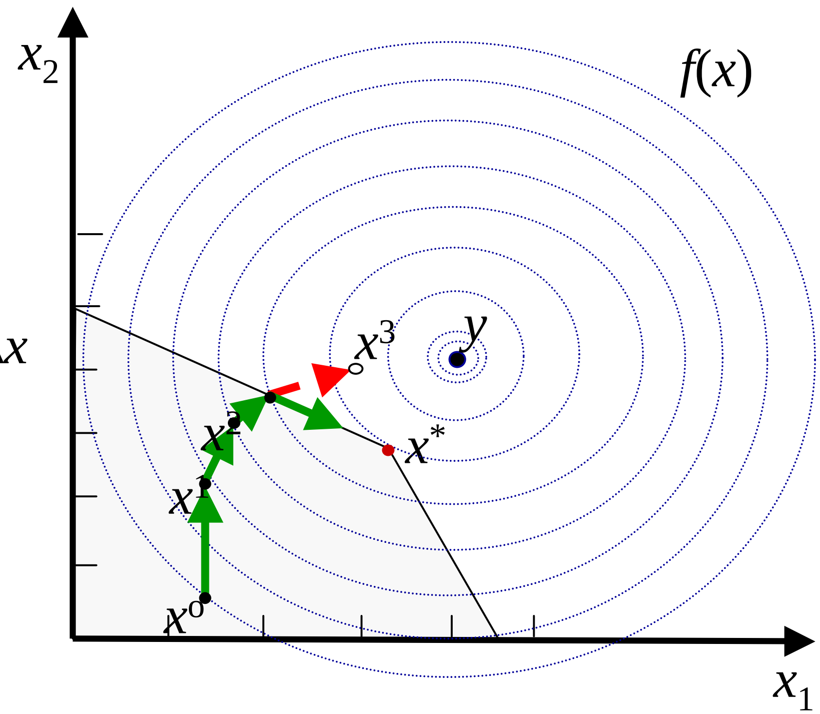
$$x = x^o \in D$$

2. prosseguir ao longo de direção factível Δx

$$x^{t+1} \leftarrow x^t + \lambda \Delta x, \quad x^{t+1} \in D$$

$$\Downarrow$$

$$f(x^{t+1}) \leq f(x^t)$$



min	$(x_1 - 4)^2 + (x_2 - 4)^2$					
sa	$1.7\,x_1$	+	$3.0\,x_2$	$\leq$	15	
	$2.2\,x_1$	+	$0.9\,x_2$	$\leq$	10	
	$x_1, x_2 \geq 0$					

- Problemas de maximização

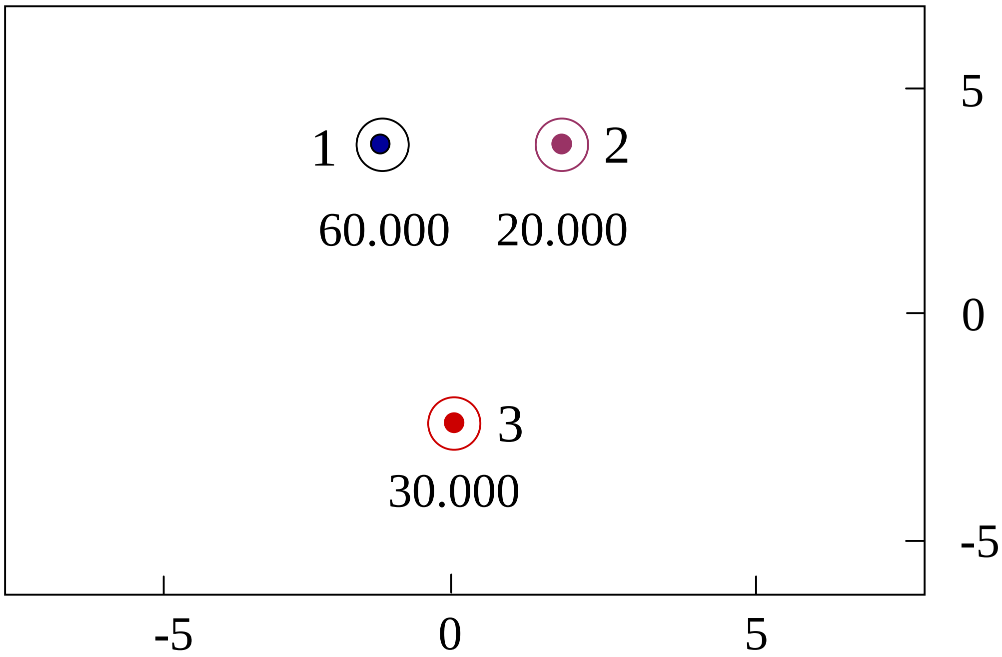
$$\begin{array}{ll} \max & f(x) \\ \text{sa} & x \in \mathrm{D} \end{array} \quad \Rightarrow \quad f(x^*) \geq f(x) \begin{cases} \forall x \in (\mathrm{D} \cap \mathrm{N}_{\varepsilon}(x)) & \text{local} \\ \forall x \in \mathrm{D} & \text{global} \end{cases}$$

- Problemas de minimização

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{sa} & x \in \mathrm{D} \end{array} \quad \Rightarrow \quad f(x^*) \leq f(x) \begin{cases} \forall x \in (\mathrm{D} \cap \mathrm{N}_{\varepsilon}(x)) & \text{local} \\ \forall x \in \mathrm{D} & \text{global} \end{cases}$$

- Ótimo local pode ser ótimo global
- Modelos tratáveis: ótimo local ≡ ótimo global
- Em geral ótimo local não é global
- O que fazer ?
  – executar algoritmos de busca independentes
  – declarar melhor solução ≡ solução ótima
  – ótimo aproximado (heurísticas)

Exemplo: problema de alocação



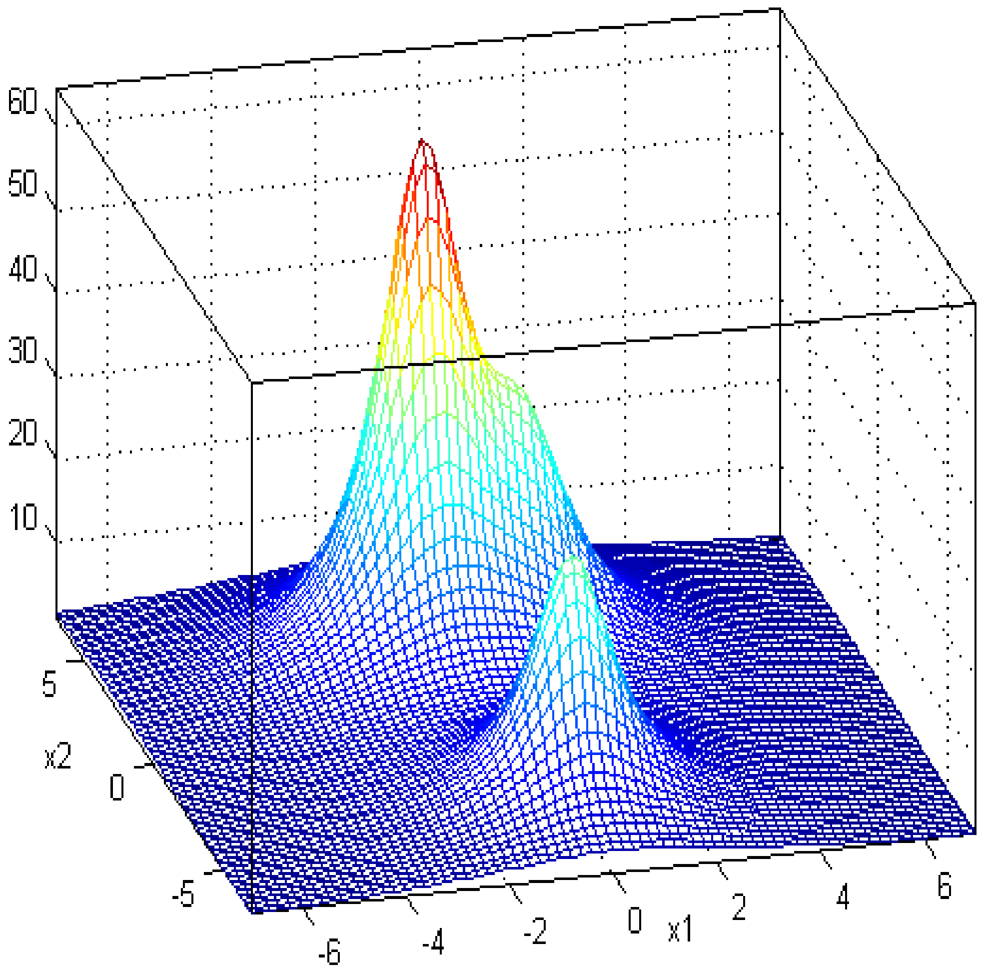
$$\max \quad f(x_1, x_2) = \frac{60}{1 + (x_1 + 1)^2 + (x_2 - 3)^2} + \frac{20}{1 + (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 3)^2} + \frac{30}{1 + (x_1)^2 + (x_2 + 4)^2}$$

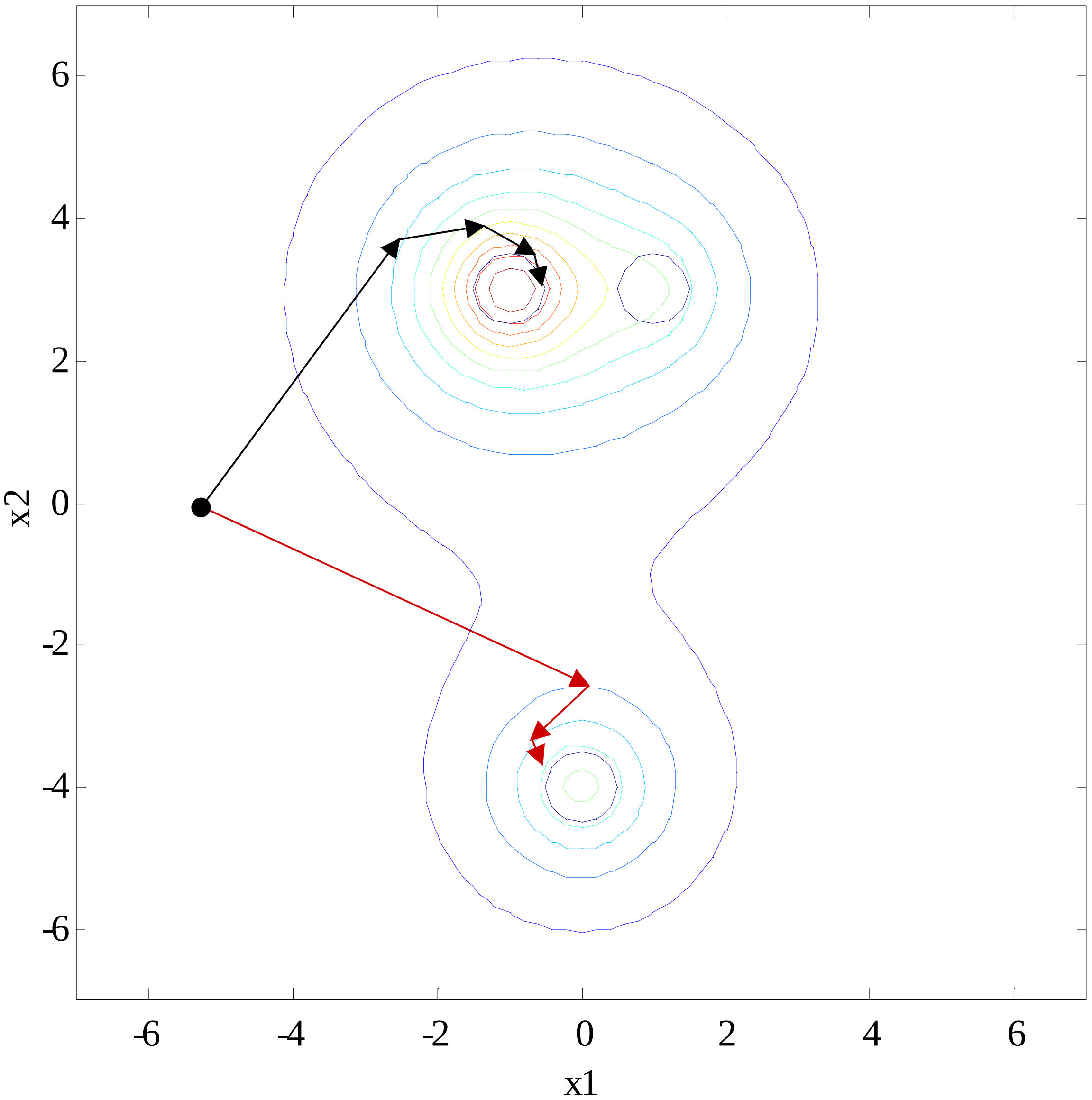
$$\text{s.a.} \quad (x_1 + 1)^2 + (x_2 - 3)^2 \geq 0.25$$

$$(x_1 - 1)^2 + (x_2 - 3)^2 \geq 0.25$$

$$(x_1)^2 + (x_2 + 4)^2 \geq 0.25$$

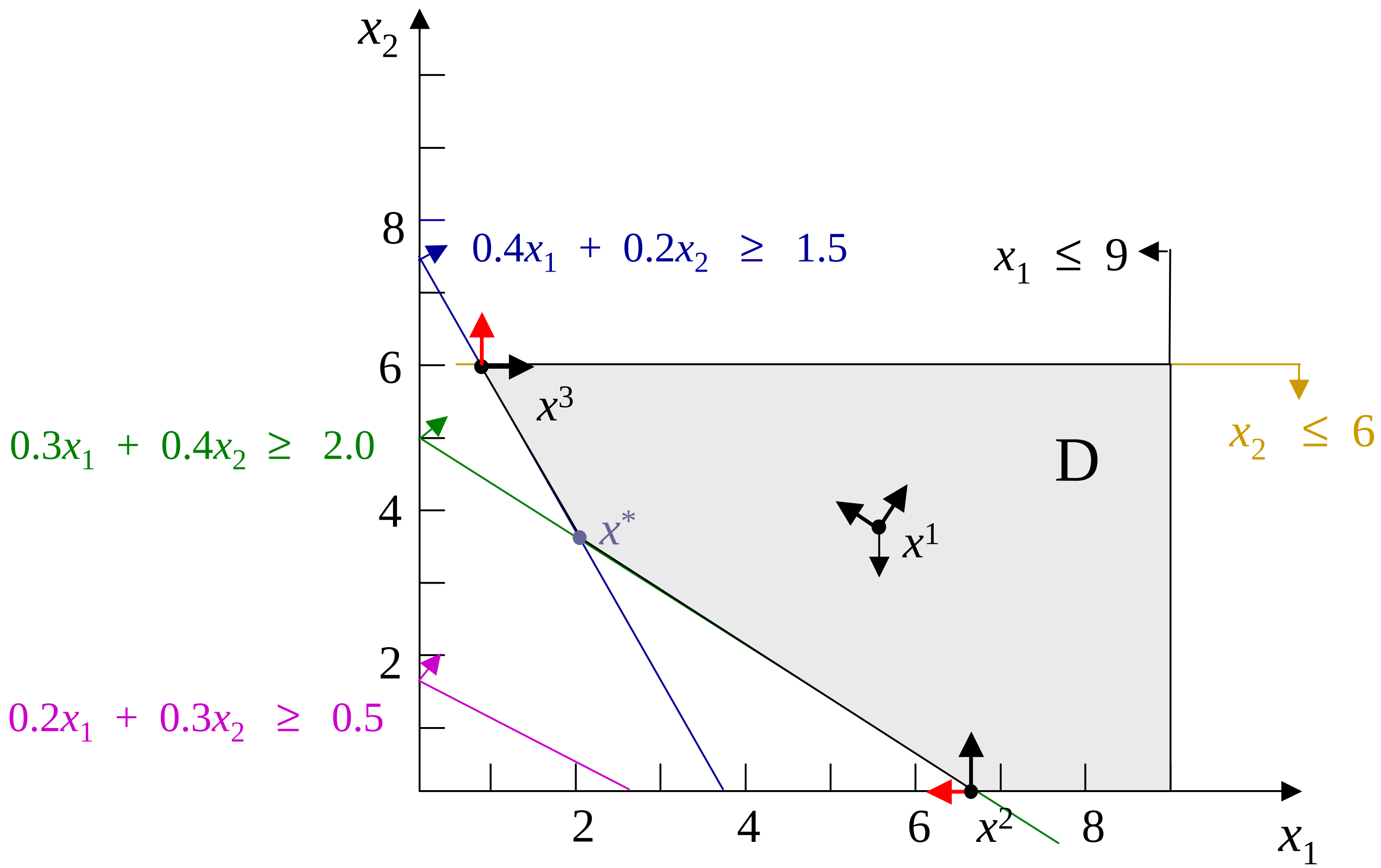
$$f(x_1, x_2)$$



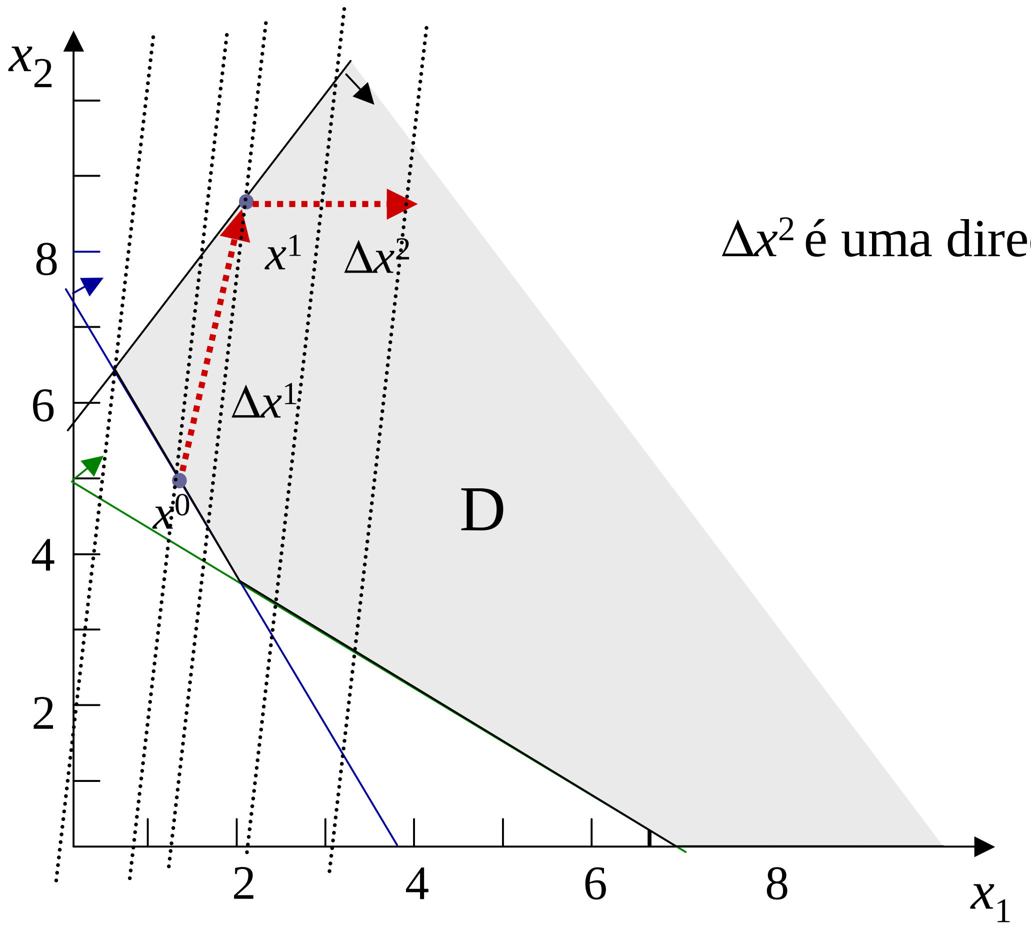

6
4
2
0
-2
-4
-6
x2
-6
-4
-2
0
2
4
6
x1

Direção factível

- Δx é uma direção factível em x^t se:
  - $x^t + \lambda\, \Delta x \in$ D, $\lambda > 0$ suficientemente pequeno
  - λ = passo na direção Δx



Modelos ilimitados



Δx^2 é uma direção ilimitada

Melhor direção: condições algébricas

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

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

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

$\nabla f(x)' \Delta x > 0 \quad \Rightarrow$ melhora para *maximizar*

$\nabla f(x)' \Delta x < 0 \quad \Rightarrow$ melhora para *minimizar*

Se $\Delta x = \nabla f(x)$ e $\nabla f(x) \neq 0$ então

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

Se $\Delta x = -\nabla f(x)$ e $\nabla f(x) \neq 0$ então

$\nabla f(x)' \nabla f(x) < 0$ em geral 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

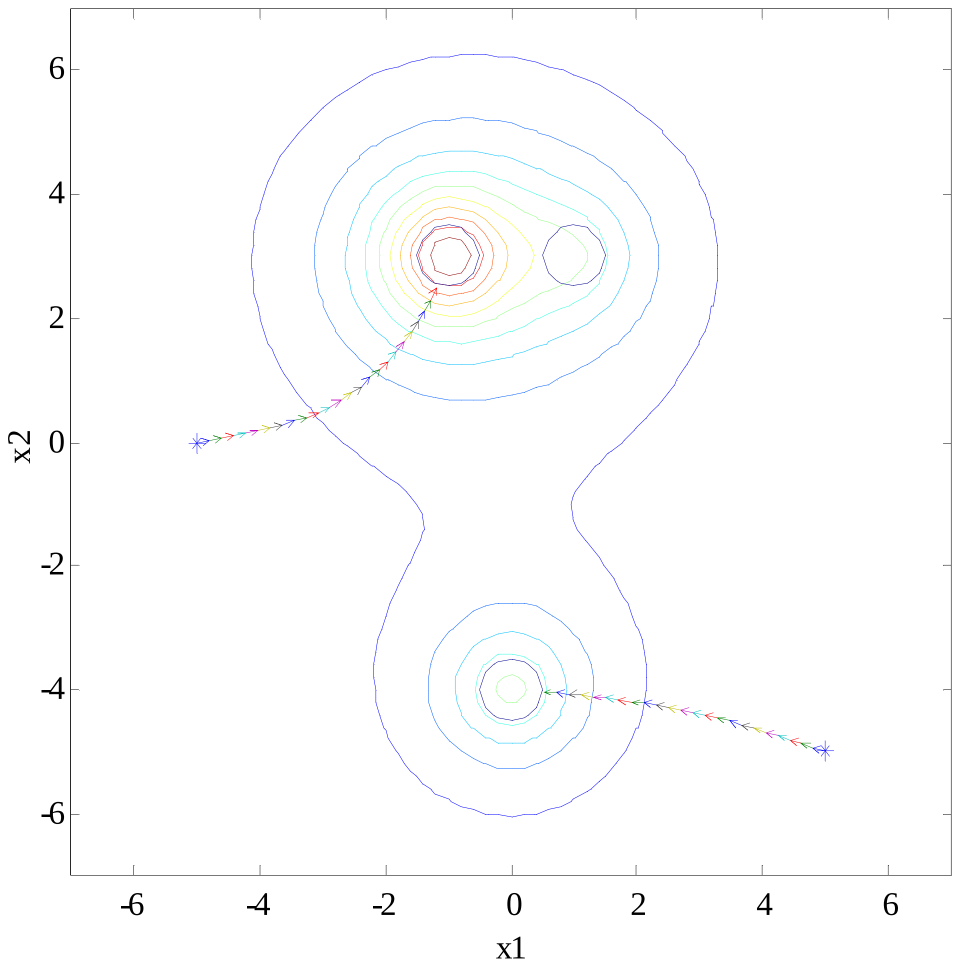
Passo 0 Inicialização: escolher uma solução factível x^0 , $t \leftarrow 0$;

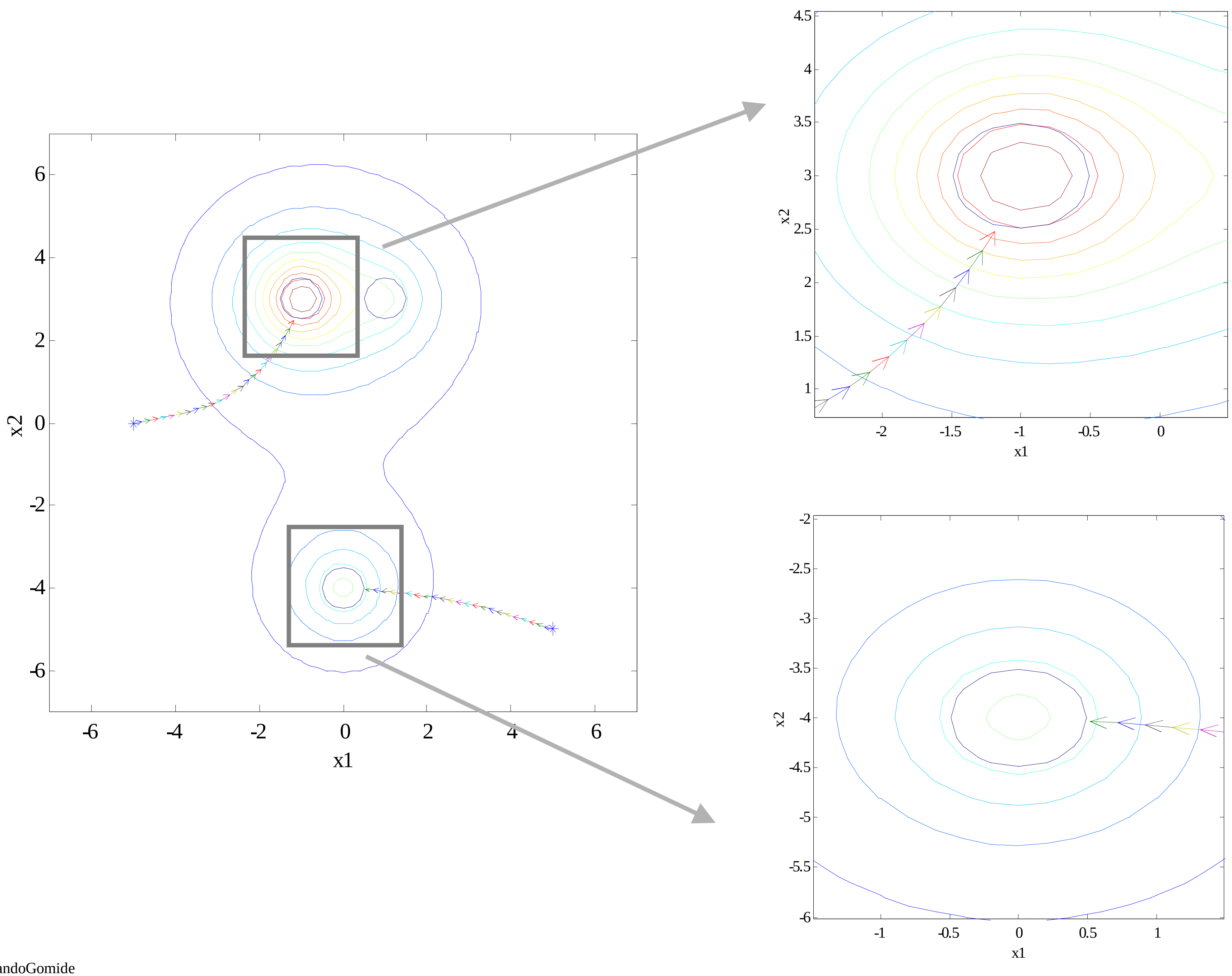
Passo 1 Direção e otimalidade: construir direção factível Δx^{t+1} em x^t;
se não existir direção factível, então parar; x^t é um ótimo local;

Passo 2 Passo: se existir limites para valor de λ para o qual a função objetivo melhora, 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





x1
x2

Factibilidade: condições algébricas:

- Caso linear

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

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

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

- Restrições ativas

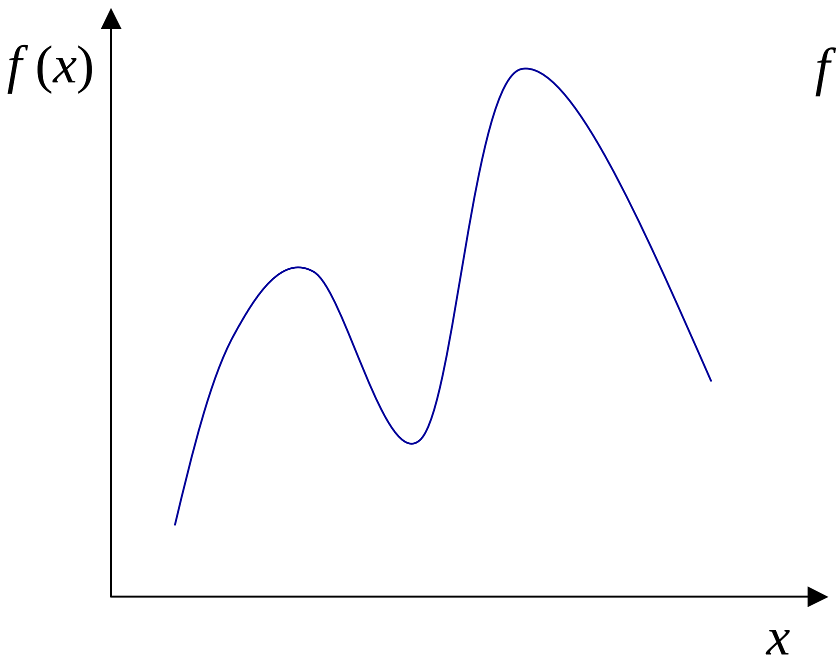
Unimodalidade e convexidade

- Tratabilidade
  - – conveniência para análise de um modelo

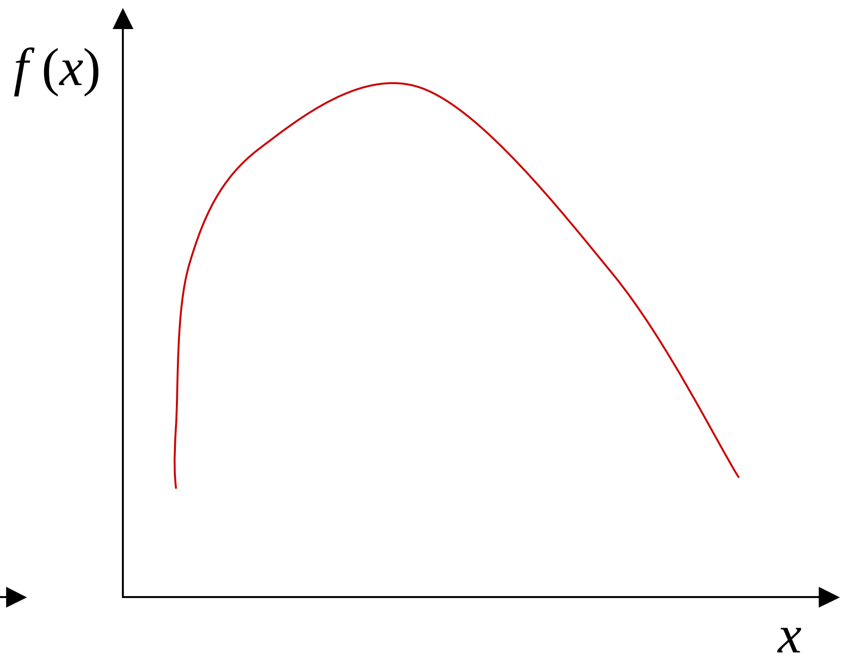
- Características importantes do modelo
  - – convexidade
  - – unimodalidade

Funções unimodais

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



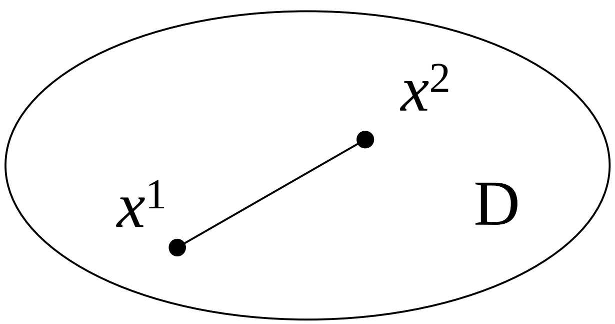
não unimodal para max e min



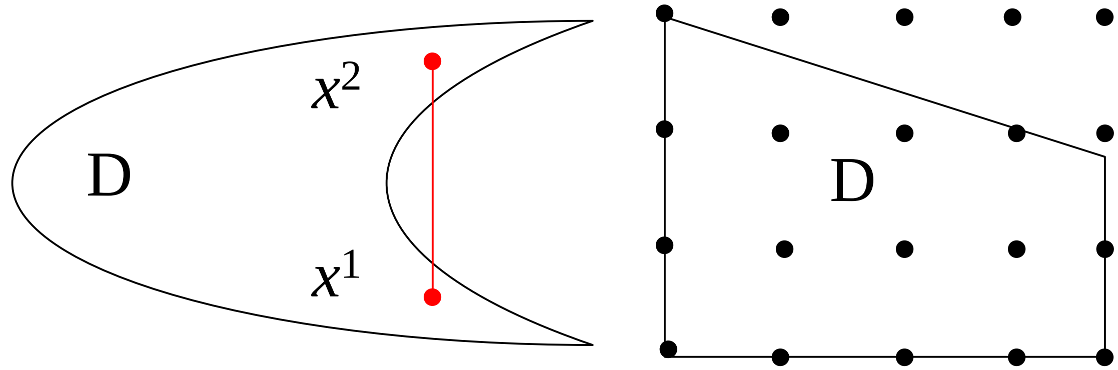
unimodal para max
não unimodal para min

Conjuntos convexos

$$\forall\, x^1, x^2 \in \mathrm{D}\,,\ \ x^1 + \lambda\,(x^2 - x^1) \in \mathrm{D}\,,\ \ 0 \leq \lambda \leq 1$$

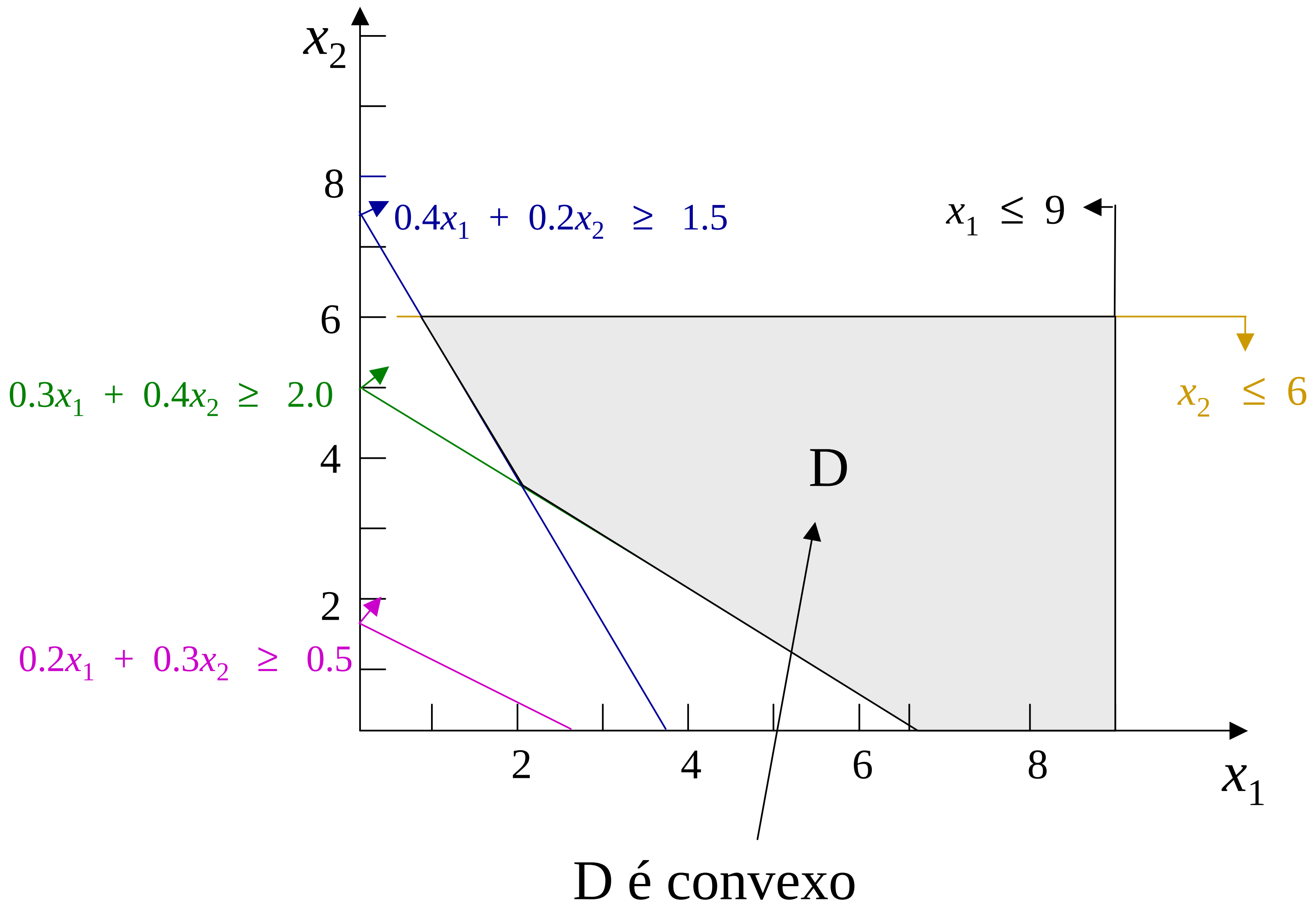


Convexo



Não convexos

- Todas restrições lineares ⇒ conjunto (espaço) factível convexo



- Ótimo local é ótimo global para:
  - – função objetivo unimodal
  - – modelos sem restrições

- Ótimo local é ótimo global para:
  - – função objetivo unimodal
  - – modelos com restrições que formam um conjunto convexo
    - modelos lineares
    - modelos lineares 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 restrições 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 Fase I termina com *soma* = 0, ir para o passo 3, a solução original é factível. Se *som*a > 0, parar: modelo original é infactível. Caso contrário, repetir Fase I com solução inicial diferente;

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

Método de duas fases: exemplo

- Modelo da Refinaria de Gabriel

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

Escolha $x_1 = x_2 = 0$

Viola as três primeiras restrições principais

- Modelo artificial

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

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

$$0.3\,(0) + 0.4\,(0) + x_3 \geq 2 \quad \Rightarrow \quad x_3 = 2$$
$$0.4\,(0) + 0.2\,(0) + x_4 \geq 1.5 \quad \Rightarrow \quad x_4 = 1.5$$
$$0.2\,(0) + 0.3\,(0) + x_5 \geq 0.5 \quad \Rightarrow \quad x_5 = 0.5$$

Solução da Fase I: (4 4 0 0 0) factível

Solução inicial para Fase II : x^o = (4 4)

Método Big-M

1 - Modelo auxiliar: max f – M (soma das variáveis artificiais)
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 as 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 M não é grande o suficicente, nada se pode dizer. Repetir algoritmo ou com valor M maior, ou com outra solução inicial.

Big-M: exemplo

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

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

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

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

Observação

Este material refere-se às notas de aula do curso CT 820 Teoria de Sistemas e Otimização Fuzzy: Introdução e Aplicações da Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação da Unicamp e do Centro Federal de Educação Tecnológica do Estado de Minas Gerais. 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.