

# Metaheurísticas de otimização. Algoritmos genéticos

Análise de sistemas

Maria M. Gamboa

2<sup>o</sup> Semestre de 2023. 06/11/2023

## Tipos de problemas de PNL

- Otimização sem restrições
  - Só restrições de não negatividade
- Otimização linearmente restrita
  - Programação quadrática
- Programação convexa
  - Os anteriores tipos são casos particulares
  - Programação separável
- Programação não convexa
- Programação geométrica
- Programação fracionária
- Problema complementar

# Condições para optimalidade

Segundo o tipo de problema, existem condições necessárias e suficientes para afirmar que uma solução é **ótima**.

Problema de otimização sem restrições, unidimensional:

$$\text{Max} = f(x)$$

Condição necessária:

$$\frac{df}{dx} = 0 \quad \text{para } x = x^*$$

É suficiente se  $f(x)$  concavo

# Condições para optimalidade

Segundo o tipo de problema, existem condições necessárias e suficientes para afirmar que uma solução é **ótima**.

Problema de otimização sem restrições, unidimensional:

$$\text{Max} = f(x)$$

Condição necessária:

$$\frac{df}{dx} = 0 \quad \text{para } x = x^*$$

É suficiente se  $f(x)$  concavo Problema de otimização sem restrições, n-dimensional:

$$\text{Max} = f(\mathbf{x})$$

Condição necessária:

$$\frac{\delta f}{\delta x_j} = 0 \quad \text{para } \mathbf{x} = \mathbf{x}^* \quad (j = 1, 2, \dots, n)$$

## Recomendação importante

Sempre, para qualquer problema, avalie as categorias mais simples antes das mais complexas

Utilizar, por exemplo, uma metaheurística complexa para um problema convexo, sem restrições, não é somente desnecessário mas incorreto!

Na prática encontramos problemas não convexos, para os que não são válidos outras técnicas, ou para os que essas técnicas são ineficientes

Na prática encontramos problemas não convexos, para os que não são válidos outras técnicas, ou para os que essas técnicas são ineficientes. Aparecem procedimentos 'alternativos' que se mostram úteis, juntando várias técnicas ou estratégias:

Na prática encontramos problemas não convexos, para os que não são válidas outras técnicas, ou para os que essas técnicas são ineficientes. Aparecem procedimentos 'alternativos' que se mostram úteis, juntando várias técnicas ou estratégias:

## **Métodos heurísticos:**



Na prática encontramos problemas não convexos, para os que não são válidas outras técnicas, ou para os que essas técnicas são ineficientes. Aparecem procedimentos 'alternativos' que se mostram úteis, juntando várias técnicas ou estratégias:

## **Métodos heurísticos:**

'...estratégias que ignoram parte da informação com o objetivo de tornar a escolha mais fácil e rápida...'

'... ou um algoritmo que encontra boas soluções a maioria das vezes, mas não tem garantias de que sempre encontrará ou um algoritmo que tem processamento rápido, mas não tem provas de que será rápido para todas as situações...'

## **Métodos heurísticos:**

- Não há garantia de atingir ótimo global

## **Métodos heurísticos:**

- Não há garantia de atingir ótimo global
- Bem feito, leva a uma boa solução factível (se há)

## **Métodos heurísticos:**

- Não há garantia de atingir ótimo global
- Bem feito, leva a uma boa solução factível (se há)
- Costuma ser iterativo

## Métodos heurísticos:

- Não há garantia de atingir ótimo global
- Bem feito, leva a uma boa solução factível (se há)
- Costuma ser iterativo
- Comumente baseado em ideias simples aplicadas e testadas no problema

## Métodos heurísticos:

- Não há garantia de atingir ótimo global
- Bem feito, leva a uma boa solução factível (se há)
- Costuma ser iterativo
- Comumente baseado em ideias simples aplicadas e testadas no problema
- Específico ao problema. Necessidade de fazer tudo para um novo tipo!

## Metaheurísticas

## Metaheurísticas

Método de solução geral que contempla uma estrutura geral e orientações estratégicas para desenvolver um método heurístico específico para um problema (ou tipo de problema).



## Metaheurísticas

Método de solução geral que contempla uma estrutura geral e orientações estratégicas para desenvolver um método heurístico específico para um problema (ou tipo de problema).

Integra processos de busca e melhora local com estratégias de mais alto nível para criar um processo que escapa dos ótimos locais, e faz uma busca robusta na região factível.

## Metaheurísticas

Método de solução geral que contempla uma estrutura geral e orientações estratégicas para desenvolver um método heurístico específico para um problema (ou tipo de problema).

Integra processos de busca e melhora local com estratégias de mais alto nível para criar um processo que escapa dos ótimos locais, e faz uma busca robusta na região factível.

Baseados em busca estocástica, e não em busca direta...

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta  
Busca direta - convencional.:

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca direta - convencional.:

- Algoritmos de melhora local.

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca direta - convencional.:

- Algoritmos de melhora local.
- Nova solução é solução anterior deslocada

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca direta - convencional.:

- Algoritmos de melhora local.
- Nova solução é solução anterior deslocada
- Direção e tamanho do passo, segundo método (Newton, Gradiente, Busca aleatória, Rosembrok, Levenberg maquadt...)

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca direta - convencional.:

- Algoritmos de melhora local.
- Nova solução é solução anterior deslocada
- Direção e tamanho do passo, segundo método (Newton, Gradiente, Busca aleatória, Rosembrok, Levenberg maquadt...)
- Sempre FO na nova solução é melhor do que na anterior

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca direta - convencional.:

- Algoritmos de melhora local.
- Nova solução é solução anterior deslocada
- Direção e tamanho do passo, segundo método (Newton, Gradiente, Busca aleatória, Rosembrok, Levenberg maquadt...)
- Sempre FO na nova solução é melhor do que na anterior
- Chega em um ótimo dependendo da solução inicial.



Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca direta - convencional.:

- Algoritmos de melhora local.
- Nova solução é solução anterior deslocada
- Direção e tamanho do passo, segundo método (Newton, Gradiente, Busca aleatória, Rosembrok, Levenberg maquadt...)
- Sempre FO na nova solução é melhor do que na anterior
- Chega em um ótimo dependendo da solução inicial.
- Pode não encontrar o ótimo global.

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca direta - convencional.:

- Algoritmos de melhora local.
- Nova solução é solução anterior deslocada
- Direção e tamanho do passo, segundo método (Newton, Gradiente, Busca aleatória, Rosembrok, Levenberg maquadt...)
- Sempre FO na nova solução é melhor do que na anterior
- Chega em um ótimo dependendo da solução inicial.
- Pode não encontrar o ótimo global.
- Opção: repetir com diferentes origens, mas pode não funcionar.

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta  
Busca estocástica - Metaheurísticas

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca estocástica - Metaheurísticas

- Nova solução tem relação com anterior, mas deslocamento é (parcialmente) aleatório

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca estocástica - Metaheurísticas

- Nova solução tem relação com anterior, mas deslocamento é (parcialmente) aleatório
- Em geral, menos preocupação pela trajetória

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca estocástica - Metaheurísticas

- Nova solução tem relação com anterior, mas deslocamento é (parcialmente) aleatório
- Em geral, menos preocupação pela trajetória
- Permite piora da FO

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca estocástica - Metaheurísticas

- Nova solução tem relação com anterior, mas deslocamento é (parcialmente) aleatório
- Em geral, menos preocupação pela trajetória
- Permite piores soluções
- Pode 'escapar' de ótimos locais

Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

Busca estocástica - Metaheurísticas

- Nova solução tem relação com anterior, mas deslocamento é (parcialmente) aleatório
- Em geral, menos preocupação pela trajetória
- Permite piores da FO
- Pode 'escapar' de ótimos locais
- Explora melhor o espaço de soluções

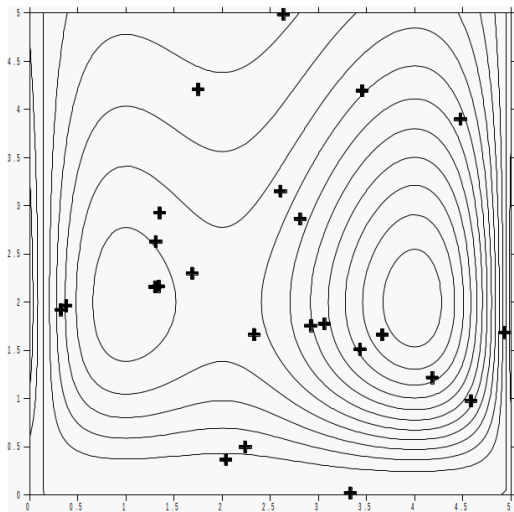


Algoritmos de busca estocástica vs. Busca direta

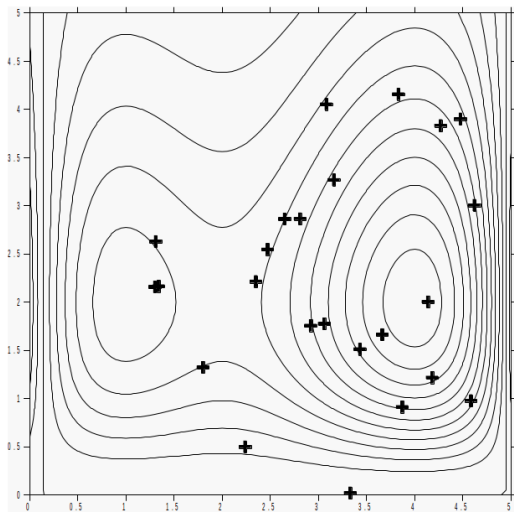
Busca estocástica - Metaheurísticas

- Nova solução tem relação com anterior, mas deslocamento é (parcialmente) aleatório
- Em geral, menos preocupação pela trajetória
- Permite piores da FO
- Pode 'escapar' de ótimos locais
- Explora melhor o espaço de soluções
- Não há garantia de chegar no ótimo global (nem de chegar perto dele)

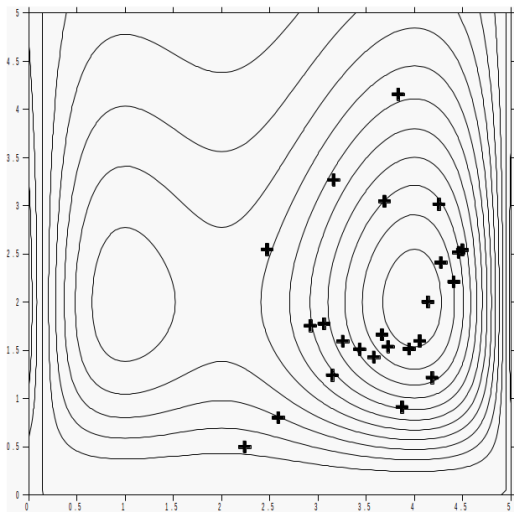
# Metaheurísticas



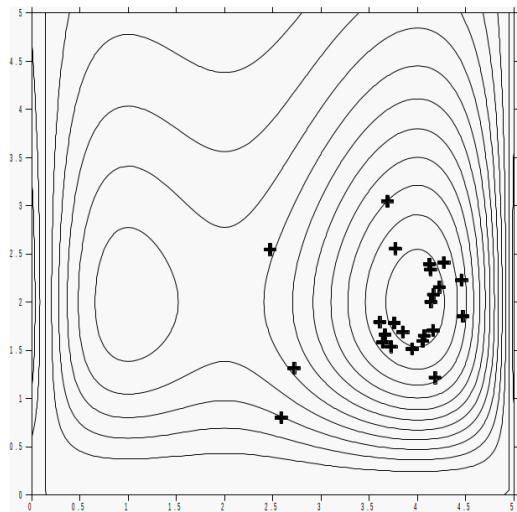
# Metaheurísticas



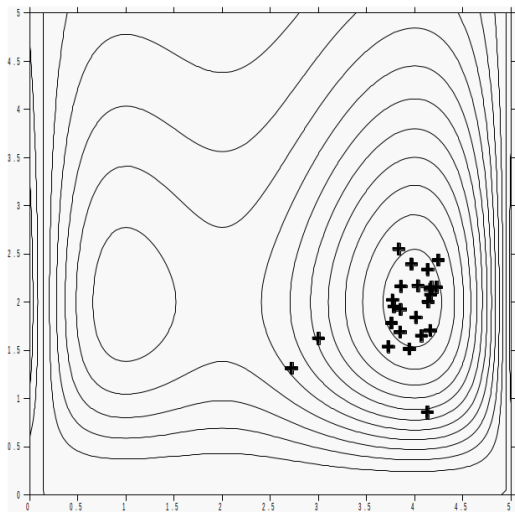
# Metaheurísticas



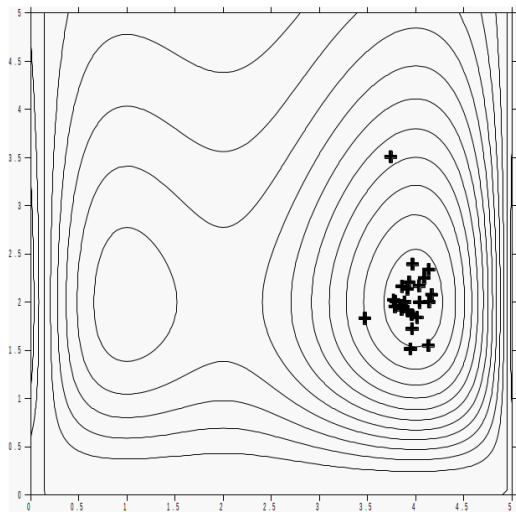
# Metaheurísticas



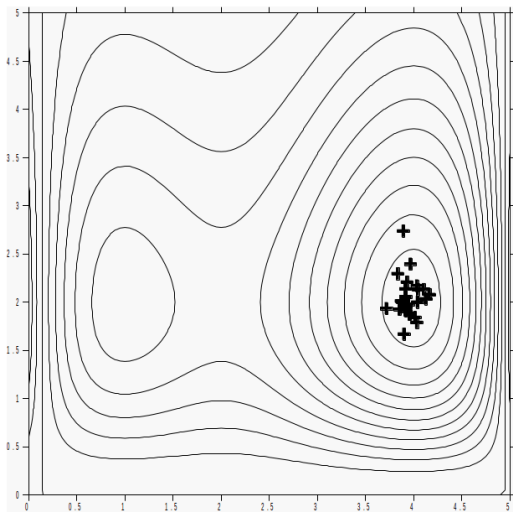
# Metaheurísticas



# Metaheurísticas

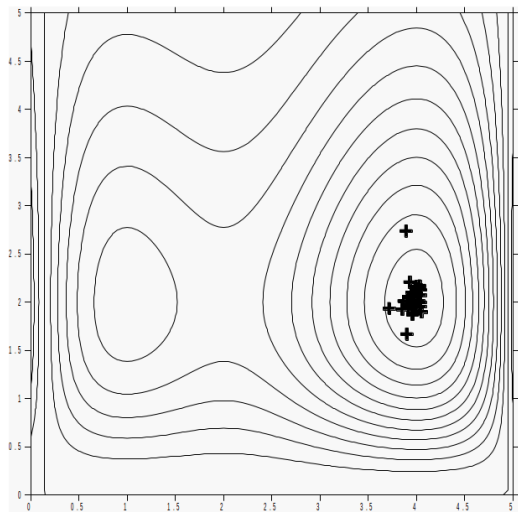


# Metaheurísticas

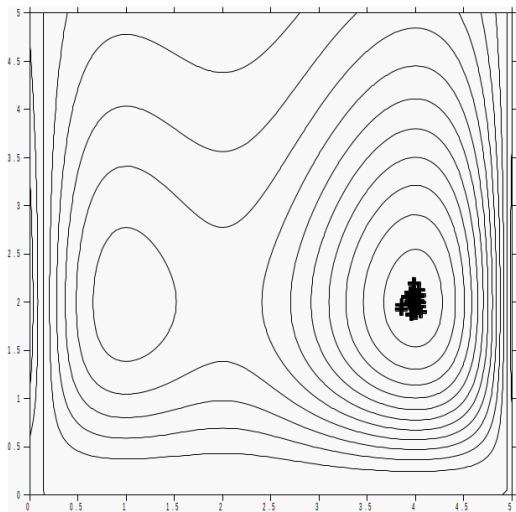




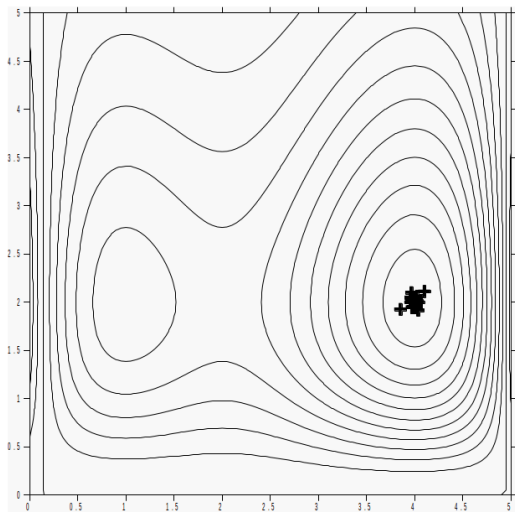
# Metaheurísticas



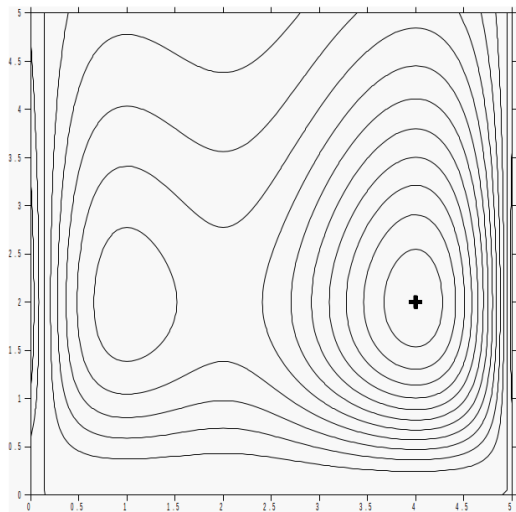
# Metaheurísticas



# Metaheurísticas



# Metaheurísticas



Algumas das mais conhecidas:

- Tabu search
- Simulated annealing
- Algoritmos genéticos
- Ant colony
- Particle swarm optimization

Algumas das mais conhecidas:

- Tabu search
- Simulated annealing
- Algoritmos genéticos
- Ant colony
- Particle swarm optimization

Podem ser aplicados a grande variedade de problemas.

## Referenciais históricos em computação evolutiva:

- Sewell Wright. 1930s. Superfície de aptidão e sua exploração. Foco na otimização
- Friedman. 1956. Modelo de sistemas dinâmicos
- 1960s. Maior capacidade de cálculo, mais interesse.
- Rechenberg. 1965. Problemas de otimização complexos
- Fogel et al. 1966. Início da programação evolutiva
- Holland. 1967. Bases para os algoritmos genéticos mais simples
- 1970s. Programação evolutiva, Estratégia evol. → Algoritmo genético, metaheurísticas
- 1980s Melhoras dentro de cada uma das etapas do AG.

Produz algoritmos de otimização estocástica populacional.

---

<sup>1</sup>Carl Sagan. Cosmos. Episodio 2. 1980



# Computação evolutiva

Produz algoritmos de otimização estocástica populacional.

Inspiração em postulados da evolução das espécies  
Assistir vídeo<sup>1</sup> : Legendado (inglês) ou Dublado

---

<sup>1</sup>Carl Sagan. Cosmos. Episódio 2. 1980

# Computação evolutiva

Produz algoritmos de otimização estocástica populacional.

Inspiração em postulados da evolução das espécies

Assistir vídeo<sup>1</sup> : Legendado (inglês) ou Dublado

- Populações de indivíduos competindo por recursos

---

<sup>1</sup>Carl Sagan. Cosmos. Episódio 2. 1980

Produz algoritmos de otimização estocástica populacional.

Inspiração em postulados da evolução das espécies

Assistir vídeo<sup>1</sup> : Legendado (inglês) ou Dublado

- Populações de indivíduos competindo por recursos
- Mudanças na população: nascimentos e mortes

---

<sup>1</sup>Carl Sagan. Cosmos. Episódio 2. 1980

Produz algoritmos de otimização estocástica populacional.

Inspiração em postulados da evolução das espécies

Assistir vídeo<sup>1</sup> : Legendado (inglês) ou Dublado

- Populações de indivíduos competindo por recursos
- Mudanças na população: nascimentos e mortes
- Aptidão. Indivíduos melhor adaptados têm maior chance de sobreviver e se reproduzir

---

<sup>1</sup>Carl Sagan. Cosmos. Episódio 2. 1980

Produz algoritmos de otimização estocástica populacional.

Inspiração em postulados da evolução das espécies

Assistir vídeo<sup>1</sup> : Legendado (inglês) ou Dublado

- Populações de indivíduos competindo por recursos
- Mudanças na população: nascimentos e mortes
- Aptidão. Indivíduos melhor adaptados têm maior chance de sobreviver e se reproduzir
- Herança variacional. Filhos similares, mas não idênticos aos pais

---

<sup>1</sup>Carl Sagan. Cosmos. Episódio 2. 1980

Produz algoritmos de otimização estocástica populacional.

Inspiração em postulados da evolução das espécies

Assistir vídeo<sup>1</sup> : Legendado (inglês) ou Dublado

- Populações de indivíduos competindo por recursos
- Mudanças na população: nascimentos e mortes
- Aptidão. Indivíduos melhor adaptados têm maior chance de sobreviver e se reproduzir
- Herança variacional. Filhos similares, mas não idênticos aos pais
- Variações aleatórias. 'Erros' nas cópias dos filhos.

---

<sup>1</sup>Carl Sagan. Cosmos. Episódio 2. 1980

# Analogia biologia / computação

Ambiente	Problema
População	Conjunto de soluções candidatas
Cromossomo (cadeia, individuo)	Solução
Genes	Partes constituintes do vetor solução. Variáveis de decisão
Lócus	Posição de um valor na cadeia da solução
Alelos	Valores que as variáveis de decisão podem assumir
Fenótipo	Solução decodificada
Genótipo	Solução codificada

- Representação das soluções



# Princípios Algoritmo Genético

- Representação das soluções
- População inicial de soluções

# Princípios Algoritmo Genético

- Representação das soluções
- População inicial de soluções
- Avaliação de aptidão

# Princípios Algoritmo Genético

- Representação das soluções
- População inicial de soluções
- Avaliação de aptidão
- Geração de descendência

# Princípios Algoritmo Genético

- Representação das soluções
- População inicial de soluções
- Avaliação de aptidão
- Geração de descendência
- Nova geração

# Princípios Algoritmo Genético

- Representação das soluções
- População inicial de soluções
- Avaliação de aptidão
- Geração de descendência
- Nova geração

Em cada etapa, diferentes alternativas

# Princípios Algoritmo Genético

- Representação das soluções
- População inicial de soluções
- Avaliação de aptidão
- Geração de descendência
- Nova geração

Em cada etapa, diferentes alternativas

Além das opções de método, sempre há necessidade de múltiplos parâmetros

## **Passos para a solução com AG**

- 0.1 Formulação do problema

## **Passos para a solução com AG**

- 0.1 Formulação do problema
- 0.2 Representação das variáveis



## **Passos para a solução com AG**

- 0.1 Formulação do problema
- 0.2 Representação das variáveis
- 1 População inicial

## **Passos para a solução com AG**

- 0.1 Formulação do problema
- 0.2 Representação das variáveis
- 1 População inicial
- 2 Seleção

## Passos para a solução com AG

- 0.1 Formulação do problema
- 0.2 Representação das variáveis
- 1 População inicial
- 2 Seleção
- 3 Recombinação

## Passos para a solução com AG

- 0.1 Formulação do problema
- 0.2 Representação das variáveis
- 1 População inicial
- 2 Seleção
- 3 Recombinação
- 4 Mutação

## **Passos para a solução com AG**

- 0.1 Formulação do problema
- 0.2 Representação das variáveis
- 1 População inicial
- 2 Seleção
- 3 Recombinação
- 4 Mutação
- 5 Nova população (geração)

## Passos para a solução com AG

- 0.1 Formulação do problema
- 0.2 Representação das variáveis
- 1 População inicial
- 2 Seleção
- 3 Recombinação
- 4 Mutação
- 5 Nova população (geração)
- 6 Avaliação da convergência  
Iteração (desde 2) ou parada

# Exemplo

Voltando ao exemplo da construção de ETE's. Só com fins didáticos, porque o problema devia ser resolvido por outros métodos (prog. inteira).

# Exemplo

Voltando ao exemplo da construção de ETE's. Só com fins didáticos, porque o problema devia ser resolvido por outros métodos (prog. inteira).

Considere uma região com baixa densidade populacional média, com rede de esgoto precária, que somente junta efluentes de 10 pequenos setores e entrega cada um sem tratar no curso d'água local. Cada um dos setores atende uma população diferente,  $p_i$ , na tabela.

Por convenio com uma universidade foram elaborados projetos de 10 pequenas ETE's (para cada setor), com estimativas de custo  $c_i$  da tabela.

Foi obtida verba especial de  $1200 \cdot 10^3 R\$$  para projetos de saneamento, e você deve indicar quais ETE's construir para que a maior quantidade de pessoas seja atendida.



# Exemplo

Considere uma região com baixa densidade populacional média, com rede de esgoto precária, que somente junta efluentes de 10 pequenos setores e entrega cada um sem tratar no curso d'água local. Cada um dos setores atende uma população diferente,  $p_i$ , na tabela.

Por convenio com uma universidade foram elaborados projetos de 10 pequenas ETE's (para cada setor), com estimativas de custo  $c_i$  da tabela.

Foi obtida verba especial de  $1200 \cdot 10^3 R\$$  para projetos de saneamento, e você deve indicar quais ETE's construir para que a maior quantidade de pessoas seja atendida.

Local	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
População	410	320	330	90	140	190	250	420	320	340
Custo $10^3 R\$$	470	230	400	50	170	44	270	480	340	410

# Exemplo

$$\text{maximizar: } f(x) = \sum_{i=1}^{10} p_i x_i$$

$$\text{s. a: } \sum_{i=1}^{10} c_i x_i \leq 1200$$

$$x \in \mathbb{B}_+^{10}$$

Usaremos uma configuração de algoritmo genético comum para o exemplo (não é a única)

- **Representação**  
Mais comum = binária

Usaremos uma configuração de algoritmo genético comum para o exemplo (não é a única)

- **Representação**

Mais comum = binária

- **Função de aptidão (fitness)**

Forma de avaliar a qualidade de cada solução

Classifica as soluções

Pode ser a função objetivo, ou uma derivação dela

## População inicial

- Geração aleatória de população inicial  
Tamanho da população = quantos indivíduos / cromossomos =  $Pop$  : Definida inicialmente.  
Geração aleatória de matriz tamanho  $Pop \times N$

## Seleção para cruzamento

- Calcula o valor de aptidão de todas as soluções da população. Como seleção natural, privilegiar melhor adaptados, mas não totalmente excludente.

## Seleção para cruzamento

- Calcula o valor de aptidão de todas as soluções da população. Como seleção natural, privilegiar melhor adaptados, mas não totalmente excludente.
- Para incorporar restrições: penalidade na função aptidão.

## Seleção para cruzamento

- Calcula o valor de aptidão de todas as soluções da população. Como seleção natural, privilegiar melhor adaptados, mas não totalmente excludente.
- Para incorporar restrições: penalidade na função aptidão.
- Operadores de seleção:



## Seleção para cruzamento

- Calcula o valor de aptidão de todas as soluções da população. Como seleção natural, privilegiar melhor adaptados, mas não totalmente excludente.
- Para incorporar restrições: penalidade na função aptidão.
- Operadores de seleção:
  - Roleta.  
Cada solução recebe parte da roleta proporcional ao 'fitness'. Roda a roleta. Solução selecionada é onde para. Formar pares ('casais')

## Seleção para cruzamento

- Calcula o valor de aptidão de todas as soluções da população. Como seleção natural, privilegiar melhor adaptados, mas não totalmente excludente.
- Para incorporar restrições: penalidade na função aptidão.
- Operadores de seleção:
  - Roleta.  
Cada solução recebe parte da roleta proporcional ao 'fitness'.  
Roda a roleta. Solução selecionada é onde para. Formar pares ('casais')
  - Torneio

## Seleção para cruzamento

- Calcula o valor de aptidão de todas as soluções da população. Como seleção natural, privilegiar melhor adaptados, mas não totalmente excludente.
- Para incorporar restrições: penalidade na função aptidão.
- Operadores de seleção:
  - Roleta.  
Cada solução recebe parte da roleta proporcional ao 'fitness'.  
Roda a roleta. Solução selecionada é onde para. Formar pares ('casais')
  - Torneio
  - Ranking

## Seleção para cruzamento

- Calcula o valor de aptidão de todas as soluções da população. Como seleção natural, privilegiar melhor adaptados, mas não totalmente excludente.
- Para incorporar restrições: penalidade na função aptidão.
- Operadores de seleção:
  - Roleta.  
Cada solução recebe parte da roleta proporcional ao 'fitness'.  
Roda a roleta. Solução selecionada é onde para. Formar pares ('casais')
  - Torneio
  - Ranking
- Elitismo. Em combinação com o operador (ou não)

## **Cruzamento (crossover)**

- Reprodução, ou produção de novas soluções 'filhas'

## **Cruzamento (crossover)**

- Reprodução, ou produção de novas soluções 'filhas'
- Cuidado, operador a usar deve ser compatível com representação de variáveis.

## **Cruzamento (crossover)**

- Reprodução, ou produção de novas soluções 'filhas'
- Cuidado, operador a usar deve ser compatível com representação de variáveis.
- Há diferentes métodos, deve ser escolhido segundo natureza do problema:

## Cruzamento (crossover)

- Reprodução, ou produção de novas soluções 'filhas'
- Cuidado, operador a usar deve ser compatível com representação de variáveis.
- Há diferentes métodos, deve ser escolhido segundo natureza do problema:
  - Troca por um ou mais pontos - Crossover de um ponto  
Dividir cada um dos dois vetores "pais" de tamanho  $N$  usando uma posição (ou várias) aleatórios.  
Trocar as seções resultado dessa divisão.



## Cruzamento (crossover)

- Reprodução, ou produção de novas soluções 'filhas'
- Cuidado, operador a usar deve ser compatível com representação de variáveis.
- Há diferentes métodos, deve ser escolhido segundo natureza do problema:
  - Troca por um ou mais pontos - Crossover de um ponto  
Dividir cada um dos dois vetores “pais” de tamanho N usando uma posição (ou várias) aleatórios.  
Trocar as seções resultado dessa divisão.
  - Cruzamento uniforme  
Para cada gene (variável), decidir aleatoriamente se deve ser trocado entre os “pais” ou não.  
Definir probabilidade de cruzamento.

Se não feito apropriadamente, fica em mínimo local.

Método comum:

- Segundo a taxa de mutação definida, escolher aleatoriamente alguns genes da matriz da população total (não da elite).
- Cada gene escolhido é substituído por um valor aleatório de uma distribuição uniforme entre o mínimo e o máximo permitido à variável.

Se não feito apropriadamente, fica em mínimo local.

Método comum:

- Segundo a taxa de mutação definida, escolher aleatoriamente alguns genes da matriz da população total (não da elite).
- Cada gene escolhido é substituído por um valor aleatório de uma distribuição uniforme entre o mínimo e o máximo permitido à variável.

Outra estratégia: Somar um valor aleatório de uma distribuição normal

$$x_{i,filho1} = x_{i,pai1} + \sigma N(0, 1)$$

com  $N(0, 1)$  valor de uma distribuição normal, média 0, desvio padrão 1. Pode sair da faixa permitida à variável.

# AG - Nova geração e iteração

Nova geração tem mesma quantidade de indivíduos (soluções) da atual, incluindo:

- Melhores indivíduos da geração atual (se elitista)
- “Filhos” obtidos da recombinação a partir dos indivíduos selecionados, e após mutação.

# AG - Nova geração e iteração

Nova geração tem mesma quantidade de indivíduos (soluções) da atual, incluindo:

- Melhores indivíduos da geração atual (se elitista)
- “Filhos” obtidos da recombinação a partir dos indivíduos selecionados, e após mutação.

A recombinação é limitada ao número de indivíduos necessários, e são gerados mais indivíduos os de menos função de aptidão são eliminados.

Alternativas: como misturar a população nova com a original, e delas escolher a nova geração.

# AG - Convergência e parada

Cada geração pode ser avaliada segundo:

- melhor função aptidão obtida
- função aptidão média

Valores podem diminuir com alguma geração, mas a tendência é melhorar até estabilizar (se o problema têm solução e foi corretamente formulado, parâmetros úteis, etc).

Critérios de parada:

- Número máximo de iterações
- Variação mínima entre função aptidão de gerações sucessivas
- Tempo máximo de computo
- Variação mínima entre indivíduos da população