

Otimização Global

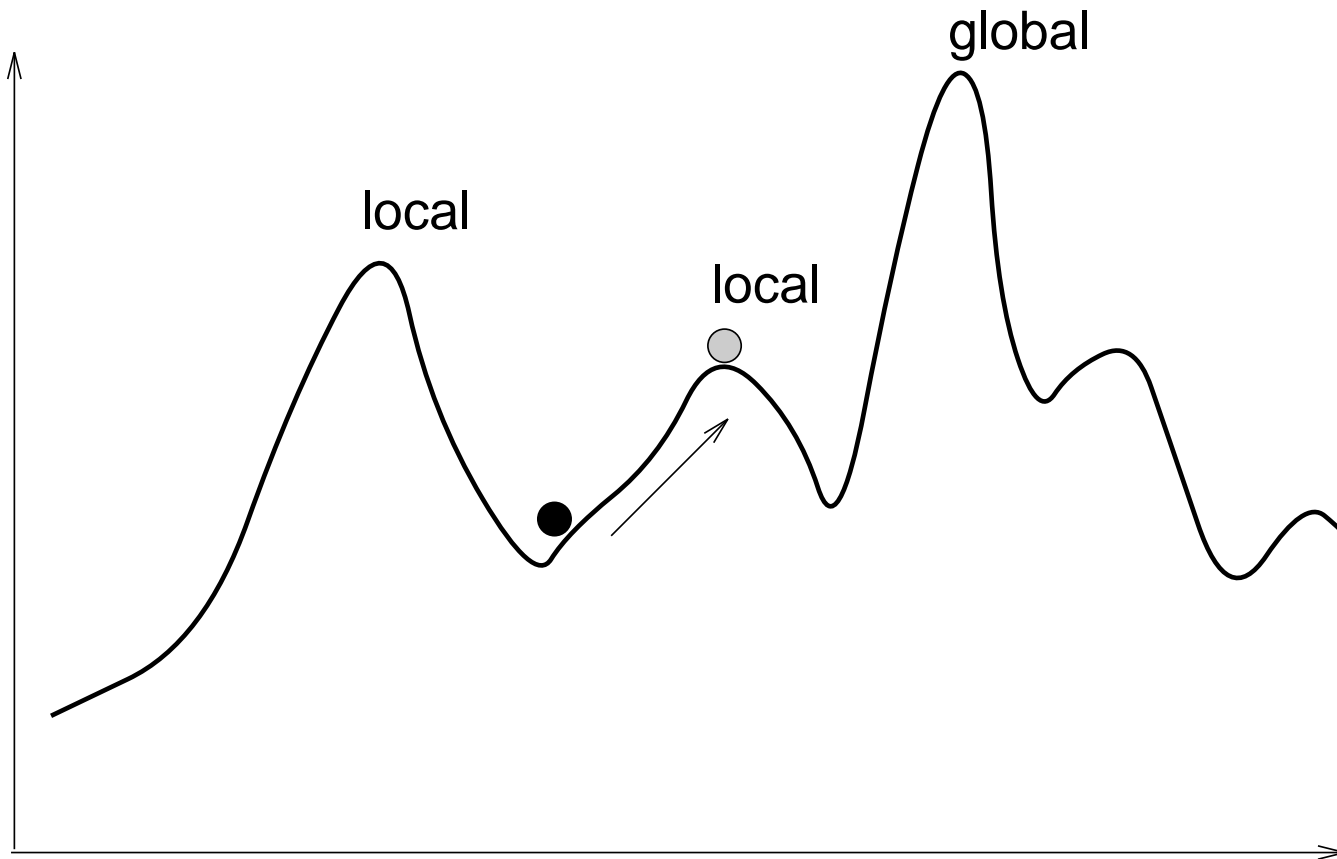
Luiz Henrique de Figueiredo

Dois Extremos

“Dentro de um conjunto finito de candidatos, encontrar aquele que melhor satisfaz um dado critério”

- Queremos a solução global
- Solução trivial: enumeração exaustiva
 - ◇ sistemática
 - ◇ não funciona: candidatos demais!
- Métodos estocásticos
 - ◇ passeio aleatório
 - ◇ não funciona: sem garantias
- Explorar a estrutura do espaço de candidatos!

Busca Local



- Mover na direção de crescimento
- Tende a ficar preso em máximos locais

Relaxação Estocástica

- Passeio aleatório + busca local
 - ◇ passo aleatório
 - ◇ se leva a ponto mais alto: aceita sempre
 - ◇ se leva a ponto mais baixo: aceita com probabilidade $p(t)$
 - ◇ $p(t)$ começa perto de 1 e decai a 0
- Tende a escapar de máximos locais

Algoritmos Genéticos

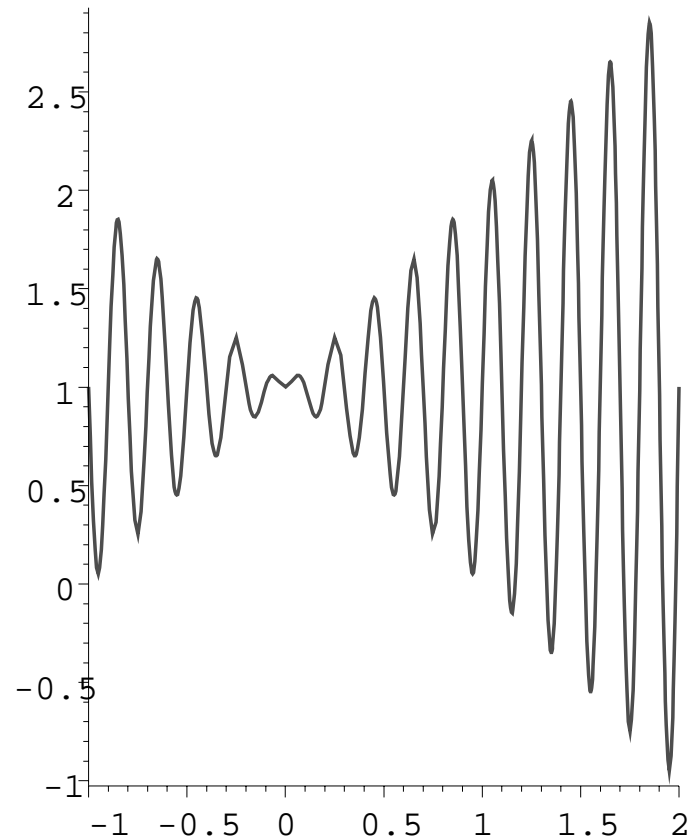
- Indivíduos compõem população
- Genótipo: carga genética, cromossomas e genes
- Fenótipo: expressão do genótipo
- Indivíduos imersos num meio ambiente em constante mudança
- Darwin: evolução por seleção natural
 - ◇ indivíduos competem entre si
 - ◇ somente os indivíduos mais aptos sobrevivem
- Mecanismos genéticos para evolução
 - ◇ mutações: variações aleatórias dos genótipos
 - ◇ reprodução sexual: mistura carga genética
- Algoritmos genéticos usam função objetivo como critério de aptidão

Algoritmos Genéticos para Otimização

1. População inicial com genótipos aleatórios ou obtidos por heurística específica. Genes representam parâmetros do espaço de candidatos.
2. A cada passo da evolução, alguns indivíduos sofrem mutações e alguns indivíduos se reproduzem.
3. Os indivíduos são avaliados segundo um critério de aptidão baseado na função objetivo. Somente os indivíduos mais aptos sobrevivem.
4. A evolução pára quando a aptidão do melhor indivíduo convergir (ou após um número pré-fixado de passos).

Otimização de uma Função de uma Variável

Maximizar $f(x) = x \sin(10\pi x) + 1$ no intervalo $[-1, 2]$



Máximo global ocorre em $x \approx 1.85$

Formulação Genética para o Problema Contínuo

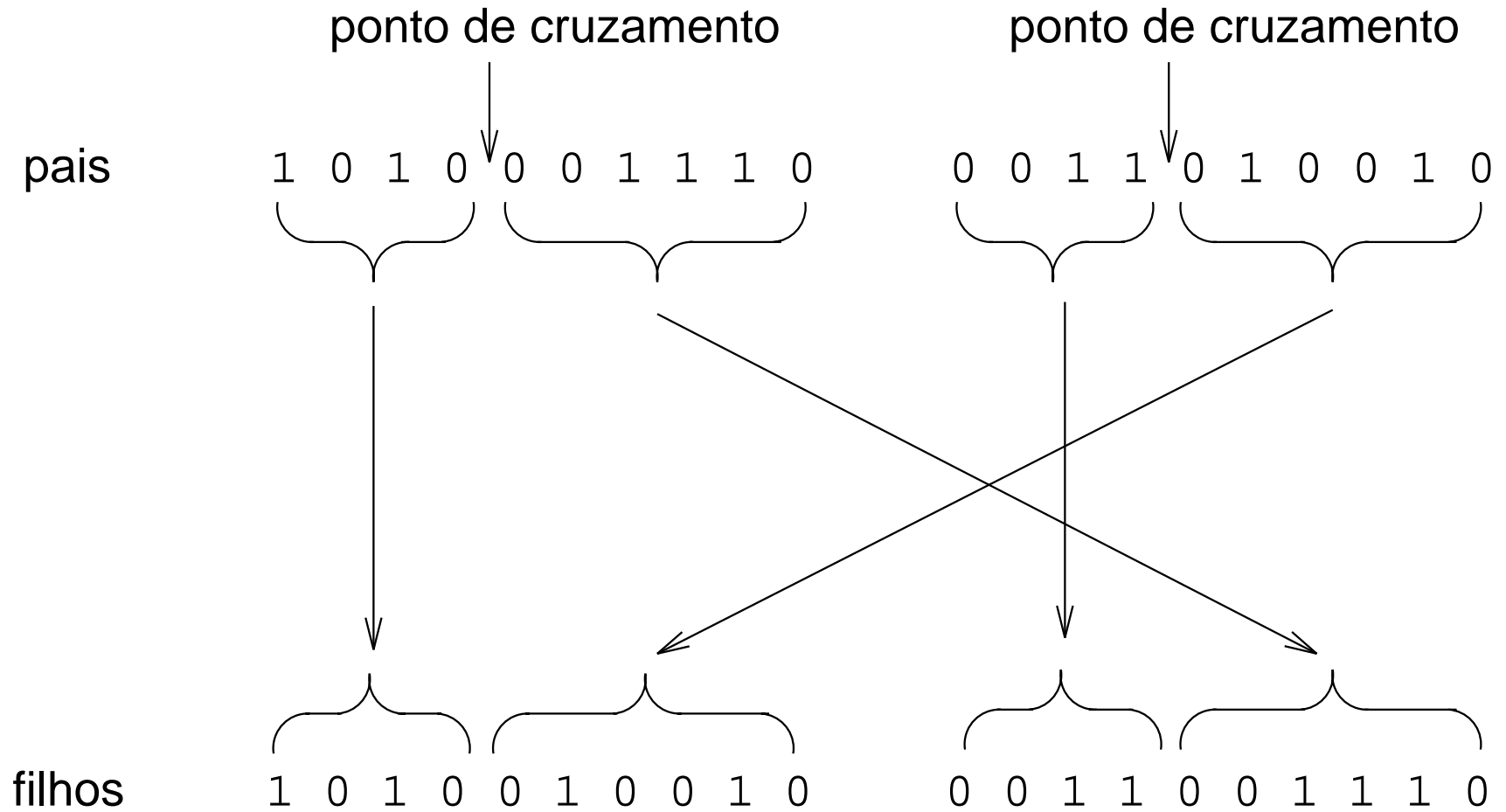
- Indivíduos = pontos em $[-1, 2]$
- Grau de aptidão = medido diretamente por f
 - ◇ quanto maior o valor de f , mais apto é o indivíduo
- Cada indivíduo possuiu um único cromossoma, com n genes
- Cada gene é um *bit*

$$x = (x_n \dots x_1) \quad \longleftrightarrow \quad x = -1 + \frac{3}{2^n - 1} \sum_{i=1}^n x_i 2^{i-1}$$

- Mutações mudam o valor de um gene, escolhido ao acaso
- Reprodução cruzada embralha *bits*

$$(a_n \dots a_1) \times (b_n \dots b_1) \longrightarrow (a_n \dots a_k b_{k-1} \dots b_1), (b_n \dots b_k a_{k-1} \dots a_1)$$

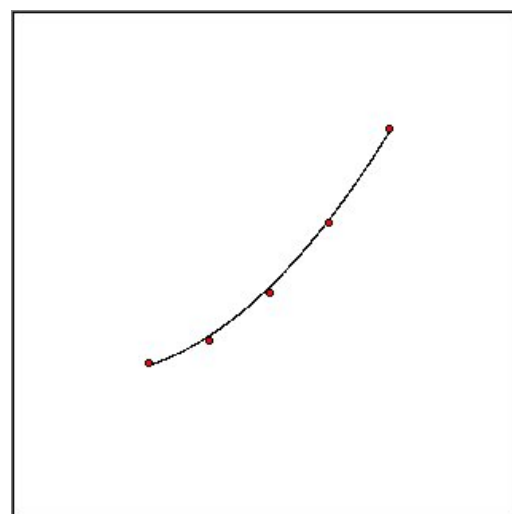
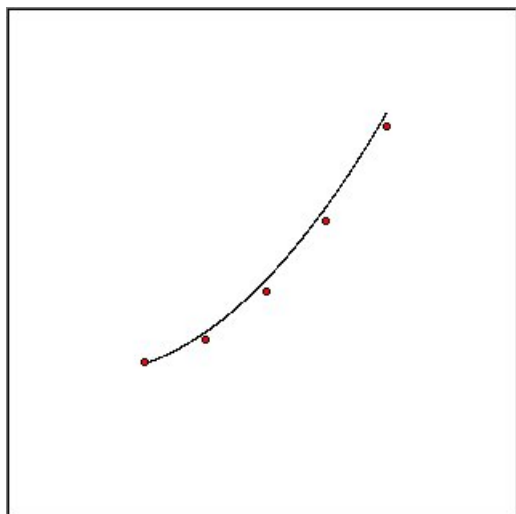
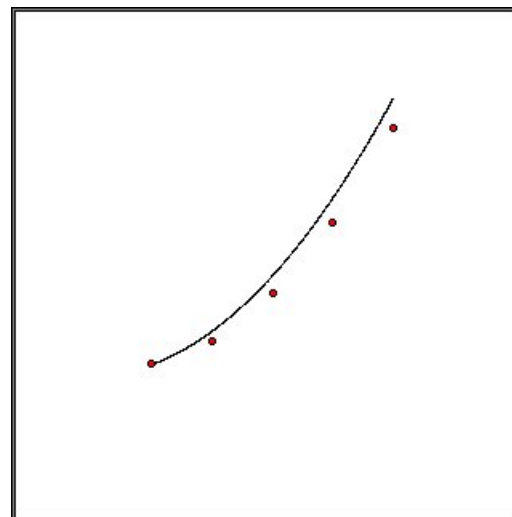
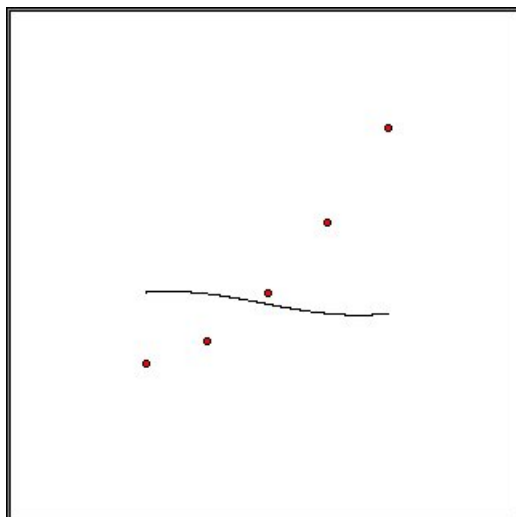
Reprodução Cruzada (*crossover*)



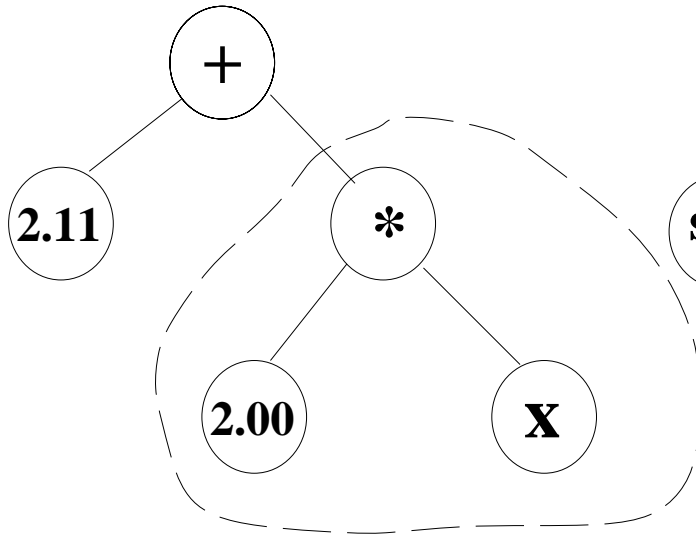
Solução Genética para o Problema Contínuo

- Seis casas decimais $\Rightarrow n = 22$
- População inicial aleatória de 50 indivíduos
- Probabilidade de mutação: 0.01
- Probabilidade de cruzamento igual a 0.25
- 150 gerações
- Indivíduo mais apto:
 - ◇ genótipo: 11110011010001000000101
 - ◇ fenótipo: $\hat{x} = 2587568/1398101 \approx 1.850773$
 - ◇ aptidão: $f(\hat{x}) \approx 2.850227$
- Máximo global:
 - ◇ $x^* \approx 1.850547$
 - ◇ $f^* \approx 2.850273$

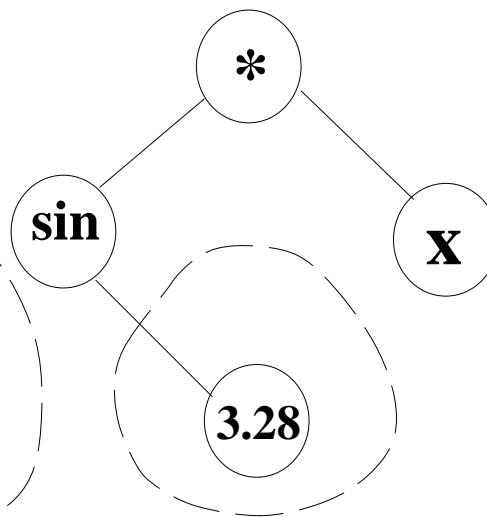
Ajuste de Curvas



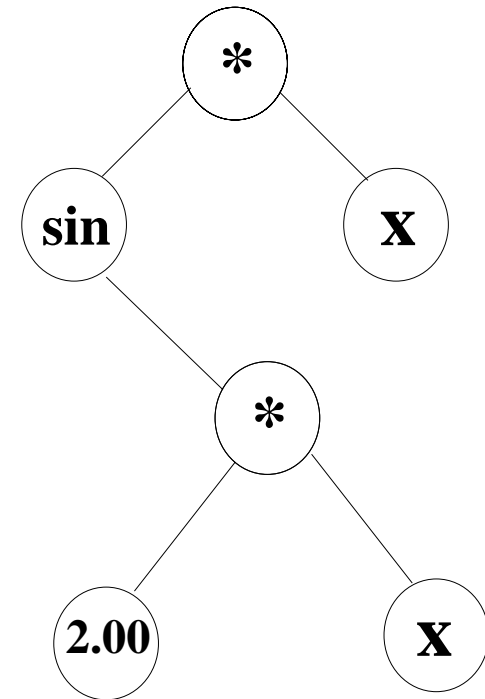
Reprodução Cruzada de Expressões Algébricas



$2.11 + 2X$



$\sin(3.28)X$



$\sin(2X)X$

Otimização Global Garantida

- Otimização global

- ◇ $f: \Omega \rightarrow \mathbf{R}$, $\Omega = [a_1, b_1] \times \cdots \times [a_n, b_n]$
- ◇ mínimo global $f^* = \min\{ f(x) : x \in \Omega \}$
- ◇ mínimo atingido em $\Omega^*(f) = \{ x^* \in \Omega : f(x^*) = f^* \}$

- Versão numérica

- ◇ identificar intervalo $M \subseteq \mathbf{R}$ tal que $f^* \in M$
- ◇ identificar $\widehat{\Omega} \subseteq \Omega$ tal que $\Omega^*(f) \subseteq \widehat{\Omega}$
- ◇ minimizar tamanhos de M e $\widehat{\Omega}$

- Análise de valores: estimativas confiáveis

$$F(X) \supseteq f(X) = \{ f(x) : x \in X \}, \quad X \subseteq \Omega$$

- Eliminar partes de Ω que não podem conter pontos de mínimo global

Aritmética Intervalar

- Quantidades representadas por intervalos

$$x = [a, b] \Rightarrow x \in [a, b]$$

- Operações primitivas

$$[a, b] + [c, d] = [a + c, b + d]$$

$$[a, b] \times [c, d] = [\min\{ac, ad, bc, bd\}, \max\{ac, ad, bc, bd\}]$$

$$[a, b] / [c, d] = [a, b] \times [1/d, 1/c]$$

$$[a, b]^2 = [0, \max(a^2, b^2)]$$

$$\exp [a, b] = [\exp(a), \exp(b)].$$

...

- Extensões automáticas

$$x_i \in X_i \Rightarrow f(x_1, \dots, x_n) \in F(X_1, \dots, X_n)$$

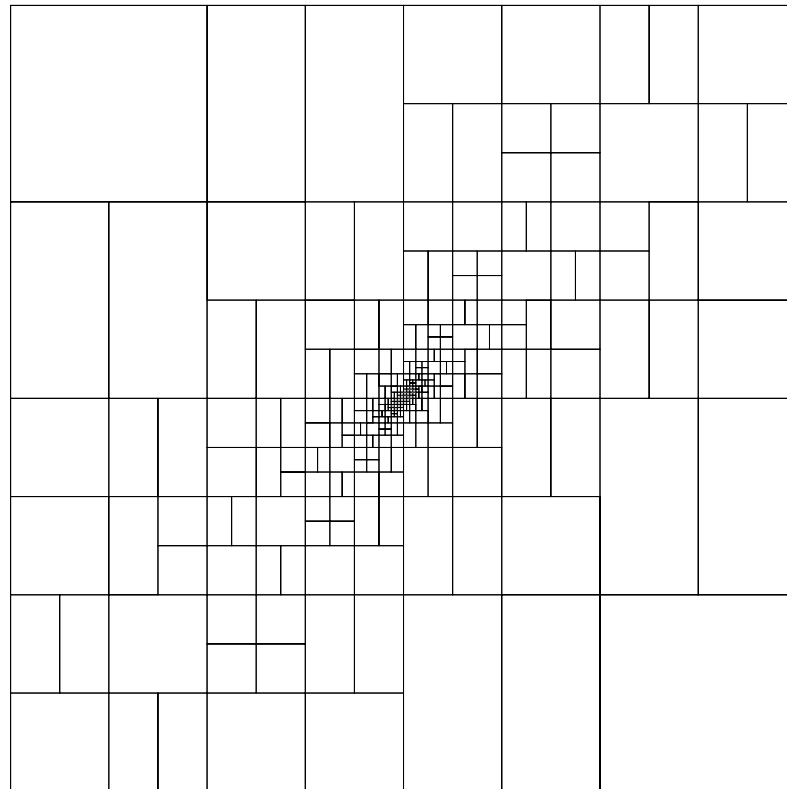
Métodos de branch-and-bound

0. $\mathcal{L} \leftarrow \{\Omega\}, \hat{f} \leftarrow \infty$
1. selecione uma subregião X de \mathcal{L}
2. se X é suficientemente pequeno, então aceite X como parte de $\widehat{\Omega}$
3. calcule estimativa intervalar $F(X)$ para $f(X)$
4. se $\inf F(X) > \hat{f}$, então descarte X
5. atualize $\hat{f} \leftarrow \min(\hat{f}, \sup F(X))$
6. subdivida X em X_1 e X_2
7. inclua X_1 e X_2 em \mathcal{L} e vai para 1

Invariante: $\widehat{\Omega} = \cup \mathcal{L} \supseteq \Omega^*(f)$

Branch-and-bound: exemplo

$$f(x_1, x_2) = 0.26(x_1^2 + x_2^2) - 0.48x_1x_2, \quad \Omega = [-10, 10] \times [-10, 10]$$



$$f^* = 0, \quad \Omega^* = \{(0, 0)\}$$

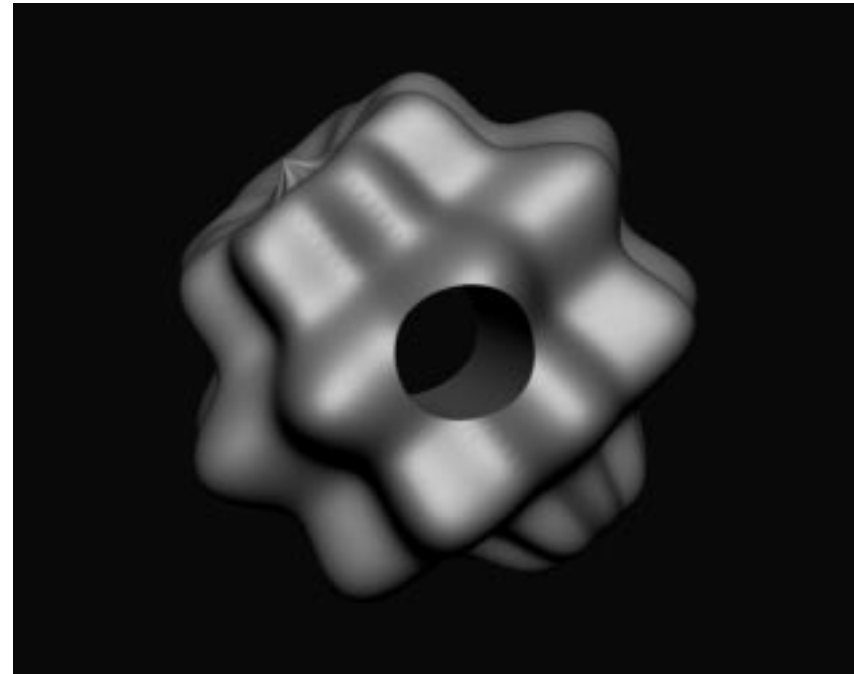
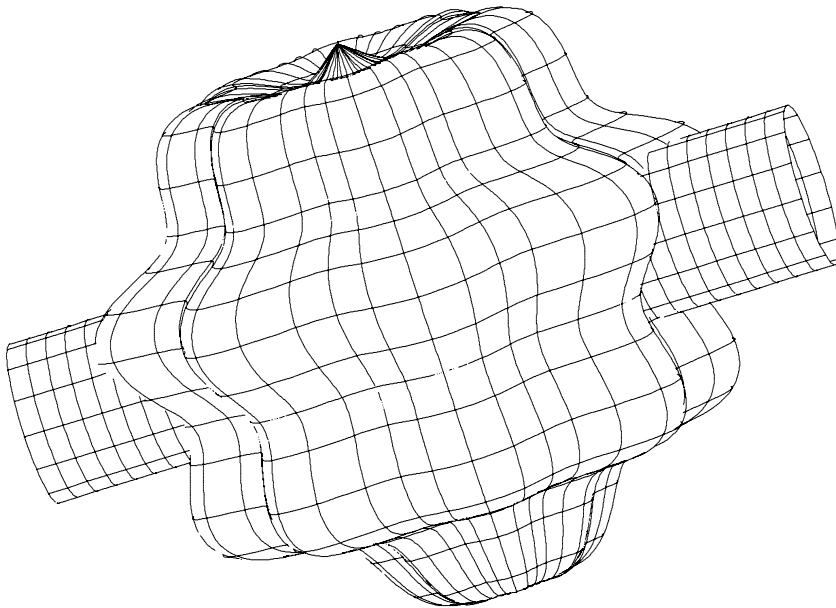
Branch-and-bound Intervalar para Otimização com Restrições

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{sujeito a} & g_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & h_j(x) \geq 0, \quad j = 1, \dots, p \end{array}$$

- Descartar regiões não viáveis
 - ◇ $0 \notin G_i(X)$
 - ◇ $H_i(X) \subseteq (-\infty, 0)$
- Problemas de viabilidade
 - ◇ É possível satisfazer todas as restrições em Ω ?
 - ◇ Qual a região viável?

$$\widetilde{\Omega} = \{ x \in \Omega : g_i(x) = 0, h_j(x) \geq 0 \}$$

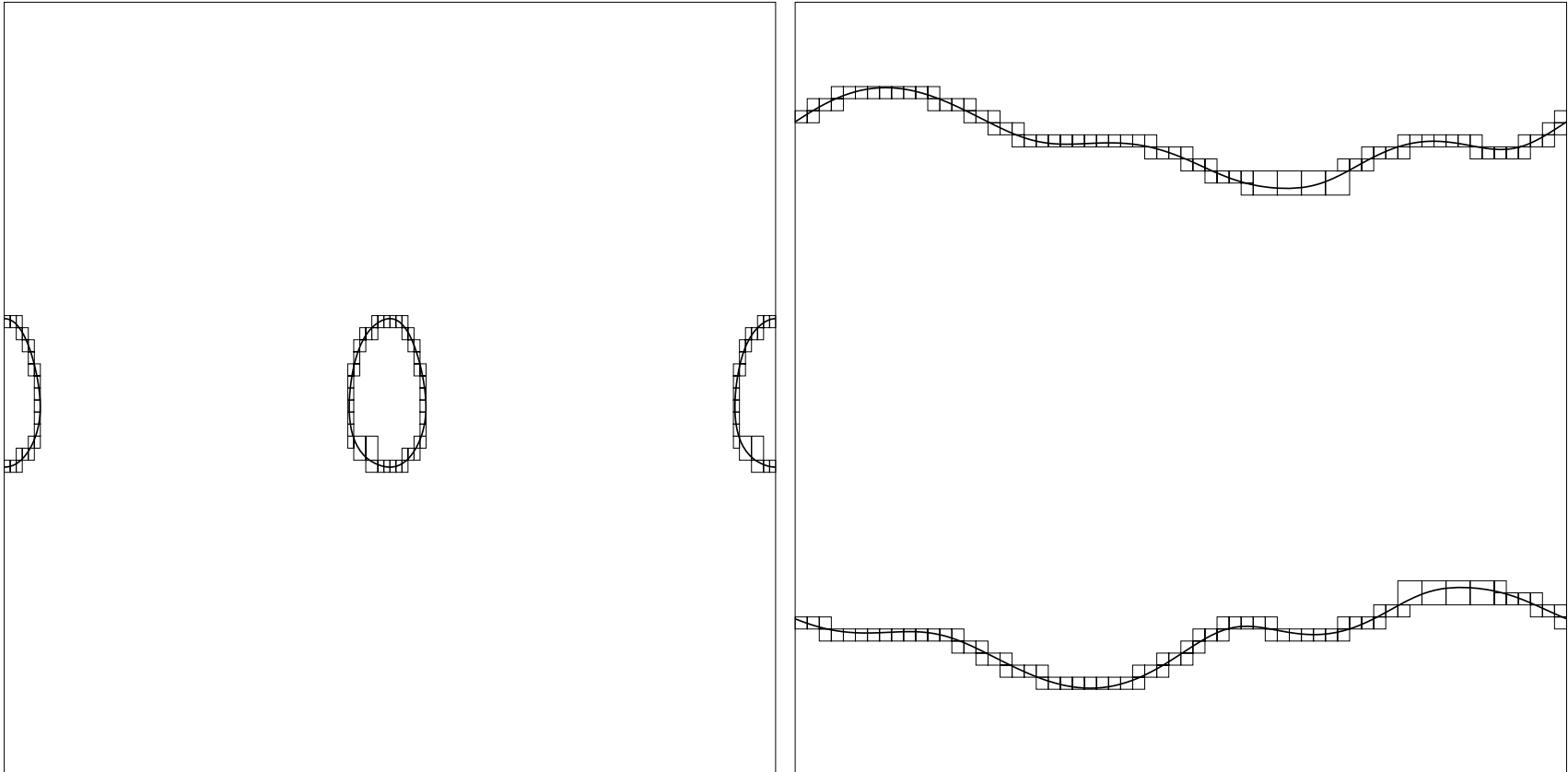
Interseção de Superfícies Paramétricas



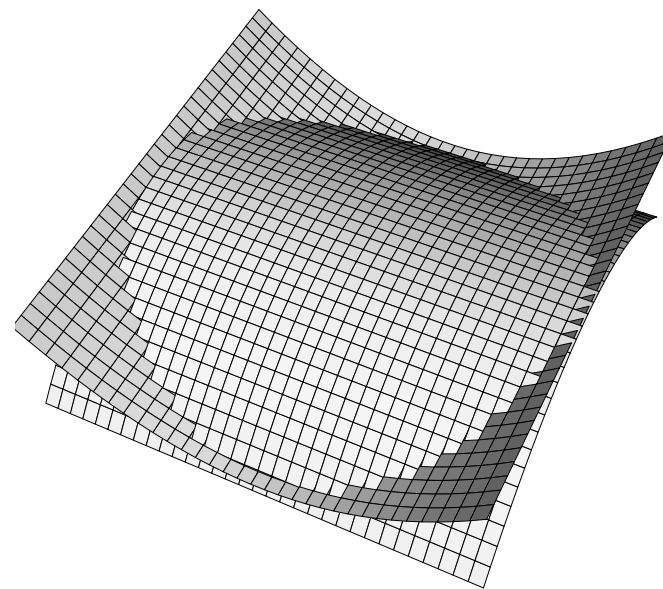
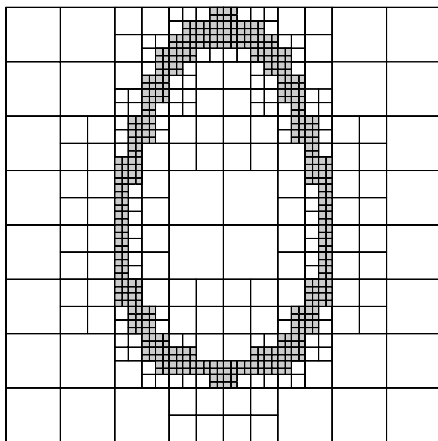
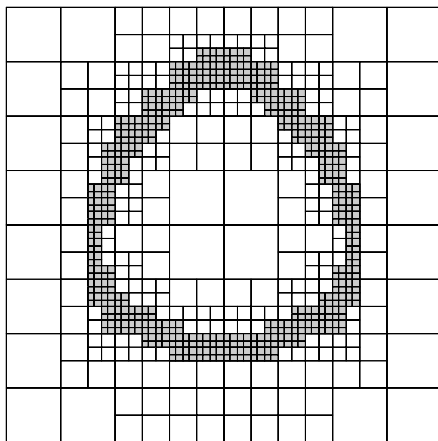
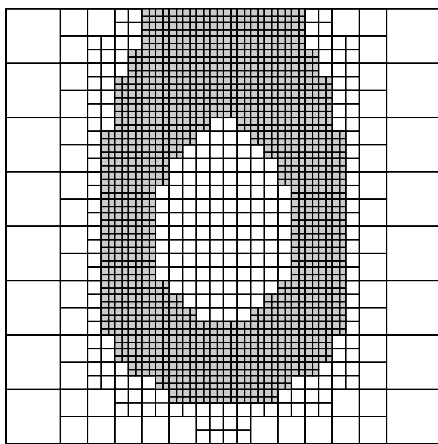
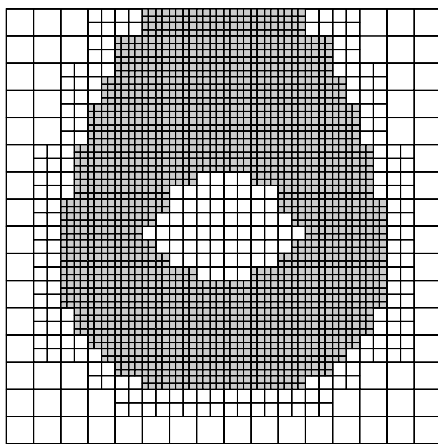
- Problema de viabilidade: colisão

$$S_1(u_1, v_1) - S_2(u_2, v_2) = 0, \quad S_1, S_2: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$$

Curvas de Recorte

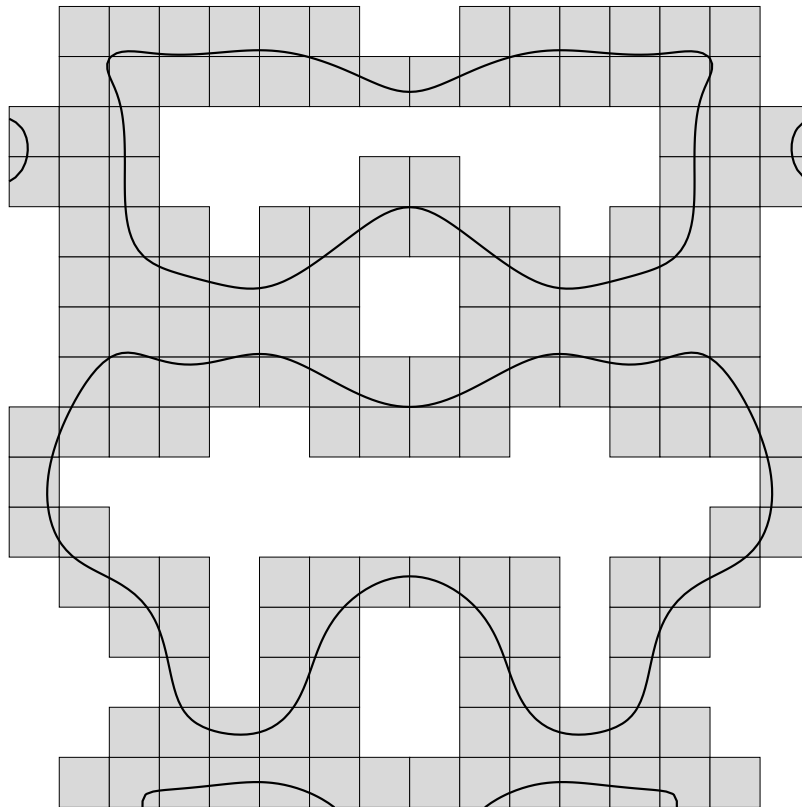


Interseção de Superfícies Paramétricas



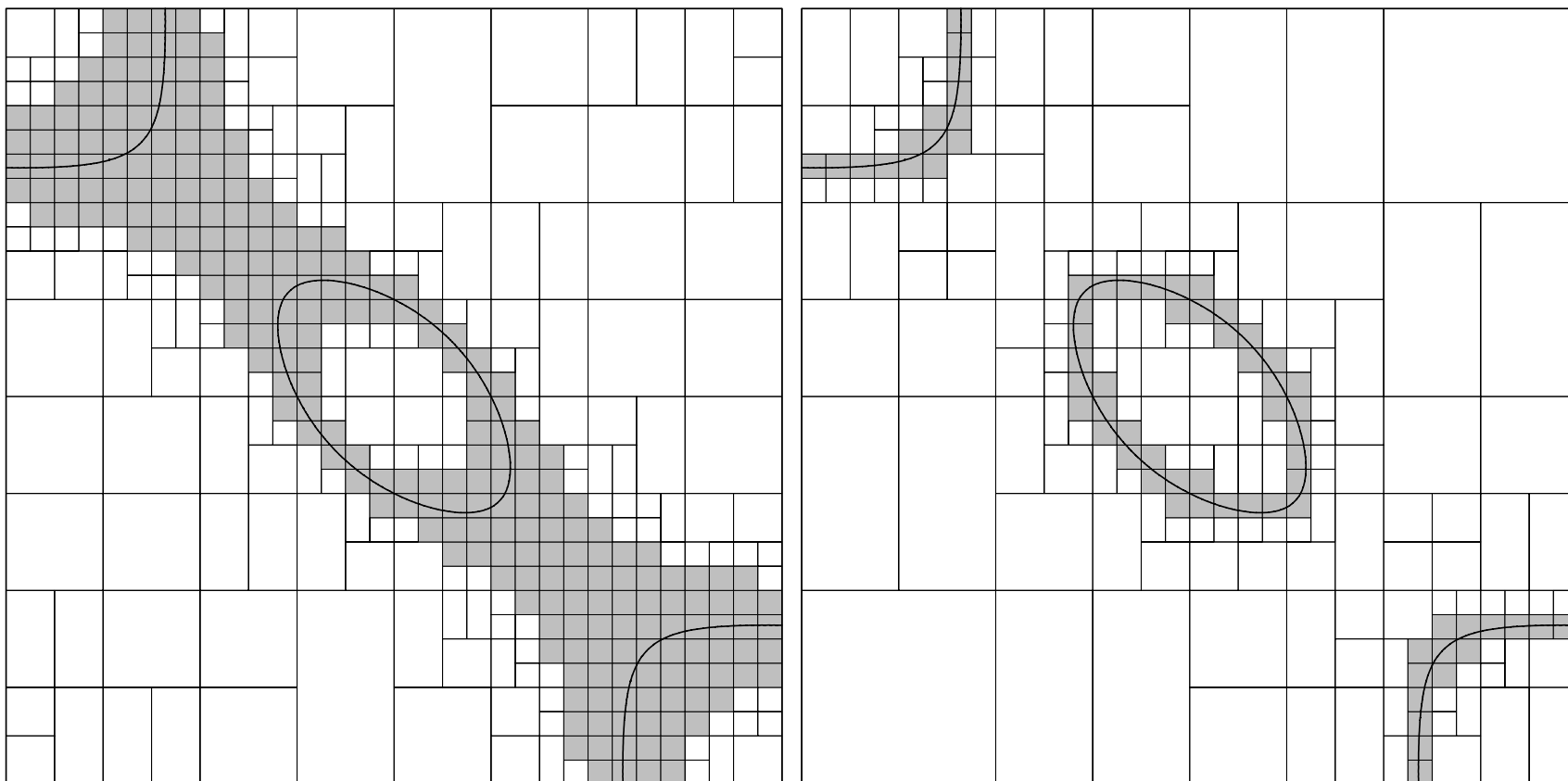
Objetos Implícitos

$$f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \quad S = f^{-1}(0) = \{x \in \Omega : f(x) = 0\}$$



Exemplo: Curva Implícita

$$x^2 + y^2 + xy - (xy)^2/2 - 1/4 = 0$$



Aproximação Poligonal Adaptativa de Superfícies Paramétricas

