

Métodos de otimização e Ajuste de parâmetros de algoritmos

Introdução

No contexto de Pesquisa Operacional, ao falar-se de algoritmos de otimização é comum o desenvolvimento de algoritmos exatos e heurísticos para maximizar ou minimizar uma função $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Os métodos exatos são capazes de encontrar uma solução ótima, mas para problemas mais complexos, o tempo de execução pode ser exageradamente longo. Exemplos de métodos exatos são: Branch-and-Bound, Branch-and-Cut and Branch-and-Cut-and-Price, Decomposição de Benders.

Já os métodos heurísticos, embora não garantam que a solução ótima será encontrada, em geral são capazes de identificar soluções próximas da solução ótima, em um tempo computacional muito menor. Por este motivo, em muitas aplicações práticas em que uma resposta se faz necessária mais rapidamente, os métodos heurísticos têm sido utilizados. Os métodos heurísticos podem ser divididos em dois grandes grupos: heurística clássicas e meta-heurísticas.

Heurísticas clássicas englobam métodos construtivos que tentam gerar boas soluções explorando informações/conhecimento do problema específico a ser resolvido. Por exemplo, no contexto do Problema de Roteamento de Veículos, algumas heurísticas construtivas muito conhecidas são Clarke & Wright (1964) e Gillett & Miller (1974). Já as meta-heurísticas são métodos mais gerais, pois se ajustam a diferentes problemas. Podemos citar:

- *Simulated Annealing (Recozimento Simulado)*: Osman (1993).
- *Deterministic Annealing (Recozimento Determinístico)*: Dueck and Scheurer (1990).
- *Algoritmos Genéticos*: Holland (1975), Baker & Ayechev (2003)
- *Ant Systems (AS)*: Bullnheimer et al. (1999)
- *Neural Networks (NN)*: Hopfield & Tank (1985), um artigo pioneiro na aplicação da técnica ao VRP, e Potvin & Robillard (1995).
- *GRASP*: Feo & Resende (1995), Assis (2007) e Pereira (2010).
- *Iterated Local Search (ILS)*: Lourenço, 2003.
- *Variable Neighborhood Descent (VND)*: Hansen & Mladenovic, 2003.

Ajuste de parâmetros

Uma característica dos métodos heurísticos, clássicos/construtivos ou meta-heurísticas, é a existência de vários parâmetros que influenciam fortemente o seu desempenho. Sendo assim, é comum após o desenvolvimento de um algoritmo, a realização de experimentos em massa para encontrar os melhores valores possíveis para estes parâmetros de modo a melhorar o desempenho do algoritmo, o que também pode ser visto como um problema de otimização em que, por exemplo, deseja-se maximizar o indicador de desempenho y ajustando-se valores para os parâmetros (x_1, x_2, \dots, x_n) , ou seja, deseja-se otimizar $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Em geral, para cada parâmetro (x_1, x_2, \dots, x_n) estima-se valores máximo e mínimos em que, fora deste intervalo, sabe-se que tais valores são impossíveis na prática, ou não fazem sentido ou muito improváveis de serem utilizados. Mas mesmo dentro destes intervalos, a quantidade de combinações entre os valores das diferentes variáveis pode ser um número extremamente alto, de modo que testar todas as combinações demanda um tempo impraticável. Deste modo, usar um algoritmo de otimização para ajustar estes valores é mais eficaz e eficiente do que planejar um experimento em massa que por mais extenso que seja, testará um número muito limitado de combinações.

Para esta aplicação, meta-heurísticas podem ser utilizadas. Uma ferramenta desenvolvida para este propósito é o *OptPlus-Optimizer*, encontrado em <http://www.betagama.com.br/opt.html>. Baseado em bem-sucedidas estratégias como Algoritmo Genético Híbrido, Evolução Diferencial e Algoritmo de Estimativa de Distribuição, trata-se de uma ferramenta flexível capaz de otimizar os parâmetros de qualquer algoritmo.

Este tipo de ferramenta pode-se mostrar muito útil, já que falhas no ajuste dos parâmetros podem induzir à conclusão de que o algoritmo desenvolvido é ruim, quando na verdade, apenas os valores dos parâmetros não são adequados.