Diplomado de especialización de desarrollo de aplicaciones con Inteligencia Artificial

Optimización industrial con Computación Evolutiva

Sesión 4 Algoritmos Evolutivos

Dr. Soledad Espezua. Ll. sespezua@pucp.edu.pe

Dr. Edwin Villanueva T. evillatal@pucp.edu.pe



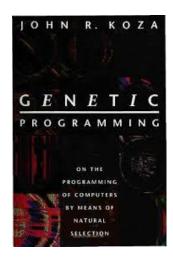


Agenda

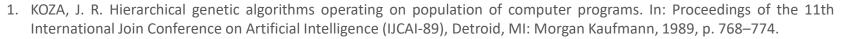
- Programación Genetica
- Differential Evolution
- MOO Algoritmos NSGA II
- Ejemplos de aplicación

Programación Genética (PG)

- Programación Genética (PG) puede ser vista como un caso particular de Ags que fue ampliamente difundida por J. Koza ¹(1989).
- La PG es un tipo de modelo evolutivo en la cual los individuos que se encuentran dentro de la población son programas de computadora cuyo fin es realizar una tarea definida por el usuario.
 - Dichos programas son manipulados y representados como cadenas de caracteres.
- PG difiere de los AGs canónicos en la representación, operadores de reproducción y métodos de evaluación de la función de aptitud.

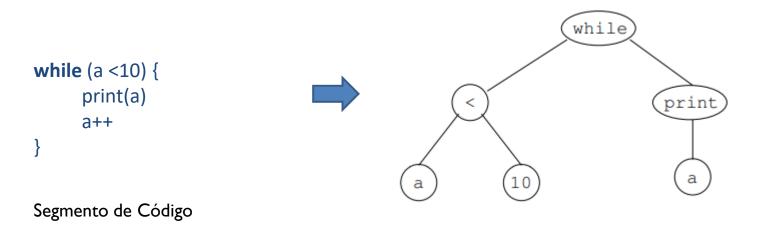






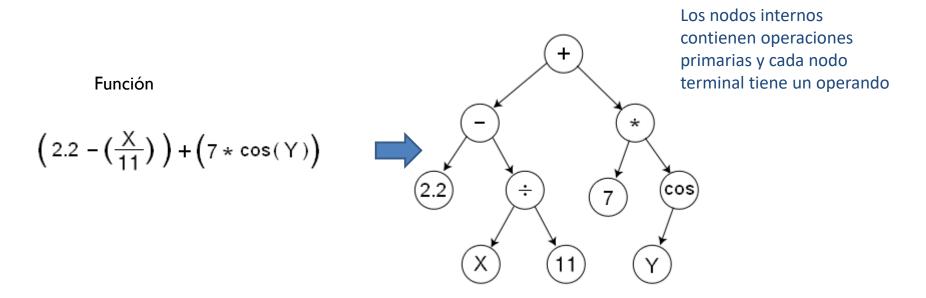
PG - Representación

- Las individuos se codifican como estructuras de árboles. Cada nodo del árbol contiene constantes, variables o parámetros para realizar procedimientos y funciones.
 - Cada nodo interno del árbol tiene una función como operador y cada nodo terminal tiene un operando, por lo que las expresiones matemáticas son fáciles de evolucionar y evaluar.



Representación en árbol

PG - Representación



- Se predetermina la máxima profundidad de los árboles, pero no su topología
- El tamaño, forma y contenido de los árboles puede cambiar dinámicamente durante el proceso evolutivo.

PG - Representación

El conjunto de <u>nodos terminales</u> está compuesto por las entradas posibles al individuo, variables y constantes.

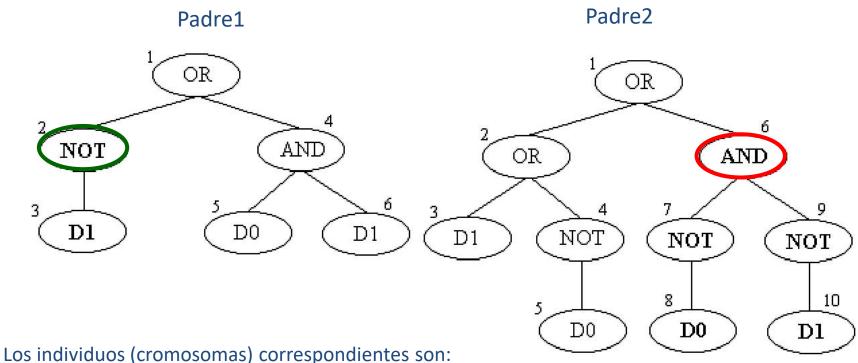
Ejemplo: {x₁,x₂,y,a,b,1...9,etc}

- El conjunto de <u>nodos internos</u> está compuesto por operadores y funciones que pueden componer a un individuo. Ejemplo:
 - Operadores aritméticos (+,-,*, etc.)
 - Operadores booleanos (AND, OR, NOT)
 - Operadores condicionales (IF-THEN-ELSE)
 - Operadores de iteraciones/ recursión (DO-UNTIL, WHILE)
 - Funciones matemáticas (seno, coseno, exp, log)
 - Cualquier función específica del dominio definido

PG - Cruzamiento

<u>Cruzamiento:</u> se intercambian partes de los árboles eligiendo al azar un nodo como punto de corte en cada árbol.

Ejemplo: Punto de cruce en el Padre1 = nodo 2, y en el Padre2 = nodo 6.

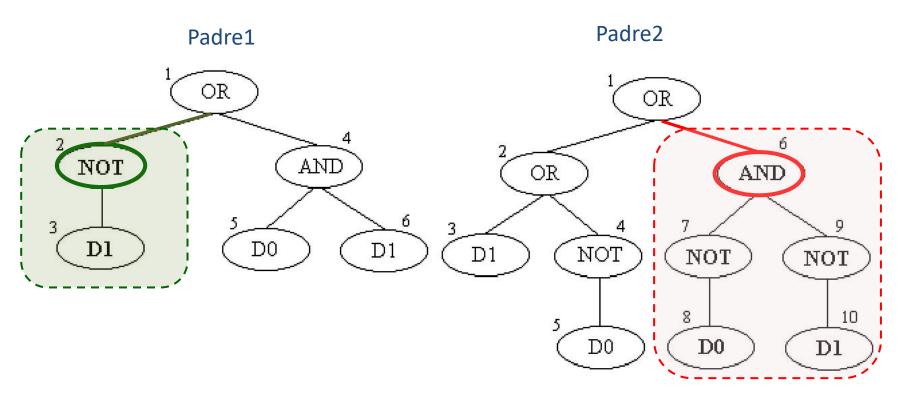


Padre1: (OR (NOT D1) (AND D0 D1))

Padre2:(OR (OR D1 (NOT D0)) (AND (NOT D0) (NOT D1)))

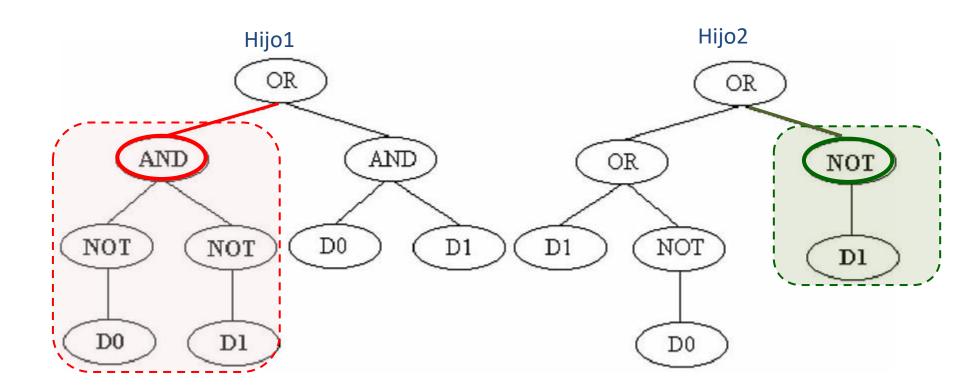
PG - Cruzamiento

- El primer hijo se produce quitándole al primer padre el fragmento indicado por el punto de cruza e insertando el fragmento (sub-árbol) correspondiente del segundo padre.
- El segundo hijo se produce de manera análoga.



PG - Cruzamiento

Entonces los hijos resultantes serán:

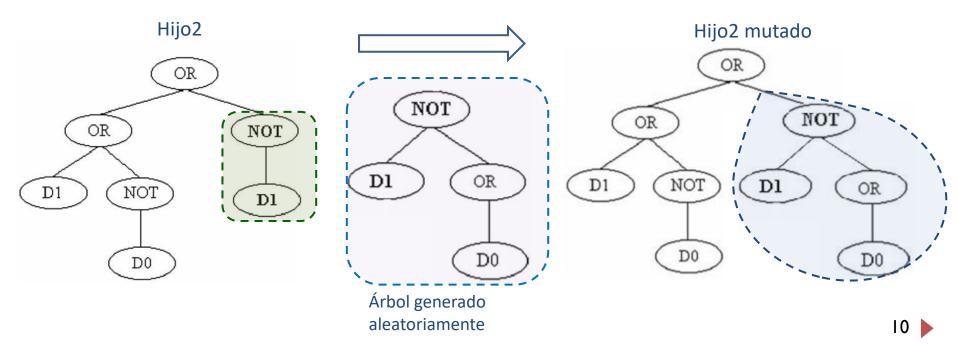


PG - Reproducción

- <u>Mutación:</u> actúa sobre un solo individuo, generalmente, uno resultante de un cruzamiento.
- La mutación actúa con una probabilidad colocada muy baja y que es un parámetro del algoritmo de PG.

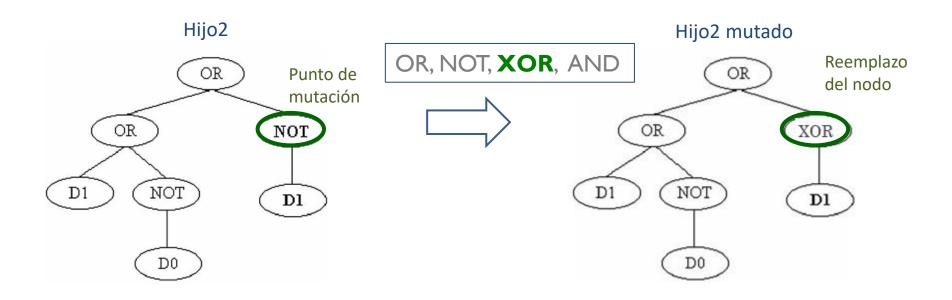
Tipos de Mutación:

1. <u>Mutación Subárbol</u>: consiste en escoger en forma aleatoria un nodo del árbol y crear bajo este, otro subárbol con restricciones de profundidad.



PG - Reproducción

2. <u>Mutación Puntual</u>: consiste en seleccionar en forma aleatoria un nodo del árbol y luego substituirlo por otro nodo del mismo tipo (terminal o nodo interno).



PG - Reproducción

Otros tipos de mutación:

Nombre del operador	Descripción del efecto	
Permutación	Los argumentos de un nodo son permutados	
Levantamiento	Nuevo individuo es generado a partir de un subárbol	
Expansión	Un terminal es cambiado por un árbol generado al azar	
Colapso	Subárbol es intercambiado por un terminal	
Duplicación de Gen	Subárbol es reemplazado por un terminal al azar.	

PG - Evaluación

- El <u>fitness</u> mide qué tan buena es una solución en la evolución simulada del PG.
- Si el objetivo es aprender una expresión simbólica, la ejecución del programa representado por el árbol, es <u>el fitness</u>. Si resuelve el problema propuesto o se acerca a la respuesta correcta, tendrá un alto valor; de lo contrario, su fitness será bajo.
- Si el objetivo es aprender una función matemática g, entonces una medida <u>del</u> <u>fitness</u> puede ser el error cuadrático medio.

$$fitness = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} (real_i - estimado_i)^2$$

donde $real_i$ es la salida real del programa y $g(i) = estimado_i$ es la salida estimada ante la entrada i.

▶ En general, los algoritmos de PG utilizan solo el operador de cruzamiento en el proceso de búsqueda de las mejores soluciones.

PG - Selección

La **selección** es el proceso por el cual se escogen individuos para transmitirlos de una generación a otra.

Tipos de selección (para N individuos).

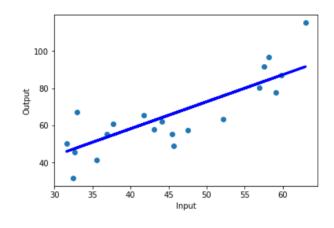
- Selección por ruleta:
- Repetir hasta completar una población de N individuos:
 - 1. Seleccionar a dos individuos padres, privilegiando los de mejor *fitness*.
 - 2. Aplicar cruzamiento
 - 3. Aplicar mutación
- Selección por torneo:
- Dividir aleatoriamente la población en dos grupos de N/2 individuos.
 - 1. Seleccionar al mejor individuo del primer grupo (padre), y al mejor individuo del segundo (madre).
 - 2. Aplicar cruzamiento.
 - Aplicar mutación
 - 4. Los dos nuevos individuos reemplazan a los peores de cada uno de los grupos.

PG - Consideraciones

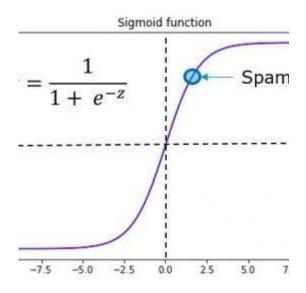
- Criterio de parada: por lo general un algoritmo de PG se detiene cuando el mejor individuo de la población tiene un fitness aceptable.
- Para resolver un problema con PG, es necesario:
- 1. Definir el conjunto de nodos terminales.
- 2. Definir el conjunto de nodos internos (funciones).
- 3. Definir la función de aptitud.
- 4. Definir parámetros tales como tamaño de la población, tamaño máximo de un individuo, probabilidad de cruzamiento y mutación, método de selección y criterio de parada del algoritmo.

PG – Aplicación

- La principal aplicación de PG es en Regresión Simbólica.
 - Las técnicas de regresión simbólica permiten obtener expresiones matemáticas g que modelen el comportamiento de un sistema a partir de un conjunto de pares entradasalida.
- La regresión numérica clásica necesita que la estructura de la expresión sea fijada a priori (regresión lineal, cuadrática, exponencial, logarítmica, etc.).
 - El objetivo es encontrar los coeficientes numéricos de dicha expresión usando alguna técnica de optimización numérica.



$$Y = b_0 + b_1 * x$$



PG – Aplicación

La regresión simbólica permite obtener tanto la estructura de la expresión como los valores de los coeficientes de un modo automático.

Expresión simbólica

$$y = a.x + b$$

Variable independiente X	Variable dependiente Y
-1	1
-0.8	0.84
-0.6	0.76
:	:
	:
1	3

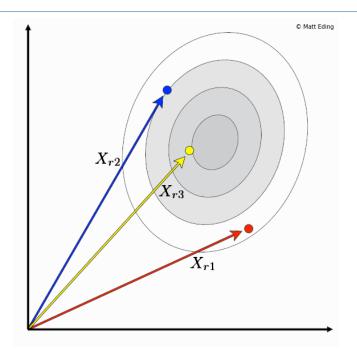
Valores de coeficientes

$$a = 1.197$$

 $b = 0.109$

De este modo PG, es muy útil para la identificación de sistemas no lineales.

Differential Evolution (DE)



Differential Evolution (DE)

• Fue introducida por R. Storn y K. Price en 1995¹, para optimización sobre espacios continuos, en un intento por resolver el problema de ajuste de polinomios de Chebychev.





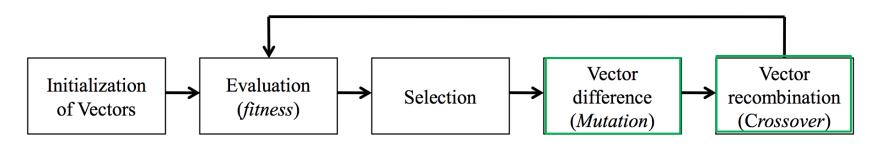


Kenneth Price

- 1. R. Storn and K. V. Price, "Differential evolution: A simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces," ICSI, USA, Technical Report TR-95-012, 1995.
- 2. R. Storn,1997. Differential Evolution, A simple and efficiente heuristic of strategy for global optimization over continuous spaces. Journal of Global Optimization, 11 (1997) 341-359.

DE - Características

- Es un modelo evolutivo de optimización perteneciente a los algoritmos de CE, para resolver problemas de optimización continua.
- DE comparte similitudes con los AGs tradicionales, pero no usa la codificación binaria.
 - La población en DE es un conjunto de vectores de valores reales, donde cada vector representa una posible solución al problema.
- DE comparte varias características con el ciclo básico de un AG. Después de usar selección, DE enfatiza en la mutación y continua con el cruzamiento sobre el vector mutado.



Presenta una forma de generar vectores, los cuales compiten con los individuos de la población actual a fin de sobrevivir.

• Una población $X_{n\times d}$ de tamaño "n", inicia con x_i vectores aleatorios ddimensionales $(i=1,\ldots,d)$. La población se genera de la siguiente
manera:

$$X_{n \times d} \leftarrow \cup (inf, sup)$$

 $x_i = inf + rand(0,1).(sup - inf)$

donde: inf y sup son límites de acotamiento.

- Después de evaluar la población, escoger 3 vectores (x_1, x_2, x_3) aleatoriamente.
- Luego escoger aleatoriamente un vector objetivo (x_i) para ser reemplazado.

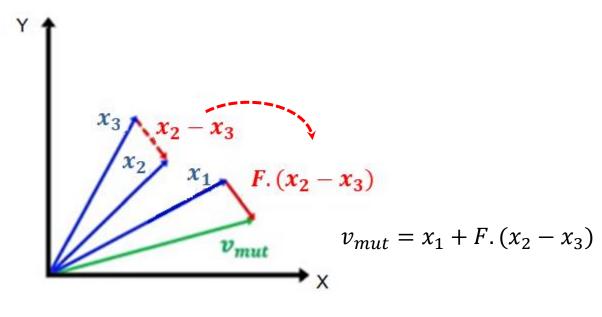
Mutación

Genera un vector mutado (v_i) con el siguiente procedimiento:

$$v_i = x_1 + F.(x_2 - x_3) \tag{1}$$

donde:

• $F \in [0,2]$ es un factor de amplificación de valor real.

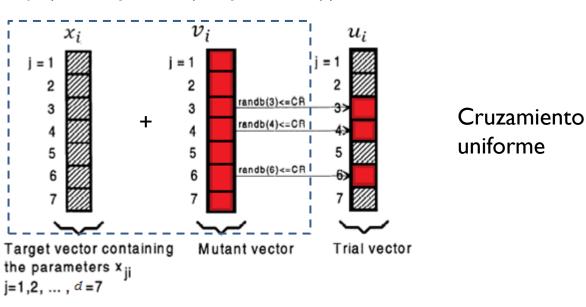


$$v_{mut} = v_i$$

Cruzamiento

Cruzamiento genera un vector trial (u_i) que incrementa la diversidad:

$$u_{ji} = \begin{cases} v_{ji}, & if \ (randb(j) \le CR) \ or \ j = rnbr(i) \\ x_{ji}, & if \ (randb(j) > CR) \ or \ j \ne rnbr(i) \end{cases}$$
 (2)



donde:

- $j = 1,2,...,d \rightarrow tamaño del vector$
- $randb(j) \in [0,1]$ (real)
- CR ∈ [0,1] taza de cruzamiento (real)
- $rnbr(i) \in [1, d]$ escoge un número aleatorio (entero)

Selección

Para decidir si el nuevo vector debe o no convertirse en un miembro de la generación G + 1, se compara el fitness del vector trial (u_i) con el fitness del vector objetivo x_i .

```
If (u_i. \text{fitness} > x_i. \text{fitness}) x_i \leftarrow u_i (3)
```

DE - Pseudocódigo

Differential Evolution

Initialize the population x with randomly generated solutions Set the weight $F \in [0, 2]$ and crossover probability $C_r \in [0, 1]$ while (stopping criterion)

for i = 1 to n,

For each x_i , randomly choose 3 distinct vectors x_p , x_r and x_r

Generate a new vector v by DE scheme (1)

Generate a random index $J_r \in \{1, 2, ..., d\}$ by permutation

Generate a randomly distributed number $r_i \in [0, 1]$

for j = 1 to d,

For each parameter $v_{j,i}$ (jth component of v_i), update

$$\mathbf{u}_{j,i}^{t+1} = \begin{cases} \mathbf{v}_{j,i}^{t+1} & \text{if } r_i \le C_r \text{ or } j = J_r \\ \mathbf{x}_{j,i}^t & \text{if } r_i > C_r \text{ and } j \ne J_r, \end{cases}$$
 (2)

end

Select and update the solution by (3)

end

end

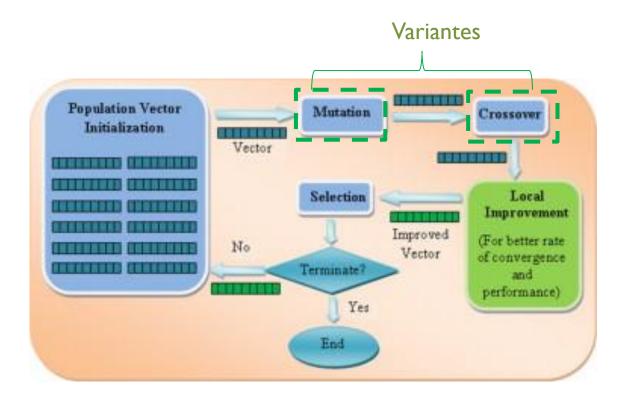
Post-process and output the best solution found

DE - Consideraciones

- Es importante notar que, incrementando ya sea el <u>tamaño de la población</u> o el <u>número de parejas de soluciones</u> usadas para calcular los valores de mutación, también se <u>incrementa la diversidad</u> de posibles movimientos, promoviendo <u>la exploración</u> del espacio de búsqueda. Sin embargo, la probabilidad de encontrar la dirección de búsqueda correcta decrece considerablemente.
 - Así, el balance entre el tamaño de la población y el número vectores seleccionados para realizar mutación, determina la eficiencia del algoritmo.

DE - Consideraciones

- Otro factor importante en DE es la selección de las <u>variantes</u>(un esquema de diferentes nomenclaturas para DE).
 - Las diferencias de una variante a otra son la forma en la que los individuos son seleccionados para calcular el vector de **mutación** y el operador de **cruzamiento**.



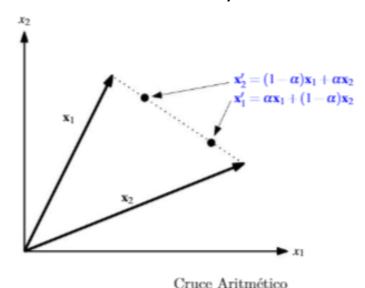
DE - Variantes

- 1. "DE/rand/1/bin", "DE/rand/1/exp", "DE/best/1/bin" y "DE/best/1/exp"
- "DE": significa Differential Evolution
- "rand": seleccionar todos los individuos para calcular la mutación de forma aleatoria
- "1": es el número de pares de soluciones escogidas
- "best": usar la mejor solución en la población además de las aleatorias.
 - Usa cruzamiento discreto, siempre sobre dos individuos, el padre original y el vector de mutación. Variantes:
- "bin": binomial, cada variable del hijo se toma en cada ocasión de uno de los dos padres, con base en el valor del parámetro "CR".
- "exp": exponencial, cada variable del hijo se toma del primer padre hasta que un número aleatorio rebasa el valor de "CR".

DE - Variantes

2. "DE/current-to-rand/1" y la "DE/current-to-best/1"

Usa cruzamiento aritmético y a diferencia del discreto, es invariante a la rotación.



$$z_i = \alpha x_i + (1 - \alpha) y_{i_j}$$
 donde $0 \le \alpha \le 1$

- "current-to-rand": selecciona los individuos para la mutación de forma aleatoria
- "current-to-best": usa la mejor solución en la población, además de soluciones aleatorias.

DE - Variantes

3. "DE/rand/2/dir"

Incorpora información de la función objetivo a los operadores de mutación y cruzamiento.

El objetivo de este enfoque es guiar la búsqueda a zonas prometedoras más rápido que en la DE tradicional.

"2": numero de pares de soluciones elegidas. Los autores argumentan que se obtienen los mejores resultados cuando eligen 2.

4. "DE/current-to-rand/1/bin"

Usa una combinación de cruzamiento discreto- aritmético.

DE - Aplicaciones

DE es uno de los campos más activos en el desarrollo de algoritmos evolutivos para optimización continua.

Control Systems and Robotics	Bioinformatics
System identification	Gene regulatory networks
Optimal control problems	Micro-array data analysis
Controller design and tuning	Protein folding
Aircraft control	Bioprocess optimization
Nonlinear system control	Artificial Neural Networks
Simultaneous localization and modeling problem	Training of feed-forward ANNs
Robot motion planning and navigation	Training of wavelet neural networks
Cartesian robot control	Training of B-Spline neural networks
Multi-sensor data fusion	Chemical Engineering
Pattern Recognition and Image Processing	Chemical process synthesis and design
Data clustering	Phase equilibrium and phase study
Pixel clustering and region based image segmentation	Parameter estimation of chemical process
Feature extraction	
Image registration and	
enhancement	
Image Watermarking	

Bibliografia DE

- Raúl Benítez, Gerard Escudero, Samir Kanaan. Inteligencia artificial avanzada.
- R. Storn,1997. Differential Evolution, A simple and efficiente heuristic of strategy for global optimization over continuous spaces. Journal of Global Optimization, 11 (1997) 341-359.
- R. Storn and K. V. Price, "Differential evolution: A simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces," ICSI, USA, Technical Report TR-95-012, 1995 [Online]. Available: http://icsi.berkeley.edu/~storn/litera.html

Review DE:

- Swagatam Das, Sankha Subhra Mullick, P.N. Suganthan. Recent advances in differential evolution – An updated survey. Swarm and Evolutionary Computation, Volume 27, 2016, Pages 1-30.
- Guohua Wu, Rammohan Mallipeddi, P.N. Suganthan, Rui Wang, Huangke Chen. Differential evolution with multi-population based ensemble of mutation strategies. Information Sciences, Volume 329, 2016, Pages 329-345.

Optimización Multiobjetivo (MOO)

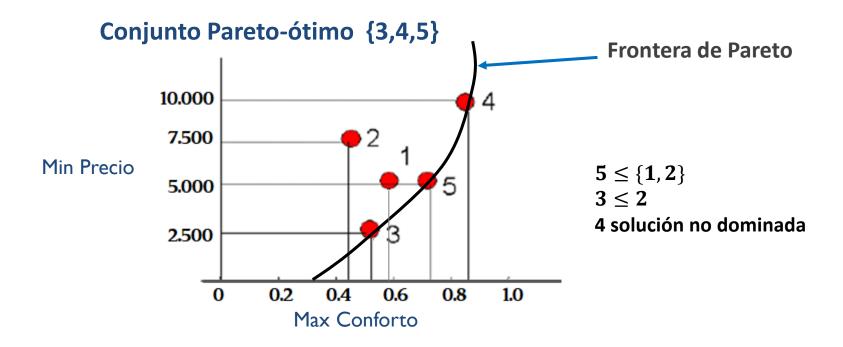
Definición [Andrzej Osyczka]

"Es encontrar un vector de variables de decisión, que satisface restricciones y optimiza un vector de funciones cuyos elementos representan <u>funciones</u> <u>objetivas</u>. Estas funciones generalmente están en conflicto entre sí.

Entonces, "optimizar" significa encontrar una solución de todas las funciones objetivas que proporcione valores aceptables para el desarrollador ".

MOO - Problema Multiobjetivo

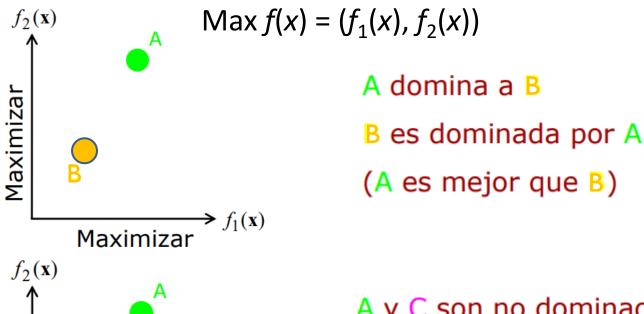
Un problema multiobjetivo tiene un conjunto de soluciones eficientes que no pueden ser consideradas diferentes entre sí. Este conjunto de soluciones se le denomina Frontera de Pareto.



Una solución es Pareto-óptima cuando es *no dominada* (es al menos tan buena como las otras en todos los objetivos o es mejor en al menos uno de ellos).

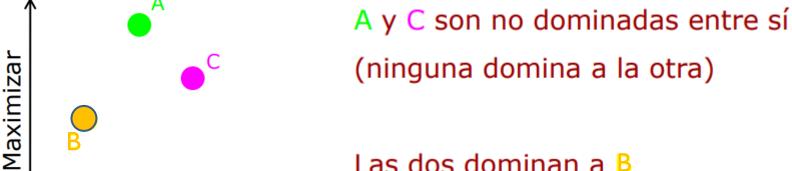
MOO – Concepto de dominancia

Una solución $x^* \in \mathfrak{I}$ es Pareto-óptima cuando es *no dominada* por ninguna otra solución.



 $f_1(\mathbf{x})$

Maximizar

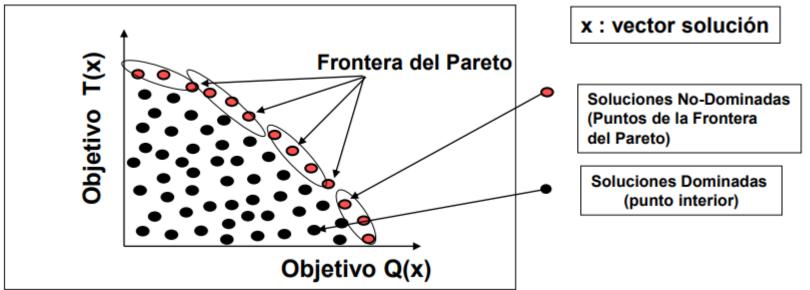


Las dos dominan a B

MOO – Concepto de dominancia

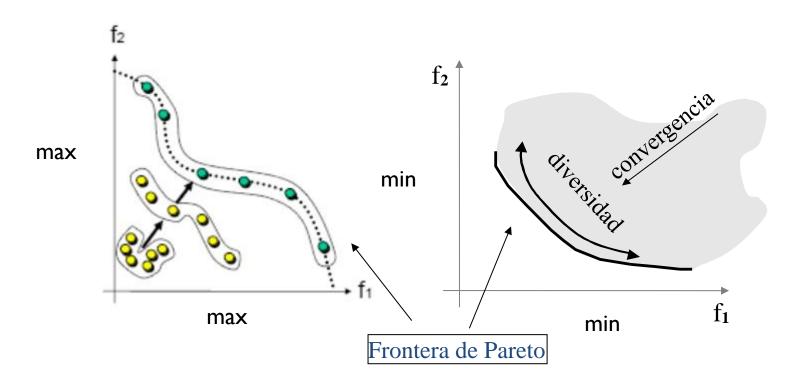
- Para que una solución domine a otra, esta necesita ser estrictamente mejor en al menos un objetivo, y no peor en ninguno de ellos.
- El conjunto de todas las soluciones *no dominadas* $x^* \in \mathfrak{I}$ es el conjunto Pareto-óptimo y compone la solución óptima del problema multiobjetivo.
- La *frontera de Pareto* consta de los *fitness* (valores de las funciones objetivo $f(x^*)$), de cada vector x^* del conjunto de Pareto-óptimos.

Ejemplo: Frontera del Pareto para [Max Q(x), Max T(x)]



Objetivo de MOO

- Encontrar el conjunto de soluciones que estén lo más próximo posible de la Frontera de Pareto.
- Encontrar el conjunto de soluciones con la mayor diversidad posible.



NSGA II

Nondominated Sorting Genetic Algorithm (NSGA-II)

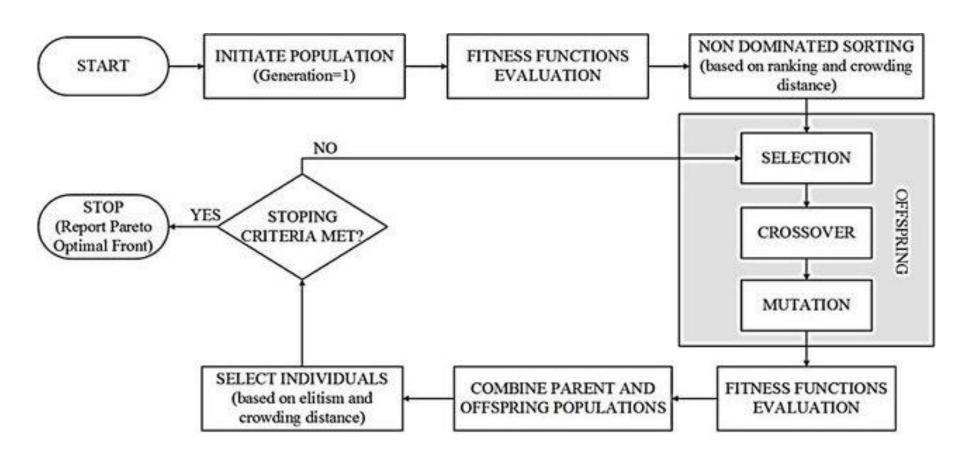
NSGA-II ¹, fue propuesto por Kalyanmoy Deb y sus estudiantes. Es una versión mejorada del NSGA² y tiene las siguientes características:

- Combina la población actual con la siguiente población, conservando las mejores soluciones de ambas.
- Utiliza un operador de distancia (crowding distance) que no requiere parámetros.
- Usa elitismo, que lo hace mucho más eficiente (computacionalmente) que NSGA (descarta soluciones no-dominadas en la iteración actual).

- 1. DEB, K.; AGRAWAL, S.; PRATAB, A.; MEYARIVAN, T. A Fast Elitist Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm for Multi-Objective Optimization: NSGA-II. KanGAL report 200001, Indian Institute of Technology, Kanpur, India, 2000.
- 2. SRINIVAS, N.; DEB, K. Multiobjective Optimization Using Nondominated Sorting in Genetic Algorithms. Evolutionary Computation, v. 2, n. 3, p. 221–248, 1994.

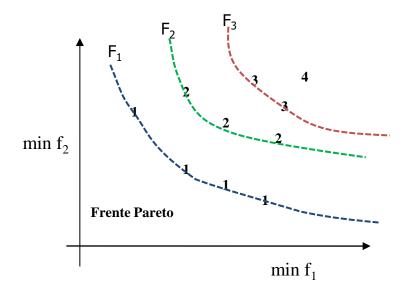


NSGA II



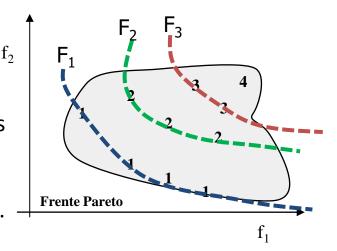
NSGA II - Asignación del fitness

- Identificar los individuos no dominados de una población y colocarles el mismo fitness.
 - Esto implica que todas las soluciones en dicha categoría tienen la misma probabilidad de reproducirse.
- Remover los individuos ya asignados a un categoría (rank) e identificar un nuevo conjunto de soluciones no dominadas.
 - A este nuevo grupo se le asigna el mismo fitness pero mayor que el rank anterior.
- El proceso continua hasta que todos los individuos de la población son asignados a una categoria.



NSGA II- Ordenamiento por no dominancia

- Seleccionar N individuos divididos en categorías, de la siguiente manera:
 - todas las soluciones no dominadas pertenecientes al ranking 1,
 - las restantes siguientes soluciones no dominadas pertenecientes al ranking 2
 - Y continuar así hasta completar N.



- Después , realizar cruzamiento y mutación hasta que se tenga una nueva población de N individuos.
- Luego repetir el ciclo, combinando padres e hijos usando elitismo.



Para distinguir soluciones con un mismo ranking se calcula la distancia de amontonamiento (*crowding distance*).

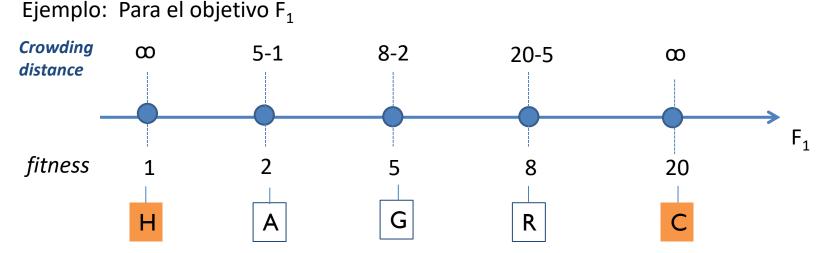
NSGA II - Crowding distance

Es una medida de "densidad de las soluciones que rodean una solución particular en la población". Pasos:

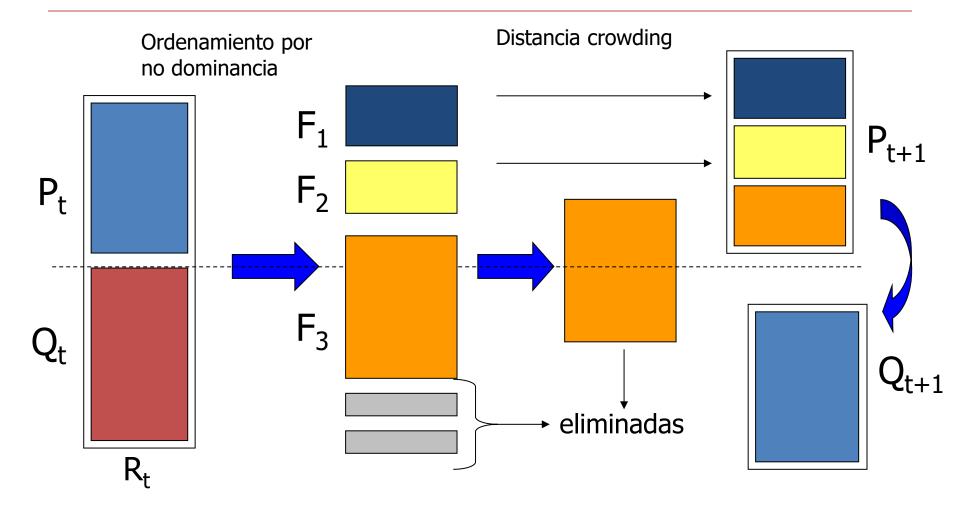
- Primero se ordena la población según el valor (fitness) de cada función objetivo en orden ascendente.
- A los primeros y últimos individuos en el rank se les asigna:

Crowding distance = infinity

En los demás individuos, la distancia crowding se calcula como la diferencia de los fitness de los 2 vecinos más cercanos.



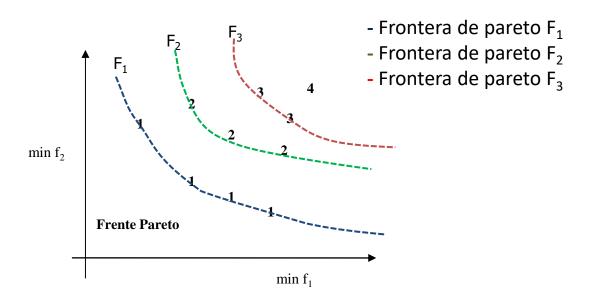
NSGA II



Combina los padres (P_t) e hijos (Q_t) para formar $R_t = P_t \cup Q_t$, lo que garantiza elitismo.

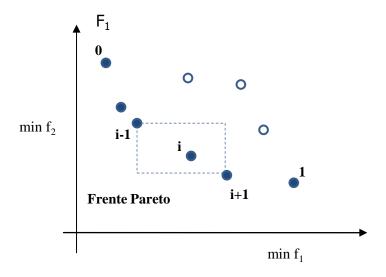
NSGA II - Procedimiento

- 1. Generar aleatoriamente una población P_t de tamaño N.
- 2. Calcular las funciones objetivo de la primera generación.
- 3. Ordenar la población P_t por ranking de no dominancia de pareto.
 - Ordenar población en los diferentes frentes (F₁,F₂, F₃,...,etc, donde 1 es el mejor nivel, luego 2 y así sucesivamente) según el nivel de no dominancia.



NSGA II - Procedimiento

- 4. Seleccionar los individuos por torneo de dos.
 - Escoger 2 individuos y eligir al mejor con respecto al ranking de no dominancia.
 - Los individuos en la misma frontera de no dominancia son comparados usando la distancia crowding.



Los puntos obscuros son individuos en la misma frontera de no dominancia.

NSGA II - Procedimiento

- 5. Usar los operadores de reproducción (cruzamiento y mutación) para generar la siguiente generación Q_t de tamaño N.
- 6. Evaluar las funciones objetivo de la nueva generación.
- 7. Combinar la población de padres P_t e hijos Q_t para formar R_t de tamaño 2N.
- 8. Ordenar la población por ranking de no dominancia de pareto.
- 9. Crear la siguiente generación seleccionando por elitismo los mejores individuos de la población R_t.
 - El criterio de selección es escoger primero los mejores individuos con respecto al ranking de no dominancia y luego los individuos resultantes de la distancia crowding.
- 10. El procedimiento termina cuando se alcanza el máximo numero de generaciones

Algoritmos Evolutivos Multiobjetivo

Métodos populares en la literatura:

Sigla	Nombre del Modelo
VEGA	Vector Evaluated Genetic Algorithm
WBGA	Weight Based Genetic Algorithm
MOGA	Multiple Objective Genetic Algorithm
NSGA	Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm
NPGA	Niched-Pareto Genetic Algorithm
PPES	Predator-Prey Evolution Strategy
REMOE	A Rudoph's Elitist Multi-Objective Evolutionay Algorithm
NSGA-II	Elitist Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm
SPEA, SPEA-2	Strenght Pareto Evolutionary Algorithm 1 y 2
TGA T	Thermodynamical Genetic Algorithm
PAES	Pareto-Archived Evolutionary Strategy
MONGA -I,MONGA - II	Multi-Objective Messy Genetic Algorithm
PESA-I, PESA-II	Pareto Envelope-Base Selection Algorithm

Ejemplo

