

Otimização Combinatória

Algoritmos Genéticos

André Luiz Brun

2022



Introdução

Classe ou família de modelos computacionais inspirados na evolução natural proposta por Charles Darwin

On the Origin of Species by Means of Natural Selection (1859)
A The descent of man, and selection in relation to sex (1871)

Os indivíduos mais propensos à sobrevivência são aqueles **mais adaptados** para enfrentar determinadas condições ambientais. Logo estes indivíduos teriam maior chance de se reproduzir e assim deixar seus descendentes. Assim, com o passar dos anos, as variações favoráveis tendem a permanecer e as desfavoráveis tendem a serem destruídas.



Introdução

1. Variation in neck length



2. Struggle for existence



3. Greater fitness



4. Long-neck trait increases





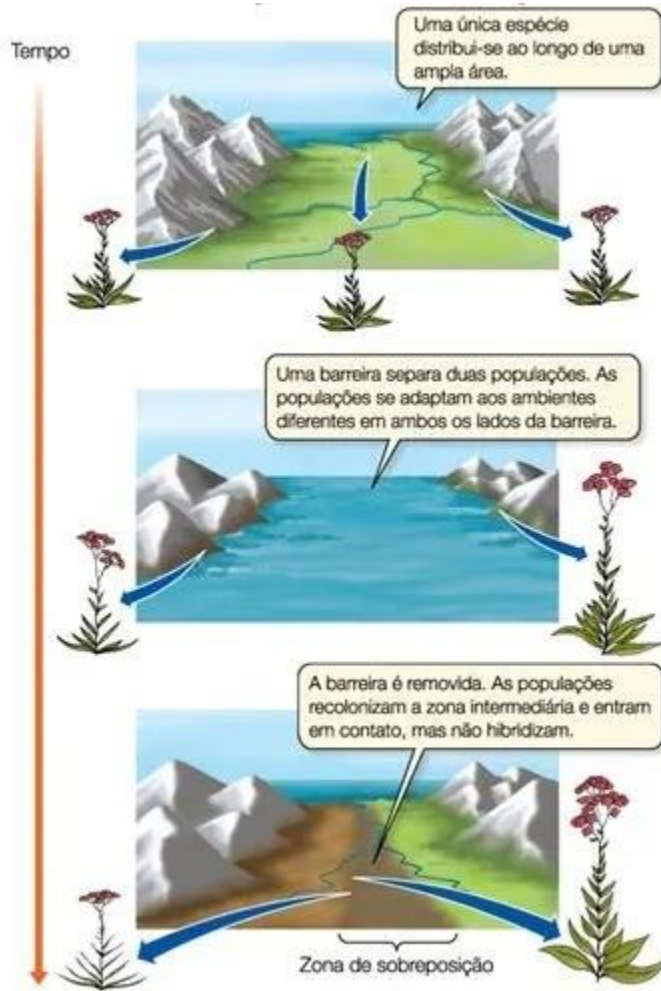
Introdução

Segundo DARWIN (1859), a seleção natural é um processo seletivo lento que ocorre ao longo das gerações, através da qual as espécies podem se diversificar*, tornando-se mais adaptadas ao meio em que vivem. A seleção é determinada, em certa parte, pelos fatores ecológicos do ambiente

*especiação (aloprática)



Introdução



Fonte: Nunes (2022)



Introdução

Elefante Africano x Elefante Indiano

Elefante Africano Savana x Elefante Africano Floresta



Fonte: Khan Academy (2022)



Introdução

Através da seleção natural, a frequência de um **gene vantajoso**, que apresenta características positivas, aumenta gradativamente na população.

A vantagem conferida pelo gene pode se refletir em diversos fatores que façam com que as espécies que o apresente sejam mais aptas.

Por exemplo, o gene pode refletir em um maior tempo de vida de um elemento, aumentando assim a probabilidade do mesmo de se reproduzir. O gene pode aumentar a sua frequência se ele fornecer ao indivíduo maior capacidade de se proteger



Introdução

Caso das borboletas de Manchester



Fonte: Hensley & James (2022)

<https://tinyurl.com/4jf7xnj4>



Introdução

De maneira rudimentar, os Algoritmos Genéticos (AGs) são técnicas de busca baseadas nas teorias da evolução, nas quais as variáveis são representadas como genes em um cromossomo. Combinam a sobrevivência dos mais aptos com a troca de informação de uma estrutura, com a seleção natural, cruzamento e mutação dos elementos a fim de encontrar os elementos mais aptos a determinada característica do meio. No caso da computação a melhor ou conjunto de melhores soluções para o problema.



Introdução

Inicialmente propostos por John Holland em 1975 através da obra “Adaptation in Natural and Artificial Systems” e posteriormente difundidos por Goldberg em 1989 na obra “Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning”.



Introdução

As tarefas de busca e otimização geralmente são compostas por três elementos básicos:

- a) a codificação do problema em questão (geralmente um dos passos mais complexos do processo)
- b) o espaço de busca, onde são consideradas todas as possibilidades de solução de um determinado problema
- c) função de avaliação (função fitness), que é uma maneira de avaliar os membros do espaço de busca (varia de acordo com o problema).



Introdução

As técnicas de busca e otimização tradicionais iniciam-se com um único candidato que, iterativamente, é manipulado utilizando algumas heurísticas (estáticas) diretamente associadas ao problema a ser solucionado. Geralmente, estes processos heurísticos não são algorítmicos e sua simulação em computadores pode ser muito complexa. Apesar destes métodos não serem suficientemente robustos, isto não implica que eles sejam inúteis. Na prática, eles são amplamente utilizados, com sucesso, em inúmeras aplicações.



Introdução

Por outro lado, as técnicas de computação evolucionária operam sobre uma população de candidatos em paralelo. Assim, elas podem fazer a busca em diferentes áreas do espaço de solução, alocando um número de membros apropriado para a busca em várias regiões.

Os AGs diferem dos métodos tradicionais de busca e otimização, principalmente em quatro aspectos:

- Trabalham com uma codificação do conjunto de parâmetros e não com os próprios parâmetros;
- Trabalham com uma população e não com um único ponto;



Introdução

- Utilizam informações de custo ou recompensa e não derivadas ou outro conhecimento auxiliar;
- Utilizam regras de transição probabilísticas e não determinísticas.

Eles empregam uma estratégia de busca paralela (onde cada indivíduo de uma população é uma solução potencial) e estruturada, mas aleatória, que é voltada em direção ao reforço da busca de pontos de "alta aptidão", ou seja, pontos nos quais a função a ser minimizada (ou maximizada) tem valores relativamente baixos (ou altos).



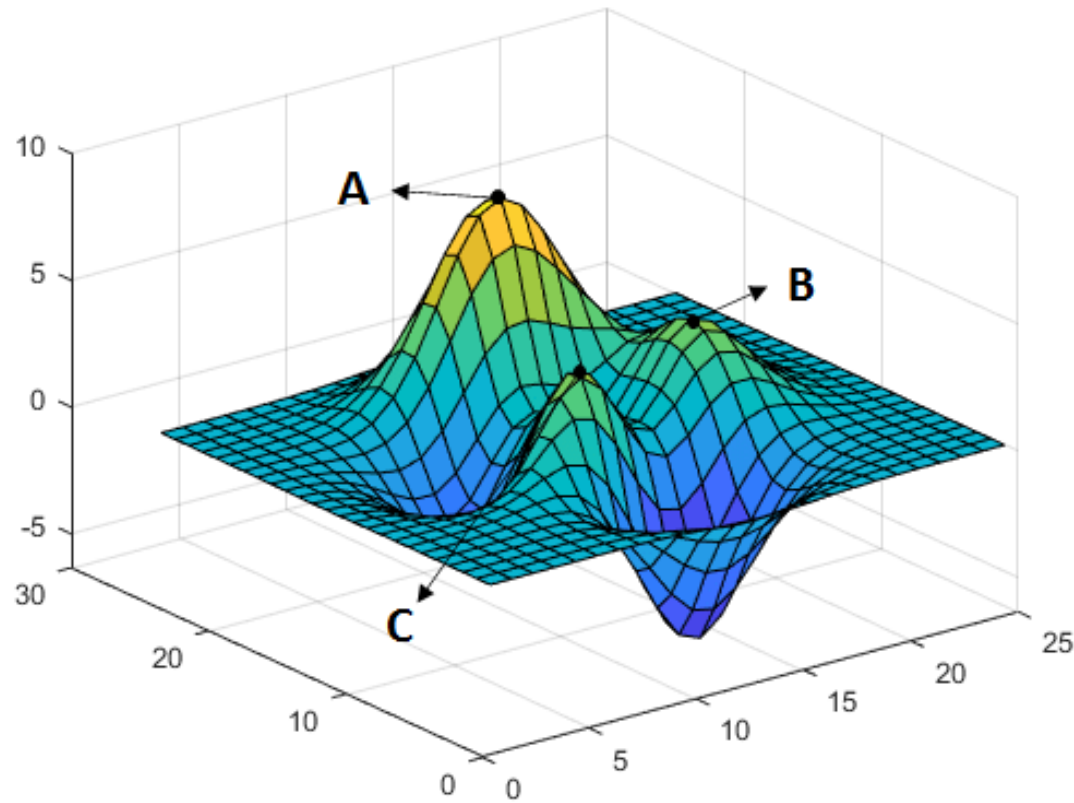
Introdução

A vantagem principal dos AGs ao trabalharem com o conceito de população, ao contrário de muitos outros métodos que trabalham com um só ponto, é que eles encontram segurança na quantidade. Tendo uma população de pontos bem adaptados, a possibilidade de alcançar um falso ótimo torna-se menor.

O conceito de máximo local (ou falso ótimo) acontece quando o algoritmo converge para uma solução local e a explora até que encontre seu melhor valor, ignorando, porém o restante do espaço de busca.

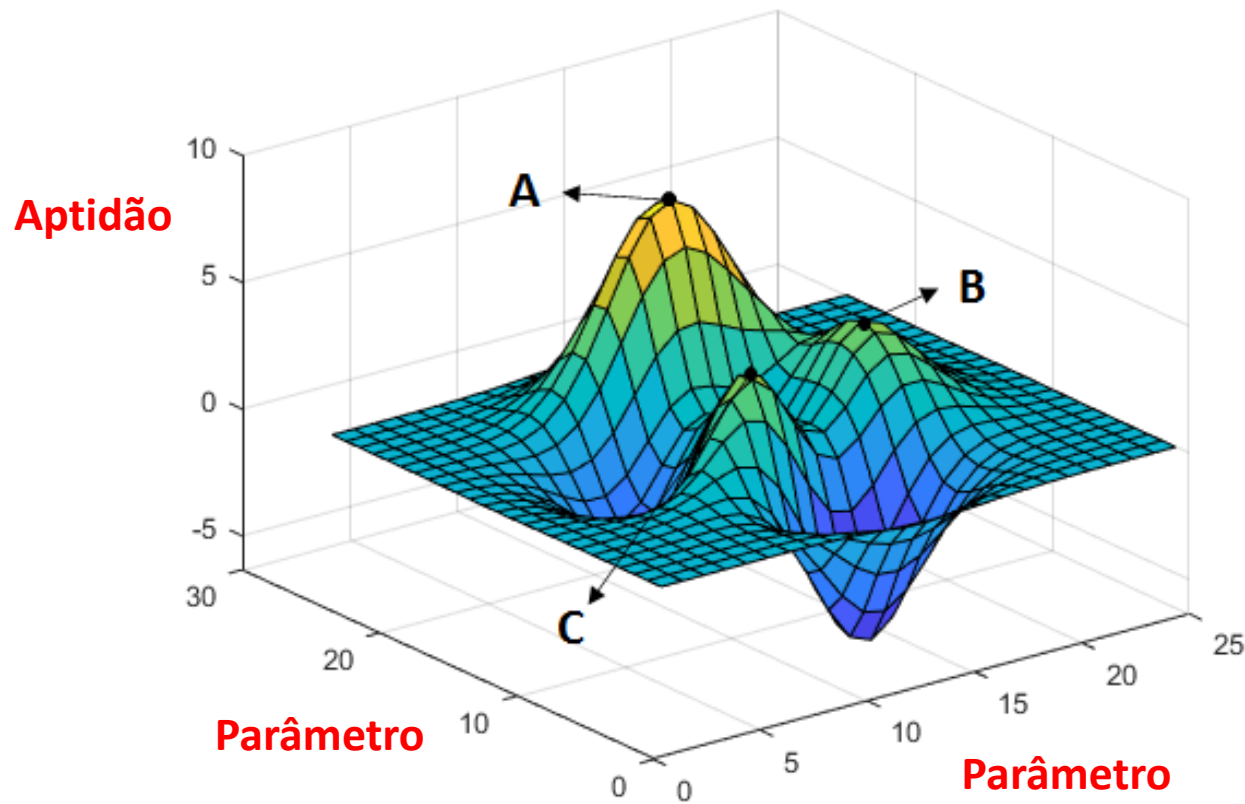


Introdução





Introdução





Introdução

Os AGs não têm conhecimento específico do problema a ser resolvido, tendo como guia apenas a função objetivo.

São métodos codificados, pois não trabalham diretamente com o domínio do problema e sim com representações dos seus elementos.



Quando usar um AG?

Normalmente (na maioria das vezes), os AGs têm sido mais usados para solução de funções de otimização, nas quais eles vêm se mostrando bastantes eficientes e confiáveis.

Características necessárias:

- a) O espaço de busca (possíveis soluções) do problema em questão deve estar delimitado dentro de uma certa faixa de valores
- b) Deve ser possível definir uma função de aptidão (fitness) que nos indique quão boa ou ruim é uma determinada resposta. Função esta que servirá de métrica para a solução do problema.



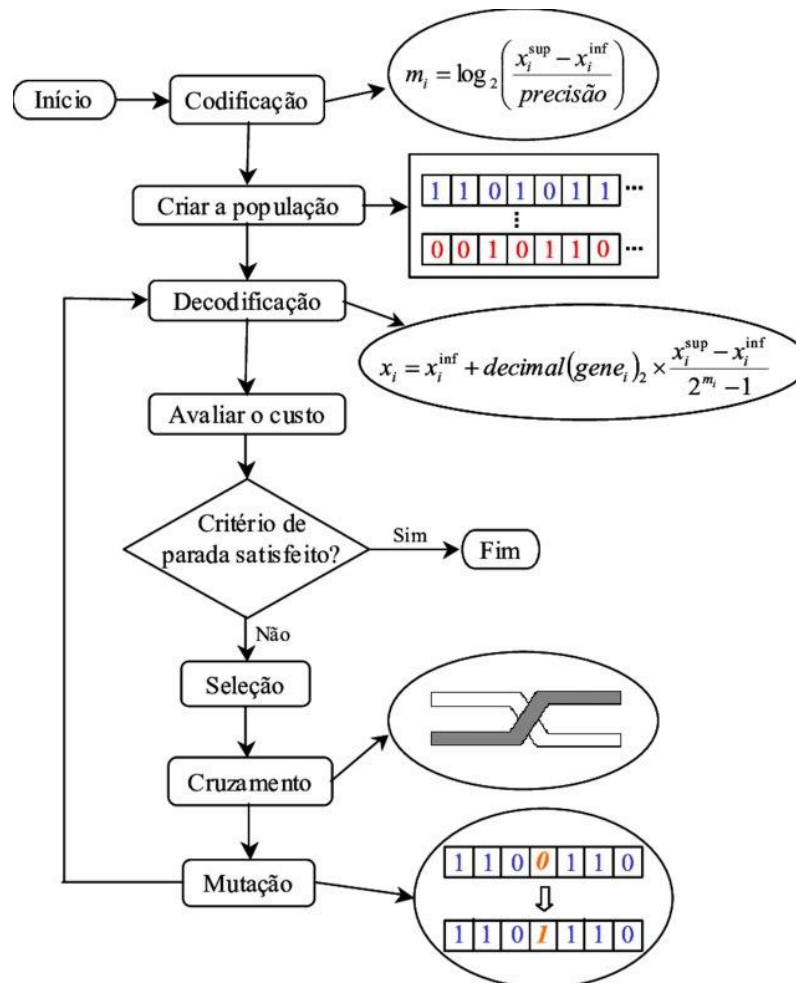
Quando usar um AG?

- c) As soluções devem poder ser codificadas de uma maneira que resulte relativamente fácil a sua implementação no computador

A literatura geralmente cita que os AGs podem ser utilizados para praticamente todo tipo de problema, porém é sempre interessante considerar as características citadas acima para que o desenvolvimento do processo não seja inviável ou mesmo atingir soluções consideradas ruins.



AG Básico



Fonte: SARAMAGO et al. (2008)



Terminologia

Termo	Significado
População	conjunto de possíveis solução para o problema em estudo.
Indivíduo	cada elemento que compõe uma população.
Cromossomo	refere-se ao conjunto de características que representa cada indivíduo.
Gene	é cada uma das características presente no cromossomo de cada indivíduo.
Alelo	é o valor atribuído a cada gene/característica.
Genótipo	é a estrutura que armazena as informações de cada indivíduo.
Fenótipo	é o grau de aptidão do indivíduo em resolver o problema em estudo.
Fitness	é o valor do fenótipo de um elemento.
Geração	corresponde a cada um dos ciclos de uma população.



Terminologia

#Ind	X	Y	Z	Fitness
1	31	12	20	21935
2	36	20	11	45725
3	32	17	17	28144
4	13	9	9	1549
...
50	8	1	1	512



Terminologia

#Ind	X	Y	Z	Fitness
1	31	12	20	21935
2	36	20	11	45725
3	32	17	17	28144
4	13	9	9	1549
...
50	8	1	1	512

População



Terminologia

Indivíduo

#Ind	X	Y	Z	Fitness
1	31	12	20	21935
2	36	20	11	45725
3	32	17	17	28144
4	13	9	9	1549
...
50	8	1	1	512



Terminologia

#Ind	X	Y	Z	Fitness
1	31	12	20	21935
2	36	20	11	45725
3	32	17	17	28144
4	13	9	9	1549
...
50	8	1	1	512

Cromossomo



Terminologia

Genes

#Ind	X	Y	Z	Fitness
1	31	12	20	21935
2	36	20	11	45725
3	32	17	17	28144
4	13	9	9	1549
...
50	8	1	1	512



Terminologia

Alelos

#Ind	X	Y	Z	Fitness
1	31	12	20	21935
2	36	20	11	45725
3	32	17	17	28144
4	13	9	9	1549
...
50	8	1	1	512



Terminologia

Genótipo

#Ind	X	Y	Z	Fitness
1	31	12	20	21935
2	36	20	11	45725
3	32	17	17	28144
4	13	9	9	1549
...
50	8	1	1	512



Terminologia

Fenótipo

#Ind	X	Y	Z	Fitness
1	31	12	20	21935
2	36	20	11	45725
3	32	17	17	28144
4	13	9	9	1549
...
50	8	1	1	512



Terminologia

Fitness

#Ind	X	Y	Z	Fitness
1	31	12	20	21935
2	36	20	11	45725
3	32	17	17	28144
4	13	9	9	1549
...
50	8	1	1	512



Terminologia

Geração

#Ind	X	Y	Z	Fitness
1	31	12	20	21935
2	36	20	11	45725
3	32	17	17	28144
4	13	9	9	1549
...
50	8	1	1	512



Representação

Binária (clássica)

Os elementos (seus genes) são representados através de cadeias binárias. As etapas seguintes devem levar em conta tal representação. Isso é visto na função de fitness, cruzamento e mutação

Real

O elementos são representados por valores literais como elementos do tipo inteiro ou real



Inicialização

- Inicialmente uma população de n indivíduos é criada. Cada um destes indivíduos representa uma possível solução, viável ou não, para o problema em questão, ou seja, um ponto no espaço de soluções.
- Geralmente estes indivíduos recebem valores aleatórios, mas caso o projetista tenha um conhecimento considerável do problema a ser abordado ele pode fazer com que estes indivíduos iniciais (população inicial) receba uma gama de valores direcionados, ou seja, recebe valores que não se apresentaram absurdos ao contexto do problema.



Inicialização

- Por exemplo, digamos que estamos trabalhando com um problema que visa encontrar a menor distância entre duas cidades, cada indivíduo representa uma distância, seria indesejável que os mesmos recebam distâncias negativas já que distâncias negativas não são possíveis neste caso.
- O projetista pode especificar, por exemplo, que as distâncias sejam inferiores a um limite...



Cálculo da Aptidão (Fitness)

- Neste passo são calculados os valores de aptidão para cada um dos n indivíduos da população. É comum que esta aptidão seja calculada através da função objetivo, que depende diretamente das especificações do projeto.
- Após o cálculo os indivíduos são ordenados conforme sua aptidão.
- Normalmente envolve a necessidade da decodificação dos indivíduos para outra representação para poder calcular o fitness.



Cálculo da Aptidão (Fitness)

- A função é totalmente dependente do problema a ser resolvida
- O resultado da função de fitness é usado para estimar o grau de competência daquele indivíduo para resolver o problema (aptidão)
- O valor obtido para o fitness pode ser usado em etapas seguintes como o Cruzamento e o Elitismo



Seleção

Segundo SCHNEIDER (1998) a ideia principal do operador de seleção, em um algoritmo genético, é **oferecer aos melhores indivíduos da população corrente preferência para o processo de reprodução**, permitindo que estes indivíduos possam passar as suas características às próximas gerações. Isto funciona como na natureza, onde os indivíduos altamente adaptados ao seu ambiente possuem naturalmente mais oportunidades para reproduzir do que aqueles indivíduos considerados mais fracos.



Seleção

Nesta fase, os indivíduos que se mostraram mais aptos da geração atual são utilizados para gerar uma nova população através do cruzamento, ao menos teoricamente, visto que alguns métodos não necessariamente selecionam apenas os melhores elementos de cada geração.

Amostragem direta

O conjunto de indivíduos representantes da geração é selecionado baseados em um critério fixo. Pode ser visto como escolha “a dedo” ou “os n melhores”



Seleção

Amostragem aleatória simples ou equiprovável

Todos os elementos possuem a mesma chance de serem escolhidos para compor o conjunto que gerará a prole seguinte

Seleção por rank

Mistura entre amostragem direta e aleatória.

Seleciona-se n indivíduos onde todos têm a mesma chance de serem escolhidos

Dentre este n escolhe-se aquele com maior aptidão



Seleção

Amostragem estocástica

A chance de cada indivíduo ser selecionado é diretamente proporcional ao valor de seu fitness. Um método de seleção, baseado no mecanismo de amostragem estocástico, bastante conhecido é o Universal ou “Por roleta” proposto por GOLDBERG em 1989

O método é considerado simples, pois consiste em criar uma roleta na qual cada cromossomo possui um segmento proporcional à sua aptidão

Estratégia bastante usada na literatura

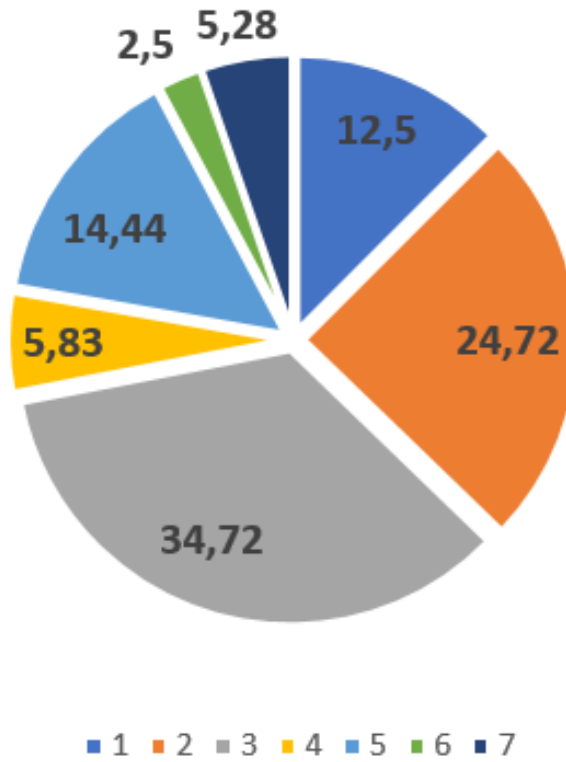


Seleção

Indivíduo	Fitness	% do total
1	45	12,5
2	89	24,72
3	125	34,72
4	21	5,83
5	52	14,44
6	9	2,5
7	19	5,28
Total	360	100



Seleção





Seleção

Tratamentos

- Problema de Minimização

Exemplo:

- Minimizar $Z = x^2 + 12y$
- Em que $x \in [0,100]$ e $y \in [0,100]$

- Problemas que permitem fitness negativo

Exemplo:

- Minimizar $Z = x^2 - y$
- Em que $x \in [0,100]$ e $y \in [0,100]$

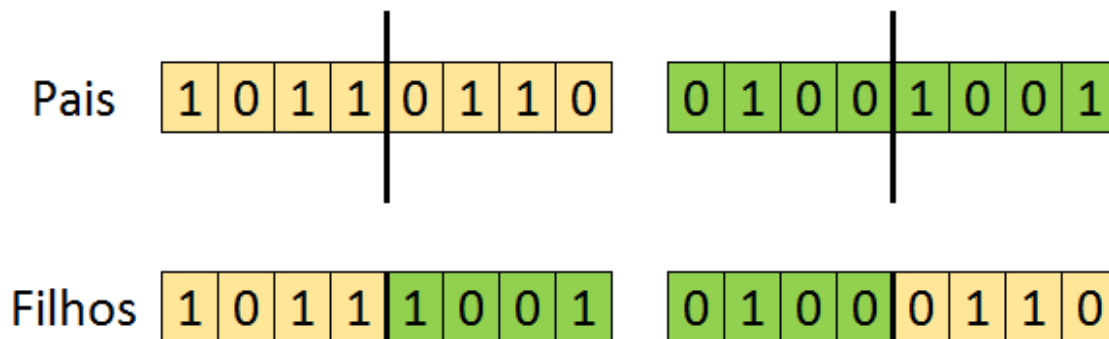


Cruzamento

Após selecionados dois elementos pais, realiza-se o cruzamento entre seus cromossomos.

Na codificação **binária** tal operação é realizada pela troca de segmentos de bits entre os elementos

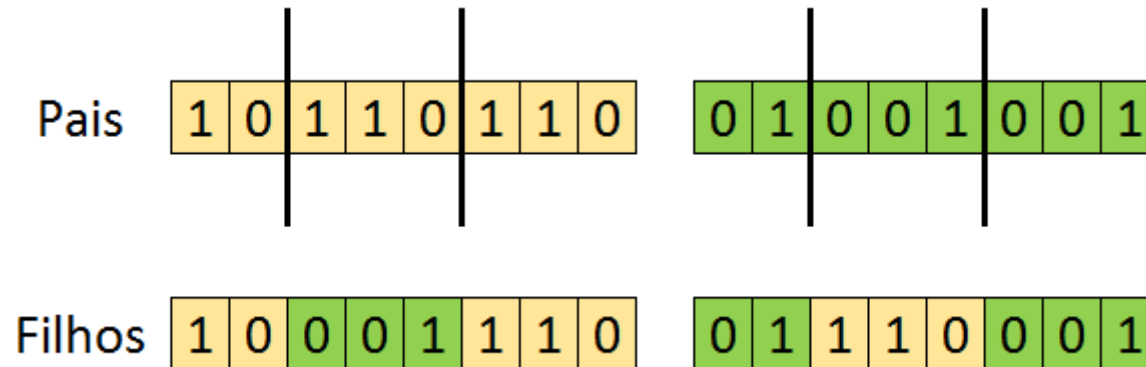
Cruzamento de um ponto:





Cruzamento

Cruzamento de dois pontos:





Cruzamento

Cruzamento de pontos aleatórios

A posição (ou posições) de troca dos segmentos é definida de forma aleatória, variando para cada operação de cruzamento.

Cruzamento uniforme

A posição (ou posições) de troca de segmentos é definida à priori e não varia ao longo do processo. Funciona como uma espécie de “máscara”.



Cruzamento

Cruzamento Uniforme

Pais	1	0	1	1	0	1	1	0	0	1	0	0	1
Máscara	1	1	2	1	2	2	2	1					
Filho	1	0	0	1	1	0	0	0					



Cruzamento

Cruzamento de com representação **real**: neste caso são aplicados operadores distintos, baseados diretamente nos valores dos pais

Média simples

$$F_1 = \frac{(P_1 + P_2)}{2}$$

Média geométrica

$$F_1 = \sqrt{P_1^2 * P_2^2}$$



Cruzamento

Aritmético

$$F_1 = \beta * P_1 + (1 - \beta) * P_2$$

$$F_2 = \beta * P_2 + (1 - \beta) * P_1$$

em que $\beta \in U[0,1]$

BLX- α

$$F_1 = P_1 + \beta(P_2 - P_1)$$

em que:

- $\beta \in U[-\alpha, 1 + \alpha]$
- α é um pequeno valor que estende os limites para a definição de F_1



Cruzamento

Heurístico

$$F_1 = \begin{cases} P_1 + r(P_1 - P_2) & \text{se } f(P_1) > f(P_2) \\ P_1 + r(P_2 - P_1) & \text{se } f(P_2) > f(P_1) \end{cases}$$

em que $r \in U[0,1]$

Se for um problema de minimização, basta inverter a interpretação dos testes lógicos...



Cruzamento

Taxa de Cruzamento

Normalmente varia entre 60% (0,6) e 90% (0,9)

Sorteia-se um valor α no intervalo $[0,1]$

Se α for menor que a taxa adotada, o cruzamento é realizado, gerando um ou dois filhos que farão parte da geração seguinte.

Se α for maior que a taxa o cruzamento não é realizado e um ou os dois pais vão a geração seguinte.



Mutação

A mutação é aplicada aos cromossomos dos filhos.

O operador de mutação é aplicado aos indivíduos com uma probabilidade dada por uma taxa de mutação definida pelo projetista.

O cromossomo tem todos seus genes percorridos. Cada um dos genes pode ser ou não mutado, dependendo diretamente do resultado do sorteio.



Mutação

Filho 1

1	0	0	0	1	1	1	0
---	---	---	---	---	---	---	---



Filho 1

1	1	0	1	1	1	0	0
---	---	---	---	---	---	---	---

Filho 2

0	1	1	1	0	0	0	1
---	---	---	---	---	---	---	---



Filho 2

1	1	1	0	0	0	0	1
---	---	---	---	---	---	---	---



Mutação

No caso da representação real, a mutação implica em uma variação controlada sobre o valor (gene) que representa cada filho.

Mutação Uniforme

consiste em substituir o gene selecionado por outro gerado aleatoriamente, segundo uma distribuição uniforme, entre os limites mínimo e máximo

Mutação gaussiana

consiste em substituir o gene selecionado por outro gerado a partir da distribuição $N(F_i, \sigma^2)$ em que:

- σ^2 corresponde a uma variância definida pelo projetista
- O valor de σ^2 pode ir decaindo ao longo das gerações



Mutação

Mutação creep

consiste em acrescentar ou subtrair do gene selecionado um valor aleatório obtido de uma distribuição $N(0, \sigma^2)$ considerando para σ^2 um valor pequeno

Mutação Não-uniforme

consiste em substituir o gene selecionado por outro gerado aleatoriamente, segundo uma distribuição não-uniforme (Exponencial, Bernoulli, Qui-quadrado, Geométrica), entre os limites mínimo e máximo



Mutação

Taxa de Mutação

Normalmente varia entre 1% (0,01) e 5% (0,05)

Sorteia-se um valor α no intervalo $[0,1]$

Se α for menor que a taxa adotada, a mutação é realizada para aquele gene em questão. Se α for maior que a taxa a mutação não é realizada.

O processo é repetido para todos os genes dos filhos.



Elitismo

O elitismo é uma técnica utilizada para melhorar a convergência dos algoritmos. A técnica consiste em se escolher o melhor (ou melhores) indivíduo de cada geração e passá-lo à geração seguinte sem que o mesmo (ou mesmos) sofra cruzamento e mutação, para que conserve suas características consideradas boas. A utilização do elitismo faz com que o algoritmo convirja mais cedo, principalmente pois evita que os elementos mais aptos sejam perdidos ou modificados.



Parâmetros Genéticos

Tamanho da População: O tamanho da população estabelece o número de cromossomos na população, o número de elementos de cada geração. Afeta diretamente o desempenho geral e a eficiência dos AG's.

Trabalhando com uma população de poucos indivíduos o desempenho pode ser comprometido visto que o espaço de busca coberto será pequeno. Já uma população grande oferece uma cobertura representativa do domínio do problema e ainda evita o problema de uma convergência prematura para soluções locais. Porém, trabalhar com uma população de tamanho considerável acarreta em uma necessidade maior de recursos computacionais e também de um consumo de tempo maior.



Parâmetros Genéticos

Taxa de Cruzamento: A rapidez com que novas estruturas são introduzidas na população depende da taxa de cruzamento. Quanto maior for esta taxa, mais rapidamente novas estruturas serão introduzidas.

Porém, se esta for muito alta, a maior parte da população será substituída, e pode ocorrer perda de estruturas de alta aptidão. Com um valor baixo, o algoritmo pode tornar-se muito lento, demorando para convergir.



Parâmetros Genéticos

Taxa de Mutação: é responsável por determinar a probabilidade em que uma mutação ocorrerá. Uma baixa taxa de mutação evita que uma dada posição entre em estagnação, possuindo sempre o mesmo valor.

Com uma taxa muito alta a busca tende a se tornar estritamente aleatória, além de aumentar muito a chance de que uma boa solução do problema seja destruída. A melhor taxa de mutação varia de acordo com o problema em questão, mas acredita-se que para a maioria dos casos.



Critérios de Parada

- Número máximo de gerações
- Função objetivo já ter alcançado o valor ótimo (só é possível se tal valor for conhecido)
- Convergência na função objetivo: depois de várias gerações os valores da função objetivo não mudam mais.
 - Pode ter chego à melhor solução ou a um máximo local



Bibliografia

CK-12 FOUNDATION. Theory of Evolution. Disponível em <https://tinyurl.com/4yt9bask>. Acesso em 15/09/2022.

KHAN ACADEMY. Espécies & especiação. Disponível em <https://pt.khanacademy.org/science/biology/her/tree-of-life/a/species-speciation>. Acesso em 05/05/2022.

NUNES, Teresa. Como se formam novas espécies? Disponível em <https://pontobiologia.com.br/como-se-formam-novas-especies/> Acesso em 05/05/2022.

SARAMAGO, Simone; STEFFEN JR, Valder; & SILVA, Jefferson; Saramago, Sezimaria, F. P. (2008). Planejamento de experimentos e otimização de sistemas mistos. FAMAT em Revista, 11, p.231-246.

SCHNEIDER, A. M. Algoritmo Adaptativo Genético para Acompanhamento da Trajetória de Alvos Móveis. - Dissertação de Mestrado - Porto Alegre: Instituto de Informática - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1998.