Fundamentele Matematice ale Algoritmilor Genetici

Asist. univ. dr. Mihai Tudor

Departamentul de Matematică, Universitatea din Craiova, România
Specializarea Matematică-Informatică

Aspecte introductive

Algoritmii genetici sunt o clasă de algoritmi de optimizare inspirați din procesele evolutive naturale. Din punct de vedere matematic, aceștia operează cu:

- ✔ Spații de căutare (search spaces);
- ✔ Funcții de fitness (objective functions);
- ✔ Populații - mulțimi finite de soluții candidate;
- ✔ Operatori probabilistici - folosiți pentru explorarea spațiului de căutare.

Reprezentarea Matematică a Populației

Definiția 1 (Cromozom/Individ): Un cromozom este o reprezentare codificată a unei soluții candidate, definit matematic ca $x \in \mathcal{X}$, unde $\mathcal{X}$ este spațiul de căutare.

Definiția 2 (Populație):O populație la generația t este o mulțime finită $P(t) = \{x_1^{(t)}, x_2^{(t)}, \ldots, x_n^{(t)}\}$, unde n este dimensiunea populației și $x_i^{(t)} \in \mathcal{X}$.

Reprezentări comune ale cromozomilor

- ✔ Reprezentarea binară: $\mathcal{X} = \{0, 1\}^l$, unde l este lungimea cromozomului;
  - Cromozom: $x = (x_1, x_2, \ldots, x_l)$;
  - Cardinalitatea spațiului: $x_i \in \{0, 1\}, \quad |\mathcal{X}| = 2^l$.
- ✔ Reprezentarea reală: $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d$
  - Cromozom: $x = (x_1, x_2, \ldots, x_d), \quad x_i \in [a_i, b_i] \subset \mathbb{R}$.

Funcția de Fitness și Concepte de Optimizare

Definiția 3 (Funcția de Fitness): Funcția de fitness (funcția obiectiv) este o aplicație $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ care asociază fiecărei soluții candidate o valoare numerică reprezentând "calitatea" acesteia.

Proprietăți Matematice ale funcției obiectiv

- ✔ Funcția obiectiv trebuie să fie măsurabilă pe spațiul $\mathcal{X}$ pentru a permite compararea obiectivă a soluțiilor;
- ✔ Funcția obiectiv trebuie să fie continuă atunci când $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d$;

$$\lim_{x \to x_0} f(x) = f(x_0), \quad \forall x_0 \in \mathcal{X}.$$

- ✔ În problemele complexe de optimizare se preferă folosirea metodelor hibride care combină algoritmii genetici cu metode de optimizare bazate pe gradientul descendent. În acest caz se impune ca funcția obiectiv să fie diferențiabilă;

Tipuri de Funcții Obiectiv

Funcțiile obiectiv sunt de două tipuri:

- ✔ Funcții Unimodale - au un unic punct de optim local;

Exemple:

- Funcția pătratică: $f(x) = -\sum_{i=1}^{d} a_i(x_i - b_i)^2, \quad a_i > 0$;
- Funcția sferică: $f(x) = -\sum_{i=1}^{d} x_i^2$.

- ✔ Funcții Multimodale: - au multiple puncte de optim local;

Exemple:

- Funcția Rastrigin: $f(x) = A \cdot d + \sum_{i=1}^{d}[x_i^2 - A\cos(2\pi x_i)]$;
- Funcția Ackley: $f(x) = -20e^{-0.2\sqrt{\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d} x_i^2}} - e^{\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d}\cos(2\pi x_i)} + 20 + e$.

Probleme de Optimizare

Fie $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ o funcție obiectiv. Definim:

- ✔ Minimul funcției: $\min_{x \in \mathcal{X}} f(x) = \inf\{f(x) : x \in \mathcal{X}\}$;
- ✔ Maximul funcției: $\max_{x \in \mathcal{X}} f(x) = \sup\{f(x) : x \in \mathcal{X}\}$;
- ✔ Argumentul minimului (argmin: $\arg\min_{x \in \mathcal{X}} f(x) = \{x \in \mathcal{X} : f(x) = \min_{y \in \mathcal{X}} f(y)\}$;
- ✔ Argumentul maximului (argmax): $\arg\max_{x \in \mathcal{X}} f(x) = \{x \in \mathcal{X} : f(x) = \max_{y \in \mathcal{X}} f(y)\}$.

Pentru orice problemă de optimizare, avem:

$$f(\arg\min_{x \in \mathcal{X}} f(x)) = \min_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

;

$$f(\arg\max_{x \in \mathcal{X}} f(x)) = \max_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

.

Problema Generală de Optimizare în Algoritmi Genetici

Într-un context cât mai general, algoritmii genetici rezolvă problema:

$$x^* = \arg\max_{x \in \mathcal{X}} f(x)$$

unde:

- ✔ $\mathcal{X}$ este spațiul tuturor cromozomilor posibili;
- ✔ $f(x)$ este funcția obiectiv;
- ✔ x^* este cromozomul optim căutat.

Algoritmul genetic nu va determina exact cromozomul optim. Va oferi o aproximare ”cât mai bună” a acestuia.

$$x_{AG}^{(t)} \approx \arg\max_{x \in \mathcal{X}} f(x),$$

unde x_{AG} este ”cel mai bun” cromozom din generația t.

Echivalența Problemelor de Optimizare

Teoremă (Echivalența Problemelor de Optimizare): *Orice problemă de minimizare poate fi transformată într-o problemă de maximizare echivalentă și invers, în sensul că setul soluțiilor optimale rămâne neschimbat.*

Pașii demonstrației:

Fie $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ o funcție obiectiv și $\mathcal{X}$ spațiu de căutare. Se cere să se determine cromozomul optim x^* astfel încât

$$x^* = \arg\min_{x \in \mathcal{X}} f(x).$$

Ne propunem să transformăm această problemă de minimizare într-o problemă de maximizare.

Fie $x^* \in \arg\min_{x\in\mathcal{X}} f(x)$. Prin definiție, obținem că:

$$f(x^*) \leq f(x), \quad \forall x \in \mathcal{X} \quad (1).$$

Înmulțim ambele părți ale inegalității (1) cu -1:

$$-f(x^*) \geq -f(x), \quad \forall x \in \mathcal{X} \quad (2).$$

Substituind $g(x) = -f(x)$ în inegalitatea (2):

$$g(x^*) \geq g(x), \quad \forall x \in \mathcal{X} \quad (3).$$

Inegalitatea (3) înseamnă exact că x^* este un punct de maxim pentru funcția g, adică:

$$x^* = \arg\max_{x \in \mathcal{X}} g(x).$$

Echivalența Problemelor de Optimizare

Echivalența problemelor de optimizare are o serie de implicații pentru proiectarea algoritmilor genetici.

- ✔ Standardizarea Implementări
  - Putem implementa doar algoritmi de maximizare;
  - Orice problemă de minimizare se transformă prin $g(x) = f(x)$.
- ✔ Consistența Selecției;
  - Întotdeauna selectăm indivizii cu fitness mai mare;
  - Nu trebuie să schimbăm logica în funcție de tipul problemei.
- ✔ Simplificarea Operatorilor;
  - Toți operatorii (selecție, crossover, mutație) funcționează identic;
  - Nu sunt necesare implementări separate.

Operatori de Selecție (probabilistici)

Problema Fundamentală: Algoritmul Genetic (AG) aproximează soluția optimă

$$x^* = \arg\max_{x \in \mathcal{X}} f(x).$$

Întrebare: Cum decidem care cromozomi din generația actuală să folosim pentru a crea generația următoare?

Răspuns: Prin **selecție** — alegem cromozomii care vor fi părinți.

Exemplu Concret: Să presupunem că avem o populație inițială de 4 cromozomi la generația $t = 0$:

Cromozom	Reprezentare	Fitness
x_1	$(1, 0, 1, 1, 0)$	$f(x_1) = 12$
x_2	$(0, 1, 1, 0, 1)$	$f(x_2) = 8$
x_3	$(1, 1, 0, 1, 1)$	$f(x_3) = 18$
x_4	$(0, 0, 1, 0, 0)$	$f(x_4) = 3$

Întrebarea: Care cromozomi să alegem ca părinți pentru generația următoare?

Operatori de Selecție (probabilistici)

Strategii de Alegere

Strategie 1 – Aleatoriu (GREȘIT):

- Alegem aleatoriu: de exemplu x_2 și x_4.
- **Problemă**: Ignorăm complet fitness-ul.

Strategie 2 – Doar cei mai buni (PARȚIAL GREȘIT):

- Alegem doar x_3 (fitness maxim).
- **Problemă**: Pierdem diversitatea.

Strategie 3 – Probabilistic bazat pe fitness (CORECT):

- Cromozomii cu fitness mare au șanse mai mari de selecție.
- Cei cu fitness mic păstrează totuși o șansă mică.

În contextul AG, *supraviețuirea* înseamnă a fi ales ca părinte pentru generația următoare.

- În natură: organismele mai adaptate au șanse mai mari să se reproducă.
- În AG: cromozomii cu fitness mai mare au șanse mai mari să fie aleși.

Implementarea Matematică - Simularea Procesului de Selecție

Pentru populația noastră:

$$f(x_3) = 18 > f(x_1) = 12 > f(x_2) = 8 > f(x_4) = 3.$$

Principiu: Probabilitatea de a fi ales ca părinte trebuie să respecte această ordine:

$$P(x_3) > P(x_1) > P(x_2) > P(x_4).$$

Întrebare: Cum transformăm fitness-ul în probabilități

Răspuns: Vom folosi ca metodă de bază: Normalizarea

Pasul 1: Calculăm suma totală a fitness-urilor.

$$S = 12 + 8 + 18 + 3 = 41.$$

Pasul 2: Calculăm probabilitatea de alegere a fiecărui cromozom. $P(x_i) = \frac{f(x_i)}{S}$.

Cromozom	Fitness	Calcul	Prob.	Procentaj
x_1	12	$12/41$	0.293	29.3%
x_2	8	$8/41$	0.195	19.5%
x_3	18	$18/41$	0.439	43.9%
x_4	3	$3/41$	0.073	7.3%

Implementarea Matematică - Simularea Procesului de Selecție

Întrebare: Cum alegem cromozomii care devin părinți pentru următoarea generație?

Pasul 1: Calculăm probabilitățile cumulate

Probabilitatea cumulată = suma tuturor probabilităților de la început până la cromozomul curent.

Pentru x_1 (primul cromozom):

- Probabilitatea cumulată $= 0 + P(x_1) = 0 + 0.293 = 0.293$
- Intervalul de selecție pentru x_1: $[0, 0.293)$

Pentru x_2 (al doilea cromozom):

- Probabilitatea cumulată $= P(x_1) + P(x_2) = 0.293 + 0.195 = 0.488$
- Intervalul de selecție pentru x_2: $[0.293, 0.488)$

Pentru x_3 (al treilea cromozom):

- Probabilitatea cumulată $= P(x_1) + P(x_2) + P(x_3) = 0.293 + 0.195 + 0.439 = 0.927$
- Intervalul de selecție pentru x_3: $[0.488, 0.927)$

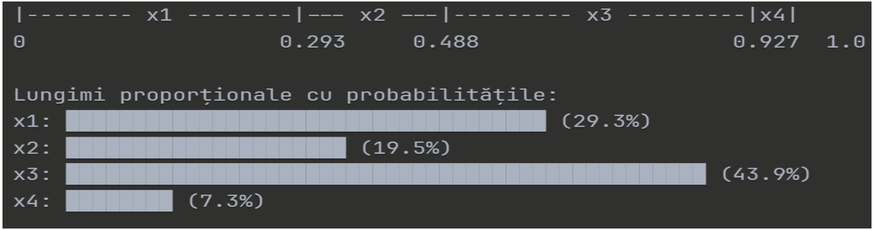
Pentru x_4 (ultimul cromozom):

- Probabilitatea cumulată $= P(x_1) + P(x_2) + P(x_3) + P(x_4) = 0.293 + 0.195 + 0.439 + 0.073 = 1.000$
- Intervalul de selecție pentru x_4: $[0.927, 1.000]$

Implementarea Matematică - Simularea Procesului de Selecție

Întreaga informație dedusă până în prezent poate fi concentrată în următorul tabel:

Cromozom	Probabilitate	Probabilitate Cumulată	Interval de Selecție	Lungimea Intervalului
x_1	0.293	0.293	[0, 0.293)	0.293
x_2	0.195	0.488	[0.293, 0.488)	0.195
x_3	0.439	0.927	[0.488, 0.927)	0.439
x_4	0.073	1.000	[0.927, 1.000]	0.073



Implementarea Matematică - Simularea Procesului de Selecție

Pasul 2: Folosirea intervalelor de selecție determinate pentru a determina părinții viitoarei generați.

- Pentru fiecare cromozom generăm un număr random r din $[0, 1]$.
- Dacă numărul generat se găsește în intervalul de selecție al cromozomului x_i, atunci acesta devine părinte pemtru următoarea generație.

Exemplu: Ne propunem să simulăm selecția părinților pentru următoarea generație, realizand 10 iterații.

Selecția	Număr aleatoriu	Cromozom ales	Motivul
1	0.15	x_1	$0.15 \in [0, 0.293)$
2	0.73	x_3	$0.73 \in [0.488, 0.927)$
3	0.45	x_2	$0.45 \in [0.293, 0.488)$
4	0.82	x_3	$0.82 \in [0.488, 0.927)$
5	0.06	x_1	$0.06 \in [0, 0.293)$
6	0.91	x_3	$0.91 \in [0.488, 0.927)$
7	0.35	x_2	$0.35 \in [0.293, 0.488)$
8	0.55	x_3	$0.55 \in [0.488, 0.927)$
9	0.95	x_4	$0.95 \in [0.927, 1.000]$
10	0.18	x_1	$0.18 \in [0, 0.293)$

Selecția Proporțională - Observații

Cele mai intâlnite probleme pe care le putem intâmpina în implementarea selecți proporționale - metodă folosită în exemplul anterior - sunt:

- Fitness negativ - în acest caz pot fi folosite metode de translație;
- Fitness-uri egale - selecția este uniformă, toți croozomii având șanse egale de a fi selectați;

Presiunea de selecție - cât de mult favorizăm cromozomii cu fitness mare

Presiunea prea Mare - Probleme

- Avantaj: Progres rapid către soluții bune;
- Dezavantaj: Risc să uităm zone bune neexplorate.

Presiunea prea Mică - Probleme

- Avantaj: Explorăm mult din spațiul de căutare;
- Dezavantaj: Progres foarte lent
- **Exemplu:** Dacă probabilitățile sunt aproape egale, alegem aproape aleatoriu.

Echilibrul Ideal

- Favorizăm cromozomii buni, dar nu îi eliminăm pe cei mai slabi;
- Progres constant + păstrarea diversității.


Thank you