# Busca por Extremos de Funções Multidimensionais Utilizando Algoritmo Genético

Davi Valadares Rodrigues Feliciano

Universidade de Brasília - Instituto de Física

3 de maio de 2022

# Motivação

## Problemas de Otimização Numérica

- Ajuste de Funções → Método dos Mínimos Quadrados
- *Machine Learning* → *Fitting* de parâmetros em redes neurais, sistemas de classificação
- Indústria → Otimização de recursos e maximização de lucros
- Física → *Fitting* de curvas de potencial de moléculas diatômicas [2]


Figura: A antena evoluída, assim chamada por ter seu formato calculado por meio de um AG.

# Motivação

## Métodos para Otimização Numérica

- Baseados em Cálculo
  - Indiretos → Solução de $\nabla f = 0$
  - Diretos → Procuram extremos escalando na direção de $\nabla f$. Conhecidos por escalada de morro, ou *hill climbing*
- Enumerativos → Iteração sobre os membros de um espaço de busca finito, ou um espaço discreto infinito
- Procura Aleatória → *Random walks*

# Um Exemplo

Otimização numérica da função

$$f(x,y) = \cos(n\pi r)\exp\left(-\frac{r^2}{\sigma^2}\right)$$

- Sabemos que exitem máximos em $2k/n$ com $k \in \mathbb{N}$
- O máximo global ocorre quando $k = 0$

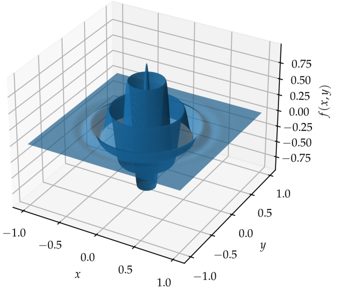



Figura: Gráfico de $f(x,y)$ com $n = 9$ e $\sigma = 0,4$

## Um Exemplo

- Algoritmos do tipo *hill climbing* só teriam sucesso em $r < 1/n$, em $\approx 1\%$ das vezes, no caso ilustrado
- Os máximos locais atuariam como barreiras protegendo o máximo local

Como criar um algoritmo para otimização numérica que contorna essas dificuldades?

# O Algoritmo Genético

## Vantagens

- Não é limitado por restrições no espaço de busca — não depende da existência de derivada ou continuidade.
- A função objetivo pode ser aleatória ou mesmo depender do tempo
- É facilmente paralelizável
- São simples, do ponto de vista computacional
- Permite o mapeamento também dos máximos locais

# O Algoritmo Genético

## Em que consiste um AG?

- Codificação da informação de um elemento do espaço de busca em um número de cromossomos
- Um conjunto de cromossomos qualifica um indivíduo
- Esses cromossomos são compostos por um número de genes, que podem ter como valores os alelos 0 ou 1
- Um conjunto de indivíduos similares qualifica uma população

# O Algoritmo Genético

## Em que consiste um AG?

- Um mecanismo de seleção probabilístico escolhe um grupo de indivíduos
- A população evolui com a recombinação desses indivíduos
- Nesse processo, existe uma probabilidade de mutação nos genes
- A tendência será de que, após um longo período, os melhores indivíduos da população representem a solução do problema

# O Algoritmo Genético

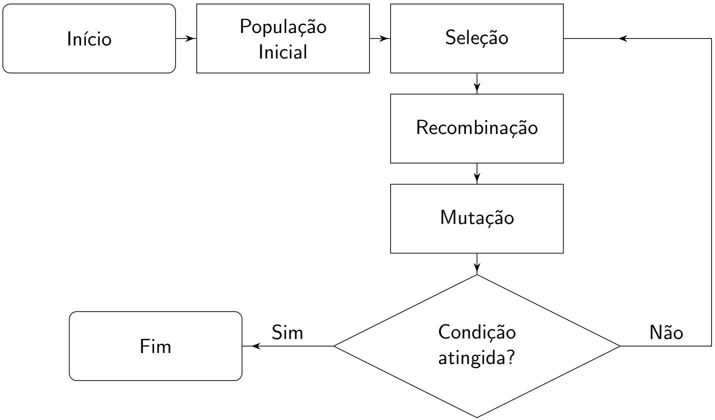



Figura: *Flowchart* geral de um algoritmo genético.

# Codificação

Vamos considerar uma função objetivo $f : \mathcal{C} \subseteq \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$

- A população é representada por $n$ matrizes

$$A_k = \begin{bmatrix} a_{11}^{(k)} & \cdots & a_{1m}^{(k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{l1}^{(k)} & \cdots & a_{lm}^{(k)} \end{bmatrix}$$

- As respectivas $n$ posições são

$$X_k = \left(x_1^{(k)}, \cdots , x_j^{(k)}, \cdots , x_m^{(k)}\right)$$

# Codificação

- O espaço de busca é $S \subseteq \mathcal{C}$ tal que

$$\mathcal{S} = \bigtimes_{j=1}^{m} [x_j^{(min)}\ ,\ x_j^{(max)}]$$

- $l$ bits representam inteiros em $[0, 2^l - 1)$
- As posições são obtidas dos cromossomos por

$$x_j^{(k)} = x_j^{(min)} + \frac{x_j^{(max)} - x_j^{(min)}}{2^l - 1} \sum_{i=1}^{l} a_{ij}^{(k)} 2^{i-1}$$

# Codificação

- A relação inversa é obtida por

$$\sum_{i=1}^{l} a_{ij}^{(k)} 2^{i-1} = \left\lfloor \frac{(x_j^{(k)} - x_j^{(min)})(2^l - 1)}{x_j^{(max)} - x_j^{(min)}} \right\rfloor$$

# Seleção

- Função Desempenho $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ tal que

$$P_k = \frac{g(f(X_k))}{\sum_{j=1}^{n} g(f(X_j))}$$

- A função usada foi um escalamento linear

$$g(x) = ax + b$$

$$a = \begin{cases} \frac{\mu(h-1)}{f_{max}-\mu}, & \text{se } f_{min} > \frac{h\mu - f_{max}}{h-1} \\ \frac{\mu}{\mu - f_{min}}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$b = \begin{cases} \frac{\mu(f_{max}-h\mu)}{f_{max}-\mu}, & \text{se } f_{min} > \frac{h\mu - f_{max}}{h-1} \\ -\frac{\mu f_{min}}{\mu - f_{min}}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

# Seleção

- Caso $g(f(X_k)) < 0$ para algum $k$, fazemos $g = 0$ para os indivíduos correspondentes
- É feito o sorteio de $n/2$ indivíduos por meio de uma roleta simples
- Os indivíduos selecionados são

$$S = \left\{ S_1 \ , \ \cdots \ , \ S_k \ , \ \cdots \ , \ S_{n/2} \right\}$$

## Motivos para essa escolha de $g$

- Evita a convergência prematura da população
- Aumenta a variabilidade genética
- Aumenta a probabilidade de que vários máximos locais coexistam na população com o máximo global

# Recombinação e Mutação

- Cada cromossomo terá dois pontos de recombinação
- Sorteio de $\alpha_j^{(k)}$ e $\beta_j^{(k)}$ tais que $0 \leq \alpha_j^{(k)} < \beta_j^{(k)}$ e $\alpha_j^{(k)} \leq \beta_j^{(k)} < l$ onde $j = 0, 1, \ldots, m$ e $k = 0, 2, 4, \ldots, n/2 - 2$
- Com esses valores, criamos a máscara de combinação

$$r_{ij}^{(k)} = \begin{cases} 0\ , & \text{se } i \leq \alpha_j^{(k)} \text{ ou } i > \beta_j^{(k)} \\ 1\ , & \text{caso contrário} \end{cases}$$

- Criamos uma máscara de mutação

$$m_{ij}^{(k)} = \begin{cases} 1\ , & \text{se houver mutação} \\ 0\ , & \text{caso contrário} \end{cases}$$

# Recombinação e Mutação

- O conjunto dos indivíduos filhos será

$$S' = \left\{ S'_1 \, , \, \cdots \, , \, S'_k \, , \, \cdots \, , \, S'_{n/2} \right\}$$

$$s'^{(k)}_{ij} = (s^{(k)}_{ij} \wedge r^{(k)}_{ij}) \vee (s^{(k+1)}_{ij} \wedge \neg r^{(k)}_{ij}) \oplus m^{(k)}_{ij}$$

$$s'^{(k+1)}_{ij} = (s^{(k)}_{ij} \wedge \neg r^{(k)}_{ij}) \vee (s^{(k+1)}_{ij} \wedge r^{(k)}_{ij}) \oplus m^{(k)}_{ij}$$

- A população da geração seguinte é $S \cup S'$

# Recombinação e Mutação

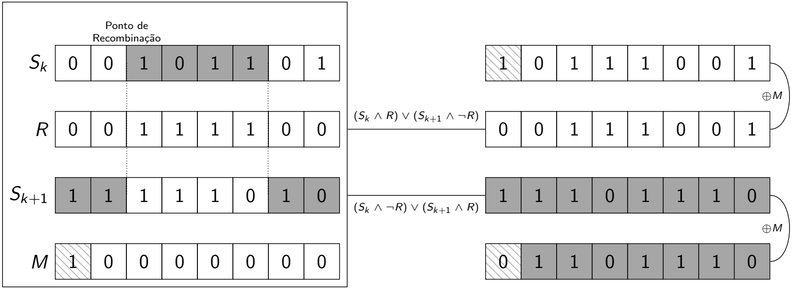



Figura: Diagrama ilustrando — em um caso com $m = 1$ e $l = 8$ — a recombinação entre os indivíduos $S_k$ e $S_{k+1}$ e mutação nos filhos gerados segundo as respectivas máscaras de recombinação e mutação $R$ e $M$.

# Estratégia Elitista

$$S = \left\{ \underbrace{S_\epsilon \ , \ \cdots \ , \ S_\epsilon}_{e_1 \text{ cópias}} \ , \ \overbrace{S_\epsilon \ , \ \cdots \ , \ S_\epsilon}^{e_2 \text{ cópias}} \ , \ \underbrace{S_{e_1+e_2+1} \ , \ \cdots \ , \ S_{n/2}}_{e_3 \text{ cópias dentre os restantes}} \right\}$$

- $S_\epsilon$ é o melhor indivíduo
- As primeiras $e_1$ cópias de $S_\epsilon$ terão probabilidade de mutação $p_1 = 0$
- As $e_2$ cópias de $S_\epsilon$ terão probabilidade de mutação $p_2$
- As $e_3$ cópias de $S_\epsilon$ terão probabilidade de mutação $p_3$

# Estratégia Elitista

## Motivos para o uso de elitismo

- Garante o $S_\epsilon$ na população seguinte
- Mutações de $S_\epsilon$ na geração seguinte
- Filhos de $S_\epsilon$ com outros membros da população
- Ganho de performance em funções comportadas

## Observação

- Essa é apenas uma dentre muitas estratégias [1]
- Os parâmetros devem ser ajustados caso a caso

# Funções de Teste

$$f_1(x, y) = \cos(9\pi r)\exp\left\{-\frac{r^2}{(0,4)^2}\right\}$$

$$r = \sqrt{(x-0,5)^2 + (y-0,5)^2}$$

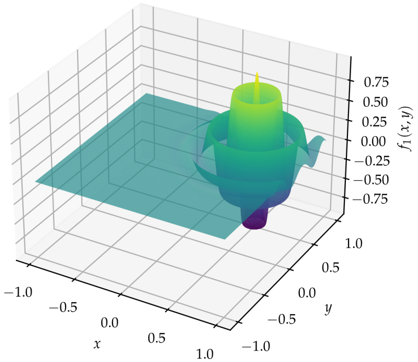



Figura: Gráfico de $f_1(x, y)$.

# Funções de Teste

$$f_2(x, y) =$$
$$+\,0,8 \exp\left\{-\frac{r_1^2}{(0,3)^2}\right\}$$
$$+\,0,88 \exp\left\{-\frac{r_2^2}{(0,03)^2}\right\}$$

$$r_1 = \sqrt{(x-0,5)^2 + (y-0,5)^2}$$

$$r_2 = \sqrt{(x-0,6)^2 + (y-0,1)^2}$$

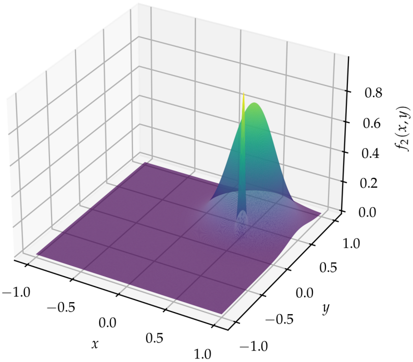
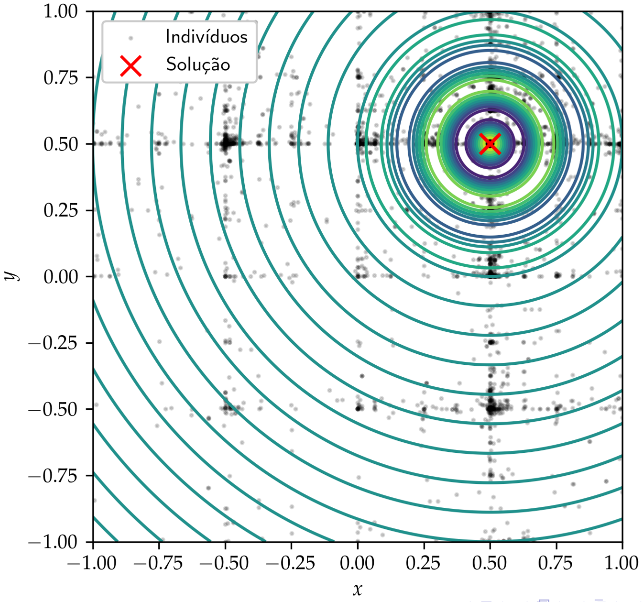
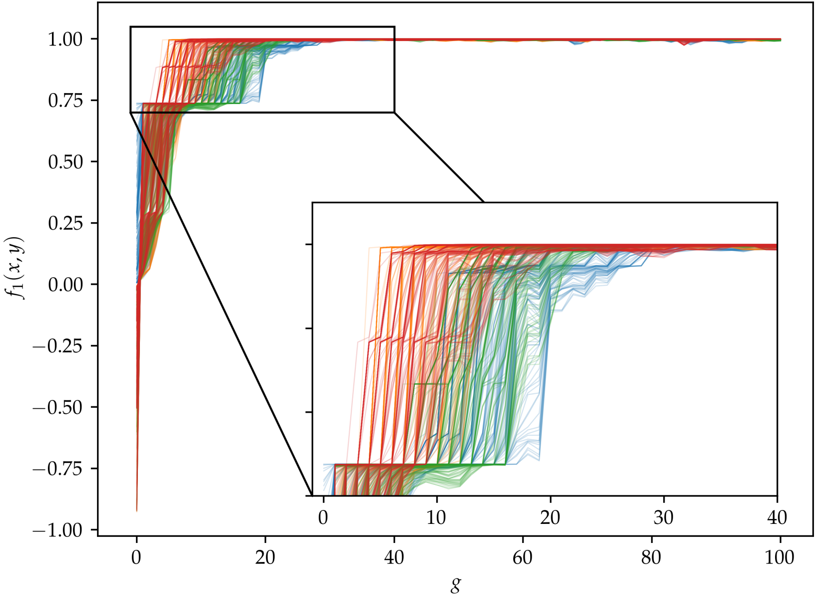


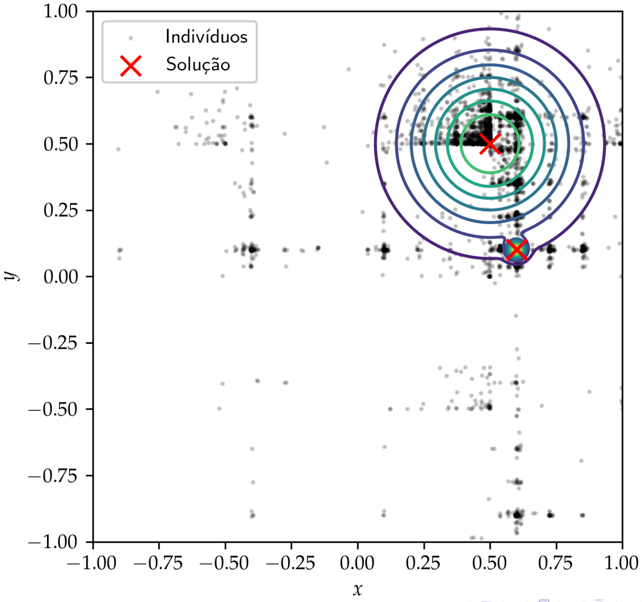

Figura: Gráfico de $f_2(x, y)$.

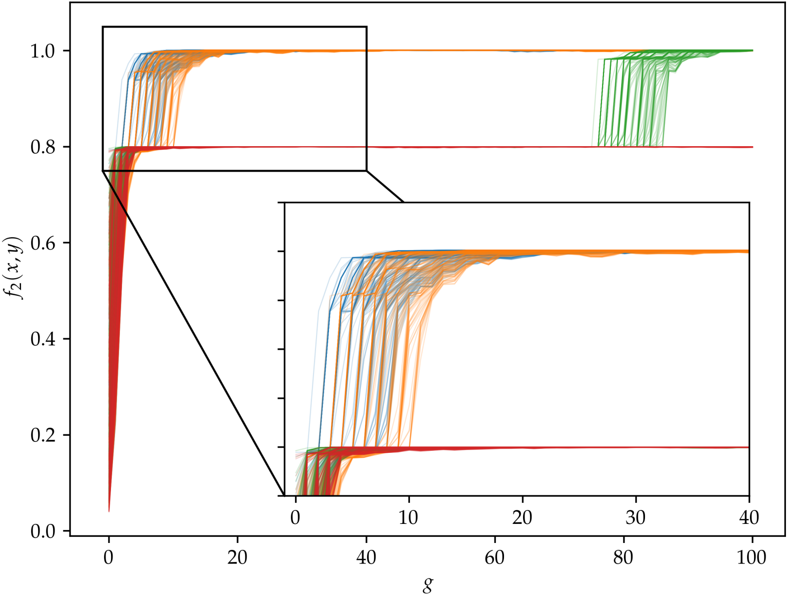
## Configurações Utilizadas

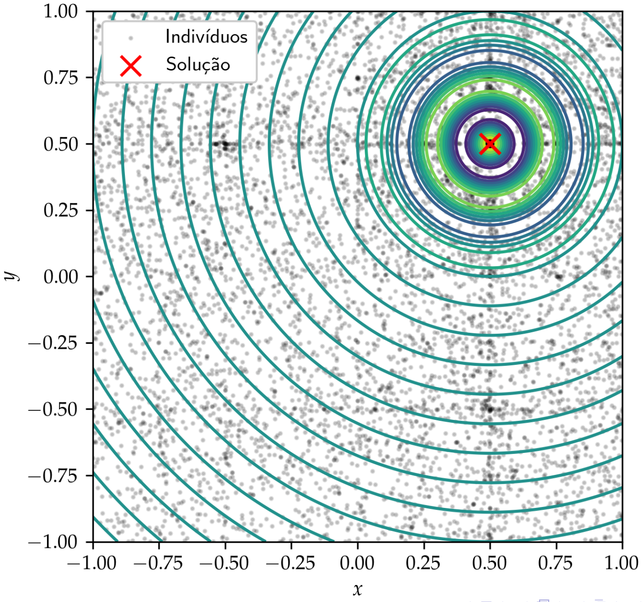
- 8 populações de 1000 indivíduos
- Cromossomos de 32 bits
- Espaço de busca $\mathcal{S} = [-1, 1] \times [-1, 1]$
- Parâmetro da função desempenho $h = 2$
- $e_1 = 4, \ e_2 = 6, \ e_3 = 10$
- $p_2 = p_3 = 5\%$ e $p_2 = p_3 = 20\%$

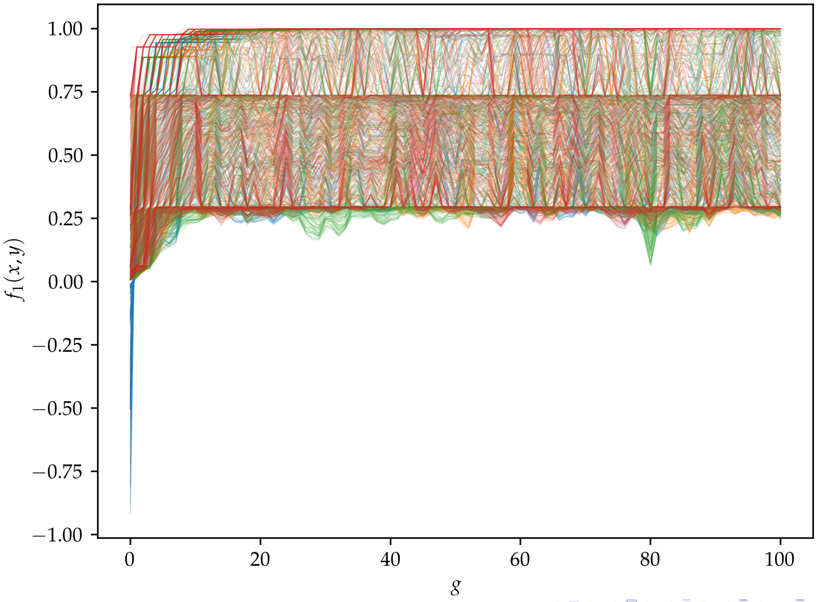

Indivíduos
Solução
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00
y
−1.00
−0.75
−0.50
−0.25
0.00
0.25
0.50
0.75
1.00
x

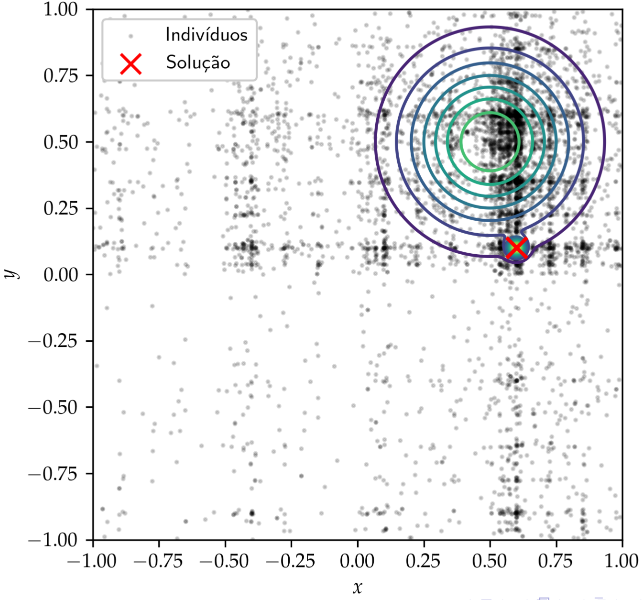

1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00
$f_1(x, y)$
0
20
40
60
80
100
$g$
0
10
20
30
40

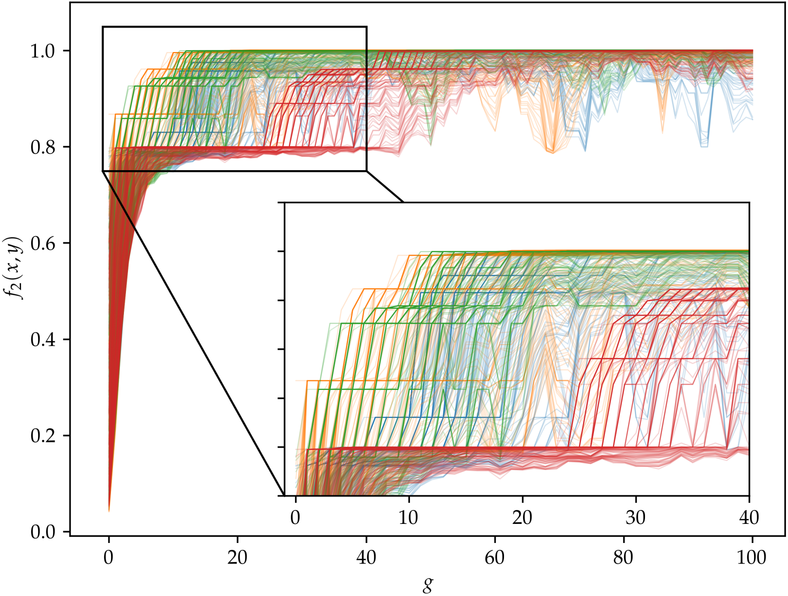

Indivíduos
Solução
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00
y
−1.00
−0.75
−0.50
−0.25
0.00
0.25
0.50
0.75
1.00
x


1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
$f_2(x, y)$
0
20
40
60
80
100
$g$
0
10
20
30
40


Indivíduos
Solução
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00
y
x


1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00
$f_1(x, y)$
0
20
40
60
80
100
$g$


Indivíduos
Solução
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00
y
x


1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
$f_2(x,y)$
0
20
40
60
80
100
$g$
0
10
20
30
40

## Conclusões

- Em todos os casos o máximo global foi localizado
- Os máximos locais também foram localizados
- Uma variabilidade genética foi mantida
- A evolução por 100 gerações de 8 populações em paralelo levou $\approx$ 15 segundos
- Se mostrou escalável: 100 gerações com $10^5$ indivíduos em $\approx$ 1 hora

## O que não foi testado

- Problemas com dimensão superior, como ajuste de curvas com 4 ou mais parâmetros
- Outros valores de $e_1$, $e_2$ e $e_3$

D. E. Goldberg.
*Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*.
Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., USA, 1st edition, 1989.

L. F. Roncaratti, R. Gargano, and G. M. e Silva.
A genetic algorithm to build diatomic potentials.
*Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 769(1-3):47–51, 2006.