Fabricio Kassardjian

Algoritmos Genéticos
Um algoritmo evolucionário para otimização

Brasil

3 de dezembro de 2019

Fabricio Kassardjian

Algoritmos Genéticos
Um algoritmo evolucionário para otimização

Monografia de final de curso, Instuto de Matemática e Estatística - USP, Matemática Aplicada

Universidade de São Paulo – USP

Insituto de Matemática e Estatística

Bacharelado em Matemática Aplicada e Computacional

Orientador: Anatoli Iambartsev

Brasil

3 de dezembro de 2019

Resumo

O presente trabalho explora uma alternativa de algoritmo de busca de soluções para maximizar ou minimizar funções. Esse algoritmo é baseado na biologia, no que se refere as teorias da evolução e da genética, e é conhecido por algoritmo genético, que pode ser classificado como um método de busca aleatório guiado. No Capítulo 1 serão apresentados os conceitos básicos da inspiração do algoritmo e uma breve história do desenvolvimento dele.

No Capítulo 2 serão explorados os conceitos básicos do algoritmo, definindo seus operadores e funcionamento básico. Também será exposto alguns conceitos teóricos sobre o algoritmo, e algumas análises feitas sobre seu funcionamento.

Para a implementação e testes, foram selecionados dois problemas, o primeiro é uma função bivariada, e será explorado no começo do Capítulo 3 sua implementação e alguns testes. Essa primeira função à ser maximizada tem o objetivo de demonstrar os funcionamentos básicos do algoritmo em operação.

Na sequência do Capítulo 3, é introduzido o modelo de Ising que será a base para as demais implementações e testes. Esse modelo é muito utilizado em mecânica estatística e também em estudos de fenômenos colaborativos. Nesse trabalho será utilizado como um problema de minimização na busca do estado que deixará o modelo com a menor energia. Além disso serão explorados os vários parâmetros do algoritmo e como influenciam o resultado.

Por fim, no Capítulo 4 serão avaliados alguns aprendizados dos testes executados e comentado quais novos desafios sobre o algoritmo genético podem ser testados em trabalhos futuros.

Palavras-chave: Algoritmos Evolucionários. Algoritmos Genéticos. Otimização. Modelo de Ising.

Abstract

The present work explores an alternative solution search algorithm to maximize or minimize functions. This algorithm is based on biology, on the topics of theories of evolution and genetics, and is known as the genetic algorithm, which can be classified as a guided random search method. In chapter 1 the basic concepts that gives inspiration to the algorithm will be presented and a brief history of its development.

In chapter 2 will be explored the basic concepts of the algorithm, defining its operators and basic operation. It will also be exposed some theoretical concepts about the algorithm, and some analyzes made about its operation.

For implementation and testing, two problems were selected, the first is a bivariate function that will be explored at the beginning of chapter 3 its implementation and some tests. This first function to be maximized has the goal to demonstrate the basic functioning of the algorithm operation.

Following chapter 3 is introduced the Ising model that will be the basis for the other implementations and tests. This model is widely used in statistical mechanics and in studies of collaborative phenomena. On this paper will be used as a minimizing problem on the search for the state that the model will present the lowest energy. In addition, the various algorithm parameters and how they influence the outcome will be explored.

Finally, on chapter 4 will be considered some thoughts taken from the tests performed and commented which new challenges about the genetic algorithm can be tested in future works.

Keywords: Evolutionary Algorithms. Genetic Algorithms. Optimization. Ising model.

Lista de ilustrações

Lista de tabelas

Lista de abreviaturas e siglas

EA	*Evolutionary Algorithm* - Algoritmo evolucionário
GA	*Genetic Algorithm* - Algoritmo Genético
NFL	*No-Free-Lunch Theorem* - Teorema da inexistência do almoço grátis
RS	*Random Search* - Busca Aleatória
SGA	*Simple Genetic Algorithm* - Algoritmo Genético Simples

Sumário

1 Introdução

1.1 Algoritmos evolucionários

Os algoritmos evolucionários são um subconjunto da computação evolutiva, sendo essa um conjunto de algoritmos para busca de soluções ótimas globais. A computação evolutiva é baseada na evolução das espécies definida na biologia, e assim os algoritmos evolucionários se baseiam em processos encontrados na natureza de seleção, reprodução e mutação das espécies, com o propósito de otimizar a solução para um problema definido.

Um problema de otimização é definido como maximizar, ou minimizar, $f(x)$ sujeito a $g_i(x) \leq 0$, $i = \{1, \ldots, m\}$, e $h_j(x) = 0$, $j = \{1, \ldots, n\}$ com $x \in \Omega$. A solução maximiza, ou minimiza, o escalar $f(x)$ onde x é um vetor com dimensão n, $x = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ do espaço de soluções Ω. (COELLO; LAMONT; VELDHUIZEN, 2007)

Dessa forma o problema de otimização tem os seguintes componentes:

- Função objetivo $f(x)$: função de avaliação que deve se minimizada ou maximizada;
- As restrições $g_i(x)$ e $h_j(x)$: definem limites para as soluções que são permitidas;
- Espaço de soluções $\Omega \ = \Omega(g_i, h_j)$: conjunto com todas as possíveis soluções para o problema;

De forma sintética pode ser escrito como, sendo a função

$$f : \Omega \to \mathbb{R}$$

e a solução o vetor $x \in \Omega$ tal que

$$\arg\min_{x \in \Omega} f(x)$$

que pode facilmente ser convertido para um problema de maximização usando $-g(x)$

Para atingir esse objetivo, os algoritmos evolutivos trabalham com uma população de indivíduos que indicaremos como soluções candidatas para o problema. Baseado na avaliação de cada individuo com relação ao seu ambiente, em nosso contexto a função de avaliação, e usando operadores definidos para seleção e evolução, a população vai sendo modificada até que se atinja um resultado satisfatório para o problema. Assim como no processo de evolução das espécies definidos por Darwin, que introduziu o conceito de seleção natural através da sobrevivência do mais apto, os indivíduos da população que tem melhores avaliações, ou seja, que melhor se adaptam ao ambiente, possuem mais probabilidade de sobrevivência e assim se reproduzirem.

Existem vários métodos para se otimizar um problema conforme pode ser visto na Figura 1. Existem os métodos enumerativos, que se tornam impraticáveis quando o Ω é muito amplo, pois o algoritmo deve testar todas as soluções possíveis. Os algoritmos determinísticos são os mais eficientes em determinadas condições, definidas pelo comportamento de $f(x)$. Se a função objetivo possui múltiplos máximos (ou mínimos) alguns algoritmos determinísticos, como o *hill-climbing* por exemplo, podem ficar 'presos' em soluções locais e não encontrar a solução global. A última categoria, onde se encontram também os algoritmos evolucionários, são os estocásticos (ou randômicos). Possuem a vantagem de não ficar presos em soluções locais, porém nem sempre obterão a melhor solução.

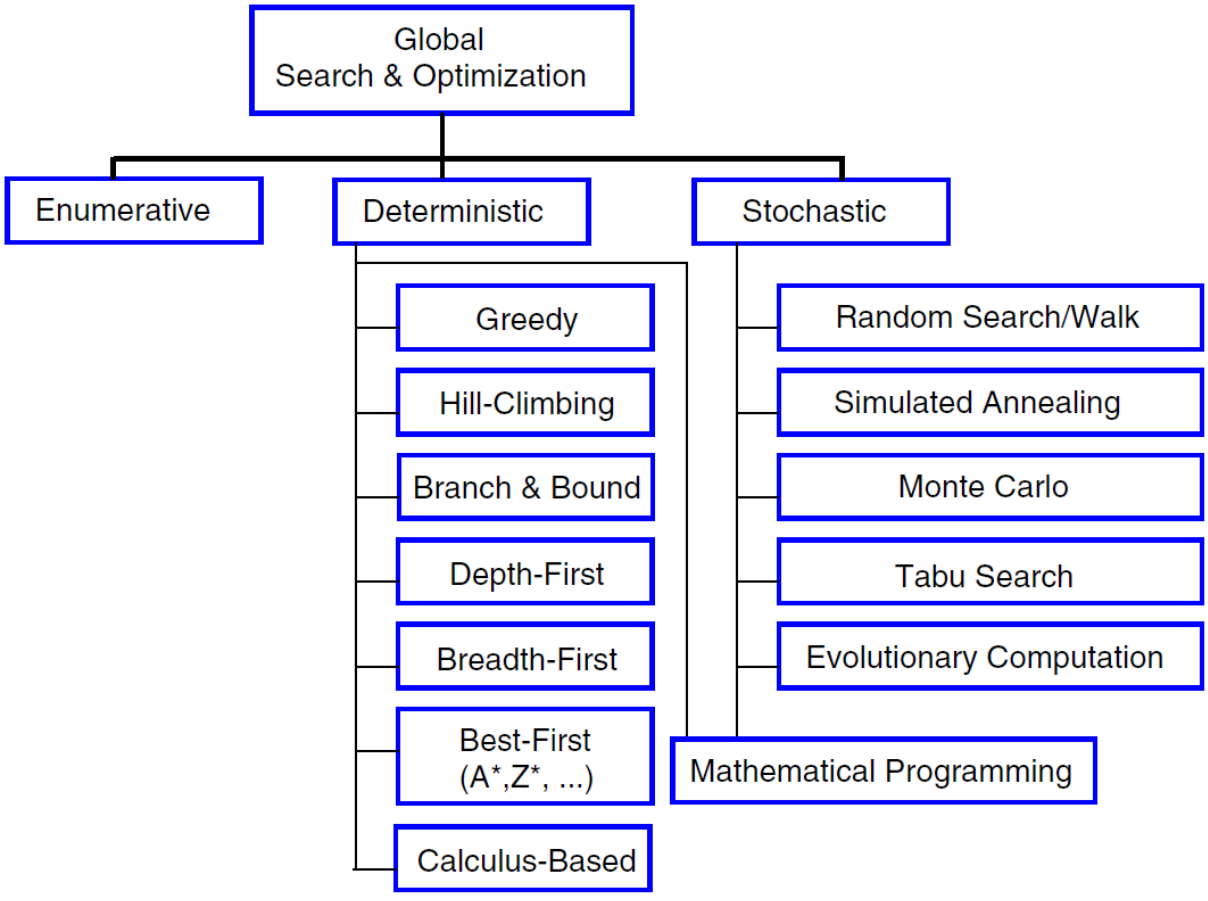


Figura 1 – Técnicas de otimização global - (COELLO; LAMONT; VELDHUIZEN, 2007)

Dentre a categoria dos métodos estocásticos existem os que são completamente aleatórios, como a busca randômica (ou passeio aleatório – *random walk*), e os que são de alguma forma guiado como o método de resfriamento simulado (*simulated annealling*) por exemplo. O algoritmo evolucionário se encaixa nessa ultima definição, onde existem componentes aleatórios atuando na seleção e reprodução dos indivíduos mas de forma guiada pelos resultados da função de avaliação.

De acordo com LINDEN, os Algoritmos Evolucionários são **heurísticas**[1] que não asseguram obter o melhor resultado possível, e além disso o resultado pode diferir entre as execuções do algoritmo.

Para SIVANANDAM; DEEPA, um algoritmo evolucionário são processos estocásticos e iterativos que operam em um conjunto de indivíduos (população). Cada individuo representa uma possível solução para o problema de otimização ou busca, sendo que os parâmetros estão de alguma forma codificados nesses indivíduos. A população inicial é gerada aleatoriamente e são avaliados usando alguma função, que determina o quão bem o indivíduo responde ao problema. Esse valor determina a direção de busca do algoritmo.

1.2 Biologia

A ideia por trás dos algoritmos evolucionários e por consequência do algoritmo genético, é a teoria de evolução das espécies na natureza de **Darwin**, onde a sobrevivência de cada indivíduo é determinada por como ele se adapta ao seu meio. Assim aqueles que conseguiam vantagens sobre os demais por ter uma maior sobrevivência se reproduziam mais, e assim, passavam para as próximas gerações essas características que os diferenciavam. Darwin chamou de seleção natural esse mecanismo da sobrevivência dos mais aptos.

Contudo Darwin não sabia explicar como essa informação era passada dos ancestrais para os descendentes, onde então entram as descobertas de **Mendel**, que através dos conceitos de genética determinava como características eram compartilhadas entre pais e filhos.

A unidade básica de informação é o gene, que é um bloco de sequências de DNA e o conjunto de genes formam o cromossomo. Cada gene tem um *locus*, que define a região dentro do cromossomo onde está localizado, e possui um conjunto de valores possíveis chamados de alelos. Os genes controlam as características do indivíduo, sendo que a expressão dessas no individuo é denominada de fenótipo. Assim um conjunto específicos de genes define o genótipo do indivíduo que está associado a um fenótipo, que apresenta as características codificadas no genótipo e que podem ser modificadas pelo ambiente.

Organismos com cromossomos combinados em pares são chamados de diplóides em contraste com os que não possuem pares, chamados de haplóides. Na natureza a maioria dos seres mais complexos que se reproduzem sexualmente são normalmente diplóides e possuem um ou mais pares de cromossomos sendo que sua quantidade e tamanho dependem de cada ser vivo.

Durante a reprodução, que pode ser de dois tipos, assexuada ou sexuada, ocorre a transmissão da informação. Na reprodução assexuada, o organismo replica a si mesmo,

[1] Heurísticas são algoritmos polinomiais que usualmente tendem a encontrar soluções ótimas ou próximas delas, mas sem garantias

e está mais presente em seres simples. Não apresenta tanta diversidade por não existir combinação de material genético entre dois seres, e fica sujeita apenas a alterações por mutação na cópia.

Na reprodução sexuada de seres diplóides, há presença de dois indivíduos que compartilham seu material genético para formar um novo organismo. No inicio da reprodução, existe a cópia do material genético e recombinação, também chamada de *crossover*(Figura 2). Esse processo é feito com os cromossomos se cruzando um sobre o outro, por isso o termo *crossover*, em um ou mais pontos havendo assim a troca nas sequências de genes. Após feita a recombinação, o material genético é divido em gametas que então são combinados com os gametas do outro pai para formar novamente um cromossomo diplódie completo, gerando assim os novos indivíduos. Para organismos haplóides é feita apenas a combinação das sequencias de cada pai.

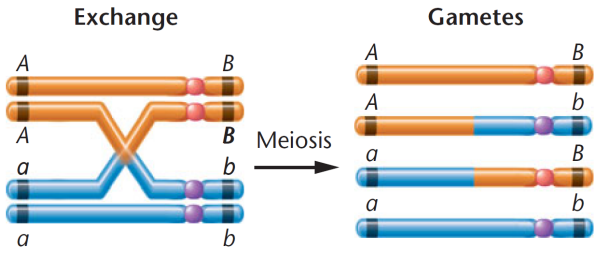


Figura 2 – Exemplo de reprodução com crossover - (KLUG et al., 2011)

Dentro da etapa de replicação do DNA podem ocorrer erros ou alterações influenciadas por fatores externos, gerando assim as mutações. Isso pode ser positivo, negativo ou não influenciar o resultado final, mas é um outro mecanismo que pode determinar a evolução das espécies.

Os genes definem as características dos indivíduos, mas também existe interação entre os genes, chamada de epistasia (*epistasis*), podendo um par de genes mascarar ou modificar a característica final de outro par de genes. (KLUG et al., 2011). Isso é importante do ponto de vista do algoritmo genético pois nem sempre a melhor avaliação estará associada a um único parâmetro, podendo estar associado a uma combinação de parâmetros.

Mendel ainda definiu o conceito de dominância-recessividade em organismos diplóides, assumindo que cada característica é controlada por pares de genes, sendo recebidos um de cada pai. Assim um dos alelos do gene é dominante sobre o outro apresentando a característica final no individuo, e outro alelo será considerado recessivo. Alguns algoritmos genéticos também implementam a lógica para genes dominantes-recessivos.

O processo de seleção acontece então combinando indivíduos que melhor se adaptaram as condições de sobrevivência. Esse seres selecionados devem gerar novos indivíduos

que tenha características ainda melhores. O outro caso pode acontecer também e o novo indivíduo ter piores condições de viver, e assim o processo de seleção natural levará esse espécime a extinção favorecendo outros que se sobressaíram na próxima geração.

A evolução então é um processo adaptativo onde através de mutações e recombinação entre os indivíduos, vão surgindo novas gerações que devem apresentar cada vez mais seres que se adaptam cada vez melhor ao ambiente.

1.3 Surgimento do algoritmo genético

Os algoritmos evolucionários vem sendo estudados a um longo tempo, desde da década de 40 que os cientistas se inspiram na natureza para criar os primeiros passos para a inteligência artificial, passando pela década de 50 onde começam os estudos sobre sistemas adaptativos para gerar soluções candidatas para problemas de difícil solução. Na década de 60 Rechenberg desenvolveu as estratégias evolucionárias (*evolutionary strategies*) usando cromossomos compostos de números reais para estudos com aerofólios. Também apareceu a programação evolucionária, usando estruturas de pequenas máquinas de estados para resolver determinadas tarefas, que evolui para programação genética onde pequenos programas passam a ser as soluções candidatas. Existiram outros trabalhos sobre algoritmos evolucionários, programação evolucionária e algoritmos genéticos nas áreas de otimização e aprendizado de máquina, porém foram os trabalhos de Holland nas décadas de 60 e 70 que consolidou os algoritmos genéticos. (MITCHELL, 1996; LINDEN, 2008)

Alguns autores como MITCHELL, JACOBSON, KWONG; MAN; TANG entre outros citam Holland como criador do algoritmo genético(*Genethic Algorithm* ou GA) em 1975 no livro *"Adaptation in Natural and Artificial Systems"*. Nele Holland formaliza uma estrutura para sistemas adaptativos, e enquadra o GA nessa estrutura como uma abstração para a evolução biológica.

O objetivo de Holland não era fazer algo especifico mas sim analisar os sistemas adaptativos e criar uma solução computacional que simulasse os processos encontrados nos sistemas de adaptação natural. Para isso cria uma abstração da evolução na biologia usando uma estrutural formal teórica que poderia atender diversos sistemas evolutivos e não somente o GA. Na formulação do GA por ele, os cromossomos usam representações binárias e os operadores utilizados são o de crossover, inversão e mutação inspirados na genética. O fato de ter usado cromossomos binários serviu de influência para vários outros estudos que se seguiram, mas será exposto no Capítulo 2 que existem outras formas de representar os cromossomos que dependem exclusivamente do problema a ser estudado.

O algoritmo genético geral proposto por Holland se baseia em uma população de cromossomos com alelos ‘0’ e ‘1’ e com os operadores de crossover, mutação e inversão. As evoluções seguiam os seguintes passos:

1. Seleção de um cromossomo na população de forma estocástica baseada nas avaliações de todos os cromossomos

2. Aplicações dos operadores genéticos sobre uma cópia do individuo selecionado em 1.

3. Seleção de outro cromossomo de forma aleatória com probabilidade igual para todos a ser substituído pelo novo cromossomo gerado em 2

4. Avaliar o novo cromossomo

5. Retornar ao 1

Essa é uma descrição bem resumida sobre o algoritmo e serve de base para as derivações. Por exemplo no caso do uso de um operador de crossover no Item 2, há a necessidade de seleção de outro cromossomo para formar um par e assim gerar uma nova estrutura.

Avaliando o algoritmo, temos alguns itens básicos que estarão presentes. A codificação do cromossomo para representar os parâmetros das soluções para os problemas. Uma população de cromossomos que serão avaliados simultaneamente durante as iterações do processo. A função de avaliação, que baseada nos parâmetros de cada estrutura irá fornecer uma forma de comparar os diversos elementos presentes na população. Os operadores genéticos que serão usados, sendo que podem ser combinados de diversas formas.

De acordo com MITCHELL existem três operadores para o algoritmo mais simples:

Seleção – seleciona cromossomos favorecendo os que tem melhor função de avaliação

Crossover – também chamado de recombinação, combina dois cromossomos na geração de um novo

Mutação – Altera de forma aleatória alguns alelos dos cromossomos, por exemplo em uma codificação binária seria alterar um dos bits do parâmetro.

No Capítulo 2 será explorado com mais detalhes cada um dos operadores. HOLLAND também descreve um operador de inversão, que apesar de garantir uma melhor diversidade genética impõe uma carga computacional grande para os ganhos efetivos, e nos trabalhos mais recentes se tornou um operador quase nunca usado.

Outro teoria que HOLLAND formula sobre os GAs é em relação ao processo de paralelismo intrínseco, sobre a forma do algoritmo trabalhar com esquemas (*schemata*) em vez de testar indivíduos específicos da população. GOLDBERG aborda esse tema com a hipótese dos blocos de construção (*Building block hypothesis*).

1.4 Teorema da inexistência do almoço grátis

Existe um compromisso entre a eficiência de um algoritmo e sua robustez, isto é, ele pode ser muito eficiente para determinados problemas mas serem ineficientes em outros. Isso implica que não existe um algoritmo que seja eficiente para todos os problemas, e então é razoável supor que algoritmo genético tenha melhor eficiência em determinadas situações. Essa falta de um algoritmo universal é comparado em (SPALL, 2003) a busca de uma agulha no palheiro sem nenhum dado sobre sua posição. Para essa situação a busca aleatória seria um dos melhores métodos de busca e em média nenhum outro seria mais eficiente.

Essa falta de um algoritmo universal para solução dos problemas de otimização parte do teorema da inexistência do almoço grátis (NFL - *No-Free-Lunch Theorem*) proposto por **Wolpert**. O NFL ainda afirma que todos os algoritmos de busca tem em média o mesmo desempenho (LINDEN, 2008). O que de fato deve ser chamado a atenção é que apesar do apelo do algoritmo comparado com a evolução da espécies, se houver um método específico para determinado problema definitivamente ele será mais eficiente que o GA.

Na Figura 3 GOLDBERG mostra que no espectro de problemas de busca e otimização, um método especializado em determinado problema sempre terá a maior eficiência e que os métodos aleatórios e enumerativos apesar de serem considerados menos eficientes podem ter desempenho melhor que o método específico em um espectro mais amplo. O método robusto representa um algoritmo idealizado para solução dos problemas em todas as variedades de problemas. Seria interessante ter um algoritmo robusto, mesmo abandonando o pico de eficiência pois assim atenderia uma variedade de problemas. Como tal algoritmo não é conhecido o que pode ser feito é usar métodos híbridos combinando mais de uma técnica.

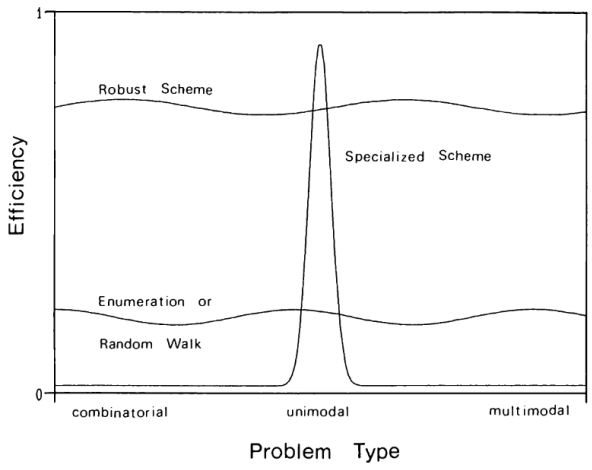


Figura 3 – Exemplo para NFL - (GOLDBERG, 1989)

2 Algoritmos Genéticos

O algoritmo genético (GA) parte de uma população de *cromossomos* que representam as soluções candidatas para o problema de otimização. Cada uma das soluções é avaliada de acordo com critérios inerentes do problema, para posteriormente serem selecionados e combinados de forma a criar novas soluções candidatas.

Já é possível perceber uma das vantagens do algoritmo, ao fazer uma avaliação direta das soluções de forma paralela. Por exemplo em problemas NP-Completos onde são difíceis de se obter soluções numéricas eficientes, mas é possível testar soluções em tempo polinomial, o algoritmo se torna atrativo. O teste de múltiplas soluções facilita o processamento paralelo aumentando a eficiência do algoritmo.

O algoritmo genético mais simples deverá conter pelo menos uma forma de avaliar os elementos da população, uma forma de seleção baseada nas avaliações e operadores genéticos para gerar a nova população.

LINDEN afirma que quanto mais conhecimento especifico sobre o problema for incorporado ao GA, melhor eficiência ele terá. Assim ao definir os operadores que serão utilizados é importante ter em mente que eles devem ser adequados ao problema e não ao contrário.

2.1 Codificação dos genes

Cada cromossomo da população possui uma sequência de genes, que representam os parâmetros para solução do problema. Cada gene terá um possível conjunto de valores, os alelos no equivalente biológico, que para o GA será um alfabeto de valores $\mathcal{A}$, ou um intervalo caso trabalhando com genes de valores reais. O alfabeto mais simples é o binário com $\mathcal{A} = \{0, 1\}$, e é muito utilizado pela simplicidade e por ter sido originalmente a escolha de HOLLAND para explicar os esquemas. Além disso, para ele, os cromossomos de maior comprimento e com menos alelos geravam mais paralelismo intrínseco. Porém essa questão dos esquemas e paralelismo vem levantado questionamentos sobre sua real contribuição para o algoritmo.

Com o alfabeto binário, os parâmetros são codificados usando sequências binárias, que podem ser representadas por *strings*. Isso envolve conversões dos parâmetros para binário e vice versa. Os operadores de crossover e mutação ficam simplificados ao utilizar esse tipo de codificação. Uma variação da codificação binária é usar o código gray, que

evita o chamado abismo de Hamming[1]

A representação dos genes em termos gerais deve ser o mais simples e o mais natural possível ao problema. Então é comum usar outras formas de representar os genes, por exemplo, em um problema de escolha da melhor rota é interessante representar os grafos no cromossomo, com isso uma sequência de números inteiros representando cada vértice seria o mais apropriado. Também tem sido muito utilizada a codificação dos genes como números reais, representando assim diretamente os parâmetros do problema, e adaptando então as técnicas de mutação e crossover para se adequar a essa nova codificação. A representação com números reais é muito presente em problemas de otimização para redes neurais, onde o cromossomo é o conjunto de parâmetros de ajuste da rede.

Quando possível é interessante impor na codificação as restrições que são impostas ao conjunto de soluções. Por exemplo, ao utilizar um alfabeto binário para representar valores inteiros, ou reais, pode ser feita a conversão de maneira que os valores máximos e mínimos da representação binária coincidam com os valores permitidos dos parâmetros após a decodificação dos genes. Com isso mais conhecimento é sobre o problema é agregado ao algoritmo melhorando sua resposta. Nem sempre esses limites serão possíveis e será vista outra maneira de impor as condições ao algoritmo através da avaliação.

2.2 População, Avaliação e Seleção

2.2.1 População

O conjunto de soluções candidatas é definido como a população do algoritmo, que será modificada a cada iteração através dos operadores genéticos. A cada uma dessas populações geradas no instante t será dado o nome de geração. O tamanho da população é um parâmetro para o algoritmo, e quanto maior, mais soluções serão testadas em paralelo, porém mais recursos computacionais serão usados para cada geração. No algoritmo mais simples, a população é de tamanho fixo e toda substituída na próxima geração, e em outras formas do algoritmo ela pode ter o tamanho variável.

Não existe um número idealizado para o tamanho da população sendo que boa parte dos trabalhos usam 100 como um parâmetro inicial. LINDEN indica que um bom começo seria usar $40 * q$ onde q é a quantidade de parâmetros codificados em nosso cromossomo, porém para codificações de grafos ou ordenamentos já não seria prático usar esse tipo de escolha para o tamanho da população.

É importante também definir dois conceitos presentes na literatura sobre os GA,

[1] O abismo de Hamming é o efeito que para mudar o valor inteiro em uma unidade na representação binária é necessário alterar todos os bits, por exemplo para ir do número 7 (0111) para o 8 (1000)

que são o *exploitation*[2] e o *exploration*[3]. O *exploitation* (aproveitamento) é o fato de explorar cada um dos indivíduos da população pelos potenciais resultados que podem gerar através dos descendentes. Já *exploration* (exploração) é o conceito de se manter a diversidade genética da população de forma a explorar o espaço de soluções de forma completa. HOLLAND indica que deve existir um equilíbrio entre os dois conceitos na população, pois deve-se aproveitar ao máximo cada solução encontrada que poderá gerar novas soluções melhores, e da mesma maneira manter os horizontes sobre o espaço de soluções aberto para a descoberta de novas soluções, evitando a convergência genética.

Defini-se convergência genética como sendo o fato dos cromossomos presentes na população começarem a ficar todos com a codificação similares, levando a entender que o algoritmo atingiu o objetivo, ou pelo menos um máximo ou minimo local. Algumas GAs criam operadores de comparação entre os cromossomos de forma a quantificar essa proximidade como parâmetro para encerramento do algoritmo, mas o mais comum é executar o processo de iteração por T gerações. A dificuldade de usar a comparação entre os cromossomos está no custo computacional, que dependendo da forma de codificação usada pode ficar muito complexo. LINDEN menciona que uma forma de verificar essa convergência é usando o algoritmo de agrupamento K-Means e e depois comparar a distância entre os centróides gerados pelo algoritmo.

Sobre a população podem existir pequenas variações sobre como é evoluída durante o algoritmo. Uma dessas alterações é o **elitismo**, que separa os k melhores indivíduos para sobreviverem na próxima geração. Isso é usado devido ao fato de que os operadores de crossover e mutação poderem destruir esses indivíduos na próxima geração, perdendo assim os bons resultados alcançados. Essa mudança melhora o equilíbrio entre os conceitos de *exploitation* e *exploration* e consequentemente o desempenho do algoritmo, pois mantemos o *exploitation* sobre os k indivíduos preservados entre as gerações, e mantemos o *exploration* dando liberdade de escolha arbitrária para os demais $n - k$ indivíduos da população, onde normalmente $n \gg k$.

Outra estratégia para as populações é chamada de $\mu + \lambda$, onde são criados λ cromossomos gerados por μ indivíduos da população atual (geralmente $\mu < \lambda$). Feito isso os $\mu + \lambda$ cromossomos pais e filhos competem para serem selecionados apenas os μ melhores indivíduos para formar a nova população. Essa técnica também pode acelerar a convergência genética, devido ao fato da seleção dos melhores que podem apresentar pouca variação genética. Pode ser compensado empregando alguma técnica para manter a diversidade.

Outra alteração possível é denominada *Steady state*, onde em vez de haver a

[2] Exploitation consiste em testar uma região limitada mas promissora do espaço de soluções com a expectativa de melhorar uma solução já conhecida dentro dessa região

[3] Exploration consiste em testar uma região muito mais ampla do espaço de soluções, com a expectativa de encontrar novas soluções promissoras

substituição de todos os n indivíduos da população anterior para a nova (ou dos $n - k$ no caso do elitismo) vão sendo criados poucos indivíduos a cada iteração substituindo de forma aleatória os piores pais, isto é, seleciona-se com mais probabilidade os pais com pior avaliação para serem substituídos. Dessa forma existirá uma interação entre cromossomos da geração t com as da geração $t + 1$. Um porém de usar essa modificação é de acelerar a convergência genética, pois os indivíduos com pior avaliação sempre serão substituídos de forma rápida, mesmo os recém criados, e também o fato de um cromossomo poder reproduzir com o cromossomo que o gerou, deverá gerar um cromossomo muito parecido com os dois, limitando o *exploitation* desses indivíduos.

Para populações com tamanho variável, basicamente duas técnicas podem ser empregadas. A primeira é determinar um tempo de vida para cada indivíduo baseado em sua avaliação em comparação com a média da população, e a outra técnica é considerar a variabilidade genética. O método que considera a idade dos indivíduos, mantém eles na população por quanto tempo foi determinado na avaliação, e podem levar a condições que a população cresça indefinidamente ou que seja extinta, sendo necessário um controle extra sobre o tamanho da população.

A técnica levando em conta a diversidade, aumenta a população caso perceba-se, através de algum tipo de medição, que os cromossomos da população são semelhantes. Nesse caso alguns cromossomos gerados aleatoriamente podem ser acrescentados a população de modo a manter a exploração do espaço de soluções. Mas como todas as técnicas que devem comparar semelhança entre cromossomos podem ser custosas computacionalmente, pode prejudicar o desempenho desse método.

A população inicial geralmente é iniciada criando cromossomos de forma aleatória, porém pode ser feito de forma a subdividir o espaço de soluções em n partes, sendo n o tamanho da população, e gerando um cromossomo aleatório para cada uma dessas partes. (LINDEN, 2008).

2.2.2 Avaliação

Para executar uma seleção sobre os cromossomos da população é necessário primeiro existir uma função de avaliação, que deverá fornecer um escalar, de forma a atribuir para cada cromossomo presente na população uma espécie de nota para sua adaptação. O comum nos algoritmos é usar funções de avaliação que são sempre positivas, para o uso no método de seleção da roleta viciada. Alguns cuidados devem ser tomados ao definir a função de avaliação, pois se ela não apresentar variações suficientes para separar os cromossomos que melhor se adaptam dos demais, o algoritmo irá convergir mais lentamente, e se o contrário ocorrer e a função de avaliação tiver valores muito elevados, teremos uma convergência genética rápida demais impedindo a exploração do espaço de soluções podendo ficar restrito a um máximo local.

De uma forma geral consideremos uma função de avaliação f e i um cromossomo da população. $f(i) = f_i$ é a avaliação do cromossomo i. A probabilidade p_i de selecionar i para reprodução é definida por

$$p_i = \frac{f_i}{\sum f}$$

Onde será adotado que $\sum f = \sum_{j=1}^{n} f(j)$ é a soma das avaliações dos cromossomos da população.

Assim quanto melhor a avaliação de um individuo sobre a média da população, maior é o número esperado de vezes que ele será selecionado. Para evitar que alguns cromossomos, considerados como **superindivíduos** por LINDEN, dominem a próxima geração, devido a uma avaliação muito superior a média dos demais cromossomos, alguns métodos de transformação sobre a função de avaliação podem ser empregados.

O primeira técnica é a de normalização linear onde pode transformar a função de avaliação na forma $f' = a * f + b$, onde a é normalmente um valor escolhido entre 1 e 2. GOLDBERG indica selecionar esses parâmetros de forma que se mantenha o valor médio de f e o valor máximo de f' seja duas vezes o valor médio. Essa transformação pode gerar problemas pois dependendo dos valores médio, máximo e mínimo e as escolhas dos coeficientes, a função f' pode assumir valores negativos que prejudicam a seleção pelo método da roleta viciada que será visto na subseção 2.2.3 sobre seleções. Esse problema pode ser contornado usando outros coeficientes para evitar tal condição passando a se balizar por manter o mínimo de f' em zero enquanto se mantém o valor médio de f' igual ao valor médio de f.

Outra técnica é o escalonamento Sigma, que procura manter a pressão na seleção constante através das gerações e ao mesmo tempo evitando a convergência genética prematura da população. Assim usando esse método, o valor esperado de vezes que o individuo será selecionado é definido por

$$E[i,t] = \begin{cases} 1 + \frac{f(i) - \overline{f}(t)}{2\sigma(t)} & , \text{se } \sigma(t) \neq 0 \\ 1.0 & , \text{se } \sigma(t) = 0 \end{cases}$$

onde $E[i,t]$ é o valor esperado do individuo i ser selecionado no instante t, *f(i)* é a função de avaliação de i, $\overline{f}(t) = \sum f/n$ é a média da função de avaliação dos cromossomos da população no instante t e $\sigma(t)$ é o desvio padrão da função de avaliação dos cromossomos da população no instante t. Com essa configuração, mesmo cromossomos que se destaquem demais nas gerações iniciais, devido ao desvio padrão da população ser maior nesse momento, eles não irão dominar a próxima geração, e conforme vai ocorrendo um equilíbrio entre os cromossomos nas gerações futuras e perto da convergência, os que ainda tiverem uma melhor avaliação, serão destacados dos demais para terem maior probabilidade de

seleção. Caso o valor esperado se torne negativo para algum individuo, adota-se um valor pequeno como 0.1 permitindo um chance relativamente muito pequena para o individuo se reproduzir. (MITCHELL, 1996)

Em alguns problemas, as restrições sobre o espaço de soluções poderão ser definidas limitando os valores dos parâmetros presentes no cromossomo. Porém em outros casos isso não é possível, principalmente onde, por exemplo, o espaço de soluções não seja convexo. Assim nesses casos é interessante deixar que as soluções sejam avaliadas também fora do espaço de soluções mas aplicar uma penalidade na função de avaliação. Essa penalidade pode ser proporcional ao desvio da solução do espaço permitido, ou uma penalidade constante, o importante é que com a penalidade esse cromossomo seja menos provável de ser selecionado para a próxima geração. O atrativo de permitir esses cromossomos na população, é que mesmo estando fora do domínio do problema, ele pode apresentar um caminho para evolução de soluções melhores, assim se mesmo com a penalidade ele continua com uma boa avaliação, ele deve conter componentes que podem ser aproveitados nos descendentes (*exploitation*).

2.2.3 Seleção

Na etapa de seleção do algoritmo, serão separados os cromossomos para reprodução e consequente geração da próxima população a ser testada. Para tanto o comum é se usar uma componente estocástica para escolha dos pais, e uma determinística que define a probabilidade de escolha de cada pai. A determinística deriva da função de avaliação, que irá definir qual o valor esperado, ou probabilidade de seleção de cada cromossomo presente na população atual. Deve-se levar em consideração de que os métodos apresentados a seguir, podem incorporar o elitismo descrito anteriormente, e selecionar uma quantidade de pais que gere apenas os cromossomos restantes para completar a população.

- **Roleta Viciada**

  O método mais comum e mais simples encontrados no GAs é o da roleta viciada. Nesse método cada cromossomo recebe a probabilidade de ser escolhido definido como $p_i = f_i / \sum_{j=0}^{n} f_j$, com $i = 1, 2, \ldots, n$, sendo n o tamanho da população e f a função de avaliação. Nesse método que percebe-se a necessidade de $f > 0$ e a preocupação com cromossomos que tem valores de avaliação destacados perante a média levarem a uma convergência genética precoce. Imagina-se uma roleta que para cada cromossomo é separado uma área proporcional a sua probabilidade de escolha definida pela avaliação, e gira-se a roleta para a seleção de um dos cromossomos. Por exemplo, sendo os valores de avaliação para uma população de 6 cromossomos presentes na Tabela 1, obtêm-se a roleta mostrada na Figura 4.

	f	p
Cromossomo 1	152	28,84%
Cromossomo 2	38	7,21%
Cromossomo 3	42	7,97%
Cromossomo 4	5	0,95%
Cromossomo 5	234	44,40%
Cromossomo 6	56	10,63%
Total	527	100,00%

Tabela 1 – Exemplo avaliação

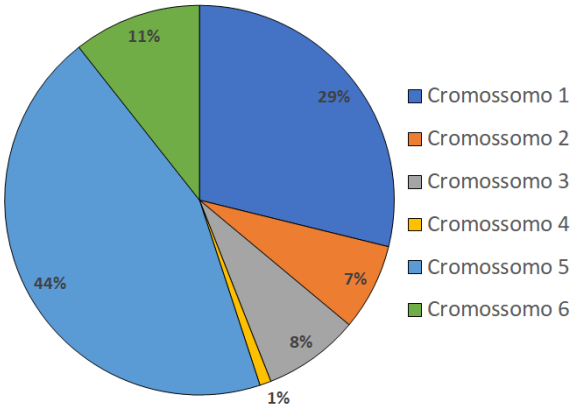


Figura 4 – Exemplo distribuição em uma roleta viciada

A implementação se torna simples, pois não há necessidade de ordenação dos cromossomos.

- **Amostragem Estocástica Uniforme**

  Uma variação do método da roleta viciada é o Amostragem Estocástica Uniforme (SUS - *Stochastic Universal Sampling*), que em vez de girar a roleta w vezes, onde w define quantos pais deve ser selecionados, é feito apenas um sorteio. O método consiste em alinhar os valores de avaliação dos indivíduos em uma reta contínua, com segmentos proporcionais as avaliações dos cromossomos e normalizados para que a reta tenha tamanho 1. Sorteia-se um número r entre 0 e $1/w$, e depois são gerados w ponteiros para reta na forma $r + j/n$ com $j = 0, 2, \ldots, n-1$. Os cromossomos são selecionados conforme esses ponteiros caiam sobre seu segmento correspondente na reta e colocados em uma lista. Os cromossomos da lista devem ser embaralhados ou sorteados de forma uniforme sem reposição para dar sequência com os operadores genéticos. Isso é necessário pois como os segmentos são contínuos, os cromossomos que forem selecionados mais de uma vez estarão na sequência na lista. Esse método, diferente da roleta, garante que cada individuo será selecionado para reprodução um número de vezes no intervalo $[\lfloor E[i,t] \rfloor, \lceil E[i,t] \rceil]$, onde $E[i,t] = \frac{f_i}{\sum f} \cdot n$ é o valor esperado de vezes que o cromossomo i será escolhido na geração t, com f sendo a função de avaliação, $\sum f$ a soma das avaliações dos cromossomos da população no instante t e n tamanho da população. Importante ressaltar que esse método não impede a questão dos superindivíduos dominarem o processo de seleção podendo levar a convergência genética prematura.

- **Seleção por Torneio**

  Nesse modelo de seleção, são sorteados dois ou mais cromossomos da população com probabilidade uniforme, depois é feito um confronto direto entre os valores

de avaliação de cada um, sendo que o que tiver maior valor será o selecionado. Esse mecanismo de seleção evita o favorecimento de indivíduos dominantes da população evitando a convergência genética prematura. Seja c a quantidade de cromossomos selecionados para cada rodada do torneio, e n o tamanho da população, a probabilidade de seleção de cada um é dada por $1/n$. Sendo assim a probabilidade de selecionar o pior indivíduo passa a ser $1/n^c$, pois para ele ser selecionado para a próxima geração deve ser o único na rodada do torneio. Em testes empíricos esse método de seleção apresentou resultados melhores que o da roleta quando $c = 2$, sendo que não é sensível a questões de escalas da função de avaliação e também ao fato da função de avaliação ser negativa. (LINDEN, 2008)

- ***Ranking***

  Outro método é a seleção por *ranking*, que também busca prevenir o convergência genética muito rápida, e consiste em ordenar os indivíduos por suas avaliações e depois usar este ranking para definir o valor esperado de cada um, em vez do valor da avaliação. Assim como no método de torneio, não é necessário se preocupar com a escala da função de avaliação. A relação entre os indivíduos i e o $i + 1$ será a mesma independente dos valores avaliados para cada um.

  Cada cromossomo é classificado com os valores de 1 a n, definido como *rank*, indo do pior avaliado para o melhor. O valor esperado de cada cromossomo será dado por

  $$E[i, t] = \min + (\max - \min)\frac{rank(i, t) - 1}{n - 1}$$

  onde max é o valor esperado para o melhor indivíduo e min para o pior. Como há as restrições de $\max \geq 0$ e $\sum_i E[i, t] = n$, pois deve-se manter a população, é necessário então que $1 \leq \max \leq 2$ e $\min = 2 - \max$.

  O valor proposto por Baker é $\max = 1,1$, e esse método tem a desvantagem de diminuir a pressão seletiva, o que pode levar ao GA uma convergência mais lenta, porém mantém a diversidade garantindo uma melhor exploração do espaço de soluções. Uma forma de manter a pressão seria usar uma função exponencial para definir os valores esperados de cada cromossomo. Seja qual for a forma de mapeamento dos valores esperados, depois pode ser utilizado o método SUS ou da roleta viciada para selecionar os pais da próxima geração.(MITCHELL, 1996)

- **Seleção Boltzmann**

  Esse método é inspirado no *simulated annealing*, onde variando a temperatura de forma continua, pode-se controlar a taxa de seleção. O algoritmo inicia com uma temperatura alta, garantindo que todos na população tem maior probabilidade de reprodução, reduzindo a pressão seletiva, e conforme as iterações do algoritmo são executadas, a temperatura é reduzida gradativamente, aumentando assim a pressão

seletiva, e restringindo para apenas os melhores continuarem a se reproduzirem. Uma implementação tipica do modelo é

$$E[i,t] = \frac{e^{f_i/\mathcal{T}}}{\frac{\sum_j e^{f_j/\mathcal{T}}}{n}}$$

onde $\mathcal{T}$ representa a temperatura, e n o tamanho da população, assim no denominador da expressão é representada a média da avaliação da população no instante t. (MITCHELL, 1996)

2.3 Operadores genéticos

Definidos como serão a população e a codificação dos cromossomos, além dos métodos de avaliação e seleção do GA, deve-se agora selecionar quais operadores genéticos serão usados. Para cada operador há um parâmetro associado que define uma probabilidade de uso do operador a cada etapa do algoritmo, e os operadores podem ser combinados. Os parâmetros podem ser fixos ou variarem conforme a evolução do algoritmo. Lembrando que com o uso do elitismo, teremos indivíduos que passarão para a próxima geração sem modificação pelos operadores genéticos.

2.3.1 Crossover

O operador mais característico e diferencial do algoritmo genético é o de crossover ou recombinação. É com esse operador que dois cromossomos tem suas características combinadas gerando um novo indivíduo que potencialmente terá avaliação melhor que seus pais. Associado a esse operador existe um parâmetro, p_c, que determina a probabilidade de ser executado o crossover sobre um par de cromossomos selecionados. Esse parâmetro, tem valor normalmente alto entre 0,8 e 1, e se após o sorteio ficar definido que não será usado o operador, um dos pais é passado sem alterações para as próximas etapas.

- **Crossover de um ponto**

  Esse é o operador mais simples de crossover, onde é sorteado um ponto de corte dentro do cromossomo para ocorrer a "quebra" da sequência dos genes. O cromossomo é formado por uma sequência l de genes, e entre esses genes há $l-1$ pontos de corte que definem as posições onde o cromossomo poderá ser interrompido para ser combinado com a outra parte do outro cromossomo. Após a seleção de dois pais, é feito um sorteio uniforme para o ponto de corte. Podem ser gerados dois novos cromossomos, sendo o primeiro combinando o material genético do pai A a esquerda do ponto de corte e o material genético do pai B a direita do ponto, e o segundo com o inverso. Algumas implementações aproveitam os dois novos indivíduos para a

nova geração, outros ainda realizam um sorteio com igual probabilidade de escolha para um dos dois novos cromossomos.

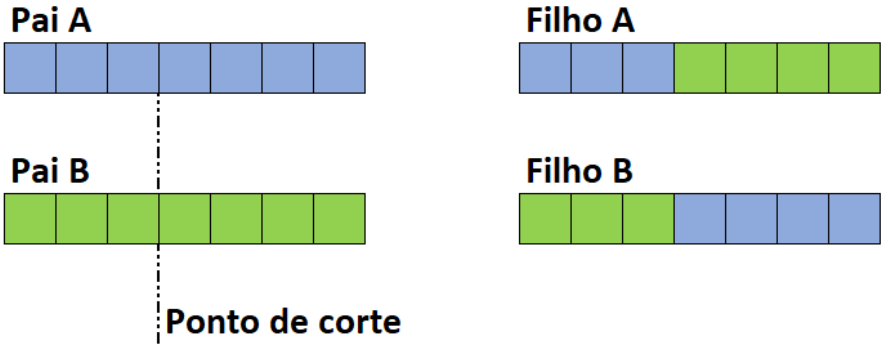


Figura 5 – Crossover com um ponto

Existem dois detalhes sobre o crossover de um ponto, primeiro se uma boa solução do problema estiver codificado nos genes extremos do cromossomo, a chance de manter esse dois genes no novo indivíduo reduz muito, pois o novo elemento da população terá a parte inicial do cromossomo ou a parte final somente. Isso também leva ao segundo problema, pois existem uma certa "preferência" no método para determinadas posições do cromossomo, já que as partes trocadas entre os pais sempre contém os extremos. (MITCHELL, 1996).

- **Crossover de dois ou mais pontos**

  Para melhorar as questões levantadas pelo crossover de um ponto, surgiram as derivações para terem mais pontos de corte no operador. O processo se mantém o mesmo, no entanto em vez de sortear um ponto de corte para executar as trocas de material genético, são sorteados dois ou mais pontos, e os cromossomos pais tem então suas sequências de genes intercaladas entre esses pontos de corte. Um exemplo para dois pontos é apresentado na Figura 6.

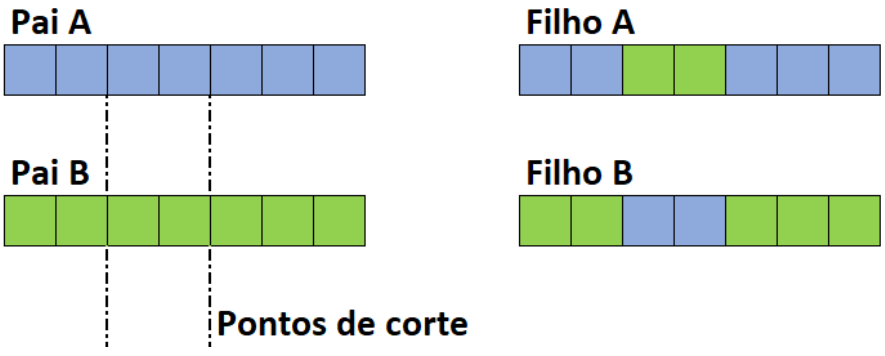


Figura 6 – Crossover com dois ponto

Fazendo o crossover em mais pontos diminuí os problemas encontrados quando utilizado apenas um ponto de corte. Aumenta-se a chance de manter os genes que

estejam em locus distantes na sequência do cromossomo que contribuem para boa avaliação do indivíduo, e diminui-se um pouco o detalhe de uso dos extremos, pois pode-se combinar apenas a parte central de um dos pais.

- **Crossover uniforme**

  Esse operador é capaz de combinar qualquer esquema presente nos cromossomos. O conceito de esquemas será melhor explorado na subseção 2.4.1, mas para o entendimento do crossover, o esquema pode ser considerado como uma máscara para os genes do cromossomo, fixando alguns desses genes e deixando outros livres. Considerando que os genes fixos no esquema são os responsáveis pela boa avaliação do cromossomo, dependendo da distância nas posições deles, foi visto que os operadores de crossover usando pontos de cortes podem interromper mais facilmente esses esquemas. Com o crossover uniforme esse efeito é minimizado, permitindo que todos os esquemas tenha probabilidade iguais de serem transmitidos aos filhos. O exemplo simplificado do operador pode ser visto em Figura 7

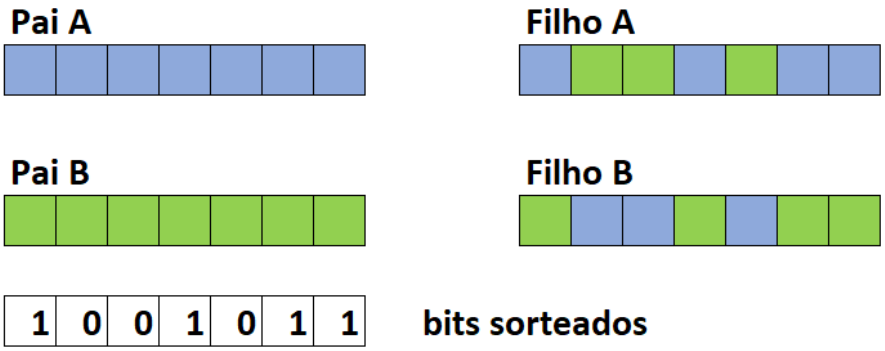


Figura 7 – Crossover uniforme

A diferença com relação aos operadores de combinação anteriores se deve ao fato de que é feito um sorteio dos valores 1 ou 0 com iguais probabilidades para cada posição do cromossomo criando uma sequência binária. Utiliza-se então o resultado do sorteio para definir se será usado o gene do pai A ou do B. Como todas as sequências tem iguais probabilidades de ocorrerem, justifica-se o fato de que os esquemas passam a ter a mesma probabilidade de se manterem durante a reprodução.

MITCHELL menciona uma outra forma de realizar o operador de crossover uniforme, onde seguindo o mesmo raciocínio dos pontos de cortes, se realiza um primeiro sorteio para decidir por qual pai começa a construção do filho, e para cada posição do gene é feito um novo sorteio com igual probabilidade para decidir se continua copiando a sequência do pai atual ou se passa a copiar do outro pai, alcançando os mesmos resultados do procedimento descrito anteriormente.

- **Crossover baseado em maioria**

O ultimo operador de crossover apresentado será um que combina vários pais simultaneamente, e não é muito utilizado pois pode levar a convergência genética muito rápida. O conceito por trás desse operador é selecionar z pais com $3 \leq z \leq n$, sendo n tamanho da população, e depois definir para cada gene o valor correspondente a maioria. Alternativamente pode ser feito de forma a calcular uma distribuição para cada gene baseado nos valores encontrados no z cromossomos, e depois realizando uma seleção nos moldes da roleta viciada para decidir qual gene utilizar. Esse crossover acaba gerando mais um parâmetro para o algoritmo, pois é necessário definir qual o valor de z

Os operadores descritos podem em geral serem usados com qualquer tipo de codificação, em especial com codificações binárias seu uso são imediatos. Para algumas outras codificações ajustes são necessários. Para representações com reais paras os genes, ou de grafos como na programação genética, os operadores de crossover que usam pontos de corte ou o uniforme funcionam normalmente, pois definido os pontos de corte basta executar os intercâmbios dos valores situados entre eles.

Para cromossomos baseados em ordem, isto é, a ordem da sequência apresentada no cromossomo representa o fenótipo do indivíduo e consequentemente sua avaliação, usar o crossover de um ponto ou mais pode gerar um problema. Como o operador se baseia na posição dos genes para fazer a concatenação, e nesse tipo de cromossomo as posições dos genes mudam, é necessário adaptar o operador. A forma mais simples de realizar essa adaptação é, em vez de intercambiar diretamente os valores entre os pontos de corte, mantém-se os valores de um dos pais selecionado, mas utiliza-se a ordem para esses valores encontradas no segundo pai. Por exemplo na Figura 8, podemos ver que o pai A possui na região entre os dois pontos de corte a ordem 7 - 1, e esses mesmos valores estão na ordem 1 - 7 no pai B, assim o operador muda a ordem dos valores nesse pedaço para ficar com a mesma ordem do pai B e o resultado é visto no filho A. No filho B o inverso ocorre, sendo que na região de corte é usada a ordem que os valores aparecem no pai A. Pode ser feita uma adaptação análoga para o crossover uniforme. Para o operador baseado em maioria, pode ser feito inciando o primeiro item da sequência pela maioria presente nos pais selecionados, e nas demais posições ir pela maioria encontrada nos pais que seguem o gene escolhido anteriormente.

Quando a codificação for baseada em números reais, o operador de crossover pode ser modificado para em vez de escolher um dos dois valores do gene presentes nos pais, considerar um deles como mínimo e o outro como máximo e realizar um sorteio uniforme no intervalo para o valor do gene. Isso irá gerar filhos bem distintos dos pais, aumentando o aspecto de *exploration* do algoritmo.

Figura 8 – Crossover com codificação por ordem

2.3.2 Mutação

O operador de mutação é responsável em aumentar o aspecto de *exploration* do GA, e através dele que é possível explorar novas soluções ainda não testadas. Existe um parâmetro, p_m associado a esse operador referente a taxa de mutações presentes no algoritmo, sendo que essa taxa usada é um valor baixo na ordem de 0,5% para menos. A taxa deve ser baixa, pois quanto maior for, mais o algoritmo irá se assemelhar a uma busca randômica. Mantendo as probabilidades de mutação baixa garante apenas que novas soluções serão apresentadas quando o algoritmo já estiver convergindo, e assim representa uma alternativa caso o GA estiver convergindo para um máximo local.

O procedimento é simples, para cada gene é feito um sorteio com a probabilidade determinada para a taxa de mutação, caso o sorteio tenha um resultado positivo, o gene em questão será modificado. Essa modificação depende do tipo de codificação que foi utilizado. Para codificação binária há duas opções, inverte-se o estado do bit que deve sofrer a mutação, ou pode-se sortear um novo bit com probabilidade igual para 0 ou 1. Usando essa segunda forma, a taxa de mutação resultante será $p_m \cdot 0,5$, onde p_m é o parâmetro de mutação escolhido.

Sobre a codificação binária, existe um detalhe sobre o operador mutação. Como cada bit tem uma significância para o parâmetro que representa do problema, dependendo do bit que for modificado pode representar "saltos" maiores ou menores no espaço de soluções e consequentemente nos valores da avaliação. Uma forma de contornar esse dilema, seria definir p_m proporcional à significância do bit que será modificado. Outra forma seria primeiro transformar a representação binária na variável do problema, realizar uma mutação sobre esse valor, e depois transformar de volta a variável para binário.

Para codificações em inteiros ou em reais, a mutação será na forma de um sorteio sobre o valor do gene. Esse pode usar alguma distribuição conhecida para toda a faixa dos valores que a variável pode assumir, ou usar uma distribuição normal para definir um valor de desvio para a variável e condicionando o resultado para ficar nos limites ou, como visto anteriormente na seção 2.2, permitir esse valores fora das restrições que serão

penalizados pela função de avaliação.

As mutações para codificações que usam ordem podem ser feita de duas formas. A primeira se um gene deverá ser modificado, sorteia-se outro gene aleatoriamente e é feita a permutação dos dois. Na segunda forma defini-se dois pontos no cromossomo e é feita ou uma mistura dos elementos entre esses dois pontos, ou inverte-se a ordem entre esses dois pontos.

Para cromossomos baseados em grafos, ou árvores, a sugestão é remover o ramo selecionada para mutação, e gerar um novo aleatório, seguindo o mesmo processos usado para gerar a população inicial.

É comum usar para o parâmetro de taxa de mutação, um valor variável, que pode ir aumentando a cada iteração do algoritmo, permitindo assim que conforme vai se atingindo a convergência genética, o GA não perca sua característica de *exploration*, buscando soluções totalmente novas.

2.3.3 Outros operadores

Existem outros operadores menos usados no algoritmo como por exemplo o de inversão proposto por Holland e alguns que operam sobre como são formados os pares para reprodução.

HOLLAND propôs um operador que inverte parte da sequência do cromossomo, pois percebeu a questão do crossover de um ponto de ter uma maior probabilidade em interromper esquemas com genes mais afastados na sequência. Esse operador é inspirado pelo que acontece na genética real, onde a função do gene não depende da sua posição, portanto invertendo parte do cromossomo, sua essência seria mantida. Para adaptar esse operador no GA, além do valor do gene, o cromossomo deve armazenar qual a sua posição original também, o que acarreta uma maior custo computacional. O funcionamento básico do operador é selecionar dois pontos aleatórios no cromossomo, e inverter a ordem dos genes encontrados nesse intervalo. Quando foi realizar o crossover, como os pais selecionados podem ter a ordem dos genes alteradas, utiliza-se um deles como referência e ordena-se o segundo da mesma forma, assim o crossover não correrá o risco de repetir genes na concatenação das partes. Testes com inversão foram feitos mas nenhum obteve resultados indicando que o uso desse operador melhora o desempenho do GA. (MITCHELL, 1996).

Além desse operador, foram feitos alguns experimentos com operadores de seleção que procuram determinar outros fatores na seleção dos pais, como por exemplo não selecionar dois indivíduos que tenham o genótipo parecido, evitando assim convergência genética prematura e buscando que a combinação entre pais geram filhos diferentes dos encontrados na população até o momento.

Também existem as versões dos operadores apresentados para cromossomos di-

plóides, onde o genótipo possui um par de cromossomos, sendo que deve ser utilizado o aspecto de dominância dos alelos para definir o fenótipo. A maior diferença está no operador de crossover, pois por serem indivíduos diplóides, ocorre primeiro a separação do par de cromossomos em gametas, feito o crossover e depois recombinação entre os gametas dos pais selecionados. Em Goldberg (1989) é possível verificar uma análise mais detalhada sobre esse assunto.

2.4 Fundamentos teóricos

2.4.1 Esquemas

O conceito de esquema (*schema* ou *schemata*) foi primeiro definido por HOLLAND, em uma tentativa de especificar por qual razão o algoritmo genético funciona e pode ser eficiente. Foi apresentado também por GOLDBERG como teorema fundamental do GA, e ficou conhecido por Teorema dos Esquemas (*Schema Theorem*). Por trás desse conceito, Holland ainda explica a teoria do paralelismo implícito presente no algoritmo razão da qual ele apresentar certa eficiência se comparado a outros algoritmos.

Para explicar o conceito primeiro define-se que o **cromossomo** é uma sequência, de comprimento l, de genes que podem ter os valores presentes no alfabeto $\mathcal{A}$. Para simplificar as definições e cálculos e sem perda de generalidade, foi escolhido um alfabeto binário $\mathcal{A} = \{0, 1\}$ e os cromossomos são portanto sequências binárias.

Define-se o **esquema**, H, como uma sequência de tamanho l, e que pode ter os valores contidos em $\mathcal{A}^+ = \{0, 1, *\}$, sendo $*$ considerado um valor coringa e representa uma posição no cromossomo que não importa (*don't care*). É possível definir um esquema para qualquer alfabeto, apenas acrescentando o caractere coringa ao alfabeto gerador dos cromossomos. O esquema funciona como um gabarito ou *template* e existirão subconjuntos de cromossomos que se encaixam nesse gabarito.

Define-se **instância** como cada cromossomo que se enquadra em determinado esquema. Por exemplo, supondo uma população de cromossomos com comprimento $l = 8$, o esquema $H = **11*0*1$ tem os cromossomos $A_1 = 00110001$ e $A_2 = 10111011$ como instâncias. Assim seja $\mathcal{C}_l$ o conjunto de todos possíveis cromossomos binários de comprimento l, e $\mathcal{E}_l$ o conjunto de todos possíveis esquemas de comprimento l, então $\mathcal{C}_l \subset \mathcal{E}_l$ e temos $2^l = |\mathcal{C}_l|$ possíveis cromossomos e $3^l = |\mathcal{E}_l|$ possíveis esquemas.

Define-se **ordem** do esquema H, denotada por $o(H)$, como quantas posições possuem valor fixo no esquemas, isto é, quantas posições no esquema são diferentes de $*$. No exemplo anterior $H = **11*0*1$ possui ordem 4, $o(**11*0*1) = 4$.

Define-se **tamanho** do esquema H (*defining length*), denotado por $\delta(H)$, como a diferença entre as posições do ultimo valor definido no esquema e do primeiro definido. Por

exemplo para o esquema $H = **11*0*1$ seu tamanho é 5, pois o ultimo valor definido está na posição 8 e o primeiro na posição 3, $\delta(**11*0*1) = 5$.

Goldberg usou o simbolo H pois o esquema define um hiperplano do espaço de dimensão l que representa as sequências binárias de comprimento l. Considerando sequências binárias e esquemas de comprimento $l = 3$, é possível desenhar a representação dos hiperplanos de forma geométrica, que pode ser visto na Figura 9. Os vértices são esquemas de ordem 3, as linhas de ordem 2 e os planos de ordem 1.

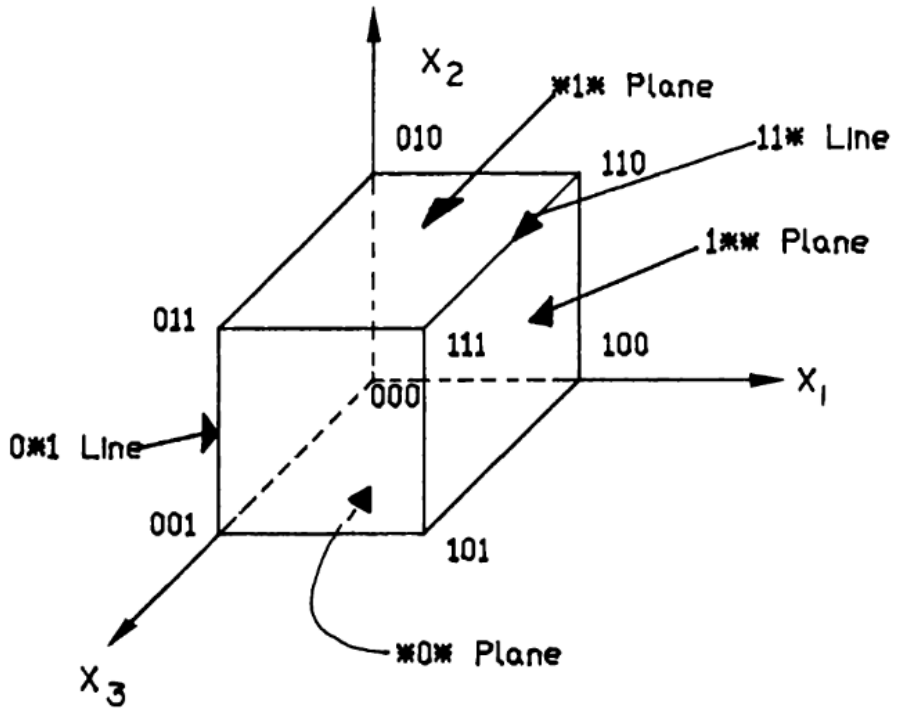


Figura 9 – Representação dos esquemas como hiperplanos em um espaço tridimensional. (GOLDBERG, 1989)

Dessas definições, pode ser verificado que quanto maior for o tamanho de um esquema $\delta(H)$, maior será sua probabilidade de ser desfeito com os operadores genéticos de crossover, e quanto maior sua ordem $o(H)$, maior será a probabilidade do operador de mutação de destruí-lo. Contudo, deve-se manter em mente que esses mesmos operadores aplicados aos melhores cromossomos avaliados e selecionados, também podem produzir cromossomos com avaliação ainda melhor.

Como esquemas de ordem e tamanho maiores estão mais sujeitos a serem destruídos, os esquemas mais curtos e que mais contribuem para a avaliação dos cromossomos, tendem a ser preservados, e esses constituem os blocos de construção (*building blocks*) citados por GOLDBERG.

O que HOLLAND indica como **paralelismo intrínseco** se atribui ao fato, de que apesar do algoritmo estar avaliando n indivíduos contidos na população da geração presente, ele está também avaliando de forma implícita um número bem maior de esquemas.

Qualquer sequência binária de comprimento l é uma instância de 2^l esquemas. Por exemplo a sequência 11, é uma instância dos seguintes esquemas: **, 1*, *1 e 11. Estendendo para a população de tamanho n existem portanto um total de até $n \cdot 2^l$ esquemas, assim o total de esquemas em determinada população será um valor entre 2^l, caso todos os cromossomos sejam iguais, e $n \cdot 2^l$, caso todos diferentes. Por essa razão o GA avalia uma quantidade de esquemas maior do que a quantidade de indivíduos presentes na população.

2.4.2 Teorema fundamental do GA

Considere uma população θ de tamanho n de cromossomos com codificação binária e comprimento l e seja H um esquema que tenha ao menos uma instância na população na geração t e lembrando que p_c é a probabilidade de aplicar o operador de crossover e p_m é a probabilidade de aplicar o operador de mutação.

Defini-se $M(H)$ o conjunto de todos os cromossomos que são instâncias de H e $M(H,t) \subseteq M(H)$ o conjunto dos cromossomos que são instâncias de H na população no instante t. Assim $m(H,t) = |M(H,t)|$ é definido como o número de instâncias de H no instante t presentes na população.

Definição:

$$\hat{u}(H,t) = \frac{\sum\limits_{i \in M(H,t)} f(i)}{m(H,t)}$$

onde i é um cromossomo na população que é instância de H, e $f(i)$ é a função de avaliação do cromossomo. Assim $\hat{u}(H,t)$ é a média das avaliações das instâncias de H no instante t.

A Equação 2.1 define o Teorema dos Esquemas proposto por HOLLAND e que pode ser visto também em Goldberg (1989).

$$\boxed{E[m(H,t+1)] \geq \frac{\hat{u}(H,t)}{\overline{f}(t)} m(H,t) \left(1 - p_c \frac{\delta(H)}{l-1}\right) \left[(1-p_m)^{o(H)}\right]} \tag{2.1}$$

A equação define que o valor esperado da quantidade de instâncias de um esquema H presentes na próxima população será baseado na média das avaliações das suas instâncias na população comparada com a média das avaliações de todos os cromossomos na população, e também nas probabilidades de crossover e de mutação associadas ao seu tamanho $\delta(H)$ e ordem $o(H)$.

O teorema pode ser verificado através da estimação do aumento ou diminuição das instâncias dos esquemas presentes na população.

Relembrando que a probabilidade de um indivíduo ser escolhido para seleção com o método da roleta viciada é definido por $p_i = f(i) / \sum_{j \in \theta} f(j)$, com $i = 1, 2, \ldots, n$. Sendo $\eta(i,t)$ a quantidade de vezes que o cromossomo i é selecionado na população no instante

t, o valor esperado de η será $E[\eta(i,t)] = n \cdot p_i$. Se $\overline{f}(t) = \sum_{j\in\theta} f(j)/n$ é a média das avaliações dos cromossomos da população no instante t, o valor esperado de $\eta(i,t)$ pode ser expresso como $E[\eta(i,t)] = f(i)/\overline{f}(t)$

O valor esperado da quantidade de instâncias de H em $t+1$ considerando **apenas a seleção** descrita e sem usar os operadores de crossover e mutação será dado por:

$$\begin{aligned} E[m(H,t+1)] &= \frac{\sum\limits_{i\in M(H,t)} f(i)}{\overline{f}(t)} \\ &= \frac{\hat{u}(H,t)}{\overline{f}(t)} m(H,t) \end{aligned} \tag{2.2}$$

Assim é verificado que a quantidade esperada de instâncias do esquema H na próxima geração depende diretamente da média das avaliações das instâncias do esquema na geração atual e pode ser concluído que esquemas com avaliação maior que a média irão aumentar ao passo que os com avaliação menor diminuirão.

Como visto antes, os operadores de crossover e mutação podem tanto construir como destruir as instâncias do esquema H, e que a probabilidade de destruir é proporcional as características do esquema dado pela ordem $o(H)$ e pelo tamanho $\delta(H)$.

Considerando apenas o fato destrutivo dos operadores, para o caso do crossover de ponto único, a probabilidade de um esquema ser destruído é definida por $D_c(H) = \delta(H)/l - 1$. Sendo p_c a probabilidade do operador ser aplicado, então o limite inferior da probabilidade de sobrevivência do esquema, $S_c(H)$, pode ser estimado como:

$$S_c(H) \geq 1 - p_c \frac{\delta(H)}{l-1} \tag{2.3}$$

e pela equação é verificado que quanto menor o tamanho do esquema, maior sua probabilidade de sobrevivência. Esse é um limite inferior pois se por exemplo dois cromossomos selecionados para o crossover forem idênticos, mesmo que o ponto de corte do operador seja dentro dos limites do esquema, essa instância não será destruída.

Já para o operador de mutação, considerando p_m como a probabilidade de um bit sofrer mutação, a probabilidade de sobrevivência do esquema a esse operador, $S_m(H)$, é dada por:

$$S_m(H) = (1 - p_m)^{o(H)} \tag{2.4}$$

e novamente quanto menor a ordem do esquema, maior probabilidade de sobrevivência.

Assim, a Equação 2.2, pode ser modificada combinando com as Equações 2.3 e 2.4, obtendo então a Equação 2.1 do teorema fundamental.

Em palavras o teorema pode ser interpretado como: "o GA tende a preservar com o decorrer do tempo aqueles esquemas com maior avaliação média e com menores ordem e tamanho, combinando-os como blocos de construir de forma a buscar a melhor solução". (LINDEN, 2008)

2.4.3 Modelos matemáticos alternativos para o funcionamento do GA

Apesar do teorema dos esquemas indicarem previsões sobre o valor esperado da quantidade dos esquemas nas próximas gerações, ele não faz avaliações sobre como a composição da população irá se transformar com o tempo, nem sobre velocidade de convergência e outros itens do gênero. Por essa razão surgiram algumas objeções sobre esse teorema elucidar todo o funcionamento do algoritmo, mesmo porque apenas considera os efeitos destrutivos dos operadores genéticos e não avalia como esses operadores poderiam definir o sucesso do algoritmo. Existem criticas também ao fato de considerarem apenas que blocos pequenos e isolados poderiam levar as melhores soluções, sendo que em alguns problemas o que existe é a interação entre diversos genes levando a uma boa avaliação.

Devido a isso outros modelos foram propostos sobre os GA. Um deles feito por NIX; VOSE, se baseia em um processo de cadeia de Markov, onde as populações definem os estados da cadeia, e os operadores atuando em conjunto definem a matriz de transição. Outro forma foi modelar o GA como um sistema dinâmico visto em Vose e Liepins (1991).

Em Prugel-Bennett e Shapiro (1994) foi feito um estudo usando mecânica estatística para verificar e procurar prever o comportamento das médias e variâncias da população no decorrer das gerações. Para tal foi utilizado o modelo de Ising de uma dimensão e o objetivo do GA era minimizar a energia na estrutura do modelo. Nesse trabalho os autores conseguiram gerar uma previsão para os dois primeiros momentos, média e variância, da distribuição de energia nos elementos da população.

Como será visto no Capítulo 3 foi escolhido o modelo de Ising com duas dimensões, e será feito uma simulação para verificar o comportamento da distribuição da população durante as gerações do algoritmo, variando alguns dos parâmetros do GA para averiguar como afetam os resultados.

2.5 Dificuldades associados ao GA

Existem duas situações conhecidas que levam o GA a ter uma piora de desempenho podendo se tornar ineficiente. Uma delas é chamado de carona (*hitchhiking*), e consiste no fato de que genes vizinhos aos que formam esquemas com alta avaliação, tendem a se manter nas próximas gerações como caronistas. Isso levanta questões sobre o teorema dos esquemas, dando argumentos aos que se opõe a ele. No exemplo de codificação binária, a ocorrência desses bits que pegam caronas se deve ao operador de crossover, que deveria ter seus pontos de corte sorteados de tal forma a precisamente manter somente os bits que geram a alta avaliação no esquema e remover os caronas, mas que dependendo do comprimento das cadeias de bits e dos esquemas passam a ter probabilidade pequena de ocorrerem.

Outra questão levantada sobre os GAs é com relação aos problemas que foram definidos como enganadores (*deceptives*), que são problemas que apresentam esquemas que não contêm o máximo global com média de avaliação superior aos esquemas que o contêm. LINDEN descreve esses problemas como tendo o máximo global em forma de pico cercados por valores de avaliação muito baixos, porém da mesma forma que impõem uma dificuldade ao GA, também será difícil para outros métodos.

SPALL também menciona a questão sobre epistasia, onde genes interagem entre si e combinados produzem um resultado melhor do que avaliados individualmente, o que vai contra a teoria dos blocos de construção de GOLDBERG, onde pequenos blocos com alta avaliação garantem ao GA sua eficiência. Na forma do algoritmo genético simples apoiado no teorema dos esquemas, ficou definido que o GA tende a preservar esquemas com menor ordem e tamanho, mas no caso deveria-se preservar esquemas que podem ter o tamanho grande se os genes que interagem ocupam posições distantes no cromossomo.

Mesmo com o GA apresentando alguns problemas, ele pode ser uma opção interessante, principalmente se o conhecimento do problema permitir que esses efeitos sejam reduzidos, como o posicionamento dos genes no cromossomo, ou o uso de outros operadores, como o de inversão que explora novos posicionamentos dos genes, ou usar operadores modificados de crossover, ou de mutação direcionados. Além disso ainda existe a opção de combinar o GA com outros métodos de otimização locais, por exemplo, usar o método de *hill-climbing* na fase de mutação.

3 Implementação do algoritmo genético

Para implementação do algoritmo foi utilizado a linguagem de programação Java, e os testes feitos com dois problemas distintos. As avaliações foram feitas através de gráficos e estatísticas geradas no R.

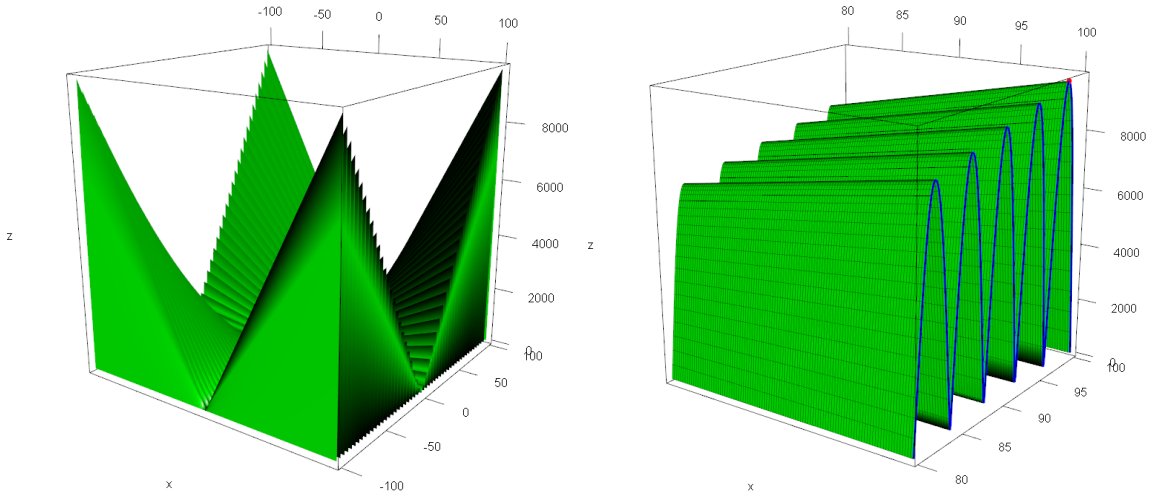
3.1 Implementação inicial

Os testes começam sobre um modelo simples usando codificação binária para representar duas variáveis reais x e y com valores no intervalo $[-100, 100]$, e 15 bits de comprimento. A conversão é feita usando um fator C definido por $C = \frac{200}{2^{15}-1}$ que multiplicado pela representação binária transformada para o inteiro i e somado ao valor mínimo, apresenta o valor real da variável, com resolução definida pelo fator, $x = C \cdot i_x - 100$. O cromossomo é formado por uma sequência de 30 bits, 15 para cada variável, concatenados na forma de um vetor (Em Java será utilizado os conceitos de Listas por serem mais versáteis com relação aos elementos que podem ser guardados e manipulados). A função que deve ser maximizada, que será a mesma de **avaliação**, é dada pela equação seguinte e apresenta o gráfico visto na Figura 10:

$$f(x, y) = \left| x \cdot y \cdot \sin\left(\frac{\pi \cdot y}{4}\right) \right|$$

É possível ver que a função possui 4 pontos máximos definidos dentro do domínio, e utilizando o R para encontrar o máximo da função em um desses pontos, foi obtido os seguintes resultados: $x = 100$, $y = 98,01654$ e $f(x, y) = 9800,827$. O ponto com é critico de ser encontrado pelo fato de possuir vários máximos locais dentro do domínio. Para comparação dos resultados do GA, sempre será executado uma busca aleatório com a quantidade de pontos gerados equivalentes a $n * T$, onde n é o tamanho da população definido como parâmetro do GA e T o total de gerações que o algoritmo será executado.

Para esse GA foi utilizado o método de seleção da roleta viciada, com um algoritmo simples que pode ser visto em Algoritmo 1, considerando as funções `random()` como um gerador de números aleatórios entre 0 e 1, `somaAvaliacao()` que soma todos os valores da função de avaliação dos cromossomos da população e `calculaAvaliacao()` que calcula o valor da função de avaliação de um cromossomo da população. Como pode ser visto, sorteia-se um número entre 0 e o valor da soma das avaliações da população, depois é feito um *loop* iterando pelos valores das avaliações de cada cromossomo e somando a uma variável auxiliar. Ao atingir o valor sorteado, o ultimo individuo que teve seu valor somado a variável auxiliar é retornado.



(a) Gráfico no domínio completo **(b)** Gráfico ampliado em um dos máximos

Figura 10 – Gráfico da função de avaliação

Entrada: População de cromossomos: *populacao*
Saída: Cromossomo selecionado: *cromossomo*

```
1 valor = random () * somaAvaliacao (populacao);
2 aux = 0;
3 i = 1;
4 enquanto aux < valor e i <= populacao.tamanho() faça
5 |   aux = aux + calculaAvaliacao (populacao[i]) ;
6 |   i = i + 1 ;
7 fim
8 retorna populacao[i-1]
```

Algoritmo 1: Roleta viciada

O operador de crossover testado foi o com único ponto de corte, e seu algoritmo pode ser visto em Algoritmo 2, sendo concatenar() a função responsável por unir as duas partes dos cromossomos pais e formar um novo cromossomos que é colocado na variável *Filho*. O crossover somente é executado se no sorteio inicial, o valor for menor que p_c. Caso não seja aplicado o operador, é feito uma cópia do *PaiA*.

O operador de mutação é feito apenas invertendo o estado do bit caso o sorteio seja positivo para aquele bit, respeitando o parâmetro de probabilidade de mutação, p_m, e o seu algoritmo está descrito em Algoritmo 3. A expressão $bit = !bit$ indica a inversão do estado do bit do cromossomo.

O critério de parada ficou definido apenas pela quantidade de iterações, isto é, quantas gerações da população foram produzidas. Para a população inicial são gerados cromossomos com bits aleatórios, sendo que é feito um sorteio individual para cada bit. Essa mesma operação é usada para gerar os valores para a busca randômica. Nesse primeiro teste a população é toda substituída por uma nova a cada geração, mas o melhor cromossomos de todas as gerações é guardado e apresentado como resultado final do algoritmo genético.

Entrada: Cromossomos: $PaiA$ e $PaiB$; probabilidade de crossover: p_c
Saída: Cromossomo: $Filho$

```
se random () <= p_c então
    corte = random () * PaiA.tamanho();
    se random () <= 0.5 então
        Filho = concatenar (PaiA[0 : corte], PaiB[corte : PaiB.tamanho()]);
    senão
        Filho = concatenar (PaiB[0 : corte], PaiA[corte : PaiA.tamanho()]);
    fim
senão
    Filho = PaiA;
fim
retorna Filho
```

Algoritmo 2: Crossover com um ponto de corte

Entrada: Cromossomo: *cromo*; probabilidade de mutação: p_m
Saída: Cromossomo: *cromo*

```
para cada bit em cromo faça
    se random () <= p_m então
        // inversão do bit
        bit = !bit ;
    fim
fim
retorna cromo
```

Algoritmo 3: Mutação em cromossomo binário

O algoritmo básico de execução do GA pode ser visto em Algoritmo 4. Nesse algoritmo, as funções operadorCross(), operadorMutacao() e roletaViciada() representam os algoritmos descritos anteriormente. A função geraPopulacaoInicial() é responsável em criar a população de tamanho n com os bits escolhidos aleatoriamente, a função pegaMelhorCromossomo() retorna o cromossomo melhor avaliado na população, isto é, o que teve o maior valor pela função de avaliação, e a função calculaAvaliacao() é a mesma descrita para Algoritmo 1

Seguem alguns resultados para execução do GA, com os parâmetros: $n = 30$, $T = 10$, $p_c = 0,8$, $p_m = 0,01$, onde n é o tamanho da população, T é por quantas gerações o GA irá evoluir, p_c e p_m as probabilidades de crossover e mutação. Na Listagem 1 temos o resultado dos operadores de seleção, crossover e mutação para um descendente. O *"HERITAGE MAP"* mostra qual porção do cromossomo herdou do pai 1 ou 2 e o *"MUTATE MAP"* representa os bits que sofreram mutação. Além disso demonstra quantas vezes cada pai foi selecionado para produzir a nova geração, e com esses dados foi possível verificar os funcionamentos básicos do algoritmo, correspondendo ao esperado.

Entrada: Tamanho população: n; Iterações: T ;probabilidade de crossover: p_c; probabilidade de mutação: p_m
Saída: Melhor Cromossomo: *melhor*

```
1  populacao = geraPopulacaoInicial (n) ;
2  melhor = pegaMelhorCromossomo (populacao) ;
3  para t = 1 até T faça
       // Gera nova população
4      novaPopulacao = [] ;
5      para j = 1 até n faça
           // Sorteia os pais
6          PaiA = roletaViciada (populacao) ;
7          PaiB = roletaViciada (população) ;
           // Aplica operadores
8          Filho = operadorCross (PaiA, PaiB, p_c) ;
9          Filho = operadorMutacao (Filho, p_m) ;
           // Guarda novo cromossomo na população
10         novaPopulacao[j] = Filho ;
11     fim
       // Substitui população anterior
12     populacao = novaPopulacao ;
       // Verifica se deve trocar o melhor cromossomo
13     novoMelhor = pegaMelhorCromossomo (populacao) ;
14     se calculaAvaliacao (melhor) < calculaAvaliacao (novoMelhor) então
           // substitui o melhor cromossomo encontrado até o momento
15         melhor = novoMelhor ;
16     fim
17 fim
18 retorna melhor
```

Algoritmo 4: Algoritmo Genético Simples

Listagem 1 – Resultado de um ciclo de seleção, crossover e mutação do teste preliminar

```
1  Geração: 1 | Média Avaliação: 2847,450535
2  #### CHILD #####
3  ID: 31
4  Fenotipo: x = -13,91949 | y = -94,32356
5  Avaliação: 1270,770525
6  #### PARENT 1 #####
7  ID: 11
8  Fenotipo: x = -13,91949 | y = -19,02829
9  Avaliação: 183,079928
10 Selecionado 1 vezes, 0,03
11
12 #### PARENT 2 #####
13 ID: 13
14 Fenotipo: x = 38,99960 | y = -94,28694
15 Avaliação: 3584,173001
16 Selecionado 6 vezes, 0,20
17
18 ### HERITAGE MAP ###
19 11111111111111111122222222222
20 ### MUTATE MAP
21 00000000000000000000000000000
```

Na Tabela 2 é feito um comparativo entre o GA e a busca randômica (RS), executados em 1000 testes e calculado médias com intervalo de confiança e qual proporção o GA teve melhor resultado que o RS. Pode ser verificado que com poucas gerações, o GA apresentou resultados melhores que o RS, aumentando a população para 50, $n = 50$, o GA teve ainda uma pequena melhora com relação ao RS, mas aumentando para 100 gerações ($T = 100$) os resultados praticamente são similares considerando os intervalos de confiança, porém percebe-se que ambos começaram a apresentar média de resultados maiores, e o GA supera o RS em menor quantidade de testes. Isso deve ocorrer, primeiro pelo fato do GA já não conseguir pelos operadores normais, refinar a solução, e segundo pelo RS ter cada vez mais amostras e com isso melhorar seu resultado.

Os testes com os outros parâmetros do GA se mostraram significativos também, com $n = 30$, $T = 10$, $p_c = 0,8$, $p_m = 0,05$, o GA apresentou resultados ainda melhores, particularmente com $T = 100$, mostrou expressiva melhora com relação ao teste anterior e ao RS. Isso mostra a necessidade do operador de mutação para garantir a exploração (*exploration*) do espaço de soluções. Os testes alterando $p_c = 0,9$ apresentaram nenhum efeito prático para esse problema, e o destaque ficou na ultima linha da tabela, onde ao usar em conjunto os parâmetros que individualmente melhoraram os resultados, obteve-se soluções muito próximas da ótima e um desempenho bem superior à busca aleatória.

Parâmetros				**Resultados GA**		**Resultados RS**		#
n	T	p_c	p_m	**Média ± IC**	**D.P.**	**Média ± IC**	**D.P.**	**GA > RS**
30	10	0,8	0,01	8693,10 ± 47,04	758,98	8419,40 ± 39,28	633,80	659
50	10	0,8	0,01	9084,39 ± 32,39	522,60	8736,45 ± 32,43	523,22	716
30	100	0,8	0,01	9369,35 ± 26,09	421,03	9352,98 ± 15,41	248,67	578
30	10	0,8	0,05	8995,23 ± 35,40	571,19	8481,60 ± 38,72	624,75	741
30	100	0,8	0,05	9670,58 ± 12,67	204,53	9367,58 ± 15,16	244,68	852
30	10	0,9	0,01	8729,25 ± 45,65	736,59	8453,47 ± 39,33	634,68	623
30	10	0,9	0,05	8997,06 ± 35,47	572,39	8504,56 ± 38,22	616,72	735
50	100	0,8	0,05	9739,77 ± 8,45	136,34	9454,56 ± 12,07	194,75	927

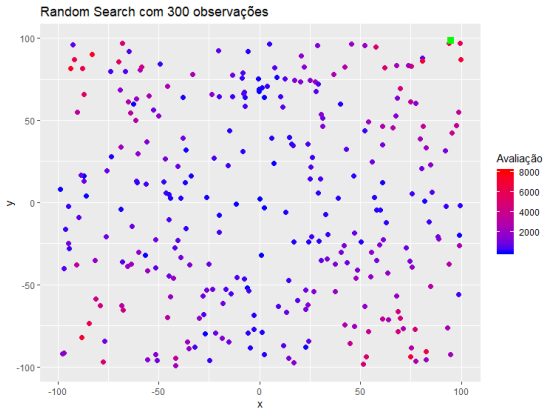
Tabela 2 – Resultados teste simples com alguns parâmetros

Além disso, pode ser vista a distribuição de um dos testes de busca aleatória, da ultima geração no GA e um comparativo da distribuição em algumas gerações Figura 11. O ponto verde indica o melhor resultado para cada uma das distribuições.

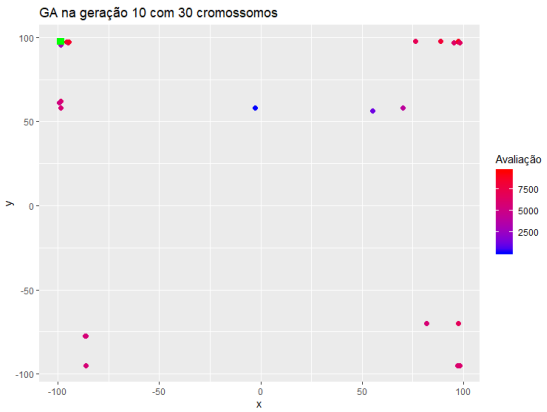
3.2 Modelo de Ising

O modelo de Ising[1] é um modelo da física para estudos de fênomenos magnéticos em materiais. Ising resolveu analiticamente o modelo para uma dimensão e depois

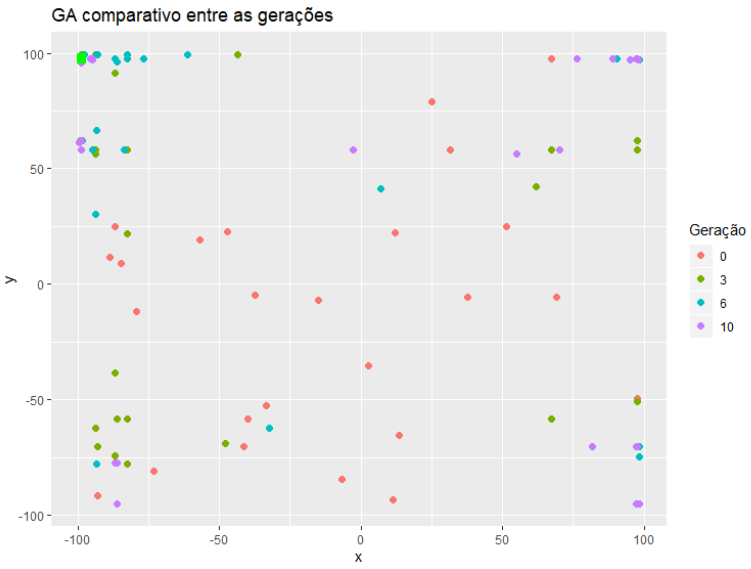
[1] O modelo também é conhecido como Lenz-Ising, pois Lenz introduziu o modelo, porém nunca calculou nenhuma de suas propriedades



(a) Distribuição dos pontos gerados no RS



(b) Distribuição da ultima geração no GA



(c) Comparativo entre algumas gerações do GA

Figura 11 – Distribuições das soluções encontradas nos algoritmos de busca aleatória e GA

Onsanger resolveu para uma rede quadrada (2D). Apesar do modelo ter sido elaborado para compreender melhor o propriedades magnéticas de certos materiais, ele se mostrou de grande utilidade para modelar problemas de outras áreas de estudos de fenômenos cooperativos, como por exemplo a dissertação de Junior (2014) onde usa o modelo de Ising aplicado a um estudo de criminalidade. É considerado um dos mais simples e estudado dos modelos de mecânica estatística.

O modelo define uma grade de *spins* σ_s que podem conter os valores -1 e +1 somente. Esses spins possuem uma interação de energia dada por $-J(s,s')\sigma_s\sigma_{s'}$, ou seja, o valor de energia de dois spins será $-J(s,s')$ se os spins forem diferentes, e $+J(s,s')$ se forem iguais, e adicionalmente podem interagir com um campo magnético externo h com energia $-h\sigma_s$. (MCCOY; WU, 1973).

Seja então $\sigma_s \in \{-1,+1\}$ cada vértice do modelo, Λ representando a grade do modelo, e $\Omega_\Lambda = \{-1,+1\}^\Lambda$ o espaço de possíveis estados do modelo, define-se $\sigma \in \Omega_\Lambda$,

$\sigma = (\sigma_s)_{s\in\Lambda}$ como um estado possível do modelo de Ising para essas configurações. O Hamiltoniano do sistema para o estado σ, $\mathcal{H}(\sigma)$, será dado por:

$$\mathcal{H}(\sigma) = -\sum_{s,s'\in\Lambda} J(s,s')\sigma_s\sigma_{s'} - \sum_{s\in\Lambda} h\sigma_s$$

Sendo $\beta = 1/\kappa\mathcal{T}$, com $\mathcal{T}$ a temperatura em Kelvin e κ a constante de Boltzmann, a função de partição é definida por

$$Z(\beta) = \sum_{\sigma\in\Omega_\Lambda} e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}$$

e a probabilidade de encontrar o estado σ

$$P(\sigma) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}}{Z(\beta)}$$

Temperaturas altas deixam β baixo, o que torna a distribuição mais plana, e todos os estados tem probabilidades mais próximas de serem encontrados, conforme a temperatura baixa, os estados de menor energia passam a ter a maior probabilidade de ser encontrado.

O modelo de duas dimensões mais simples usa uma estrutura formada por quadrados com formato retangular de dimensões $\Lambda = n \times m$, facilmente representada por uma matriz. Além disso $J(s,s')$ é um valor fixo independente dos spins e que se s e s' não forem vizinhos será igual 0. Por fim será sem campo magnético externo, ou seja, $h = 0$, e assim o Hamiltoniano pode ser reescrito na forma:

$$\mathcal{H}(\sigma) = -\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=1}^{m-1}\Big(J(s,s')\sigma_{i,j}\sigma_{i,j+1} + J(s,s')\sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j}\Big) \tag{3.1}$$

O algoritmo genético simples será usado para apresentar uma solução, isto é σ, para modelo de Ising em uma matriz 10×10, com $J(s,s') = 1$ para os spins vizinhos, sendo $\Lambda = [1,10]^2$ as posições da matriz, e a função de avaliação utilizada será baseada na Equação 3.1.

3.3 GA para o modelo de Ising

A classe cromossomo será usada para representar cada solução para o problema e conterá um vetor de valores inteiros de tamanho 100, representando assim a matriz 10×10, alinhando uma linha da matriz na sequencia da outra no vetor. Assim o nosso genótipo é uma cadeia de inteiros, onde o fenótipo será a matriz correspondente quebrando o vetor em linhas de tamanho 10.

Exemplo da relação genótipo x fenótipo para uma matriz 3×3:

$$\text{cromossomo} = [-1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, 1, -1]$$
$$\text{fenótipo} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Na implementação em Java, os cromossomos são definidos como classes, encapsulando os genes, os métodos dos operadores genéticos de crossover e mutação, e os métodos para avaliação e classificação dos cromossomos quando necessário. Para outros tipos de verificação cada cromossomo também guardou informações sobre seus cromossomos pais.

Para o método de seleção foi usado o método da roleta viciada, definindo a proporção de seleção de cada estado presente na população relacionado diretamente a sua função de avaliação. A primeira função testada foi usando o resultado da Equação 3.1 somando o valor de $\min_{\sigma \in \Omega_\sigma}(\mathcal{H}(\sigma))$ e multiplicando por -1 para conter somente valores positivos. Essa função não mostrou bons resultados pois não houve muita pressão seletiva, pois cromossomos com melhores valores recebiam pouco ou nenhum destaque na fase de seleção, assim o algoritmo precisava de muitas gerações para começar um avanço em encontrar melhores soluções. Na literatura sobre GA é mencionado o fato da função de avaliação ser muito plana o algoritmo passa a ser menos eficiente, isso também ocorre com outros métodos de otimização, como por exemplo os que usam gradientes por aproximação numérica, pois em funções que mostram pouco crescimento, a aproximação pode falhar em indicar a direção de maior crescimento. Os resultados para a seleção de uma das gerações pode ser visto na Tabela 9 do Anexo A. Para corrigir isso foi adotada a função de avaliação $e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}$ o que leva a uma probabilidade de seleção do indivíduo definida por:

$$Pr(\sigma) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}}{\sum_{\sigma \in \theta_\Lambda} e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}} \tag{3.2}$$

Onde $\theta_\Lambda \in \Omega_\Lambda$ representa a população de estados daquela geração do algoritmo e o método de seleção é parecido com o apresentado como seleção de Boltzmann na subseção 2.2.3. O problema que deve ser definido um novo parâmetro para o algoritmo dado por β, que como valor inicial será usado o 0,05. Os resultados foram muito melhores e podem ser verificados na Tabela 10 do Anexo A.

O operador de crossover será testado com o método de ponto único, dois pontos e uniforme, e para o operador de mutação cada posição do gene será sorteado com a probabilidade p_m para ser eleito para alteração e depois cada estado possível, no caso dois $\{-1, +1\}$, será sorteado com probabilidades iguais para definir o novo estado do gene.

A população inicial é definida sorteando os σ_s de cada posição das matrizes de cada um dos indivíduos. O programa terá definido uma classe para a população que é

responsável por criar a geração inicial aleatória, controlar aspectos sobre a geração como melhor e pior cromossomo e algumas estatísticas sobre a população como quantidade de indivíduos que sofreram mutação e crossover, entre outros.

Da mesma forma que o teste inicial, serão testados algumas variações dos parâmetros do algoritmo e comparado com os resultados da busca aleatória. Além disso será verificado, assim como no mencionado em Mitchell (1996) sobre o trabalho de Prugel-Bennett e Shapiro (1994), as distribuições dos valores de $\mathcal{H}(\sigma)$ para as gerações 0, 10, 20, 30 e 40 do GA, e calculando as estatísticas para média e variância da amostra de 1000 testes. De forma ampliar as comparações dos resultados finais, os dois algoritmos foram modificado para ordenar as populações, que no caso do GA é feito a cada geração.

3.4 Testes e resultados

O começo da Tabela 3 demonstra os resultados mantendo-se os parâmetros fixo e alterando apenas o método usado no crossover, indicado pelo índice nos valores de p_c, com 1 para ponto único, 2 para crossover em dois pontos e u para uniforme. Todos são muitos superiores ao método RS, provavelmente em virtude do espaço de soluções ser dado por 2^{10*10} e a quantidade de observações geradas para o método cobrir uma parte pequena do espaço.

Parâmetros				**Resultados GA**		**Resultados RS**		**#**
n	T	p_c	p_m	**Média ± IC**	**D.P.**	**Média ± IC**	**D.P.**	**GA < RS**
30	10	$0,8_1$	0,02	-58.90 ± 0,54	8,77	-39,05 ± 0,33	5,43	978
30	10	$0,8_2$	0,02	-60,21 ± 0,57	9,33	-38,98 ± 0,32	5,22	970
30	10	$0,8_u$	0,02	-60,42 ± 0,63	10,30	-39,39 ± 0,35	5,68	960
30	100	$0,8_1$	0,02	-122,24 ± 0,71	11,57	-48,54 ± 0,27	4,49	1000
30	100	$0,8_2$	0,02	-126,05 ± 0,75	12,19	-47,94 ± 0,27	4,48	1000
30	100	$0,8_u$	0,02	-130,47 ± 0,73	11,89	-48,23 ± 0,28	4,54	1000

Tabela 3 – Resultados da média de energia para 1000 testes com modelo Ising alterando tipo de crossover

Comparando o resultado entre os 3 métodos de crossover, é possível pela média dos resultados verificar pequena melhora usando o método para 2 pontos e mais uma pequena melhora para o uniforme, mais visível nos testes com mais gerações. Isso pode ser explicado pela construção do genótipo do cromossomos, como cada linha da matriz está na sequência da outra, podemos ter *clusters* com bom resultados de forma quadrada, como mostrado na Figura 12. A região vermelha possui uma baixa energia contribuindo de forma positiva para a avaliação do indivíduo, porém essa área não consegue ser isolada pelos operadores de crossover de 1 ou 2 pontos, mas tem boa probabilidade de ser compartilhada em partes ou inteira através do operador uniforme. Outro fator que piora nessa condição é os genes

caronistas, discutidos na seção 2.5, pois a área azul ao apresentar pior resultado tem alta probabilidade de pegar carona com a área vermelha do cromossomo.

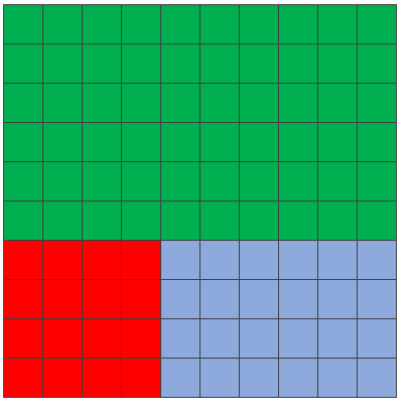


Figura 12 – Exemplo de uma região (vermelha) com baixa energia, próxima de outras com energias superiores

Nos próximos testes fica fixado o crossover uniforme, além disso pela característica do GA, quanto mais iterações do algoritmo permitida, melhores resultados deve apresentar, portanto serão avaliados os demais parâmetros e os resultados estão apresentados na Tabela 4. Pelos valores de média apresentado é possível ver que os parâmetros $p_c = 0,8$ e $p_m = 0,02$, apresentaram os melhores resultados, quando o p_m é aumentado, como o algoritmo não tem elitismo, é provável que os melhores esquemas se perdem com a mutação. O p_c com valores mais baixos teve um resultado pior, que indica que com menos crossover deve ter ocorrido menos *exploitation* do algoritmo levando a uma convergência mais lenta.

Parâmetros				**Resultados GA**		**Resultados RS**		**#**
n	T	p_c	p_m	**Média ± IC**	**D.P.**	**Média ± IC**	**D.P.**	**GA < RS**
30	40	0,8	0,02	-105,07 ± 0,72	11,66	-44,98 ± 0,31	5,01	1000
30	40	0,8	0,05	-93,90 ± 0,71	11,52	-44,63 ± 0,29	4,81	1000
30	40	0,8	0,01	-101,69 ± 0,74	11,96	-44,91 ± 0,30	4,85	1000
40	40	0,8	0,02	-111,06 ± 0,73	11,89	-46,24 ± 0,30	4,87	1000
40	40	0,8	0,01	-109,59 ± 0,73	11,84	-46,02 ± 0,31	5,04	1000
30	40	0,95	0,02	-108,42 ± 0,75	12,15	-44,91 ± 0,31	5,14	1000
30	40	0,7	0,02	-101,26 ± 0,69	11,27	-44,78 ± 0,31	5,10	1000

Tabela 4 – Resultados da média de energia para 1000 testes com modelo Ising alterando outros parâmetros

Os resultados mostrados foram para o melhor cromossomo encontrado entre todas as gerações do GA. A Tabela 5 mostra mais dois resultados para a implementação do elitismo mantendo os 3 melhores cromossomos para a próxima população. Os valores indicam que houve pequena melhora no algoritmo.

Outro parâmetro que pode ser modificado é β, introduzido na função de avaliação e portanto com impacto direto na seleção. A Tabela 6 mostra os resultados que se

Parâmetros				Resultados GA		Resultados RS		#
n	T	p_c	p_m	Média ± IC	D.P.	Média ± IC	D.P.	GA < RS
30	40	0,8	0,02	-110,66 ± 0,66	10,73	-44,81 ± 0,30	5,88	1000
30	40	0,95	0,02	-113,69 ± 0,70	11,36	-44,75 ± 0,30	4,99	1000

Tabela 5 – Resultados da média de energia para 1000 testes com modelo Ising e usando elitismo mantendo 3 cromossomos

comportam como o esperado. Diminuir o β equivale aumentar a temperatura, e todos os estados passam a ter maior probabilidade de ser selecionado. Já quando o valor é elevado, ou seja, a temperatura fica menor, os estados de menor energia possuem maior probabilidade de ocorrerem, o que eleva a pressão seletiva do algoritmo.

Parâmetros					Resultados GA		Resultados RS		#
n	T	p_c	p_m	β	Média ± IC	D.P.	Média ± IC	D.P.	GA < RS
30	40	0,8	0,02	0,05	-113,69 ± 0,70	11,36	-44,75 ± 0,30	4,99	1000
30	40	0,95	0,02	0,01	-90,78 ± 0,66	10,74	-44,79 ± 0,30	4,87	1000
30	40	0,95	0,02	0,1	-120,45 ± 0,70	11,35	-44,95 ± 0,30	4,95	1000

Tabela 6 – Resultados da média de energia para 1000 testes com modelo Ising, usando elitismo com 3 cromossomos e variando β

Na Figura 13 percebe-se que ao aumentar o β, o algoritmo converge mais rapidamente e pode gerar melhores soluções, porém é necessário manter o equilíbrio entre o *exploitation* e *exploration*. Um valor muito alto para esse parâmetro, pode levar a uma convergência genética prematura, diminuindo as possibilidades de exploração do espaço de soluções (*exploration*).

Para completar as avaliações, mantendo os parâmetros $n = 50$, $T = 40$, $p_c = 0,95$, $p_m = 0,02$ e com elitismo mantendo 3 cromossomos, foram salvos os valores de energia da população dos 1000 testes para as gerações 0, 10, 20, 30 e 40. Depois foi calculado a média e variância dessas gerações para cada um dos testes e finalmente feita a média dos parâmetros entre os 1000 testes obtendo os valores mostrados na Tabela 7

Geração	**0**	**10**	**20**	**30**	**40**
Média	0,00	-47,49	-78,76	-96,46	-106,86
Variância	178,55	158,42	117,09	106,79	103,55

Tabela 7 – Resultados da média de energia para 1000 testes das gerações 0, 10, 20, 30 e 40 do modelo Ising e usando elitismo com 3 cromossomos

Diferente dos resultados vistos em Prugel-Bennett e Shapiro (1994), que não usou operador de mutação, a variância no teste executado reduz pouco conforme se passam as gerações, o que é esperado já que a mutação busca manter diversidade na população. Refazendo os testes com $p_m = 0$ obtemos a seguinte Tabela 8. O operador de mutação

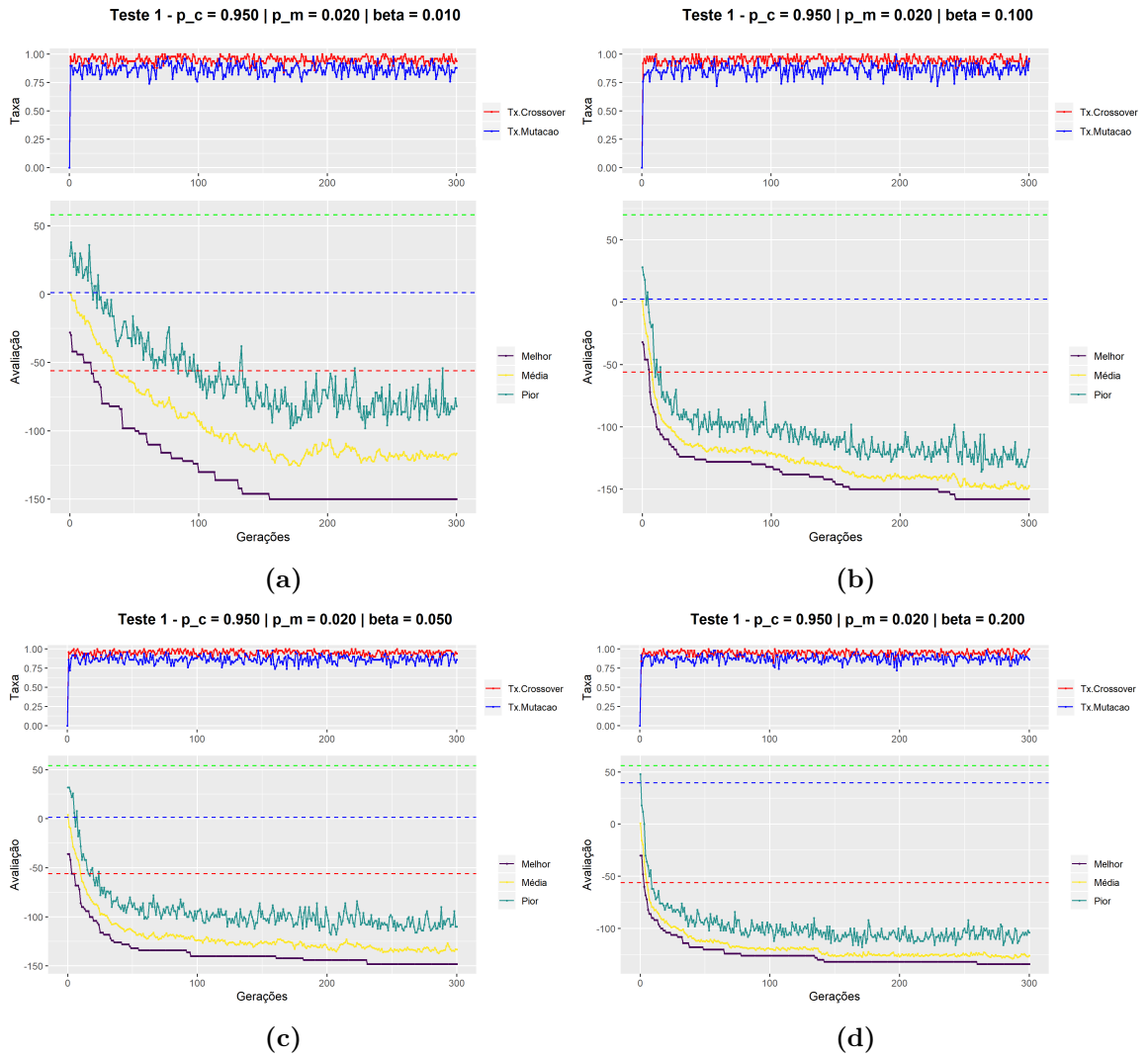


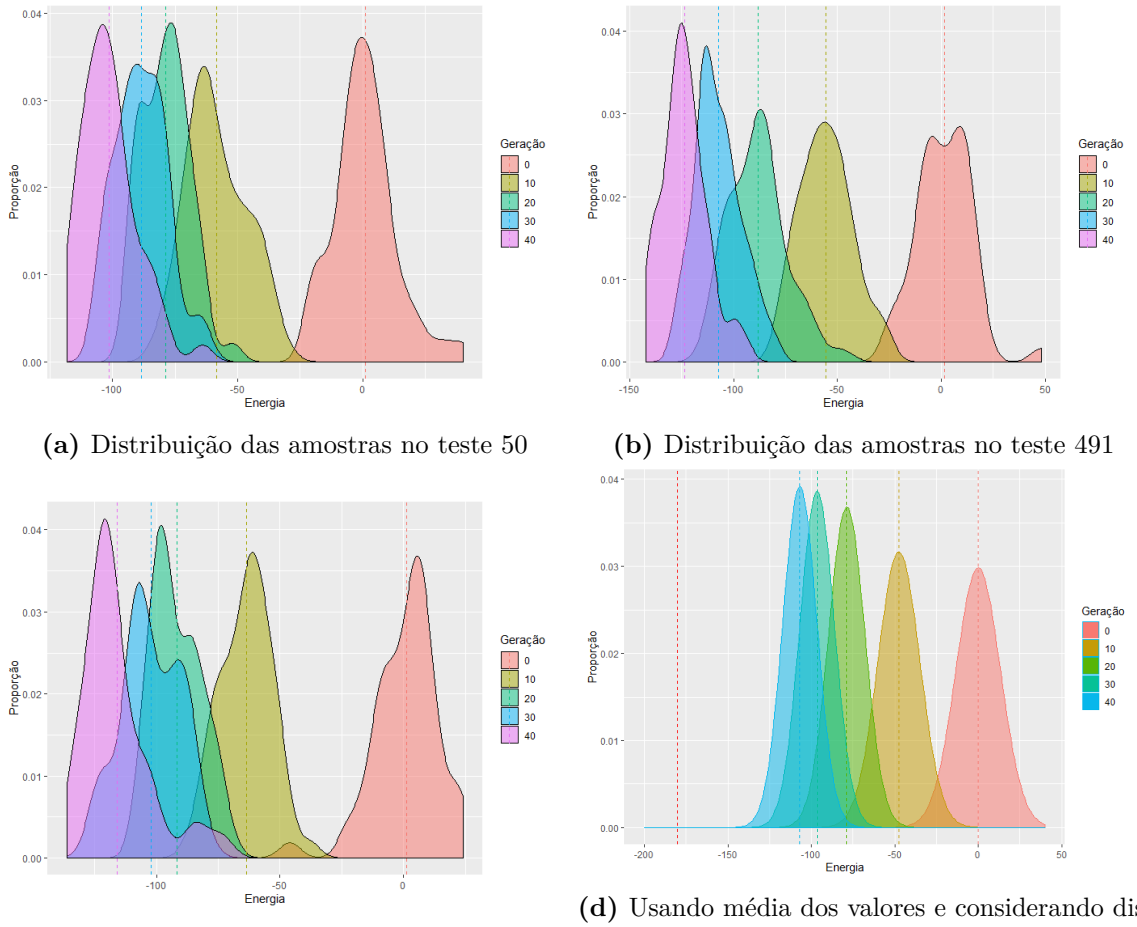
Figura 13 – Evolução do GA variando o β

mantém a variância na população pois ele garante o *exploration*, mantendo a diversidade da população.

Geração	**0**	**10**	**20**	**30**	**40**
Média	-0,02	-52,34	-85,29	-96,25	-98,72
Variância	180,96	120,07	36,62	8,01	1,54

Tabela 8 – Resultados da média de energia para 1000 testes com modelo Ising usando elitismo mantendo 3 cromossomos

Na Figura 16 pode ser visto os resultados das médias e variâncias da população durante as gerações. Os gráficos representam a média das duas medidas de cada geração pelos 500 testes realizados. Quando a taxa de mutação é mantida em 0, percebe-se a rápida convergência do GA, chegando a um patamar mínimo de energia, e a variância com tendência a zero. Ao colocar uma pequena taxa de mutação, o algoritmo converge mais lentamente, porém obtém resultados de média melhores, e a variância se mantém em



(a) Distribuição das amostras no teste 50

(b) Distribuição das amostras no teste 491

(c) Distribuição das amostras no teste 900

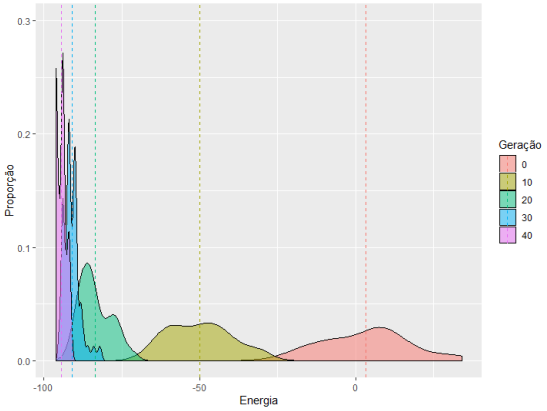
(d) Usando média dos valores e considerando distribuição normal

Figura 14 – Distribuições das populações para gerações 0, 10, 20 e 40, com $p_m = 0,02$

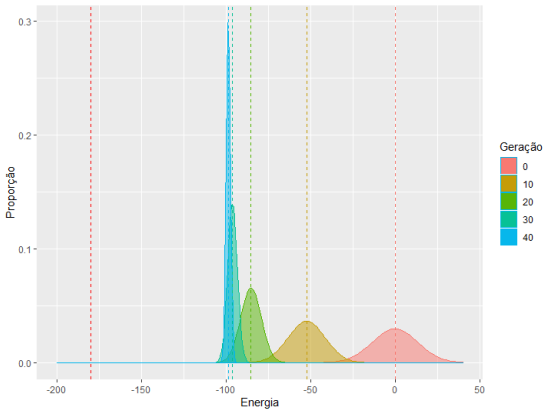
um patamar. Isso é desejável no GA, pois indica que se manteve a diversidade genética. Além disso também é mostrado novamente o desempenho entre os operadores de crossover de um ponto e uniforme, e como esperado, o uniforme conseguiu médias melhores, mas a variância levou mais iterações para diminuir, justificado pelo fato desse operador obter maior diversidade genética no início, explorando melhor o espaço de soluções e garantindo melhores médias.

Por último na Figura 17 é exposto a evolução do algoritmo durante as gerações com variações no parâmetro de probabilidade de mutação, mostrando o melhor, pior cromossomo da população além de sua avaliação média. As linhas horizontais tracejadas mostram o melhor, pior e média do método de busca aleatório, considerando sempre a amostra para esse método de tamanho $n \cdot T$ e portanto com $50 \cdot 300 = 15000$ observações.

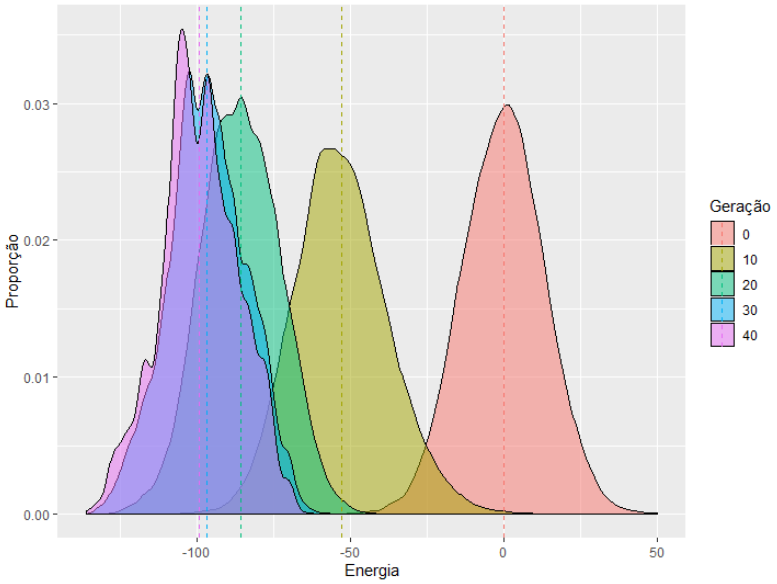
Outros gráficos de resultados podem ser vistos na Figura 18 do Anexo A.



(a) Distribuição das amostras no teste 43

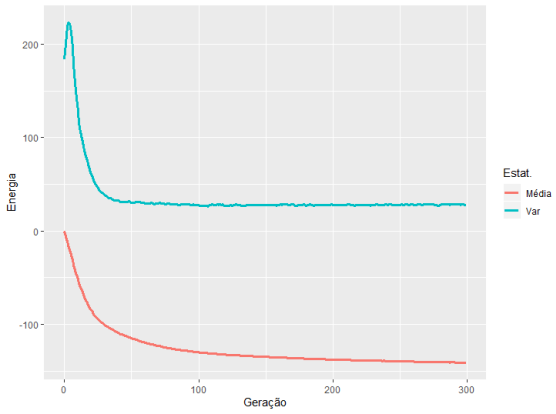


(b) Usando média dos valores e considerando distribuição normal

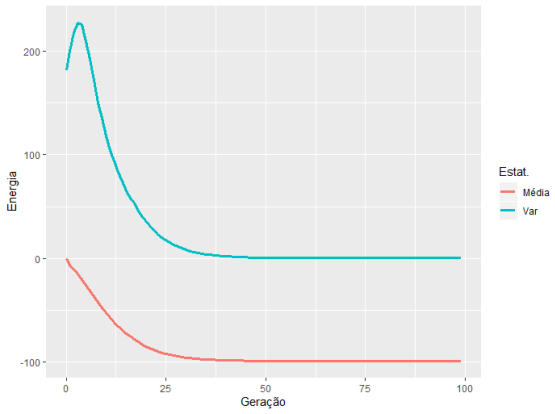


(c) Usando amostra dos 500 testes e agrupando por geração

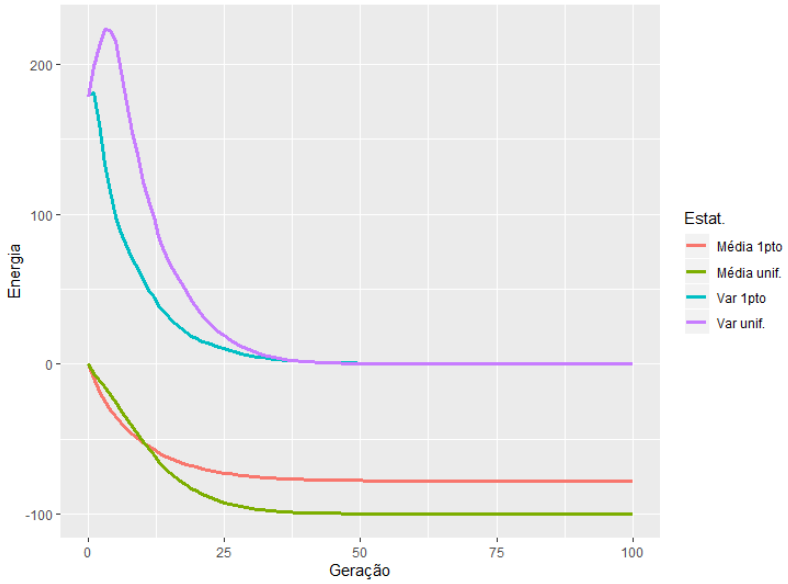
Figura 15 – Distribuições das populações para gerações 0, 10, 20 e 40, com $p_m = 0$,



(a) Usando $p_m = 0,005$

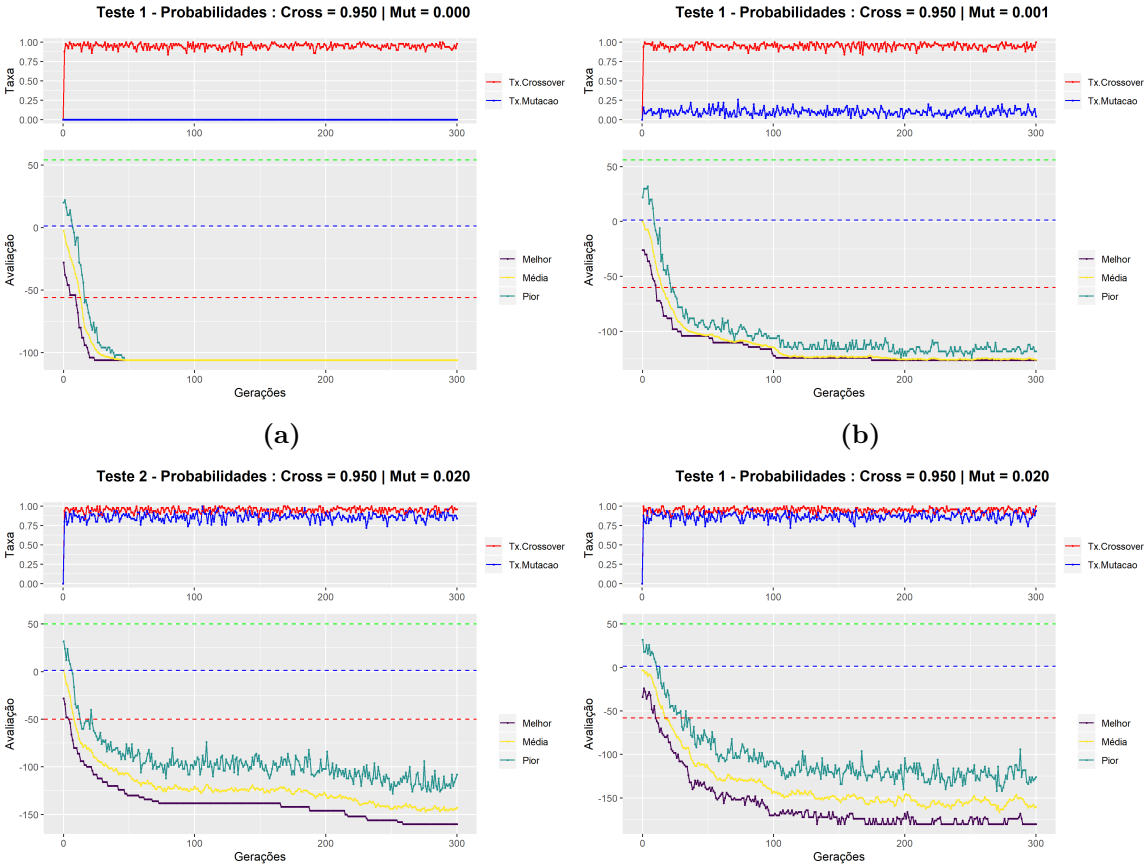


(b) Usando $p_m = 0$



(c) Usando $p_m = 0$ e comparando dois métodos de crossover

Figura 16 – Valores das médias e variâncias da população durante as gerações com $p_m = 0,005$. Os valores apresentados são da média de 500 testes



(a) **(b)**

(c) **(d)** Sem elitismo

Figura 17 – Evolução do algoritmo genético durante gerações

4 Conclusão

O algoritmo genético é uma outra ferramenta que dispomos pela busca de soluções ótimas. Como visto na literatura, podemos considerar que na verdade é um algoritmo com foco em busca de soluções satisfatórias do que exatamente da solução ótima. Uma das vantagens está na facilidade de implementação do algoritmo, porém possui parâmetros de configuração que ainda não se conhece formas de definir analiticamente os melhores valores, além de dependerem das condições do problema a ser resolvido. Com isso a maior parte dos trabalhos se baseiam em resultados empíricos para ajuste dos parâmetros. Foi visto que o GA também apresenta algumas dificuldades com certas condições, mas que podem ser amenizadas se propriamente codificado e parametrizado.

Nos testes realizados, o GA se mostrou bem mais eficiente que a busca aleatória, alcançando resultados mais expressivos. Portanto em problemas que por limitações inerentes seriam usados o algoritmo de busca aleatória, o algoritmo genético se apresenta como uma outra abordagem possível.

Ficou demonstrado que é muito importante as escolhas feitas para a arquitetura do GA e seus parâmetros podem definir o sucesso do algoritmo. No teste sobre o modelo de Ising, percebeu-se que a utilização de uma função de avaliação, que não era a mais apropriada, resultou em ineficiência do algoritmo obtendo resultados iguais e até inferiores que a busca aleatória, fato contornado usando outra função. Esse tipo de detalhe é exatamente o LINDEN menciona sobre quanto mais informação sobre o problema conseguir inserir no algoritmo, melhor será a resposta, e por isso não existe uma padrão do GA que seja ideal para todos os problemas.

Outro conceito que impôs diferença nos resultados foi o uso do elitismo, pois ao manter os melhores cromossomos de uma geração para outra, sustentou-se o melhor resultado até o fim do processo. Sem o elitismo era possível ver nos gráficos que o melhor cromossomo em gerações $t + 1$ ficavam com pior resultado que o o melhor da geração t.

No modelo de Ising, o algoritmo mostrou através da análise das médias e variâncias, que caminhava para uma convergência, e com boa probabilidade de se tiver gerações suficientes, encontrar o estado de menor energia

As aplicações para o GA são as mais variadas, podendo ser usado em problemas de busca de máximo ou mínimo de funções multivariadas e também com multiobjetivos, na busca de ordenações mais eficientes, como é o caso do problema do caixeiro viajante, e programação genética, onde o GA consegue criar pequenos algoritmos para solução de problemas.

Umas das aplicações interessantes para o algoritmo é na busca dos coeficientes de uma rede neural. Para as redes usadas em processos de *machine learning* para classificação, pode ser usado de forma a determinar os coeficientes iniciais para o algoritmo de *backpropagation*, que por ser uma função com vários máximos locais, dependendo do ponto inicial utilizado pode ficar preso a um que não seja o máximo global. Normalmente o ponto inicial é definido aleatoriamente, e nesse sentido que poderia ser usado o GA, que teria uma população definida por cromossomos de valores reais definindo os coeficientes inicias da rede. Para cada cromossomo poderia ser executado o *backpropagation* e verificado através dos resultados qual obteve melhor taxa de sucesso de classificação, e usado esse valor como função de avaliação.

Ainda com redes neurais, existem os casos que a rede define o comportamento de um sistema em resposta a sensores de entrada. O caso clássico de demonstração dessa aplicação é do treinar o computador para jogar determinado jogo eletrônico. A população fica definida como cromossomos de valores reais com os coeficientes da rede e o resultado da rede só pode ser visto após determinada simulação. A população do GA testada contra o resultado de pontuação, que será a função de avaliação do algoritmo, é evoluída então combinando os melhores resultados e aplicando mutação em alguns.

Outra característica interessante, que ainda pode ser explorada, é a possibilidade de combinar o GA com outro algoritmo de otimização, por exemplo direcionando a mutação para uma busca de máximo local da função de avaliação. Esse pode ser um diferencial combinando a qualidade do GA de encontrar soluções satisfatórias ou próximas a máximos locais e combinar com um algoritmo mais eficiente de maximização local, como o *hill climbing*.

O algoritmo genético ainda precisa ser muito analisado de forma a entender melhor seu mecanismo de funcionamento e dessa forma conseguir determinar os melhores parâmetros, e tem demonstrado certa popularidade com as novas técnicas de AI e *machine learning*. Portanto, com que foi apresentado de recursos e resultados do algoritmo, compensa estudar seu uso para determinados problemas, caso esses não estejam respondendo bem aos métodos convencionais e mais eficientes.

Para trabalhos futuros podem ser seguido os testes com o modelo proposto de Ising, trabalhando com contornos e busca de soluções para acoplamentos do modelo, e modificando o valor de β ou até mesmo fazendo ele variar conforme as iterações do algoritmo. Podem ser exploradas as técnicas de combinar com outros métodos de otimização, e também avaliar o algoritmo modificado que trabalha com uma ou mais populações isoladas e com troca de indivíduos aleatórias entre elas. Ainda é necessário também avaliar o algoritmo com relação a seu desempenho computacional e outro passo importante seria o de executar o algoritmo usando paralelismo, pois a fase de avaliação e seleção poderia facilmente ser colocada em tarefas concorrentes, otimizando o tempo de resposta do algoritmo.

Referências

COELLO, C. C.; LAMONT, G. B.; VELDHUIZEN, D. A. van. **Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems (Genetic and Evolutionary Computation)**. New York, NY: Springer, 2007. ISBN 978-0-387-36797-2.

GOLDBERG, D. E. **Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning**. 1. ed. Reading, MA: Addison-Wesley Professional, 1989. ISBN 0201157675.

GREFENSTETTE, J. J. **Genetic Algorithms for Machine Learning**. New York, NY: Springer-Verlag GmbH, 2012. ISBN 1461361826.

HOLLAND, J. H. **Adaptation in Natural and Artificial Systems**. 2. ed. Cambridge, MA: MIT Press Ltd, 1992. ISBN 0262581116.

JACOBSON, B. K. L. **Genetic Algorithms in Java Basics**. New York, NY: Springer-Verlag GmbH, 2015.

JUNIOR, J. E. de L. **Modelo de Ising Aplicado ao estudo da criminalidade**. 56 f. Dissertação (Mestrado em Ciências) — Escola de Artes, Ciências e Humanidades da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

KLUG, W. S. et al. **Concepts of Genetics**. São Francisco, CA: Benjamin Cummings, 2011. ISBN 978-0-321-72412-0.

KWONG, S.; MAN, K.-F.; TANG, K.-S. **Genetic Algorithms**. London: Springer London, 2001. ISBN 1852330724.

LINDEN, R. **Algoritmos Geneticos**. 2. ed. Rio de Janeiro: Brasport, 2008. ISBN 978-8574523736.

MCCOY, B. M.; WU, T. T. **The Two-Dimensional Ising model**. Cambridge, Mass: Harvard University Press, 1973. [by] Barry M. McCoy and Tai Tsun Wu., Includes bibliographical references. ISBN 0674914406.

MITCHELL, M. **An Introduction to Genetic Algorithms (Complex Adaptive Systems)**. 1. ed. Cambridge, MA: The MIT Press, 1996. ISBN 0262133164.

MéLO, L. C. de. **Magnetização Espontânea em Modelos de Ising Uni-Dimensionais com Interação de Longo Alcance**. 89 f. Dissertação (Mestrado em Matemática) — Departamento de Matemática da Universidade de Brasília, Brasília, 2014.

NIX, A. E.; VOSE, M. D. Modeling genetic algorithms with markov chains. **Annals of Mathematics and Artificial Intelligence**, Springer Science and Business Media LLC, v. 5, n. 1, p. 79–88, mar 1992.

PRUGEL-BENNETT, A.; SHAPIRO, J. L. Analysis of genetic algorithms using statistical mechanics. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), v. 72, n. 9, p. 1305–1309, feb 1994.

REEVES, J. E. R. C. R. **Genetic Algorithms: Principles and Perspectives: A Guide to Ga Theory**. [S.l.]: SPRINGER NATURE, 2002. ISBN 1402072406.

SIVANANDAM, S.; DEEPA, S. N. **Introduction to Genetic Algorithms**. New York, NY: Springer, 2007. ISBN 978-3-540-73189-4.

SPALL, J. C. **Introduction to Stochastic Search and Optimization**. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2003. ISBN 0471330523.

VOSE, M. D. **The Simple Genetic Algorithm: Foundations and Theory**. Cambridge, MA: The MIT Press, 1999.

VOSE, M. D.; LIEPINS, G. E. Punctuated equilibria in genetic search. **Complex Systems**, v. 5, 1991.

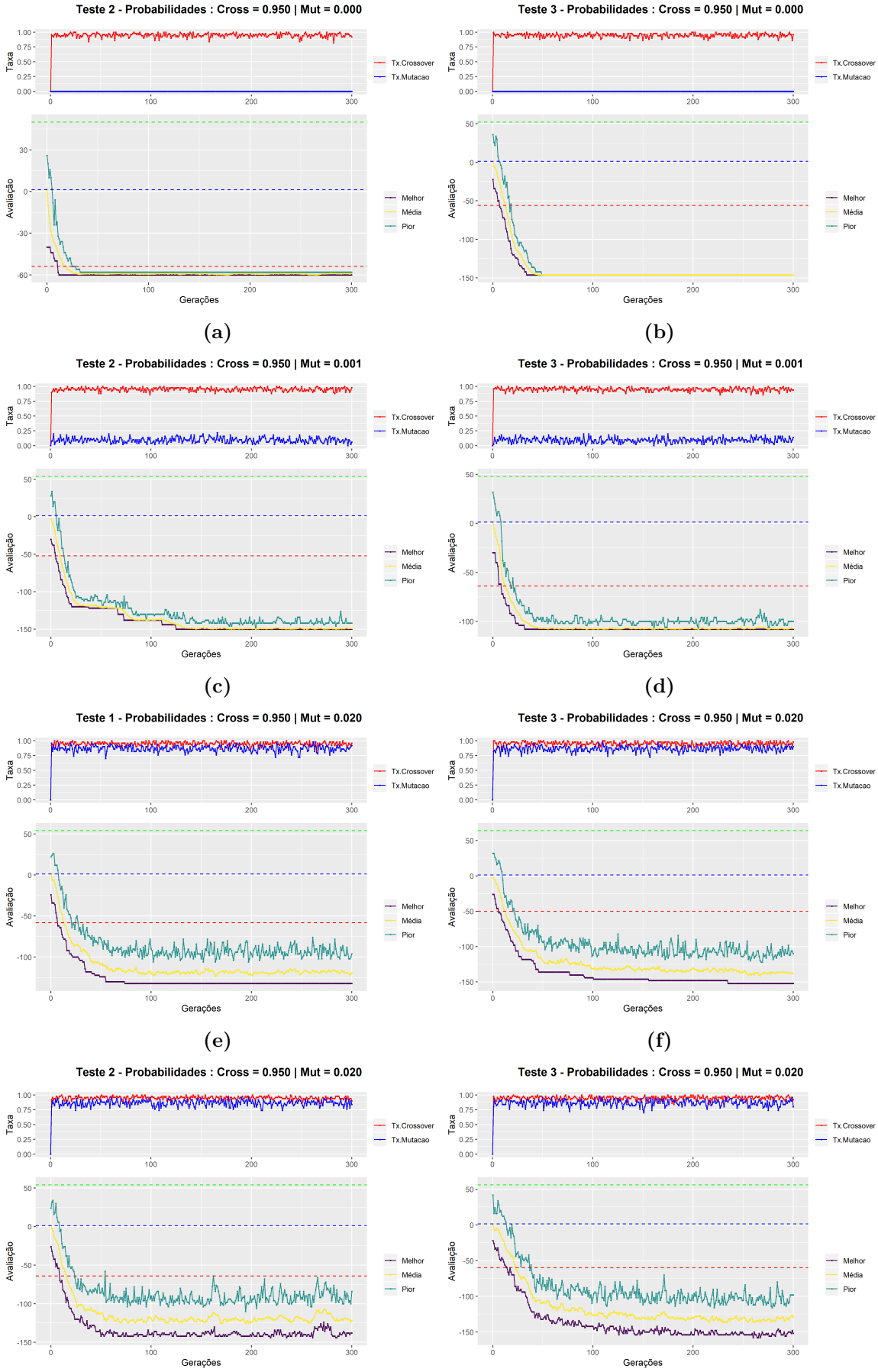
ANEXO A – Resultados

Cromossomo	Avaliação	$\mathcal{H}(\sigma)$	Taxa de seleção	Proporção estimada
287	222	42	0,067	0,040
277	206	26	0,050	0,037
280	204	24	0,033	0,037
282	204	24	0,017	0,037
285	200	20	0,000	0,036
276	194	14	0,000	0,035
291	194	14	0,083	0,035
286	192	12	0,017	0,034
293	192	12	0,033	0,034
283	190	10	0,033	0,034
288	190	10	0,017	0,034
289	190	10	0,000	0,034
299	188	8	0,017	0,034
273	186	6	0,067	0,033
300	186	6	0,017	0,033
292	184	4	0,033	0,033
274	182	2	0,000	0,033
297	182	2	0,067	0,033
271	180	0	0,033	0,032
281	180	0	0,033	0,032
295	180	0	0,050	0,032
290	178	-2	0,050	0,032
294	178	-2	0,033	0,032
278	176	-4	0,017	0,032
284	176	-4	0,067	0,032
279	174	-6	0,033	0,031
275	172	-8	0,067	0,031
298	172	-8	0,033	0,031
272	164	-16	0,000	0,029
296	160	-20	0,033	0,029

Tabela 9 – Resumo da geração 9 com média de avaliação 185,86 mostrando a taxa de amostragem da seleção e o que era esperado para a proporção usando a função de avaliação da Equação 3.1

Cromossomo	Avaliação	$\mathcal{H}(\sigma)$	Taxa de seleção	Proporção estimada
178	6,69	-38	0,100	0,063
160	6,05	-36	0,100	0,057
159	5,47	-34	0,033	0,052
166	5,47	-34	0,067	0,052
162	4,95	-32	0,067	0,047
171	4,95	-32	0,000	0,047
180	4,95	-32	0,033	0,047
167	4,48	-30	0,050	0,042
175	4,48	-30	0,017	0,042
161	4,06	-28	0,050	0,038
163	4,06	-28	0,033	0,038
169	4,06	-28	0,017	0,038
151	3,67	-26	0,050	0,035
155	3,67	-26	0,033	0,035
170	3,32	-24	0,017	0,031
176	3,32	-24	0,050	0,031
153	3,00	-22	0,067	0,028
157	3,00	-22	0,033	0,028
174	3,00	-22	0,050	0,028
152	2,72	-20	0,000	0,026
164	2,72	-20	0,050	0,026
165	2,72	-20	0,000	0,026
158	2,46	-18	0,017	0,023
154	2,23	-16	0,033	0,021
168	2,01	-14	0,000	0,019
173	2,01	-14	0,000	0,019
156	1,82	-12	0,033	0,017
179	1,82	-12	0,000	0,017
172	1,22	-4	0,000	0,012
177	1,11	-2	0,000	0,010

Tabela 10 – Resumo da geração 5 com média de avaliação 3.516 mostrando a taxa de amostragem da seleção e o que era esperado para a proporção usando a função de avaliação da Equação 3.2



(a) **(b)**

(c) **(d)**

(e) **(f)**

(g) Sem elitismo **(h)** Sem elitismo

Figura 18 – Evolução do algoritmo genético durante gerações

Listagem 2 – Resultado de um ciclo de seleção, crossover e mutação do GA para o modelo de Ising

```
Geração: 1 | Média Avaliação: 1.601593
#### CHILD #####
ID: 54
Fenotipo:
1 | -1 |  1 | -1 | -1 |  1 |  1 | -1 | -1 |  1
-------------------------------------------------
1 |  1 |  1 | -1 | -1 |  1 |  1 | -1 | -1 |  1
-------------------------------------------------
1 |  1 | -1 | -1 |  1 |  1 |  1 |  1 | -1 |  1
-------------------------------------------------
1 |  1 | -1 | -1 |  1 | -1 |  1 |  1 |  1 | -1
-------------------------------------------------
1 |  1 | -1 |  1 | -1 | -1 |  1 |  1 |  1 | -1
-------------------------------------------------
1 |  1 | -1 | -1 | -1 | -1 |  1 |  1 |  1 | -1
-------------------------------------------------
1 |  1 | -1 |  1 | -1 | -1 |  1 |  1 |  1 |  1
-------------------------------------------------
1 |  1 |  1 | -1 | -1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1
-------------------------------------------------
-1 |  1 | -1 | -1 |  1 | -1 | -1 | -1 |  1 | -1
-------------------------------------------------
1 | -1 | -1 |  1 |  1 |  1 | -1 |  1 |  1 |  1

#1:  60 | #-1:  40

Avaliação: 6.685894
#### PARENT 1 #####
ID: 11
Fenotipo:
1 | -1 | -1 | -1 | -1 | -1 |  1 | -1 | -1 |  1
-------------------------------------------------
-1 |  1 |  1 | -1 | -1 |  1 |  1 | -1 | -1 | -1
-------------------------------------------------
1 |  1 | -1 | -1 | -1 |  1 |  1 |  1 | -1 |  1
-------------------------------------------------
1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1 | -1 |  1 | -1
-------------------------------------------------
-1 |  1 | -1 |  1 | -1 | -1 | -1 |  1 |  1 | -1
-------------------------------------------------
1 |  1 |  1 | -1 | -1 | -1 |  1 |  1 |  1 | -1
-------------------------------------------------
1 | -1 | -1 |  1 |  1 | -1 | -1 |  1 |  1 |  1
-------------------------------------------------
1 | -1 | -1 | -1 | -1 |  1 |  1 | -1 |  1 | -1
-------------------------------------------------
-1 |  1 | -1 | -1 |  1 | -1 | -1 | -1 |  1 | -1
-------------------------------------------------
1 | -1 | -1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1

#1:  52 | #-1:  48

Avaliação: 1.000000
Selecionado 2 vezes, 0.04

#### PARENT 2 #####
ID: 13
```

```
Fenotipo:
1 |  1 |  1 | -1 | -1 |  1 |  1 | -1 |  1 |  1
-------------------------------------------------
1 |  1 |  1 |  1 | -1 |  1 | -1 | -1 | -1 |  1
-------------------------------------------------
-1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1 | -1 | -1 | -1 |  1
-------------------------------------------------
-1 | -1 | -1 | -1 |  1 | -1 |  1 | -1 | -1 | -1
-------------------------------------------------
1 | -1 | -1 | -1 | -1 | -1 |  1 | -1 | -1 | -1
-------------------------------------------------
-1 |  1 | -1 |  1 | -1 |  1 |  1 | -1 | -1 | -1
-------------------------------------------------
1 |  1 | -1 | -1 | -1 | -1 |  1 |  1 |  1 | -1
-------------------------------------------------
1 | -1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1
-------------------------------------------------
-1 | -1 | -1 | -1 |  1 | -1 | -1 |  1 |  1 | -1
-------------------------------------------------
1 |  1 | -1 |  1 |  1 |  1 | -1 |  1 |  1 |  1

#1:  52 | #-1:  48

Avaliação: 4.055200
Selecionado 11 vezes, 0.22

### HERITAGE MAP ###
2 |  1 |  2 |  1 |  1 |  2 |  1 |  2 |  1 |  2
-------------------------------------------------
2 |  1 |  1 |  1 |  2 |  1 |  1 |  1 |  2 |  2
-------------------------------------------------
1 |  1 |  1 |  1 |  2 |  2 |  1 |  1 |  2 |  1
-------------------------------------------------
1 |  1 |  2 |  2 |  2 |  2 |  2 |  2 |  1 |  1
-------------------------------------------------
2 |  1 |  1 |  1 |  2 |  2 |  2 |  1 |  1 |  1
-------------------------------------------------
1 |  2 |  2 |  1 |  1 |  1 |  2 |  1 |  1 |  2
-------------------------------------------------
1 |  2 |  2 |  1 |  2 |  2 |  2 |  2 |  1 |  1
-------------------------------------------------
2 |  1 |  2 |  1 |  1 |  2 |  2 |  2 |  2 |  2
-------------------------------------------------
2 |  1 |  2 |  2 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1 |  1
-------------------------------------------------
1 |  1 |  2 |  2 |  1 |  2 |  2 |  1 |  2 |  2

### MUTATE MAP
FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA
-------------------------------------------------
FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA
-------------------------------------------------
FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA
-------------------------------------------------
FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | TR | FA | FA
-------------------------------------------------
FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA
-------------------------------------------------
FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA
-------------------------------------------------
```

```
FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA
-----------------------------------------------
FA | TR | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA
-----------------------------------------------
FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA
-----------------------------------------------
FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA | FA
```