ALGORITMOS GENÉTICOS CAP 4.1.4

Parcialmente adaptado de

http://aima.eecs.berkeley.edu

O que são algoritmos genéticos

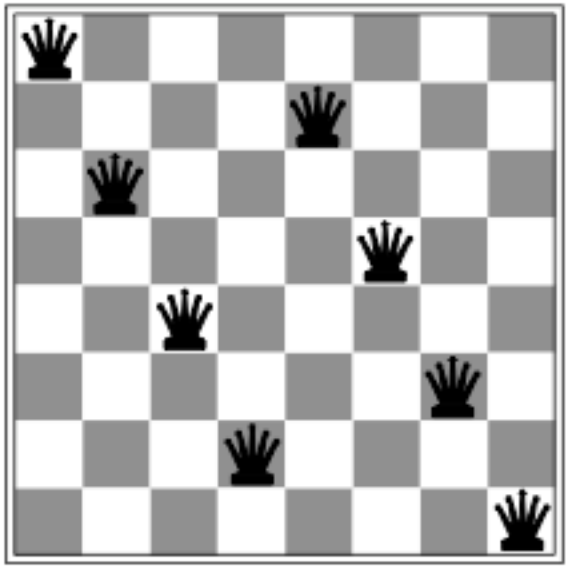
- Técnicas de optimização estocásticas inspiradas no processo de evolução por seleção natural
- Começam com uma população de indivíduos (ou cromossomas) gerados aleatoriamente
- Fazem evoluir em simultâneo a população (soluções alternativas) por intermédio de operadores de seleção, reprodução e mutação
- Os operadores genéticos permitem manter a diversidade da população e evitam que os AG convirjam prematuramente para um máximo local
- Com uma modelação correta do problema, a qualidade média das gerações sucessivas será aumentada, em particular a do seu melhor indivíduo

Conceitos básicos de AGs

- A população é constituída por um número geralmente fixo de indivíduos
- Cada cromossoma (ou indivíduo) é representado por uma cadeia de símbolos de um alfabeto finito, normalmente uma cadeia binária de 0s e 1s.
- Os cromossomas são constituídos por genes e os valores que cada gene pode tomar são os alelos.
- A qualidade de cada indivíduo é avaliada por uma função de mérito (*fitness function*) que influencia a probabilidade de seleção dos indivíduos para reprodução
- A reprodução combina dois indivíduos para gerar novo(s) indivíduo(s)
- Os filhos podem sofrer mutações genéticas aleatórias no seu cromossoma antes de serem colocados na população (geração seguinte)
- Uma geração pode ser substituída integralmente pelos seus descendentes ou manter alguns dos seus indivíduos mais aptos.

As rainhas novamente

- Podemos representar um estado por um cromossoma constituído por N-genes, em que cada alelo corresponde à posição ocupada pela rainha respectiva:

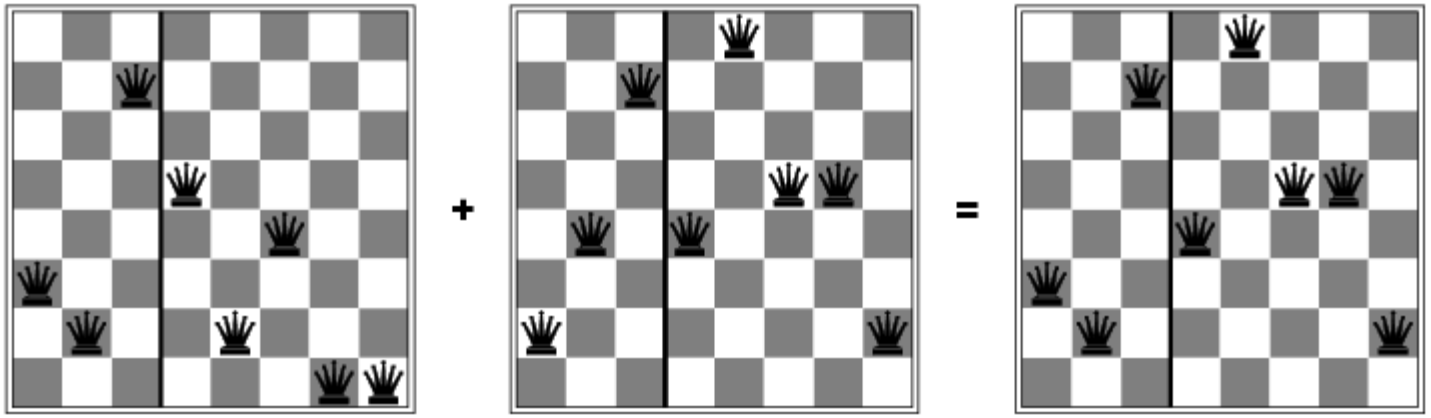


Alfabeto	Cromossoma							
{0,1}	111	101	011	001	110	100	010	000
{1,2,3,4,5,6,7,8}	8	6	4	2	7	5	3	1

Funcionamento do AG

- Função de mérito: número de pares de rainhas que não se atacam (min = 0, max = 8 × 7/2 = 28)
- O indivíduo j é selecionado para reprodução com probabilidade $P(x_j) = \frac{f(x_j)}{\sum_{i=1}^{k} f(x_i)}$
- Neste exemplo,
  - 24/(24+23+20+11) = 31%
  - 23/(24+23+20+11) = 29% etc

Operação de recombinação



O locus (ponto de corte) é escolhido aleatoriamente:

Progenitores	Descendência
32752411	32748552
24748552	24752411

1 ponto de corte

Progenitores	Descendência
32752411	22758451
24748552	34742512

Uniforme com máscara 01110101

Outros métodos permitem a reprodução com N pontos de corte, mas normalmente melhores resultados são obtidos com a recombinação uniforme, em que é criada aleatoriamente uma máscara para copiar o material genético.

Operação de mutação

- Alteração aleatória de um valor dos genes, com uma probabilidade baixa (0.001 valor típico)

- Evita que o algoritmo genético fique preso em máximos locais

Maximização de funções

- Como fazer para encontrar o máximo da função f(x) = x*sin(10πx)+1.0 com precisão de 6 casas decimais no intervalo [-1..2]?
- A função de mérito é simplesmente a função que pretendemos maximizar
- Serão necessários 22 bits:
  - $2097152=2^{21} < 3\,000\,000 < 2^{22} = 4194304$
- O valor correspondente de x é obtido por simples aritmética a partir do número em decimal representado pelo indivíduo i:
  - $x = -1.0 + decimal(i)*(1 – (-2))/(2^{22} – 1) = -1.0 + decimal(i)* 3 / (4194303)$
- Por exemplo, o cromossoma 1000101110110101000011 representa o valor de x=0,637197
  - x = -1.0 + (2 288 967) * 3 / (4194303) = 0,637197
- Podem experimentar o algoritmo com a aplicação disponibilizada em http://www.obitko.com/tutorials/genetic-algorithms/example-3d-function.php

Uma implementação de AG

```
function GENETIC-ALGORITHM( problem, FITNESS-FN) returns an individual
   inputs: population, a set of individuals
           FITNESS-FN, a function that measures the fitness of an individual
  repeat
     new_population ← empty set
     loop for i from 1 to SIZE(population) do
        x ← RANDOM-SELECTION(population, FITNESS-FN)
        y ← RANDOM-SELECTION(population, FITNESS-FN)
        child ← REPRODUCE(x, y)
        if (random number ≤ mutation probability) then child ← MUTATE(child)
        add child to new_population
     population ← new_population
   until some individual is fit enough or enough time has elapsed
   return best individual in population, according to FITNESS-FN
```

```
function REPRODUCE( x, y) returns an individual
   inputs: x, y, parent individuals
   n ← LENGTH(x)
   c ← random number from 1 to n
   return APPEND(SUBSTRING(x,1,c), SUBSTRING(y,c+1,n))
```

Outra implementação de AG

```
function GENETIC-ALGORITHM( problem, FITNESS-FN) returns an individual
  inputs: population, a set of individuals
          FITNESS-FN, a function that measures the fitness of an individual
  repeat
    new_population ← empty set
    loop for i from 1 to SIZE(population)/2 do
      x ← RANDOM-SELECTION(population, FITNESS-FN)
      y ← RANDOM-SELECTION(population, FITNESS-FN)
      if (random number ≤ crossover probability) then
        child_1, child_2 ← REPRODUCE(x, y)
      else
        child_1, child_2 ← x, y
      endif
      if (random number ≤ mutation probability) then child_1 ← MUTATE(child_1)
      if (random number ≤ mutation probability) then child_2 ← MUTATE(child_2)
      add child_1 and child_2 to new_population
    population ← new_population
  until some individual is fit enough or enough time has elapsed
  return best individual in population, according to FITNESS-FN
```

Valores empíricos

- Para grandes populações (100 indivíduos)
  - Probabilidade de recombinação 0.6
  - Probabilidade de mutação 0.001
- Para populações pequenas (30 indivíduos)
  - Probabilidade de recombinação 0.9
  - Probabilidade de mutação 0.01

Outros operadores de selecção

- amostragem universal estocástica
  - Mecanismo para obter de uma vez só todos os indivíduos para reprodução.
- por posição
  - Ordenam-se os indivíduos por posição, utilizando esta posição para atribuir as probabilidades de seleção.
- por torneio
  - Seja k um parâmetro entre 0 e 1. Selecionam-se dois indivíduos aleatoriamente da população. Gera-se um número aleatório r. Se r < k fica-se com o melhor indivíduo; caso contrário seleciona-se para reprodução o pior deles.
- estado estável
  - Substitui-se uma percentagem dos piores indivíduos
- por truncatura
  - Só se deixa reproduzir uma percentagem dos melhores indivíduos.
- Elitista
  - Retém-se sempre um pequeno número dos melhores indivíduos.

O caixeiro viajante

- O problema do caixeiro viajante requer cuidados especiais para a sua resolução com algoritmos genéticos
  - Representação dos cromossomas
  - Operador de recombinação
  - Operador de mutação

Cromossoma para o TSP

- A representação natural recorre a uma lista ordenada de cidades para representar o circuito

1	8	3	4	6	2	7	9	5

Problemas a resolver

- A dificuldade essencial é o operador de recombinação dado que qualquer dos métodos vistos anteriormente podem criar indivíduos inviáveis (abortos…)

- Duas aproximações possíveis:
  - Reparar os indivíduos
  - Garantir que a recombinação só gera indivíduos válidos

Operador de recombinação PMX

- Partially mapped crossover (PMX)
- Escolhe uma subsequência a partir de um dos pais e preserva a ordem, na medida das possibilidades, do outro progenitor.
- Seleccionam-se dois pontos de corte
  - p1=1 2 3 | 4 5 6 7 | 8 9
  - p2=4 5 2 | 1 8 7 6 | 9 3
- A selecção induz o conjunto de equivalências 4↔1, 5 ↔ 8, 6 ↔ 7 e 7 ↔ 6.
- Os segmentos entre os pontos são trocados
  - f1=_ _ _ | 1 8 7 6 | _ _
  - f2=_ _ _ | 4 5 6 7 | _ _
- Copiam-se os restantes valores que não introduzam repetições
  - f1=_ 2 3 | 1 8 7 6 | _ 9
  - f2=_ _ 2 | 4 5 6 7 | 9 3
- Recorre-se às equivalências para substituir os restantes valores
  - f1=4 2 3 | 1 8 7 6 | 5 9 (porque 4↔1 e 5 ↔ 8)
  - f2=1 8 2 | 4 5 6 7 | 9 3 (porque 4↔1 e 5 ↔ 8)

Operador de recombinação OX

- Order crossover (OX)
- Seleciona-se uma subsequência e mantém-se a ordem do outro progenitor.
- Selecionam-se dois pontos de corte
  - p1=1 2 3 | 4 5 6 7 | 8 9
  - p2=4 5 2 | 1 8 7 6 | 9 3
- Copiam-se os segmentos para os descendentes
  - f1=_ _ _ | 4 5 6 7 | _ _
  - f2=_ _ _ | 1 8 7 6 | _ _
- Copiam-se os valores do outro progenitor sequencialmente a partir do segundo ponto de corte, evitando repetições de cidades
  - f1=2 1 8 | 4 5 6 7 | 9 3
  - f2=3 4 5 | 1 8 7 6 | 9 2

Outras variantes do OX

- Selecionam-se dois pontos de corte
  - p1=1 2 3 | 4 5 6 7 | 8 9
  - p2=4 5 2 | 1 8 7 6 | 9 3
- Copiam-se os segmentos para os descendentes
  - f1=_ _ _ | 4 5 6 7 | _ _
  - f2=_ _ _ | 1 8 7 6 | _ _
- Em vez de se começar a partir do segundo ponto de corte começa-se pela ordem do outro progenitor desde o início
  - f1=2 1 8 | 4 5 6 7 | 9 3
  - f2=2 3 4 | 1 8 7 6 | 5 9
- Em vez de utilizar uma subsequência, pode-se gerar uma máscara aleatória para selecionar as cidades a manter para a geração seguinte.

Operador de recombinação CX

- Cycle crossover (CX) – não necessita de pontos de corte
  - p1=1 2 3 4 5 6 7 8 9
  - p2=4 1 2 8 7 6 9 3 5
- Começa-se na primeira cidade de p1
  - f1=1 _ _ _ _ _ _ _ _
- A respectiva em p2 é a 4, colocando-se essa cidade na posição de p1
  - f1=1 _ _ 4 _ _ _ _ _
- A respectiva em p2 é a 8, colocando-se essa cidade na posição de p1
  - f1=1 _ _ 4 _ _ _ 8 _
- Itera-se até introduzir um ciclo (cidade já colocada)
  - f1=1 2 3 4 _ _ _ 8 _
- Preenchem-se as restantes a partir da sequência no outro progenitor:
  - f1=1 2 3 4 7 6 9 8 5

Operadores de mutação

- Inversão (inverte subsequência)
  - 1 2 | 3 4 5 6 | 7 8 9
  - 1 2 | 6 5 4 3 | 7 8 9
- Inserção (move arbitrariamente 1 cidade)
  - 1 2 3 4 5 6 7 8 9
  - 1 2 7 3 4 5 6 8 9
- Deslocamento (move subsequência)
  - 1 2 3 4 5 | 6 7 8 | 9
  - 1 | 6 7 8 | 2 3 4 5 9
- Troca (troca duas cidades)
  - 1 2 3 4 5 6 7 8 9
  - 7 2 3 4 5 6 1 8 9

Algoritmos meméticos

- Após aplicação de qualquer um dos operadores genéticos e mesmo da inicialização da população, efetua-se uma procura local
- Estes algoritmos são designados por algoritmos meméticos
- Por exemplo, pode-se aplicar o algoritmo trepa-colinas para melhorar o indivíduo
  - Considerando todas as trocas de duas ou três cidades e escolhendo a melhor alternativa até atingir um mínimo local
- É preciso ter cuidado na escolha do operador de mutação para não efetuar as mesmas operações que a procura local.
- Uma possibilidade é não efetuar procura local após mutação.

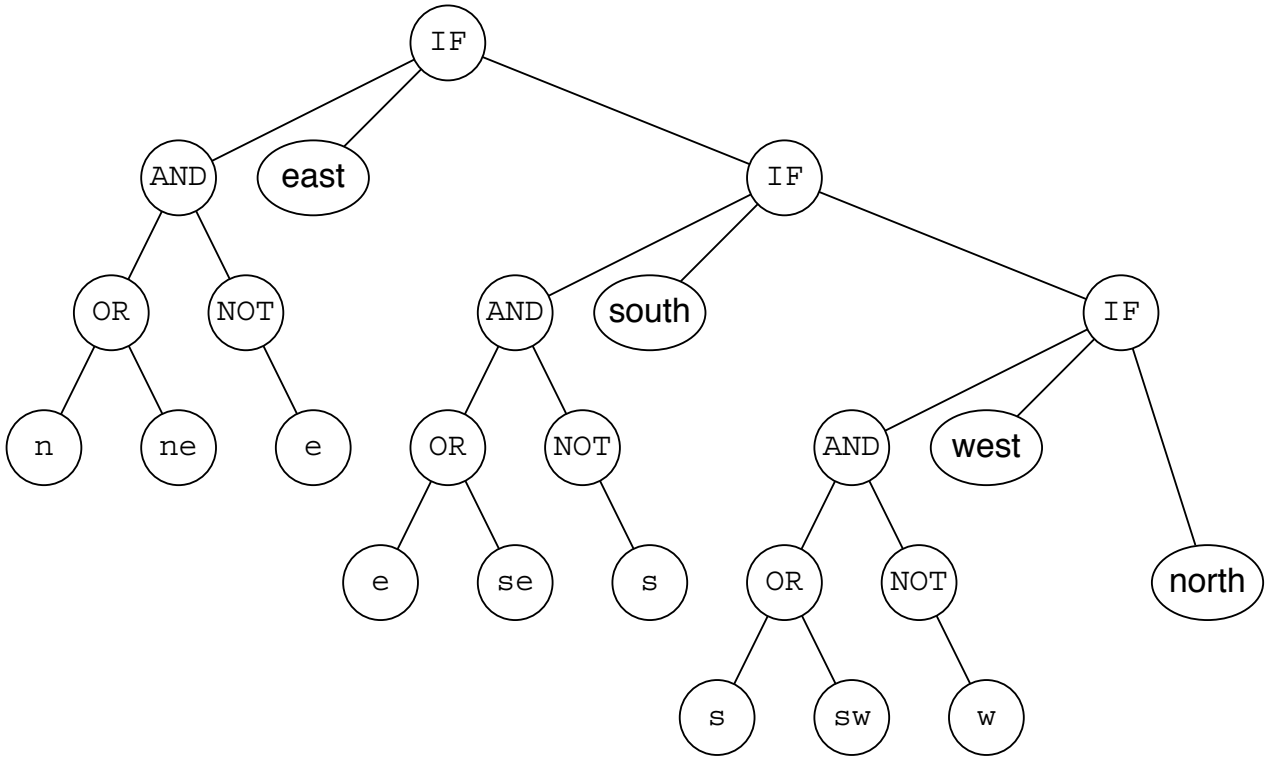
Outros algoritmos de inspiração evolucionária

- Programação Genética
  - Evolução de programas
- Estratégias Evolutivas
  - Evolução de vectores reais com distribuições normais para resolução de problemas de Engenharia
  - O operador dominante é a mutação
- Programação Evolutiva
  - Os indivíduos são máquinas de estados

Programação Genética

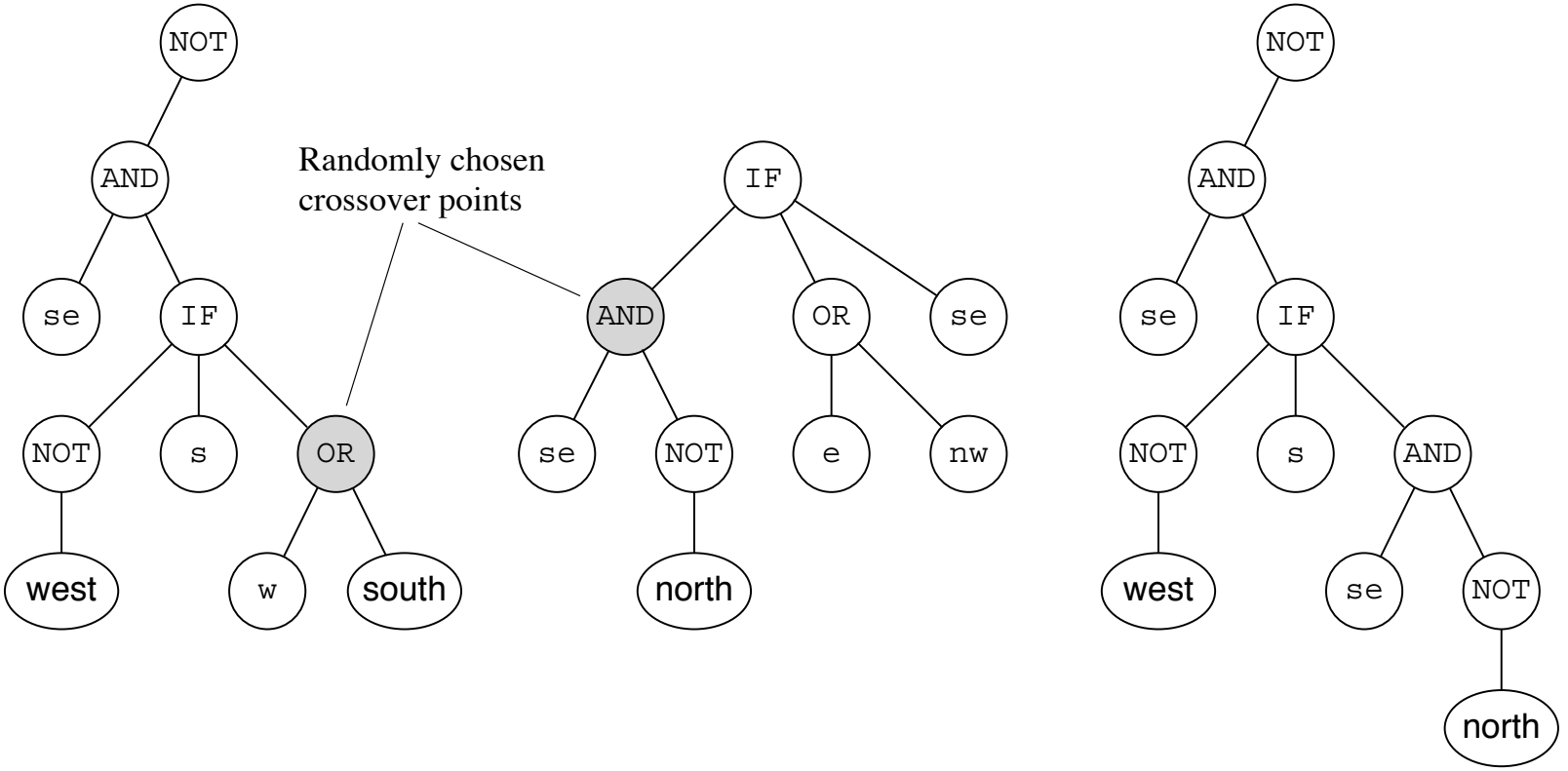
- Cada indivíduo é um programa. A qualidade de um indivíduo é obtida por execução do programa relativamente a um conjunto de testes.
- O material genético encontra-se estruturado em árvore
- O material genético é de tamanho variável durante o processo evolutivo
- O operador de recombinação troca subárvores entre os dois progenitores, preservando a sintaxe
- O operador de mutação substitui uma subárvore por outra construída aleatoriamente
- A população inicial é obtida pela geração aleatória de funções e terminais que constituem os programas.

Evolução de seguidores de paredes [Nilsson]




```
(IF (AND (OR (n) (ne)) (NOT (e)))
    (east)
    (IF (AND (OR (e) (se)) (NOT (s)))
        (south)
        (IF (AND (OR (s) (sw)) (NOT (w)))
        (west)
        (north))))
```

Recombinação de programas

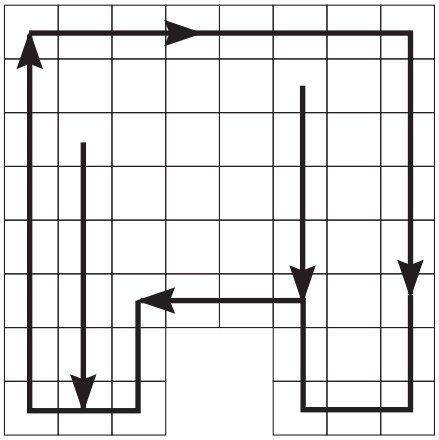


Mother program

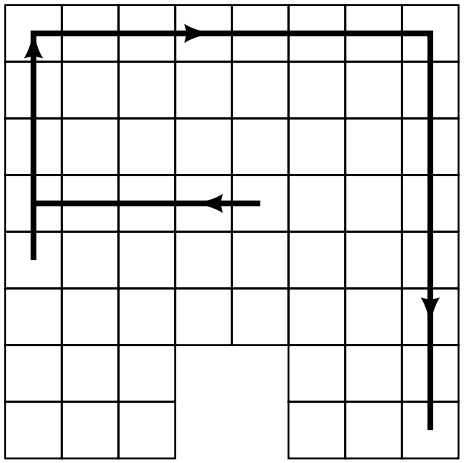
Father program

Child program

Exemplo de programas gerados



```
(IF (IF (IF (se)(0)(ne))
        (OR (se)(east))
        (IF (OR (AND (e)(0))
                (sw))
            (OR (sw)(0))
            (AND (NOT (NOT (AND (s)(se))))
                 (se))))
    (IF (w)
        (OR (north)
            (NOT (NOT (s))))
        (west))
    (NOT (NOT (NOT (AND (IF (NOT (south))
                            (se)
```



```
(IF (AND (NOT (e))
         (IF (e)(s)(nw)))
    (OR (IF (1)(e)(south))
        (IF (north)(east)(nw)))
    (IF (OR (AND (0)(north))
            (AND (e)(IF (e)
                        (IF (se)(south)(east))
                        (north))))
        (AND (e)
             (NOT (IF (s)(sw)(e))))
        (OR (OR (AND (nw)(east))
                (west))
```

Conclusões

- Grande impacto em problemas de optimização, nomeadamente problemas de escalonamento, desenho de circuitos integrados, classificação, simulação e controlo.
- Algoritmos que suscitam muito interesse, provavelmente por causa das suas origens na teoria da evolução.
- Falta estudar condições que identifiquem claramente as situações em que os algoritmos genéticos têm bom comportamento.

PROCURA LOCAL EM ESPAÇOS CONTÍNUOS CAP 4.2

Parcialmente adaptado de

http://aima.eecs.berkeley.edu

Procura local em espaços contínuos

- Muitos problemas podem ser representados como maximização/ minimização de funções multidimensionais em R^n.
- Existem inúmeras técnicas, mas iremos abordar brevemente aquelas baseadas no gradiente de uma função $f(x_1, \ldots, x_n)$ que se supõe diferenciável em R^n.
- O gradiente da função f, denotado por ∇f define-se por:

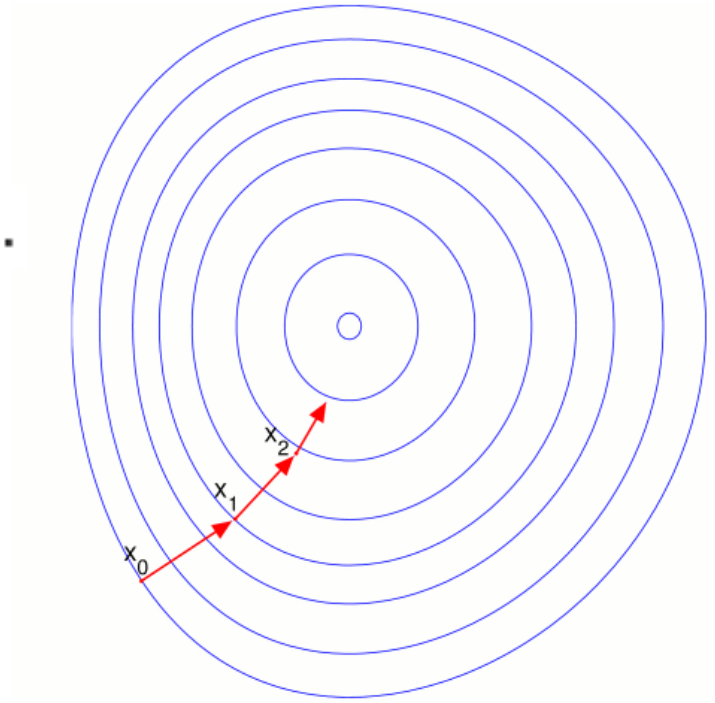
$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$$

Subida pelo gradiente

- Partindo de uma solução inicial x0
- Executa-se iterativamente o algoritmo

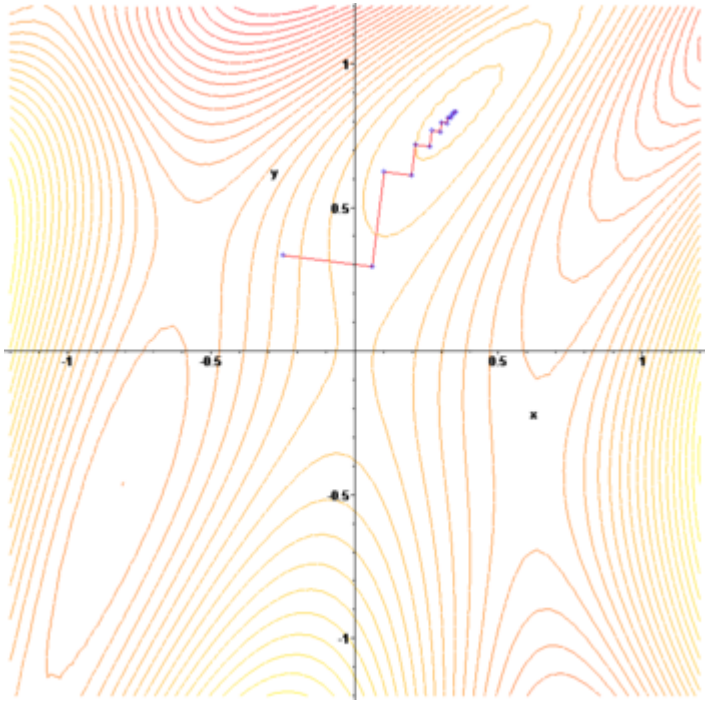
$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \gamma_n \nabla F(\mathbf{x}_n), \ n \geq 0.$$

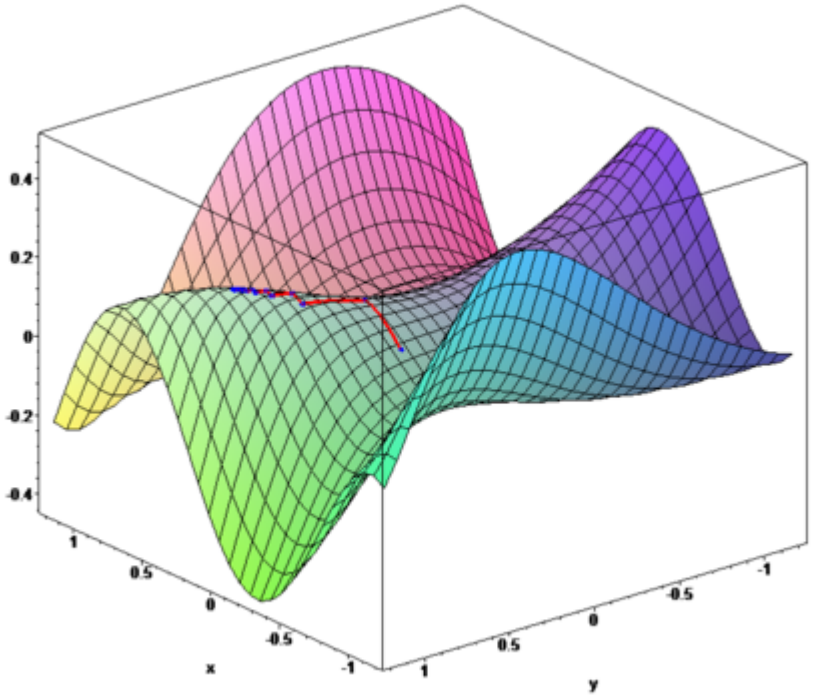
- Até que a variação entre $|x_{n+1} - x_n|$ atinja um erro predeterminado.
- Podemos variar em cada passo o parâmetro γ_n, que deve ser suficientemente pequeno



Exemplo: maximização de função

$$F(x,y) = \sin\left(\frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{4}y^2 + 3\right)\cos(2x + 1 - e^y)$$



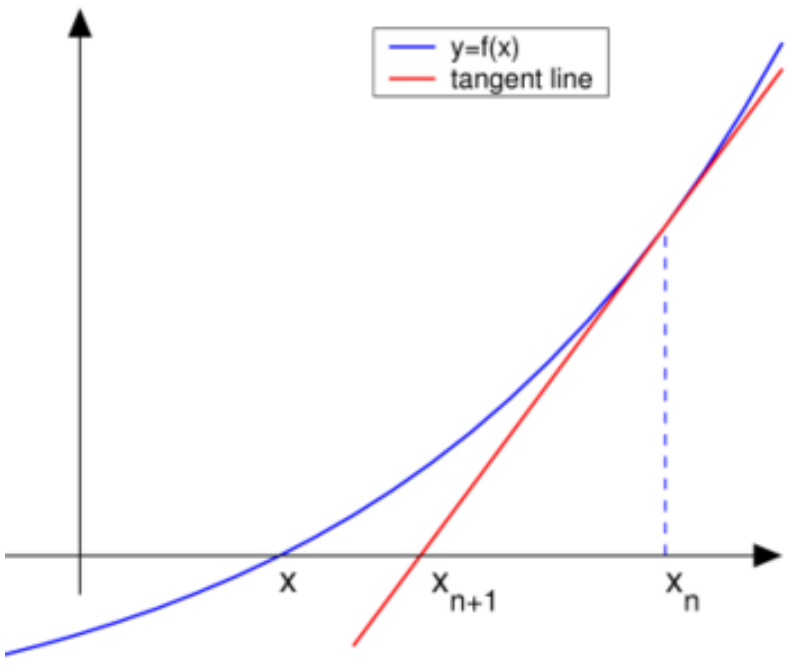


Método de Newton-Raphson

- O método de Newton-Raphson é utilizado para obter as raizes de f(x)=0.
- O método para funções reais corresponde a iterar

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

- Para encontrar os extremos (máximos ou mínimos) tem de se resolver a equação f'(x) = 0



Optimização com método de Newton-Raphson

- Para o caso de funções reais, iterar

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)}, \ n \geq 0$$

- Para o caso de funções em R^n, generaliza-se a fórmula de aproximação para

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \gamma [H f(\mathbf{x}_n)]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_n).$$

- A matriz Hessiana H_f contém as derivadas parciais de segunda ordem de f, isto é $H_{ij} = \partial^2 f / \partial x_i \partial x_j$