

# Algoritmos Genéticos (AG's)

## Sumário

1	INTRODUÇÃO.....	2
2	ALGORITMO GENÉTICO CLÁSSICO.....	3
2.1	REPRESENTAÇÃO (ESTRUTURA DE DADOS) .....	3
2.2	MECANISMO DE SELEÇÃO .....	4
2.3	OPERADOR DE RECOMBINAÇÃO (CROSSOVER SIMPLES) .....	5
2.4	OPERADOR DE MUTAÇÃO .....	7
3	ALGORITMO GENÉTICO MODIFICADO .....	9
4	EXERCÍCIOS COMPUTACIONAIS .....	11
5	TEORIA DOS ESQUEMAS ( <i>SCHEMATA THEORY</i> ) .....	17
5.1	DECEPTION PROBLEM.....	24
6	REFERÊNCIAS .....	25

## 1 Introdução

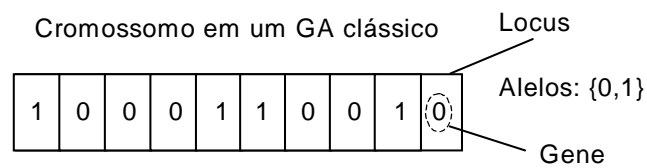
- Os algoritmos genéticos (AG's) foram desenvolvidos por HOLLAND (1975; 1992), da Universidade de Michigan.
- Metas:
  - abstrair e rigorosamente explicar os processos adaptativos em sistemas naturais
  - desenvolver simulações em computador que retenham os mecanismos originais encontrados em sistemas naturais
- Características principais:
  - existência de 2 espaços de trabalho: espaço **genotípico** e espaço **fenotípico**
  - AG's fazem busca sobre uma **população** de pontos e não sobre um único ponto
  - AG's fazem uso de descrições genéricas do que se quer ver presente na solução, através de **funções de fitness** (funções-objetivo)
  - AG's utilizam regras de transição **probabilísticas**, e não regras determinísticas

## 2 Algoritmo Genético Clássico

- população de tamanho fixo e estrutura de dados do tipo cadeias binárias
- seleção natural proporcional ao fitness via algoritmo Roulette Wheel
- crossover simples (crossover de um ponto)
- mutação pontual

### 2.1 Representação (Estrutura de Dados)

- Cadeias binárias de comprimento fixo.



**Figura 1:** Cadeia binária de comprimento  $l = 10$  correspondente à estrutura de dados de um GA clássico.

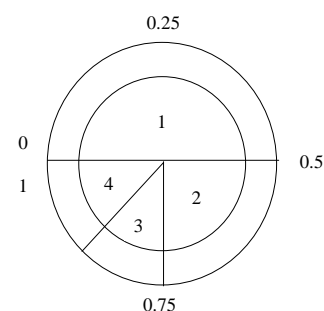
- O problema a ser resolvido é capturado em uma função objetivo que indica o fitness (adaptabilidade) de cada candidato a solução.

### 2.2 Mecanismo de Seleção

- A seleção no GA clássico é proporcional ao fitness e é geralmente implementada utilizando um algoritmo denominado de *Roulette Wheel*.

#### • Exemplo:

N	Cromossomo	Fitness	Graus
1	0001100101010	6.0	180
2	0101001010101	3.0	90
3	1011110100101	1.5	45
4	1010010101001	1.5	45



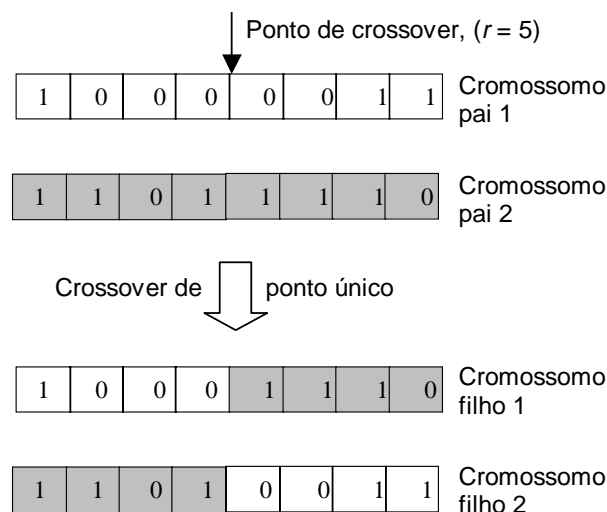
- Implementação: gerador de números pseudo-aleatórios com distribuição uniforme.
- Note que este procedimento permite a perda (“morte”) do melhor indivíduo e também permite que um indivíduo seja selecionado mais do que uma vez.

- As probabilidades de reprodução de cada indivíduo irão resultar na geração de uma nova população composta por indivíduos probabilisticamente selecionados a partir da população atual.
- Os indivíduos selecionados irão gerar probabilisticamente filhos (descendentes) através de operadores genéticos específicos, particularmente, *crossover* e *mutação*.

### 2.3 Operador de Recombinação (Crossover Simples)

- Nos sistemas biológicos o crossover pode ocorrer durante a reprodução sexuada permitindo a troca de material genético entre dois indivíduos.
- Este processo pode ser abstraído como um operador geral para as estruturas de dados do tipo cadeia binária utilizada no GA clássico (HOLLAND, 1975):
  - Duas cadeias  $\mathbf{x} = x_1x_2\dots x_l$  e  $\mathbf{y} = y_1y_2\dots y_l$  de comprimento  $l$  são selecionadas com probabilidade de crossover  $pc$ .
  - Um número  $r \in \{1, 2, \dots, l-1\}$  indicando o ponto de cruzamento (crossover) é selecionado.

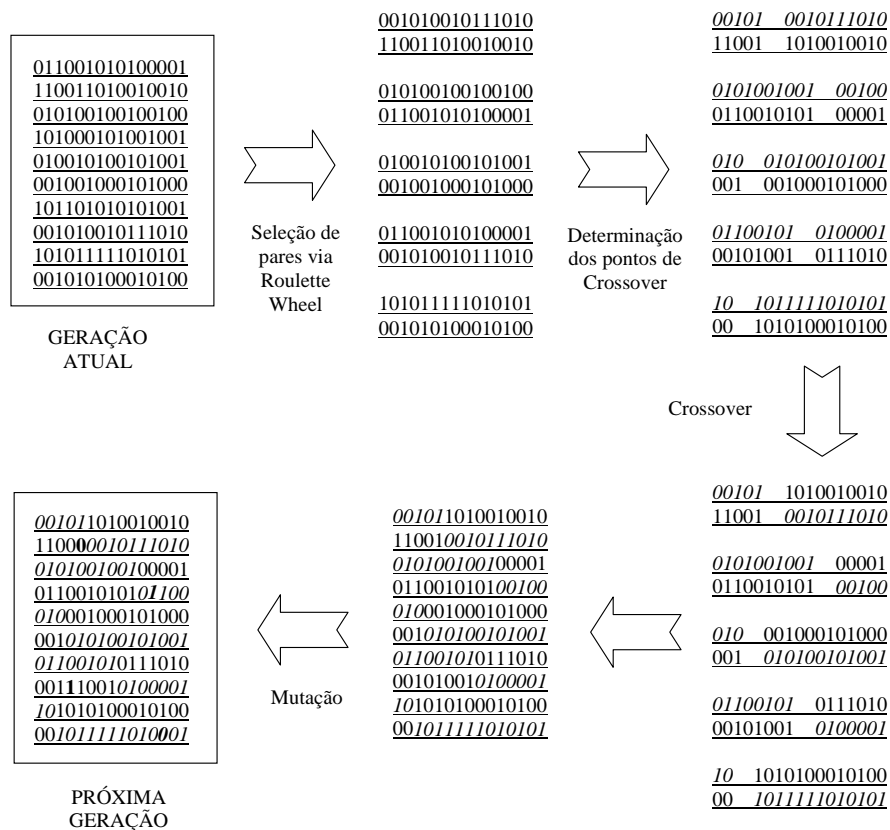
- Duas novas cadeias são formadas a partir de  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  através da troca de um conjunto de atributos à direita da posição  $r$ , resultando em  $\mathbf{x}' = x_1\dots x_iy_{i+1}\dots y_l$  e  $\mathbf{y}' = y_1\dots y_ix_{i+1}\dots x_l$ .
- Os dois novos cromossomos gerados  $\mathbf{x}'$  e  $\mathbf{y}'$  são os filhos (*offspring*) de  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$ .



**Figura 2:** Crossover de um único ponto para cadeias de comprimento  $l = 8$ .

## 2.4 Operador de Mutação

- Em genética a mutação pontual é um processo no qual um alelo de um gene é aleatoriamente substituído (ou modificado) por outro, resultando em um novo cromossomo.
- Geralmente existe uma baixa probabilidade de mutar cada gene de um cromossomo.
- Isso significa que cada bit na população  $P$  é operado da seguinte forma:
  - Os números  $r, \dots, u$  indicando as posições que irão sofrer mutação são determinadas aleatoriamente de forma que cada posição possui uma pequena probabilidade  $pm$  de sofrer mutação independente das outras posições.
  - Uma nova cadeia  $x' = x_1 \dots x_r \dots x_u \dots x_l$  é gerada onde  $x_r \dots x_u$  são determinadas aleatoriamente partindo do conjunto de alelos para cada gene. No caso de cadeias binárias, se uma posição possui alelo '0', então ela se torna '1' e vice-versa.



- **Problemas com o algoritmo clássico:**

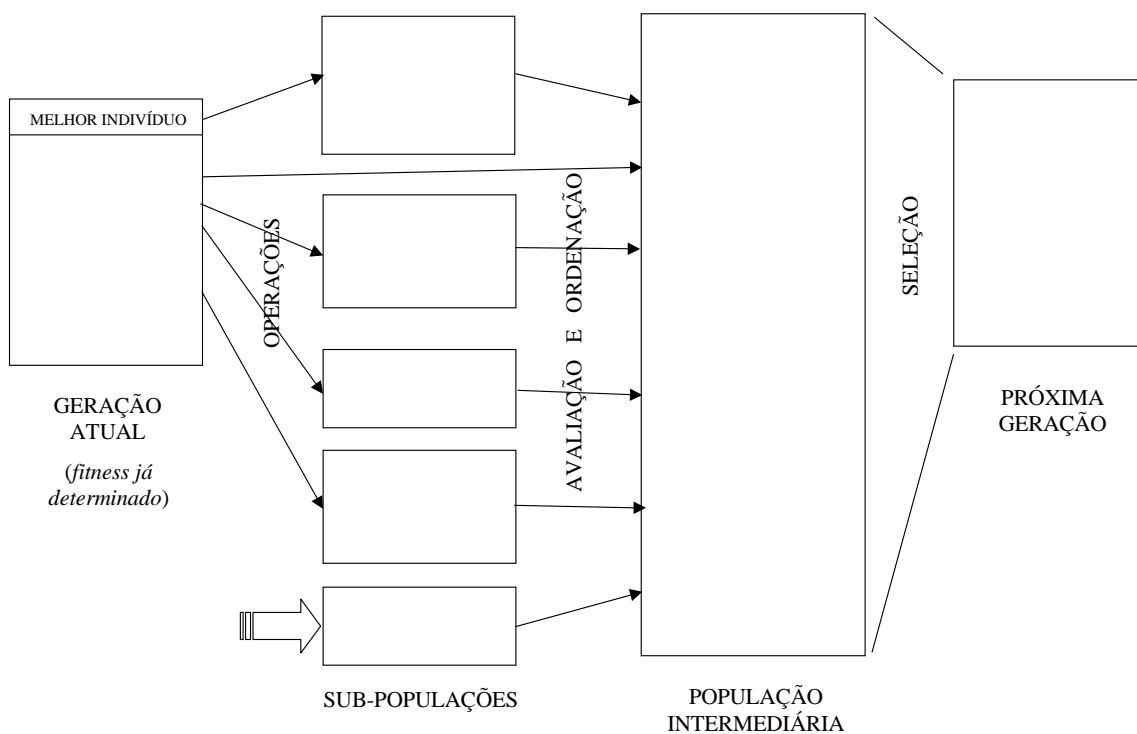
- política de reprodução/seleção permite a perda do melhor indivíduo
- posição dos genes no cromossomo influi na probabilidade de permanecerem no mesmo cromossomo após crossover
- dificuldades na codificação binária de números reais

- **Algumas estratégias de solução:**

- mecanismos alternativos de seleção
- crossover uniforme
- codificação em arranjos de números reais

### 3 Algoritmo Genético Modificado

- geração de sub-populações por meio da aplicação de operadores genéticos e outros operadores sobre membros da geração atual
- avaliação (cálculo do *fitness*) e ordenação da população intermediária
- seleção para nova geração



## 4 Exercícios computacionais

**EXERCÍCIO COMPUTACIONAL 3 (EC3):** Dada a função de uma única variável

$g(x) = 2^{-2((x-0.1)/0.9)^2} \sin(5\pi x)^6$ , apresentada na Figura 1, tente determinar seu ótimo global utilizando o algoritmo genético padrão. A variável  $x$  está definida no intervalo  $[0,1]$ ,  $x \in [0,1]$ . (Exercício 2, Seção 8.2, pg. 37, do Tutorial 1.)

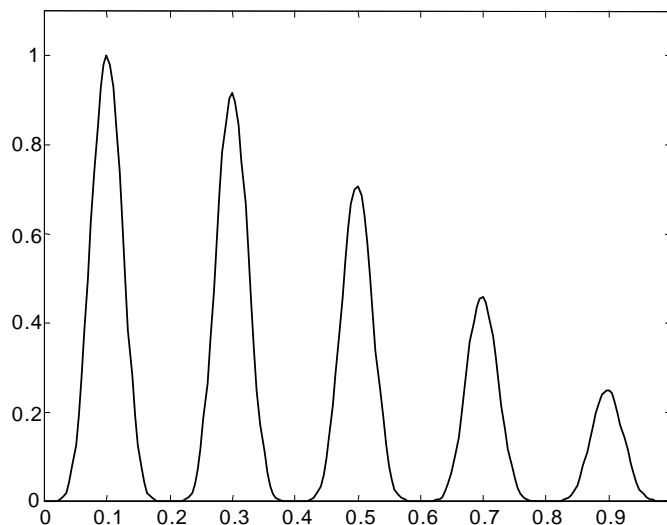
Escolha como representação para a variável  $x$  uma cadeia binária  $m$  ( $m = \langle m_l, \dots, m_2, m_1 \rangle$ ) de comprimento  $l = 22$ , correspondente a uma precisão de seis casas decimais.

- O mapeamento de uma cadeia binária para um número real pode ser feito em dois passos:
  - Converta a cadeia binária  $m = \langle m_l, \dots, m_2, m_1 \rangle$  da base 2 para a base 10:

$$(\langle m_l, \dots, m_2, m_1 \rangle)_2 = \left( \sum_{i=0}^{l-1} m_i \cdot 2^i \right)_{10} = x'$$

- Encontre o correspondente valor real ( $\Re$ ) para  $x$ :  $x = x_{\min} + x' \cdot \frac{x_{\max} - x_{\min}}{2^l - 1}$ , onde

$x_{\min} = 0$  e  $x_{\max} = 1$ ,  $x \in [x_{\min}, x_{\max}]$  (domínio da variável).



**Figura 3:** Função  $g(x) = 2^{-2((x-0.1)/0.9)^2} \sin(5\pi x)^6$  a ser maximizada.

**Função de Avaliação:**  $\text{eval}(v) = f(x)$

**Operadores Genéticos:** Crossover simples, mutação pontual

**População Inicial** - Aleatória com 50 indivíduos

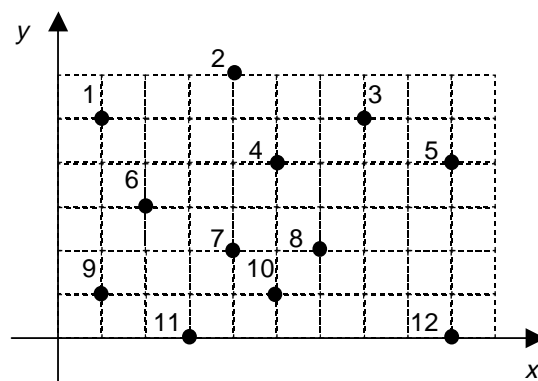
**Parâmetros:**

- probabilidade de crossover  $p_c = 0,5$  e probabilidade de mutação  $p_m = 0,01$

**EXERCÍCIO COMPUTACIONAL 4 (EC4):** Resolver o Exercício 3 da Seção 8.4 (pg. 37) do Tutorial 1.

O problema do caixeiro viajante (*travelling salesman problem – TSP*) é de natureza combinatorial e aparece em diversas aplicações, do projeto de circuitos integrados à entrega de *fast food*. Em sua forma mais simples, o caixeiro deve visitar cada cidade em um dado território somente uma vez, e depois retornar a cidade de origem. Dado o custo da viagem entre cada uma das cidades, qual o itinerário que resulta no custo mínimo total?

Implemente um algoritmo genético para resolver o problema do caixeiro ilustrado na Figura 4.



**Figura 4:** TSP simples com 12 cidades.

**Codificação** - arranjo de números inteiros:  $\langle 1,3,4,5,6,8,9,12,11,10,7,2 \rangle$

**Função de fitness** - soma dos custos de movimentação entre cada par de cidades.

## Operadores

- Crossover OX:

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
7	3	1	11	4	12	5	2	10	9	6	8
			4	5	6	7					
1	11	12	4	5	6	7	2	10	9	8	3

- Mutação Inversiva

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	2	3	8	5	6	7	4	9	10	11	12

- Variação de Mutação Inversiva

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	2	3	5	4	6	7	8	9	10	11	12
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
12	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	1

**EXERCÍCIO COMPUTACIONAL 5 (EC5):** Verifique o comportamento do algoritmo implementado no exercício 4 quando as seguintes modificações são inseridas independentemente e em conjunto:

- Elitismo na seleção: mantenha sempre o melhor indivíduo na população.
- Crossover de todos os indivíduos com o melhor indivíduo.



## 5 Teoria dos Esquemas (*schemata theory*)

- A teoria dos esquemas foi proposta por HOLLAND (1975; 1992) para tentar explicar por que os algoritmos genéticos funcionam.
- Nesta seção, apresentaremos os principais resultados da teoria dos esquemas: o teorema de crescimento dos esquemas e a hipótese dos blocos construtivos.
- Um *esquema* é uma representação capaz de descrever diversos cromossomos simultaneamente. Um esquema é construído inserindo um caractere *don't care* (\*) no alfabeto dos genes, indicando que aquele gene representa qualquer alelo.
  - Por exemplo, o esquema  $[1 * 0 1 0 0 1]$  representa os cromossomos  $[1 0 0 1 0 0 1]$  e  $[1 1 0 1 0 0 1]$ . O esquema  $[1 * 0 * 1 1 0]$  representa quatro cromossomos:  $[1 0 0 0 1 1 0]$ ,  $[1 0 0 1 1 1 0]$ ,  $[1 1 0 0 1 1 0]$  e  $[1 1 0 1 1 1 0]$ .
- Obviamente, o esquema  $[1 1 1 0 0 1 0]$  representa apenas um cromossomo, enquanto que o esquema  $[* * * * * * *]$  representa todos os cromossomos de comprimento 7.

- Observe que cada esquema representa  $2^r$  cromossomos, onde  $r$  é o número de caracteres *don't care* “\*” presentes no esquema. Por outro lado, cada cromossomo de comprimento  $m$  é representado por  $2^m$  esquemas.
  - Por exemplo, considere o cromossomo  $[0 1 0 0 1 0 0]$ . Este cromossomo é representado pelos seguintes  $2^7$  esquemas:

$$\begin{array}{c}
 [0 1 0 0 1 0 0] \\
 [* 1 0 0 1 0 0] \\
 [0 * 0 0 1 0 0] \\
 \vdots \\
 [0 1 0 0 1 0 *] \\
 [* * 0 0 1 0 0] \\
 [* 1 * 0 1 0 0] \\
 \vdots \\
 [0 1 0 0 1 * *] \\
 [* * * 0 1 0 0] \\
 \vdots \\
 [* * * * * * *]
 \end{array}$$

- Considerando cromossomos de comprimento  $m$ , há um total de  $3^m$  possíveis esquemas. Numa população de tamanho  $n$ , entre  $2^m$  e  $n \cdot 2^m$  diferentes esquemas podem ser representados.
- A *ordem* de um esquema  $S$ ,  $o(S)$ , é definida como o número de 0's e 1's presentes no esquema, isto é, o número de *posições fixas* (caracteres diferentes de *don't care*) presentes no esquema. A ordem de um esquema define sua especificidade, de modo que quanto maior a ordem, mais específico é o esquema.
- O *comprimento definitório* de um esquema  $S$ , denotado por  $\delta(S)$ , é a maior distância entre posições fixas de um cromossomo. O comprimento definitório define o nível de compactação da informação contida no esquema.
- O *fitness* de um esquema  $S$  na geração  $t$ ,  $\text{eval}(S, t)$ , é definido como a média dos *fitness* de todos os cromossomos na população representados pelo esquema  $S$ . Assuma que há  $p$  cromossomos  $\{\mathbf{x}_{i_1}^t, \dots, \mathbf{x}_{i_p}^t\}$  representados pelo esquema  $S_i$  na geração  $t$ . Então:

$$\text{eval}(S_i, t) = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p \text{eval}(\mathbf{x}_{i_j}^t),$$

onde  $\text{eval}(\mathbf{x}_{i_j}^t)$  é o *fitness* do indivíduo  $\mathbf{x}_{i_j}^t$ .

- Seja  $\text{tam\_pop}$  o tamanho da população. O *fitness* médio da população na geração  $t$ ,  $\bar{F}(t)$ , é dado por

$$\bar{F}(t) = \frac{1}{\text{tam\_pop}} \sum_{i=1}^{\text{tam\_pop}} \text{eval}(\mathbf{x}_i^t).$$

- Sejam  $p_c$  e  $p_m$  as probabilidades de *crossover* e *mutação*, respectivamente, e  $m$  o comprimento dos cromossomos. Seja  $\xi(S_i, t)$  o número de cromossomos representados pelo esquema  $S_i$  na geração  $t$ . Pode-se mostrar que (MICHALEWICZ, 1996):

$$\xi(S_i, t+1) \geq \frac{\xi(S_i, t) \text{eval}(S_i, t)}{\bar{F}(t)} \left[ 1 - p_c \frac{\delta(S_i)}{m-1} - o(S_i) p_m \right]$$

- A equação acima é conhecida como *equação de crescimento reprodutivo do esquema*. Esta equação é deduzida supondo que a função de *fitness*  $f(\cdot)$  produz apenas valores positivos. Se a função a ser otimizada produz valores negativos, um mapeamento entre as funções de otimização e de *fitness* é necessário.
- Esta equação de crescimento mostra que a seleção aumenta a amostragem de esquemas cujo *fitness* está acima da média da população, e este aumento é exponencial (MICHALEWICZ, 1996).
- A seleção, por si só, não introduz nenhum novo esquema (não representado na geração inicial em  $t = 0$ ). Esta é a razão da introdução do operador de *crossover*: possibilitar a troca de informação estruturada, ainda que aleatória. Além disso, o operador de mutação introduz uma variabilidade maior na população.
- O efeito (destrutivo) combinado destes operadores não é significativo se o esquema é curto e de ordem baixa. O resultado final da equação de crescimento pode ser formulado como segue:

**Teorema dos Esquemas:** Esquemas com comprimento definitório curto, de ordem baixa, e com *fitness* acima da média, têm um aumento exponencial de sua participação em gerações consecutivas de um algoritmo genético.

Prova: Veja HOLLAND (1975; 1992).

- Uma consequência imediata deste teorema é que os algoritmos genéticos tendem a explorar o espaço por meio de esquemas curtos e de baixa ordem que, subsequentemente, são usados para troca de informação durante o *crossover*.

**Hipótese dos Blocos Construtivos:** Um algoritmo genético busca desempenho quase-ótimo através da justaposição de esquemas curtos, de baixa ordem e alto desempenho, chamados de *blocos construtivos*.

- Em uma população de tamanho  $tam\_pop$ , indivíduos de comprimento  $m$  processam pelo menos  $2^m$  e no máximo  $2^{tam\_pop}$  esquemas. Alguns deles são processados de forma útil: são amostrados a uma taxa crescente exponencial (desejável); e outros são quebrados por meio de *crossover* e mutação.

- HOLLAND (1975; 1992) mostrou que, em uma população de tamanho  $tam\_pop$ , pelo menos  $tam\_pop^3$  são processados de forma útil. Esta propriedade foi denominada *paralelismo implícito*, pois é obtida sem nenhuma exigência extra de memória e processamento. Entretanto, BERTONI & DORIGO (1993) mostraram que a estimativa  $tam\_pop^3$  é válida apenas para o caso particular em que  $tam\_pop$  é proporcional a  $2^l$ , onde  $l = \frac{1}{2}m\varepsilon$  e  $\varepsilon$  é a probabilidade de um esquema ser rompido por *crossover*.
- Note entretanto que, em alguns problemas, alguns blocos construtivos (esquemas curtos, de ordem baixa) podem direcionar erroneamente o algoritmo, levando-o a convergir a pontos sub-ótimos. Este fenômeno é conhecido como **decepção**. Assim, a hipótese dos blocos construtivos não fornece uma explicação definitiva do porquê os algoritmos genéticos funcionam. Ela é apenas uma indicação do porquê os algoritmos genéticos funcionam para uma certa classe de problemas.

## 5.1 Deception Problem

- Alguns blocos construtivos podem direcionar erroneamente o GA, levando a uma convergência a pontos sub-ótimos:
  - $\langle 1\ 1\ 1\ *\ *\ *\ *\ *\ *\ *\ *\rangle$  – fitness *acima* da média
  - $\langle *\ *\ *\ *\ *\ *\ *\ *\ 1\ 1\rangle$  – fitness *acima* da média
  - $\langle 1\ 1\ 1\ *\ *\ *\ *\ *\ *\ 1\ 1\rangle$  – fitness *muito menor* que  $\langle 0\ 0\ 0\ *\ *\ *\ *\ *\ *\ 0\ 0\rangle$
  - solução ótima –  $\langle 1\ 1\ 1\ 1\ 1\ 1\ 1\ 1\ 1\ 1\rangle$
  - tendência a convergir para pontos como  $\langle 0\ 0\ 0\ 1\ 1\ 1\ 1\ 1\ 1\ 0\ 0\rangle$
- Algumas alternativas foram propostas para combater o problema da decepção (GOLDBERG, 1989; MICHALEWICZ, 1996). A primeira assume que há algum conhecimento a priori da função-objetivo para que seja possível codificá-la de forma apropriada (que forme blocos construtivos “coesos”).

- A segunda é a utilização de um operador de *inversão*: selecionam-se 2 pontos em um cromossomo e inverte-se a ordem dos bits entre os pontos selecionados (alterando-se a codificação em conjunto com a operação).
- A terceira opção é utilizar algoritmos genéticos *messy*, que diferem do algoritmo genético clássico de várias maneiras: codificação, operadores, presença de cromossomos de tamanho distinto e fases evolutivas.

## 6 Referências

- GOLDBERG, D. E. “Messy Genetic Algorithms: Motivation, Analysis, and First Results”, *Complex Systems*, 3: 493-530, 1989.
- HOLLAND, J.H. “Adaptation in Natural and Artificial Systems”, University of Michigan Press, 1975.
- HOLLAND, J.H. “Adaptation in Natural and Artificial Systems”, 2nd edition, The MIT Press, 1992.
- MICHALEWICZ, Z. “Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs”, 3rd edition, Springer, 1996.