

# Introdução a Sistemas Inteligentes

## Introdução aos Algoritmos Evolutivos

**Prof. Ricardo J. G. B. Campello**

ICMC / USP

## Créditos

- Este material consiste de adaptações e extensões dos originais gentilmente cedidos:
  - pelo Prof. Dr. Eduardo Raul Hruschka

2

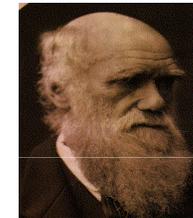
## Agenda

- Introdução
- Breve Histórico
- Metáforas
- Principais Componentes de um AE
- Descrição Geral de um AG
- Exemplos Pedagógicos
- Exemplos de Aplicação
- Noções da Teoria dos Esquemas

3

## Introdução

- Computação inspirada na natureza/biologia (nesta aula – Evolução/Genética);
- Computação Evolutiva: solucionar problemas com base na *evolução natural*



\*Charles Darwin (1809 – 1882)  
*Teoria da Evolução:*  
- variações herdadas da população  
- seleção do mais apto



\*Gregor Mendel (1822 – 1884)  
*Genética:*  
- mecanismos para herdar traços  
- mapeamento genótipo-fenótipo

- Algoritmos Evolutivos (AEs):
  - Algoritmos Genéticos (AGs), Programação Genética, Estratégias Evolutivas, ...

\*Fonte: A.E Eiben, Introduction to EC1, EvoNet Summer School 2002.

4

## Breve Fundamentação

- Evolução é um processo de otimização: objetivo é melhorar a aptidão dos indivíduos ao meio
- Computação evolutiva é a emulação do processo de seleção natural em um procedimento de busca / otimização
- Na natureza, organismos possuem determinadas características que influenciam suas habilidades de se reproduzir e de sobreviver
- Estas características são representadas na informação contida nos cromossomos

5

## Breve Fundamentação

- Reprodução sexuada objetiva combinar a informação de cada pai de tal forma que os cromossomos descendentes contenham as melhores características de cada pai
- O processo de seleção natural *assegura* que os melhores indivíduos tenham mais oportunidades de se reproduzir, levando à expectativa de que os descendentes tenham *adequabilidades* melhores (ou pelo menos semelhantes)
- Evolução via seleção natural: pode ser vista como um processo de **busca** no espaço de cromossomos possíveis

6

## Breve Fundamentação

- Ocasionalmente, cromossomos ficam sujeitos a mutações, que podem causar mudanças nos indivíduos:
    - Influência pode ser positiva ou negativa para o indivíduo
    - Mesmo negativa para o indivíduo, pode favorecer a população
    - Sem mutação a população tende a convergir para um estado de estagnação, no qual os indivíduos ficam muito parecidos entre si
    - Diversidade é importante para a sobrevivência de uma população
- AEs: processo de busca estocástica por uma boa solução para um dado problema que pode ser formulado como um problema de otimização

7

## Breve Histórico e Algumas Aplicações:

### Histórico:

- J. Holland, 1962: Algoritmos Genéticos
- L. Fogel, 1962: Programação Evolutiva
- I. Rechenberg & H.P. Schwefel, 1965: Estratégias Evolutivas
- J. Koza 1989: Programação Genética

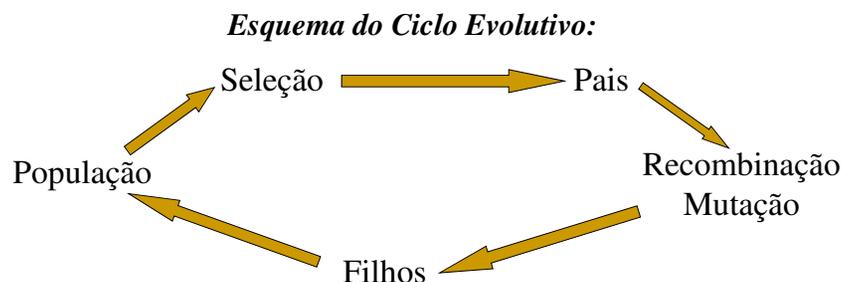
### Algumas Aplicações:

- Pesquisa operacional e otimização
- Modelagem e identificação de sistemas
- Projetos de engenharia
- Mineração de dados (p. ex. seleção de atributos)
- Otimização de RNAs
- ...

8

## Metáforas:

Evolução	↔	Resolução de Problemas
Indivíduo	↔	Solução Candidata
Aptidão / Adequabilidade	↔	Qualidade
Ambiente	↔	Problema



9

## Principais Componentes de um AE:

- Codificação dos genótipos (cromossomos)
- Função para avaliar a *adequabilidade* (*fitness*, *aptidão*) de cada indivíduo
- Inicialização das soluções
- Operadores de Seleção
- Operadores de Reprodução e de Mutação

10

## Codificação:

- Cromossomo e indivíduo (genótipo x fenótipo)
- Cada cromossomo é formado por genes e representa uma posição do espaço de busca
- Cada gene, cujo valor é chamado de alelo, representa uma (ou parte de uma) característica do indivíduo
- A determinação do esquema de codificação é crítica para o sucesso do AE (binária, real, discreta, etc.)

11

## Exemplo Simples de Codificação:

- **Codificação binária** de uma variável numérica
  - Por exemplo: variável discreta  $x \in [0, 255]$
  - Cromossomos (vetores de bits)  $\times$  indivíduos (valores de  $x$ )

$$\text{genótipos} \left\{ \begin{array}{l} C_1 = 11110101 \rightarrow x = 245 \\ C_2 = 00110101 \rightarrow x = 53 \\ C_3 = 01100100 \rightarrow x = 100 \\ C_4 = 10001100 \rightarrow x = 140 \\ C_5 = 00010011 \rightarrow x = 19 \end{array} \right. \text{fenótipos}$$

12

## Função de Adequabilidade (*Fitness*):

- Mapeia a representação cromossômica em um escalar:
  - $F_{AE}: C^d \rightarrow \mathcal{R}$ , onde  $C^d$  representa um cromossomo  $d$ -dimensional
- Avalia a qualidade de cada cromossomo (o quão apto é o respectivo indivíduo, ou seja, o quão boa é a solução)
- Operadores de seleção, recombinação, mutação e de elitismo usualmente utilizam a informação da  $F_{AE}$
- Extremamente importante que  $F_{AE}$  reflita precisamente o objetivo do problema de otimização

13

## Exemplo Simples de *Fitness*:

- **Própria função que se deseja minimizar ou maximizar em um dado problema de otimização numérica**

- Por exemplo: maximizar  $f(x) = \sin(50x) / e^{(x/70)}$  para  $x \in [0, 255]$

$$C_1 = 11110101 \rightarrow x = 245 \rightarrow f(x) = -0,0242$$

$$C_2 = 00110101 \rightarrow x = 53 \rightarrow f(x) = -0,4680$$

$$C_3 = 01100100 \rightarrow x = 100 \rightarrow f(x) = -0,2368$$

$$C_4 = 10001100 \rightarrow x = 140 \rightarrow f(x) = +0,0686$$

$$C_5 = 00010011 \rightarrow x = 19 \rightarrow f(x) = +0,7207$$

14

## População Inicial:

- Antes de iniciar o processo evolutivo é necessário gerar soluções (cromossomos) iniciais
- Usualmente a população é gerada aleatoriamente
- Tenta-se assegurar que o espaço de busca esteja uniformemente representado
- Tamanho da população influencia o tempo de convergência e o tempo de cada geração

15

## Operadores de Seleção:

- Cada geração de um AE produz um novo conjunto de indivíduos, os quais representam soluções potenciais para o problema
- Operador de seleção objetiva enfatizar a busca nas melhores soluções da população
- **Operadores com Elitismo:**
  - copiam um conjunto dos melhores indivíduos para a próxima geração antes de realizar a seleção propriamente dita
  - garante que melhor *fitness* não decresce ao longo das gerações

16

## Alguns Operadores de Seleção:

- **Seleção Proporcional ao *Fitness* (Roleta):** indivíduos são amostrados de acordo com uma distribuição de probabilidades diretamente proporcional aos seus valores de adequabilidade, ou seja, para um indivíduo  $C_i$  temos:

$$\text{Prob}(C_i) = \frac{F_{AE}(C_i)}{\sum_{l=1}^n F_{AE}(C_l)}$$

- Nota:
  - É preciso garantir  $F_{AE}(C_i) \geq 0$

17

## Exemplo de Cálculo das Probabilidades:

$$\begin{aligned} C_1 = 11110101 &\rightarrow x = 245 \rightarrow f(x) = -0,024 \rightarrow F_{AE}(C_1) = 0,443 \rightarrow P(C_1) = 0,184 \\ C_2 = 00110101 &\rightarrow x = 53 \rightarrow f(x) = -0,468 \rightarrow F_{AE}(C_2) = 0 \rightarrow P(C_2) = 0 \\ C_3 = 01100100 &\rightarrow x = 100 \rightarrow f(x) = -0,236 \rightarrow F_{AE}(C_3) = 0,231 \rightarrow P(C_3) = 0,096 \\ C_4 = 10001100 &\rightarrow x = 140 \rightarrow f(x) = +0,068 \rightarrow F_{AE}(C_4) = 0,536 \rightarrow P(C_4) = 0,223 \\ C_5 = 00010011 &\rightarrow x = 19 \rightarrow f(x) = +0,720 \rightarrow F_{AE}(C_5) = 1,188 \rightarrow P(C_5) = 0,495 \end{aligned}$$

- Alta Pressão Seletiva: alguns poucos indivíduos podem tender a dominar as gerações seguintes
  - pode causar falta de diversidade e estagnação precoce...

18

## Alguns Operadores de Seleção:

- **Seleção Baseada em *Rank*:** consiste em ordenar os valores de *fitness* e usar as respectivas posições (ordens) ao invés dos valores propriamente ditos
  - Probabilidades de seleção inversamente proporcionais aos *ranks* → pode balancear a pressão seletiva
- **Torneio:** dois indivíduos são aleatoriamente escolhidos, selecionando-se o melhor com probabilidade  $p$  e o pior com probabilidade  $(1-p)$
- Existem outras alternativas na literatura
  - seleção determinística  $(\mu, \lambda)$  e  $(\mu + \lambda)$ , etc.

19

## Operadores de Reprodução e Mutação:

- **Recombinação (crossover):** combinar material genético dos pais – pode-se substituir os pais pelos filhos ou não com probabilidades  $p$  e  $(1-p)$
- **Mutação:** em geral envolve mudar aleatoriamente o valor de um ou mais genes num cromossomo, introduzindo material genético novo na população
- A caracterização e eficiência de cada operador depende muito da codificação adotada para representar as potenciais soluções do problema !

20

## Exemplos de Recombinação:

- **Crossover de 1 Ponto:** sorteia-se 1 posição do genótipo e trocam-se os genes dos pais à direita (esquerda) dessa posição



- **Crossover de 2 Pontos:** sorteiam-se 2 posições do genótipo e trocam-se os genes dos pais internos (externos) a essas posições



**Crossover Uniforme:** para cada gene no 1º filho é decidido (com probabilidade  $p$ ) qual pai vai contribuir com seu valor daquele gene

21

## AEs x Otimização Clássica:

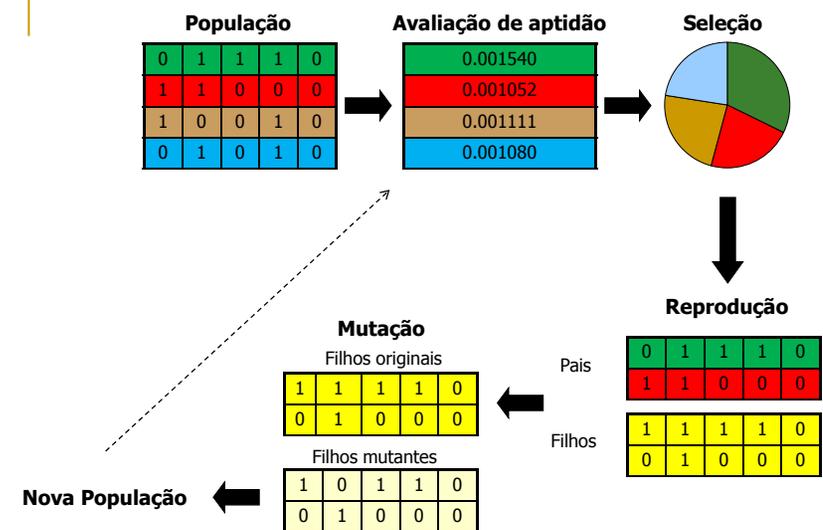
- Algoritmos clássicos em geral apresentam melhor desempenho em problemas de otimização linear, quadrática, unimodal, polinomiais
- AEs em geral se mostram mais eficientes em problemas não contínuos, não diferenciáveis, multimodais, NP-hard, ...
- Vamos estudar agora um *exemplo típico* de AE
  - Algoritmos Genéticos (AGs)

22

## Descrição Geral de um AG:

1. Inicializar uma população de cromossomos
2. Avaliar (o *fitness* de) cada cromossomo da população
3. Enquanto o critério de convergência não tiver sido alcançado, fazer:
  - 3.1 Selecionar cromossomos com base nas suas aptidões
  - 3.2 Gerar novos cromossomos (recombinação e mutação)
  - 3.3 Inserir cromossomos gerados em 3.2 na população
  - 3.4 Avaliar os cromossomos da população

23



## Exemplo Pedagógico:

Suponhamos que se deseje maximizar a quantidade de 1s num vetor (*string*) formado por  $L$  dígitos binários

População inicial de genótipos (cromossomos):

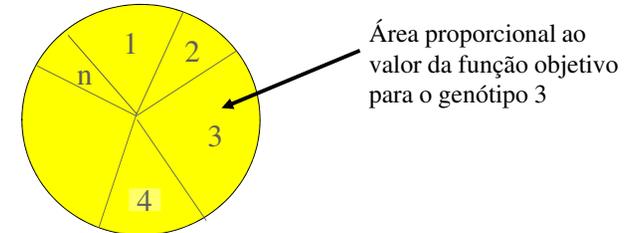
$s_1 = 1111010101$	$f(s_1) = 7$
$s_2 = 0111000101$	$f(s_2) = 5$
$s_3 = 1110110101$	$f(s_3) = 7$
$s_4 = 0100010011$	$f(s_4) = 4$
$s_5 = 1110111101$	$f(s_5) = 8$
$s_6 = 0100110000$	$f(s_6) = 3$

\*Fonte: Zaritsky, A. – Introduction to Genetic Algorithms.

25

## Seleção pelo Método da Roleta:

- Cada cromossomo  $i$  tem uma probabilidade de ser escolhido que é diretamente proporcional à sua aptidão / adequabilidade / valor da função objetivo (*fitness*)
- O *sorteio* é executado  $n$  vezes



26

## Seleção pelo Método da Roleta:

Relembrando a definição temos:

$$\text{Prob}(\mathbf{C}_i) = \frac{F_{AE}(\mathbf{C}_i)}{\sum_{l=1}^n F_{AE}(\mathbf{C}_l)}$$



$$\text{Prob}(s_i) = \frac{f(s_i)}{f(s_1) + f(s_2) + \dots + f(s_6)}$$

Como implementar computacionalmente?

27

## Seleção pelo Método da Roleta:

- Suponhamos que, após executar a seleção, obtém-se a seguinte população:

$s_1' = 1111010101$	$(s_1)$
$s_2' = 1110110101$	$(s_3)$
$s_3' = 1110111101$	$(s_5)$
$s_4' = 0111000101$	$(s_2)$
$s_5' = 0100010011$	$(s_4)$
$s_6' = 1110111101$	$(s_5)$

28

## Recombinação (*Crossover*):

Probabilidade de recombinação  $p$ / cada par de cromossomos: 0.6

Suponhamos que os pares  $(s_1', s_2')$  e  $(s_5', s_6')$  sejam recombinados

Para cada par, seleciona-se aleatoriamente **um ponto de crossover** (por exemplo 2 para o primeiro par e 5 para o segundo par)

### Antes do *crossover*:

$s_1' = 1111010101$   
 $s_2' = 1110110101$

$s_5' = 0100010011$   
 $s_6' = 1110111101$

### Depois do *crossover*:

$s_1'' = 1110110101$   
 $s_2'' = 1111010101$

$s_5'' = 0100011101$   
 $s_6'' = 1110110011$

29

## Mutação:

- Seleciona-se aleatoriamente um *bit* (gene) para alterar de acordo com uma pequena probabilidade (por exemplo 0.1):

### Antes da mutação:

$s_1'' = 1110110101$   
 $s_2'' = 1111010101$   
 $s_3'' = 1110111101$   
 $s_4'' = 0111000101$   
 $s_5'' = 0100011101$   
 $s_6'' = 1110110011$

### Depois da mutação:

$s_1''' = 1110100101$       $f(s_1''') = 6$   
 $s_2''' = 1111110100$       $f(s_2''') = 7$   
 $s_3''' = 1110101111$       $f(s_3''') = 8$   
 $s_4''' = 0111000101$       $f(s_4''') = 5$   
 $s_5''' = 0100011101$       $f(s_5''') = 5$   
 $s_6''' = 1110110001$       $f(s_6''') = 6$

30

## Resultado:

- ❑ Em uma geração, a *adaptação total* da população aumentou aproximadamente 9%
- ❑ O processo continua até se atingir um determinado critério de convergência, como por exemplo:
  - Valor pré-estabelecido de *fitness*
  - No. máximo de gerações
  - No. de gerações sem alteração do melhor *fitness*

31

## AEs de Propósito Específico

- ❑ Os algoritmos evolutivos mais eficientes costumam ser aqueles cujos esquemas de codificação e operadores são especialmente projetados para o problema em questão
  - ❑ conjunto codificação + operadores **sensível ao contexto**
- ❑ Veremos dois exemplos a seguir:
  - ❑ AEs para Caixeiro Viajante (TSP)
  - ❑ AEs para Agrupamento de Dados

38

## AEs de Propósito Específico

### Problema do Caixeiro Viajante (Problema Combinatório NP-Hard):

Considere que um viajante deva partir da cidade  $A$  para visitar outras  $N$  cidades e retornar à sua cidade de origem  $A$ . Além disso, assuma que cada cidade só possa ser visitada uma única vez e que todas as cidades estejam interligadas entre si. A melhor solução é aquela correspondente ao menor caminho percorrido.

- Não existe algoritmo de tempo polinomial que resolva
- O número de possíveis rotas é  $(N - 1)!$
- Busca exaustiva pode ser inviável até para valores pequenos de  $N$ 
  - mesmo em um super-computador ...
  - $12! = \sim 480$  milhões,  $13! = \sim 6$  bilhões, ...

39

## AEs para Caixeiro Viajante

### □ Diferentes Esquemas de Codificação Possíveis

- **Codificação Inteira Circular** é muito comum:
  - exemplo de percurso para 4 cidades: 4-1-3-2
  - nota: este percurso é equivalente a 1-3-2-4, 3-2-4-1 e 2-4-1-3

### □ Seleção:

- Qualquer esquema tradicional pode ser utilizado (e.g. roleta)
- *Fitness*: inversamente proporcional à soma das distâncias

### □ Vários Operadores de Crossover e Mutação Possíveis

- **Mutação por Reversão** (inversão de laço): sorteia-se 2 cidades e inverte-se o percurso internamente ou externamente a essas cidades. Por exemplo:
  - 5-7-3-2-1-4-6 → 5-1-2-3-7-4-6 ou 4-7-3-2-1-5-6
- **Recombinação CX, OX, PMX**, ... consulte a literatura !

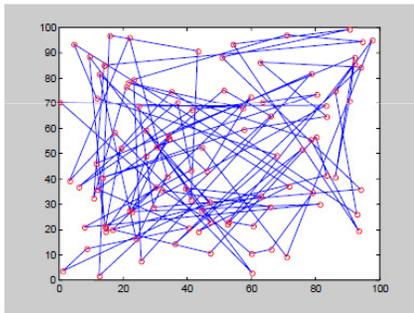
40

## AEs para Caixeiro Viajante

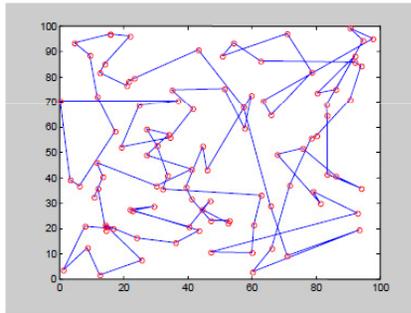
### □ Exemplo de Simulação (Prof. Fernando Von Zuben – FEEC/Unicamp):

- $N = 100$  cidades

Melhor indivíduo na população inicial



Melhor indivíduo após 500 gerações



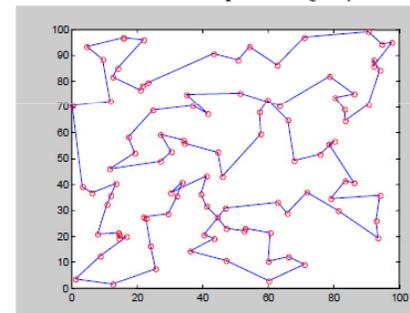
41

## AEs para Caixeiro Viajante

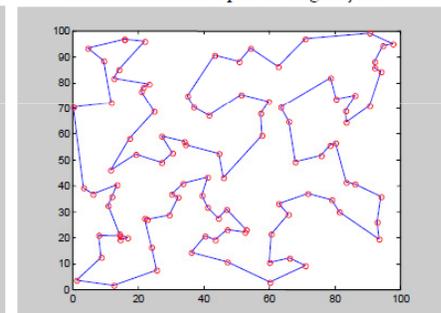
### □ Exemplo de Simulação (Prof. Fernando Von Zuben – FEEC/Unicamp):

- continuação...

Melhor indivíduo após 2000 gerações



Melhor indivíduo após 4000 gerações



42

# AEs para Agrupamento de Dados

## ❑ Vários Esquemas de Codificação Possíveis

❑ por exemplo, rotulação dos objetos (vide a seguir)

## ❑ Seleção:

- ❑ qualquer esquema tradicional pode ser utilizado (e.g. roleta)
- ❑ *fitness*: critério capaz de avaliar a qualidade de soluções de agrupamento

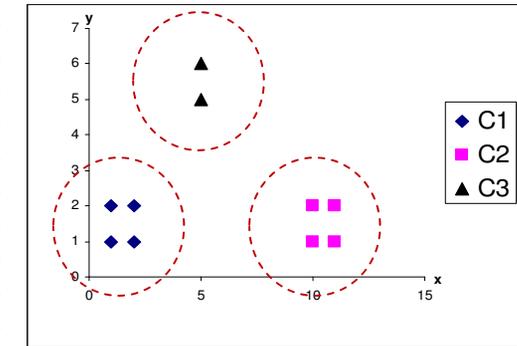
## ❑ Vários Operadores Possíveis (vide exemplos a seguir)

- ❑ mutação por eliminação de um ou mais grupos (reduz o no. de grupos  $k$ )
- ❑ mutação por divisão de grupos em dois novos grupos (aumenta  $k$ )
- ❑ busca local
- ❑ ...

43

## ❑ Exemplo de Codificação:

objeto	x	y	grupo
1	1	1	C <sub>1</sub>
2	1	2	C <sub>1</sub>
3	2	1	C <sub>1</sub>
4	2	2	C <sub>1</sub>
5	10	1	C <sub>2</sub>
6	10	2	C <sub>2</sub>
7	11	1	C <sub>2</sub>
8	11	2	C <sub>2</sub>
9	5	5	C <sub>3</sub>
10	5	6	C <sub>3</sub>

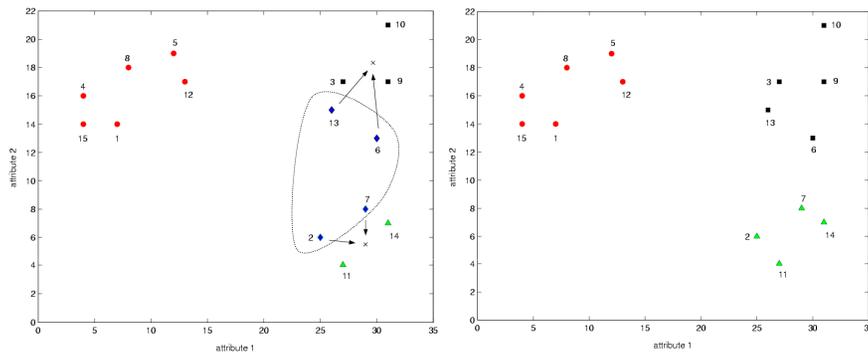


❑ Cromossomo codificando a partição acima:



44

## ❑ Exemplo de Operador de Mutação:

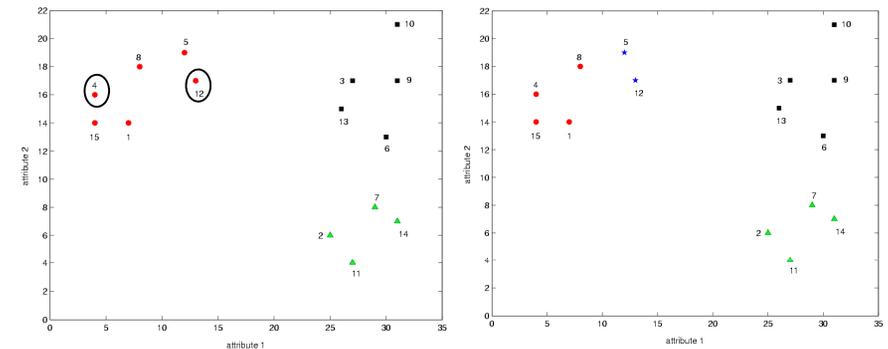


### ❑ Mutação por Eliminação de Grupos:

- Grupo **Azul** é selecionado para mutação
- Objetos 6 e 13 são *mais próximos* ao Grupo **Preto**
- Objetos 2 e 7 são *mais próximos* ao Grupo **Verde**

45

## ❑ Outro Exemplo de Operador de Mutação:

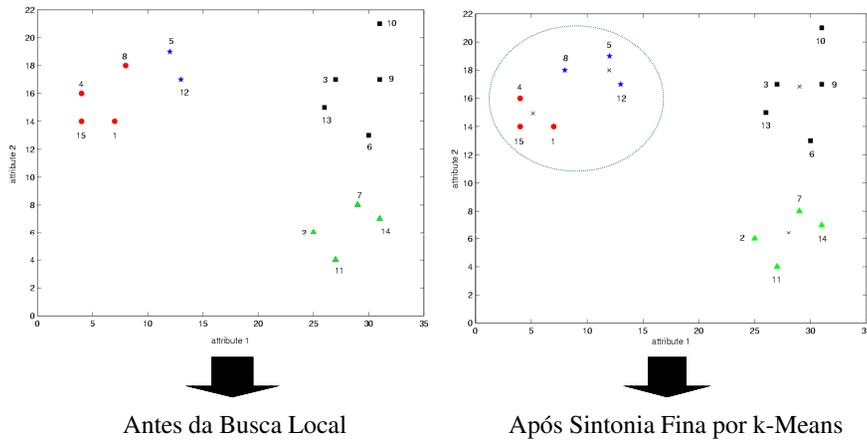


### ❑ Mutação por Divisão de Grupos (grupo Verde selecionado para mutação):

- Obj. 4 e seu colega mais distante (obj. 12) selecionados aleatoriamente como sementes
- Objeto 5 está mais próximo do objeto 12
- Objetos 1, 15 e 8 estão mais próximos do objeto 4

46

## Exemplo de Operador de Busca Local (k-Means):



47

## Exercícios:

1. Represente os valores  $x = 9, 35, 42, 136$  e  $208$  em codificação binária e aplique os ops. de crossover de 1 e 2 pontos a cada par de cromossomos, escolhendo diferentes pontos de cruzamento
2. Dados os seguintes valores de adequabilidade de uma população de 5 indivíduos, calcule as probabilidades de seleção de cada indivíduo pelo método da roleta:  $F_{AE}(C_1) = 18$ ,  $F_{AE}(C_2) = 0$ ,  $F_{AE}(C_3) = 36$ ,  $F_{AE}(C_4) = 9$ ,  $F_{AE}(C_5) = 4$ .
3. Considere o seguinte cromossomo que representa uma solução do problema do caixeiro (TSP) na codificação inteira circular vista em aula: 1-10-3-4-9-5-7-6-5-2. Aplique o operador de mutação por reversão no percurso interno entre a 3ª e 7ª cidades (inclusas). Em seguida, aplique novamente esse operador, porém no percurso externo a essas mesmas cidades.

48

## Leitura Básica Sugerida

- F. J. Von Zuben, **Computação Evolutiva: Uma Abordagem Pragmática**, DCA/FEEC/Unicamp, Tutorial, disponível on-line em:

[ftp://ftp.dca.fee.unicamp.br/pub/docs/vonzuben/ia013\\_1s07/tutorialEC.pdf](ftp://ftp.dca.fee.unicamp.br/pub/docs/vonzuben/ia013_1s07/tutorialEC.pdf)

49