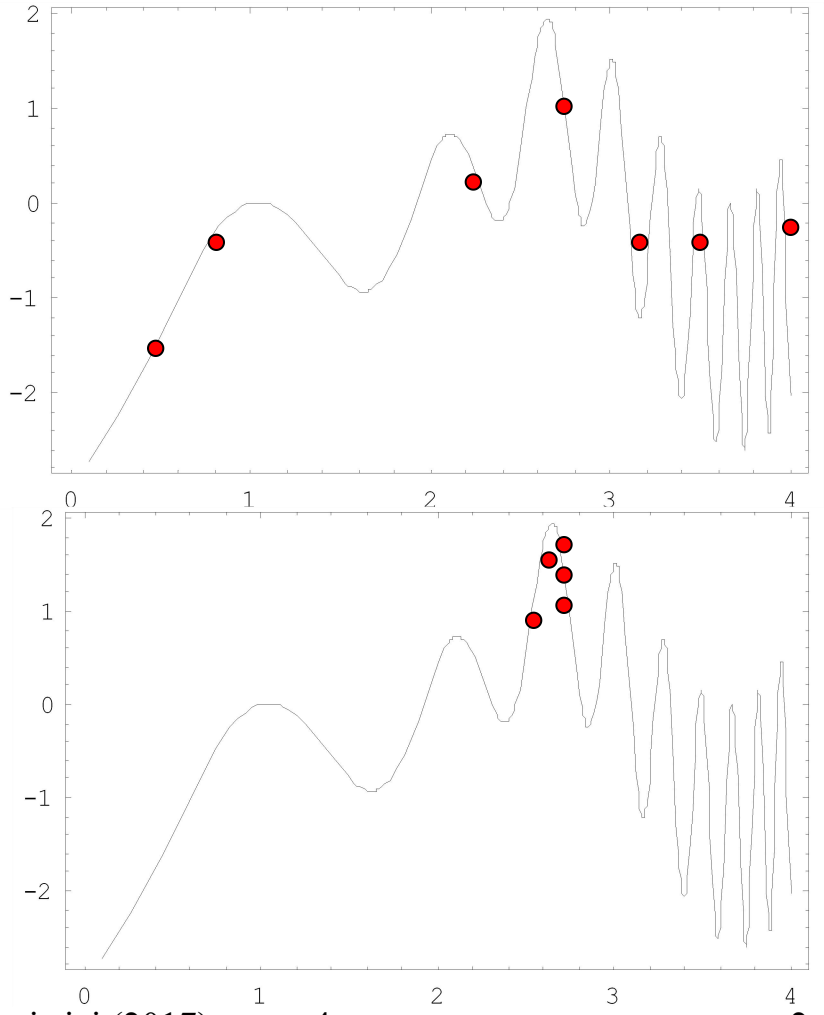
Metaeuristici bazate pe populații

- Specific
- Clase de metaeuristici bazate pe populații
- Structura generală
- Componente de bază
- Algoritmi evolutivi:
  - Codificare
  - Selecție
  - Reproducere: încrucișare și mutație

Metaeuristici bazate pe populații

Rezolvarea unei probleme =

- căutarea soluției în spațiul tuturor soluțiilor potențiale folosind o populație de agenți (căutători);
- căutarea este ghidată prin intermediul unei funcții care măsoară gradul de apropiere față de soluție

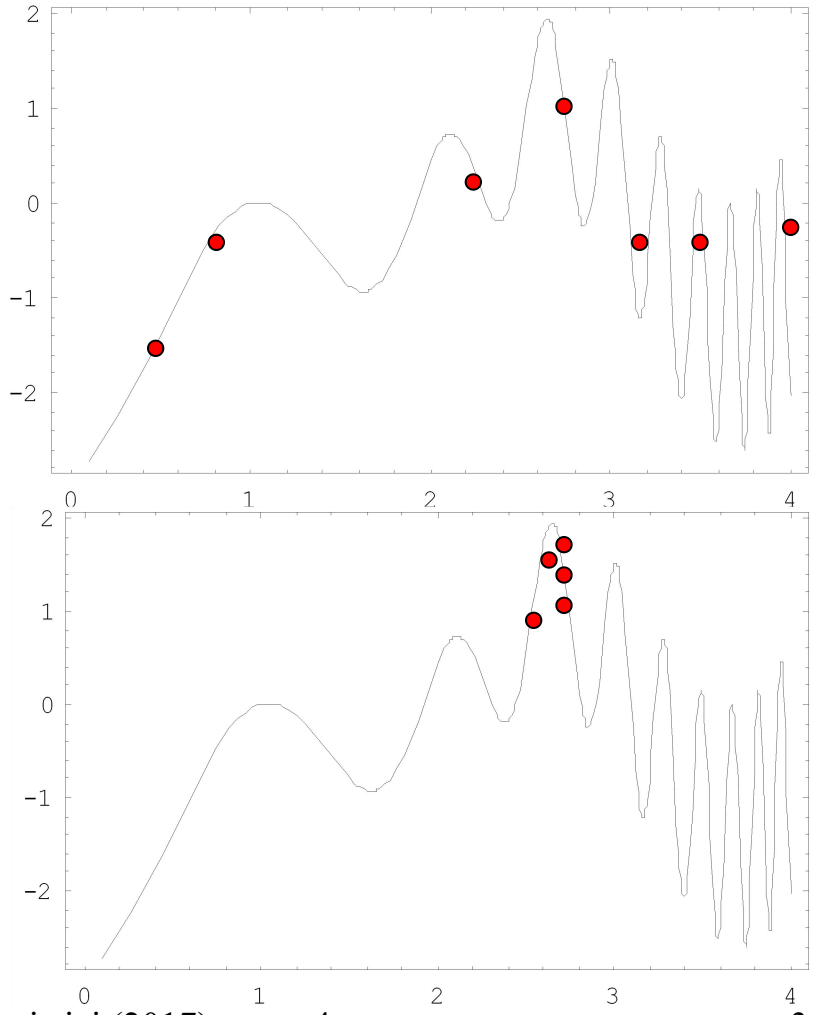


Metaeuristici bazate pe populații

Procesul de căutare se bazează pe două mecanisme principale:

- explorare = parcurgerea diferitelor regiuni din spațiul soluțiilor și colectarea de informații – presupune colaborare între elementele populației
- exploatare = rafinarea soluției (exploatarea informațiilor colectate în procesul de explorare) – competiție între elementele populației

Obs: există numeroase variante de metaeuristici bazate pe această idee



Metaeuristici bazate pe populații

- Algoritmi evolutivi
  - Algoritmi genetici (Genetic Algorithms)
  - Strategii evolutive (Evolution Strategies)
  - Programare evolutivă (Evolutionary Programming)
  - Programare genetică (Genetic Programming)
- Algoritmi bazați pe inteligența colectivă
  - Modelul stolului de păsări (Particle Swarm Optimization)
  - Modelul coloniei de furnici (Ant Colony Optimization)
  - Modelul roiului de albine (Artificial Bee Colony)
  - ... o serie de alți algoritmi inspirati de comportamentul diferitelor specii biologice
- Alți algoritmi care utilizează populații
  - Algoritmi bazați pe diferențe (Differential Evolution)
  - Algoritmi bazați pe estimarea unei distribuții de probabilitate (Estimation of Distribution Algorithms)

Structura generală

Inițializare populație (aleatoare sau bazată pe euristici specifice)

Evaluare populație (calculul valorii funcției obiectiv pt fiecare element)

REPEAT

    Generarea unei noi populații de soluții candidat

    Evaluarea soluțiilor candidat

    Selecția elementelor care vor forma noua populație

UNTIL <condiție de oprire>

Obs:

- generarea noilor soluții candidat este specifică fiecărei clase de algoritmi
- la fiecare generație se construiește un nou set de soluții candidat iar competiția pentru selecție implică populația curentă și cea a noilor candidați (algoritm generațional sau cu evoluție sincronă)

Structura generală

Varianta: soluțiile candidat sunt analizate și eventual asimilate în populație imediat după generarea lor (algoritmi de tip steady state sau cu evoluție asincronă)

Inițializare populație: $(s_1, s_2, ..., s_m)$

Evaluare populație (calculul valorii funcției obiectiv pt fiecare element)

REPEAT

  FOR i =1:m

    construirea unei noi soluții (s'_i)

    evaluarea noii soluții

    decide dacă noua soluție candidat este acceptată în populație

UNTIL <condiție de oprire>

Obs: o nouă soluție candidat este de obicei acceptată dacă este mai bună decât cel mai slab element al populației curente

Calcul evolutiv

Calcul evolutiv = dezvoltarea și utilizarea de tehnici de rezolvare a problemelor inspirate de evoluția speciilor în natură

Sursa de inspirație: teoria evoluției speciilor biologice =

- Populațiile evoluează prin apariția de noi caracteristici ale indivizilor în timpul încrucișării și ca efect al mutațiilor aleatoare
- în procesul de evoluție supraviețuiesc indivizii care se adaptează cel mai bine mediului

Analogie evoluție - optimizare

Proces de evoluție	Rezolvarea unei probleme
Mediu natural	Informații despre problemă
Individ (cromozom)	Soluție candidat (configurație/ individ/ cromozom)
Populație de indivizi	Populație de soluții candidat (configurații / indivizi/ cromozomi)
Grad de adaptare la mediu (fitness)	Măsură a calității soluției (valoarea funcției obiectiv/ funcție de scor)
Selecție	Mecanism de exploatare
Reproducere (încrucișare și mutație)	Mecanisme de explorare

Calcul evolutiv: noțiuni de bază

Cromozom = mulțime de gene asociate unui individ (soluție potențială a problemei)

(1,0,0,1)

Populație = mulțime de indivizi (soluții candidat)

{(0,0,0,0), (0,0,1,1), (1,0,0,1),(1,0,1,0)}

Genotip = ansamblul tuturor genelor unui individ sau populații

Fenotip = ansamblul tuturor trăsăturilor determinate de către un genotip

{0,3,9,10}

Calcul evolutiv: noțiuni de bază

Fitness = măsură a calității unui individ (în raport cu problema de rezolvat);

termeni sinonimi: funcție obiectiv, funcție scor, criteriu de optim.

Generație = etapă în evoluția unei populații

Reproducere = generarea de urmași (fii, copii) pornind de la elementele populației curentă

- încrucișare
- mutație

Ex: problema ONEMAX

= caută șirul de biți care maximizează numărul de biți egali cu 1

(1,0,0,1) → 2

Incrucișare:

(1,0,0,1) → (1,0,1,1)

(0,0,1,1) → (0,0,0,1)

Mutație:

(1,0,1,1) → (1,1,1,1)

Calcul evolutiv: aplicații

Planificare: alegerea traseelor optime ale unor vehicule, rutarea mesajelor într-o rețea de telecomunicații, planificarea unor activități etc.

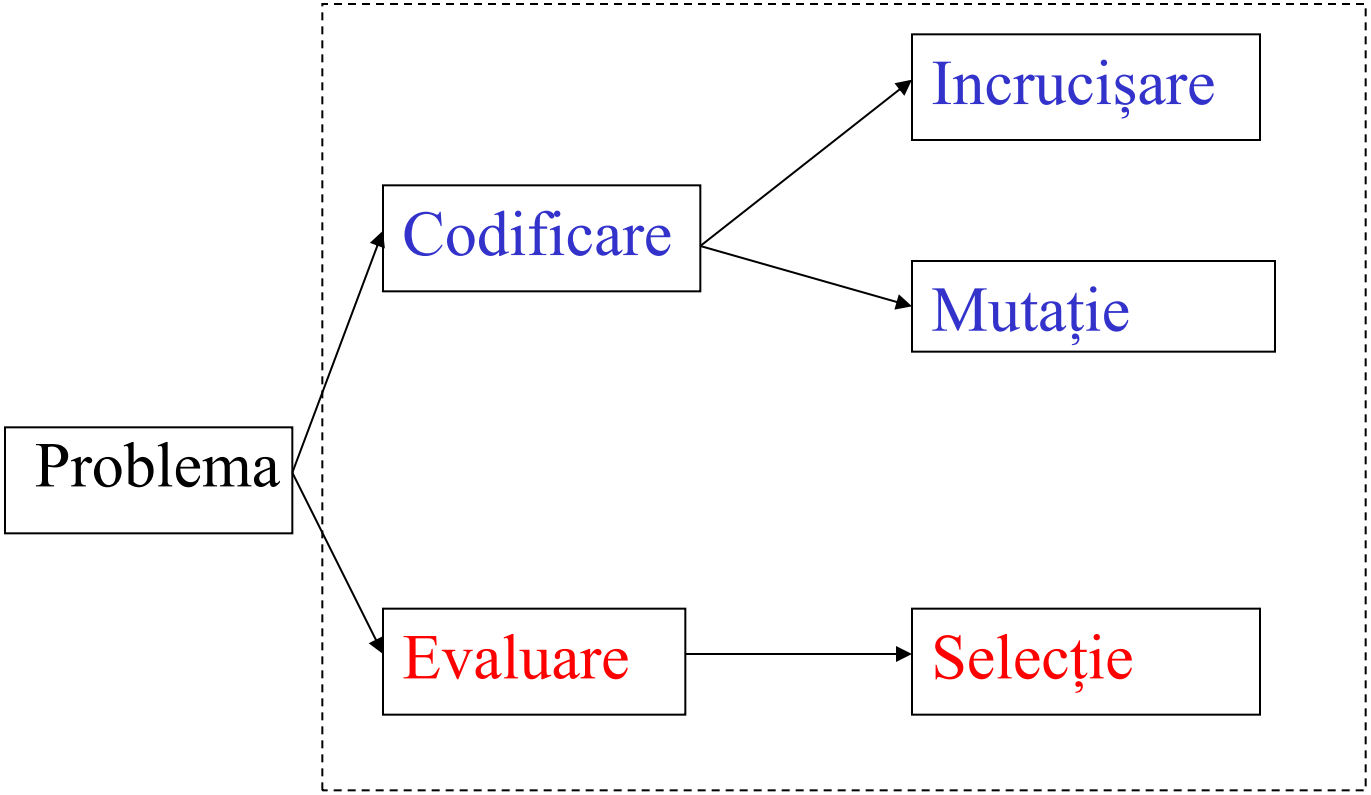
Proiectare: circuite digitale, filtre, rețele neuronale; determinarea parametrilor optimi în proiectarea avioanelor, reactoarelor chimice, a structurilor în construcții etc.

Modelare: dezvoltarea de modele utile în efectuarea de predicții în economie, finanțe, medicină etc.

Analiza datelor: proiectarea de sisteme de clasificare aplicabile în inginerie, biologie, medicină

Proiectarea unui algoritm evolutiv

Elemente componente:



Structura unui algoritm evolutiv

Inițializare populație
Evaluare populație
REPEAT
    Selecție părinți
    Generare urmași prin încrucișare
    Modificare urmași prin mutație
    Evaluare urmași
    Selecție supraviețuitori (vor forma populația din noua generație)
UNTIL <condiție de oprire>

Variante de algoritmi evolutivi

Algoritmi genetici (Holland, 1962-1967):

Codificare: binară

Incrucișare: operator principal

Mutație: operator secundar

Aplicații: optimizare combinatorială

Programare genetică (Koza, 1990):

Codificare: structuri arborescente

Incrucișare: operator principal

Mutatie: operator secundar

Aplicații: proiectare modele de calcul

Strategii evolutive (Rechenberg,Schwefel 1965):

Codificare: reală

Mutație: operator principal

Incrucișare: operator secundar

Aplicații: optimizare în domenii continue

Programare evolutivă (L. Fogel, D. Fogel, 1960-1970):

Codificare: reală / diagrame de stări

Mutație: operator principal

Incrucișare: nu se aplică

Aplicații: optimizare continuă

Codificarea elementelor populatiei

Reprezintă un element cheie în proiectarea unui algoritm genetic.

La alegerea tipului de codificare se ține cont de specificul problemei

Variante de codificare:

- Codificare binară (varianta clasică pentru algoritmi genetici)
- Codificare reală (adecvată optimizării în domenii continue, tipică pentru strategiile evolutive)
- Codificare specifică (pentru cazul când se caută configurații cu o structură specială – de exemplu, permutări)

Codificare binară

Cromozom = șir de biți

Spațiul de căutare: $\{0,1\}^n$, n este corelat cu dimensiunea problemei

Exemple:

1. Pb. ONEMAX: determinarea șirului de biți $(x_1,\ldots,x_n)$ care maximizează funcția $f(x_1,\ldots,x_n)=x_1+\ldots+x_n$
2. Pb. Rucsacului: se consideră un set de obiecte caracterizate de greutățile $(w_1,\ldots,w_n)$ și valorile $(v_1,\ldots,v_n)$ și un rucsac de capacitate C; să se determine un subset de obiecte ce pot fi incluse în rucsac astfel încât să nu fie depășită capacitatea acestuia și valoarea totală a obiectelor selectate să fie maximă

   Reprezentarea soluției: $(s_1,\ldots,s_n)$

   s_i=0 obiectul i nu este selectat

   s_i=1 obiectul i este selectat

Codificare binară

3. Optimizarea unei funcții definite pe un domeniu continuu.

$f:[a_1,b_1]x...x[a_n,b_n] \rightarrow R$

$X=(x_1,\ldots,x_n) \rightarrow V=(v_1,\ldots,v_n) \rightarrow U=(u_1,\ldots u_n) \rightarrow Y=(y_1,\ldots,y_n, y_{n+1},\ldots y_{nr})$

$v_i=(x_i-a_i)/(b_i-a_i)$ (v_i aparține lui [0,1])

$u_i=[v_i*(2^r-1)]$ (u_i este număr natural din $\{0,\ldots 2^r-1\}$ => poate fi reprezentat în binar pe r poziții)

$(y_{r(i-1)+1},\ldots y_{ri})$ = reprezentarea binară a valorii u_i

Codificare binară

Obs. Reprezentarea binară are dezavantajul că valori numerice apropiate au asociate reprezentări binare aflate la distanță Hamming mare (ex. $7=(0111)_2$, $8=(1000)_2$)

Soluție: utilizarea codului Gray (valori succesive au asociate reprezentări binare ce diferă într-o singură poziție)

$(b_1,\ldots,b_r) \rightarrow (g_1,\ldots,g_r)$

$g_1=b_1$

$g_i=(b_{i-1} + b_i) \bmod 2$

Codificare binară

Codificarea Gray:

$(b_1,\ldots,b_r) \rightarrow (g_1,\ldots,g_r)$

$g_1=b_1$

$g_i=(b_{i-1} + b_i) \bmod 2$

Decodificare:

$b_j=(g_1+\ldots+g_j) \bmod 2$

Nr.	Binar	Gray
0	000	000
1	001	001
2	010	011
3	011	010
4	100	110
5	101	111
6	110	101
7	111	100

Codificare specifică

Codificare adaptată problemei de rezolvat

Exemplu: codificare de tip permutare

$(s_1,s_2,\ldots,s_n)$, s_i în $\{1,\ldots,n\}$, $s_i <> s_j$ pt. orice $i<>j$

Problema: pb. comis voiajorului

s_i = indicele orașului parcurs la etapa i

Obs. Prezintă avantajul că asigură implicit satisfacerea restricțiilor

Alte variante: mulțimi, liste de diferite lungimi, arbori, grafuri

Evaluarea elementelor

Funcția scor (fitness)

- este o măsură a calității unui element al populației
- cu cât valoarea sa este mai mare cu atât va fi mai mare probabilitatea ca elementul respectiv să supraviețuiască (direct sau prin intermediul urmașilor săi)

Problema: optimizare fără restricții

Functia scor este direct proporțională cu funcția obiectiv (pt. o problemă de maximizare) și invers proporțională cu funcția obiectiv (pt. o problemă de minimizare)

Problema: optimizare cu restricții

Funcția scor este determinată de funcția obiectiv și de restricțiile problemei

Evaluarea elementelor

Tratarea restricțiilor: includerea restricțiilor în funcția obiectiv utilizând metoda penalizării

$$\max_{x \in D} f(x)$$

$$g_i(x) = 0, \; i = \overline{1, k_1}$$

$$h_i(x) \geq 0, \; i = \overline{1, k_2}$$

$$F(x) = f(x) - a\sum_{i=1}^{k_1} g_i^2(x) - b\sum_{i=1}^{k_2} \varphi(h_i(x)), \quad a > 0, b > 0$$

$$\varphi(u) = \begin{cases} 0, & u \geq 0 \\ -u, & u < 0 \end{cases}$$

(fără penalizare dacă restricția e satisfăcută)

(penalizarea e cu atât mai mare cu cât gradul de încălcare a restricției este mai mare)

Evaluarea elementelor

Exemplu: problema rucsacului

$$\max_s \sum_{i=1}^{n} v_i s_i$$

$$C - \sum_{i=1}^{n} w_i s_i \geq 0$$

Funcția scor

$$F(s) = \begin{cases} \sum_{i=1}^{n} v_i s_i, & \text{daca } \sum_{i=1}^{n} w_i s_i \leq C \\ a\sum_{i=1}^{n} v_i s_i - b\left(\sum_{i=1}^{n} w_i s_i - C\right), & \text{daca } \sum_{i=1}^{n} w_i s_i > C \end{cases}$$

$$a, b > 0, a + b = 1$$

Obs: ponderile a și b controlează importanța celor două componente: optimizarea funcției obiectiv, respectiv satisfacerea restricțiilor

Selecție

Scop:

- stabilirea elementelor din populația curentă care vor participa la construirea urmașilor (selecția părinților)
- stabilirea elementelor din populația de urmași care vor face parte din generația viitoare (selecția supraviețuitorilor)

Principiu:

- elementele care au valoarea scorului mai mare au mai multe șanse să fie selectate

Mecanisme de selecție:

- selecție proporțională,
- selecție pe baza rangurilor
- selecție de tip turneu
- selecție prin trunchiere

Selecția proporțională

Populația curentă: $P=(x^1,\ldots,x^m)$

Valorile funcției scor :

$(F_1,\ldots,F_m)$

Probabilități de selecție:

$p_i=F_i/(F_1+\ldots+F_m)$

Obs. Dacă F_i nu sunt strict pozitive se modifică:

$F'_i=F_i-\min(F_i)+eps$

Etape:

a) Calculul probabilităților de selecție

b) Generarea de valori aleatoare în conformitate cu distribuția

1	2	…	m
p_1	p_2	…	p_m

Variante de implementare:

(i) "Roulette Wheel"

(ii) "Stochastic Universal Sampling" (SUS)

Selecția proporțională

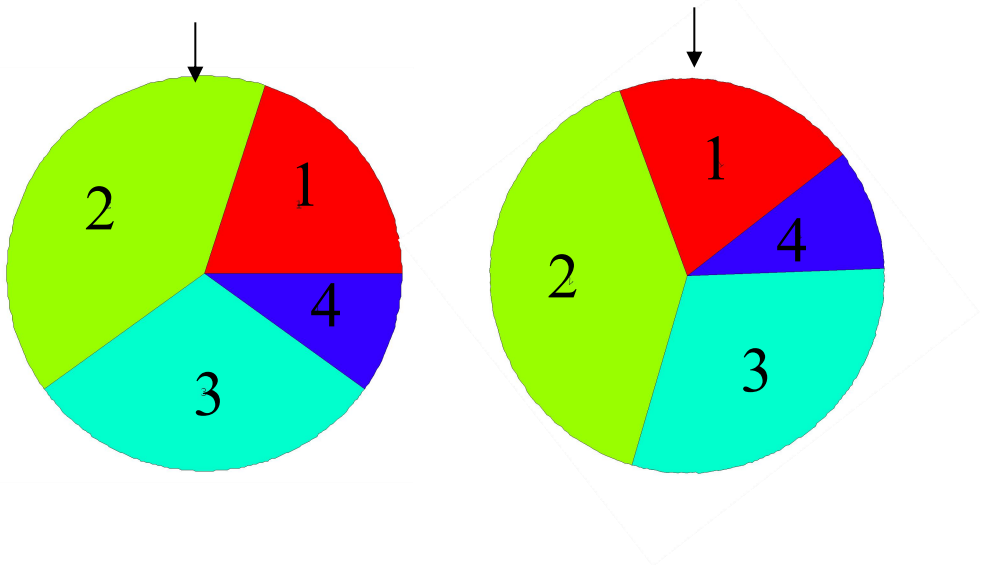
Roulette Wheel (metoda ruletei)

- Se consideră o ruletă divizată în m sectoare de arii proporționale cu probabilitățile de selecție

- Se rotește ruleta și numărul de ordine al sectorului în dreptul căruia se află indicatorul la oprirea ruletei reprezintă elementul din populație care se va selecta

Exemplu:

1	2	3	4
0.2	0.4	0.3	0.1



Selecția proporțională

Implementare:

```
Ruleta (p[1..m])
    i=1
    s=p[1]
    u=random(0,1)
    while s<u do
        i=i+1
        s=s+p[i]
    endwhile
    return i
```

Obs.

1. Algoritmul alăturat implementează metoda inversării funcției de repartiție
2. La o rulare generează indicele unui element
3. Pentru selectarea mai multor elemente ar trebui aplicat algoritmul de mai multe ori.

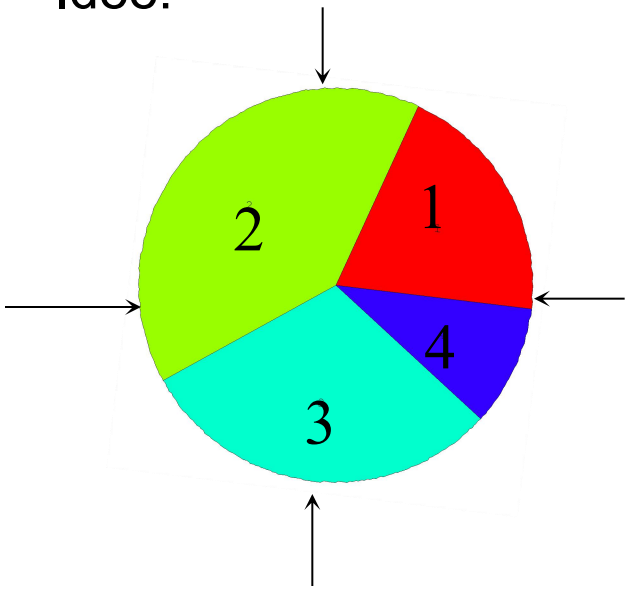
   Pentru a eficientiza procesul

   se poate utiliza varianta SUS (Stochastic Universal Sampling) – permite generarea mai multor valori într-o singură rulare

Selecția proporțională

Stochastic Universal Sampling

Idee:



Obs: k reprezintă numărul de elemente ce trebuie selectate

c[1..m] va conține nr. de copii ale fiecărui element

Algoritm:

```
SUS(p[1..m],k)
   u=random(0,1/k)
   s=0
   for i=1,m  do
        c[i]=0
        s=s+p[i]
        while u<s do
             c[i]=c[i]+1
             u=u+1/k
         endwhile
   endfor
   Return c[1..m]
```

Selecția proporțională

Dezavantaje:

1. In cazul în care funcția de optimizat nu este strict pozitivă, valorile trebuie transformate

2. Daca diferența între scorul celui mai bun element este semnificativ mai mare decât cel al celorlalte elemente atunci e posibil sa fie selectate doar copii ale acestuia stopându-se procesul de evoluție (când populația nu are suficientă diversitate devine dificil să fie generate configurații noi)

Selecția bazată pe ranguri

Specific:

probabilitățile de selecție nu se calculează pe baza valorilor scorurilor ci pe baza poziției acestor valori în lista ordonată crescător a tuturor valorilor (în contextul unei probleme de maximizare)

Etape:

1. ordonează crescător valorile funcției scor
2. fiecărei valori distincte din lista de valori i se asociază un rang (1 pentru cea mai mică valoare)
3. se partiționează populația în clase de elemente având asociat același rang (de exemplu, c clase)
4. se calculează probabilitățile de selecție: $P_i = i/(1+2+\ldots+c)$
5. se selectează clase de elemente utilizând tehnica ruletei sau SUS; din fiecare clasă selectată se extrage uniform aleator câte un element

Selecția de tip turneu

Specific:

selecția unui element se bazează pe compararea lui cu alte elemente

Pentru selecția fiecărui element se parcurg etapele:

1. Se selectează aleator r elemente din populație
2. Dintre cele r elemente selectate se alege cel mai bun; acesta va fi rezultatul selecției

Obs.

1. Selecția elementelor ce participă la turneu se poate face cu sau fără revenire (în cazul selecției fără revenire, un element selectat o dată nu mai poate fi selectat a doua oară)

- Caz clasic: r=2

Selecția prin trunchiere

Specific:

din populația reunită a părinților și fiilor generați prin încrucișare și mutație se selectează cei mai buni *m* indivizi (in cazul în care populația supraviețuitorilor conține *m* elemente)

Obs.

1. Este singura selecție care nu implică elemente aleatoare
2. Se utilizează mai mult la strategiile evolutive
3. In general populațiile de părinți și urmași au fiecare câte *m* elemente dintre care trebuie selectați *m* supraviețuitori

Proprietăți ale procesului de selecție

Elitism:

- Cel mai bun element descoperit în procesul evolutiv este conservat
  - Selecție prin trunchiere este elitistă
  - In selecția proporțională probabilitatea de a selecta cel mai bun element este mare
  - Selecția de tip turneu se caracterizează prin cel mai scăzut grad de elitism

Presiune de selecție:

- exprimă gradul în care procesul de selecție favorizează cel mai bun element al populației
- o măsură cantitativă a presiunii de selecție este numărul de generații în care doar prin aplicare a selecției (fără operatori de reproducere) populația ajunge să fie constituită doar din copii ale celui mai bun element („takeover time”)

Incrucișare

Scop: combinarea a două sau mai multor elemente ale populației cu scopul obținerii de noi elemente

Variante:

- La algoritmii genetici clasici se pornește de la doi părinți și se generează doi urmași
- La strategiile evolutive se folosesc mai mulți părinți și se construiește un singur urmaș

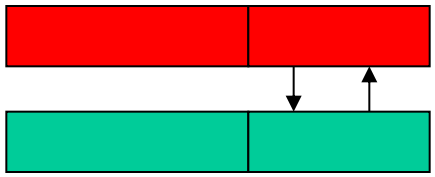
Modalități de implementare:

- cu puncte de tăietură
- uniformă
- convexă
- specifică problemei de rezolvat

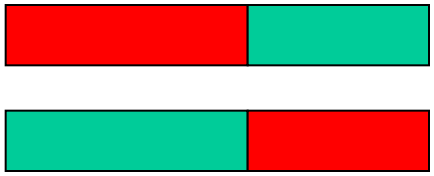
Incrucișare cu puncte de tăietură

Un punct de tăietură

Părinți

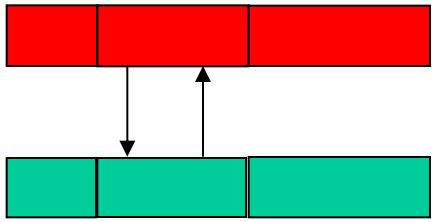


Urmași

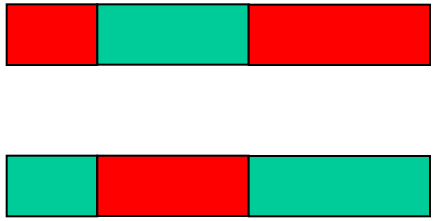


Două puncte de tăietură

Părinți



Urmași



Incrucișare cu puncte de tăietură

Observatii:

1. Din populația de parinti se selecteaza aleator (sau prin selecție ce ține cont de calitatea elementelor) perechi de elemente asupra cărora se aplică încrucișarea cu o probabilitate prestabilită (0.2<=Pc<=0.9)

2. Elementele din populație care nu se selectează ca părinți sunt transferate nealterate în populația de urmași

3. Punctele de tăietură se selectează uniform aleator

4. Nu există argumente teoretice referitoare la superioritatea incrucișării cu mai multe puncte de tăietură; experimental s-a observat că varianta cu două puncte de tăietură se comportă mai bine decât cea cu un singur punct

Incrucișare uniformă

Specific: genele urmașilor se determină prin selecția aleatoare a genelor părinților

Notatii: $x = (x_1, \ldots x_n)$, $y = (y_1, \ldots, y_n)$ – părinți

$x' = (x'_1, \ldots x'_n)$, $y' = (y'_1, \ldots, y'_n)$ – urmași

$$x_i' = \begin{cases} x_i, & \text{cu probabilitatea p} \\ y_i, & \text{cu probabilitatea 1 - p} \end{cases}$$

$$y_i' = \begin{cases} y_i, & \text{daca } x_i' = x_i \\ x_i, & \text{daca } x_i' = y_i \end{cases}$$

Incrucișare convexă

Specific: se utilizează pentru elementele ale căror componente sunt valori reale

Notatii: $x=(x_1,\ldots x_n)$, $y=(y_1,\ldots,y_n)$ – părinți
$x'=(x'_1,\ldots x'_n)$, $y'=(y'_1,\ldots,y'_n)$ – urmași

$$x_i' = ax_i + (1-a)y_i$$
$$y_i' = ay_i + (1-a)x_i$$

Obs.

- Se poate extinde pentru mai multi părinți (variantă utilizată în cazul strategiilor evolutive), caz în care se generează un singur urmaș
- Coeficientul a din (0,1) se poate alege aleator
- Variante mai generale:
  - Parametrul a se alege aleator intr-un interval de forma (-p,p+1)
  - Se poate alege altă valoare aleatoare pentru fiecare dintre componente și fiecare dintre urmași

$$x_i' = a_i x_i + (1-a_i)y_i$$
$$y_i' = b_i y_i + (1-b_i)x_i$$

Incrucișare specifică

Scop: surprinde mai bine specificul problemei de rezolvat; poate include scheme euristice adecvate problemei

Exemplu: problema comis voiajorului (un traseu este specificat prin ordinea de parcurgere a orașelor) – reprezentare de tip permutare

Părinți: A B C D E F G Punct de tăietura: 3
A B E G D C F

Fii: A B C E G D F
A B E C D F G

Obs: Pt a rămâne permutarea corectă nu se interschimbă efectiv elementele ci doar se folosește ordinea elementelor din unul dintre părinți pentru a aranja o parte dintre elementele celuilalt părinte

Incrucișare specifică

Altă încrucișare specifică reprezentării prin permutări: Partially Matched Crossover (PMX)

Etape:

- Se selectează două poziții aleatoare
- Fiecare dintre elementele aflate între pozițiile selectate ale unui părinte se interschimbă cu elementul corespunzător din celălalt părinte

Exemplu:

Părinți: A B C D E F G Pozitii: 2 și 4;
A G E F D C B Perechi: (B,G),(C,E),(D,F)

Fii: A G E F C D B
A B C D F E G

Mutație

Scop: permite introducerea unor gene noi (care nu fac parte din genotipul curent)

Obs: tipul de mutație depinde de modul de codificare a elementelor populației

Codificare binară: mutația constă în complementarea unor gene selectate aleator

Codificare reală: perturbare folosind un vector aleator

Codificare specifică: euristică particulară problemei

Variante de mutație:

1. La nivel de cromozom
2. La nivel ansamblului de gene (“gene pool”)

Mutație

La nivel de cromozom

Etape:

1. Se parcurg elementele populației și pentru fiecare se decide dacă să se aplice mutație sau nu (probabilitatea de mutație P_m este de regulă o valoare foarte mică)

2. Pentru fiecare cromozom selectat pentru mutație se selectează aleator poziția pe care se aplică mutația (în cazul codificării binare presupune complementarea valorii)

Obs:

Pentru a avea, în medie, o un element perturbat prin mutație/populație se poate alege probabilitatea de mutație $P_m=1/m$

Mutație

La nivelul ansamblului de gene

Ipoteza: se presupune că toate elementele populației formează un șir binar lung

Aplicare mutație: Se parcurg toate genele și pentru fiecare se decide (cu probabilitatea P_m) dacă se complementează sau nu

Obs.:

1. In aceasta variantă pot fi modificate mai multe gene ale unui cromozom

Parametri de control

Comportamentul unui algoritm evolutiv este influențat de parametrii ce controlează structura populației și mecanismele evolutive

Exemple de parametri de control:

- Dimensiunea populației
- Parametri ce intervin în criteriul de oprire (număr de generații, număr de evaluări ale funcției obiectiv, numărul de etape de stagnare etc)
- Parametri ce intervin în selecție:
  - Dimensiunea eșantionului în cazul selecției de tip turneu
- Parametri ce intervin în încrucișare:
  - Probabilitatea de încrucișare
- Parametri ce intervin în mutație:
  - Probabilitate de mutație
  - Parametri specifici distribuțiilor folosite în perturbarea aleatoare