

3

Métodos de Otimização

3.1

Técnicas de Inteligência Computacional

Técnicas de Inteligência Computacional são técnicas que, geralmente, imitam aspectos do comportamento humano, tais como: aprendizado, percepção, raciocínio, evolução e adaptação. Desta forma, muitos sistemas foram desenvolvidos utilizando conceitos e princípios da evolução natural das espécies como estratégia de otimização (Linden, 2006).

Este trabalho envolve uma dessas técnicas: os Algoritmos Genéticos. Sendo assim, este capítulo resume os principais conceitos e fornece uma breve explicação sobre o funcionamento dos Algoritmos Genéticos, descrevendo suas principais etapas e seus parâmetros de evolução.

3.2

Algoritmos Genéticos

Algoritmos Genéticos são algoritmos matemáticos inspirados nos mecanismos de evolução biológica natural e recombinação genética. A técnica de Algoritmos Genéticos fornece um mecanismo de busca adaptativa que se baseia no princípio Darwiniano de seleção natural e reprodução genética (Goldberg, 1989).

Os princípios da natureza nos quais os Algoritmos Genéticos se inspiram são simples, eles se utilizam dos conceitos da genética para simular a evolução das populações. A complexidade utilizada pela natureza para formar novas gerações é representada através da reprodução sexuada, que exige a presença de dois organismos, na maioria das vezes de sexos opostos, que fazem a troca entre si do material genético. Na reprodução sexuada os elementos que fazem parte desse processo são: cromossomos, genes e alelos. No desenvolvimento da técnica usada em Algoritmos Genéticos os elementos que participam desse processo são: problemas de otimização, indivíduos, variáveis e valores das variáveis. Para melhor entender esses conceitos, faz-se uma analogia entre os termos usados na biologia e os termos usados em Algoritmos Genéticos. Esta analogia pode ser vista na Figura 3.1.



Figura 3.1: Analogia feita entre os conceitos da genética e Algoritmos Genéticos

De acordo com a teoria de Charles Darwin, o princípio de seleção privilegia os indivíduos mais aptos com maior longevidade e, portanto, com maior probabilidade de reprodução. Indivíduos com mais descendentes têm mais chance de perpetuarem seus códigos genéticos nas próximas gerações. Tais códigos genéticos constituem a identidade de cada indivíduo e estão representados nos cromossomos.

Estes princípios são imitados na construção de algoritmos computacionais que buscam uma melhor solução para um determinado problema, através da evolução de populações de soluções codificadas por meio de cromossomos artificiais.

Em Algoritmos Genéticos, um cromossomo (indivíduo) é uma estrutura de dados que representa uma das possíveis soluções existentes no espaço de busca do problema. Os cromossomos são então submetidos a um processo evolucionário que envolve avaliação, seleção, recombinação (cruzamento) e mutação. Após vários ciclos de evolução a população deverá conter indivíduos mais aptos.

Esta técnica é particularmente aplicada a problemas complexos de otimização com diversos parâmetros ou características que precisam ser combinadas em busca da melhor solução; problemas com muitas restrições ou condições que dificultam a sua representação matemática; e problemas com grandes espaços de busca.

3.2.1 Estrutura Básica de um Algoritmo Genético

De uma forma geral, pode-se apresentar a estrutura básica de um Algoritmo Genético, pois vários de seus componentes são invariantes de um problema para outro. Isto favorece sua implementação em diferentes casos (Linden, 2006).

O processo de evolução começa com a criação aleatória dos indivíduos que formarão a população inicial. Essa população inicial também pode ter um ou mais indivíduos definidos pelo especialista (sementes iniciais), ou seja, o algoritmo evoluirá a partir destas soluções dadas. Posteriormente, através de uma função de avaliação, é atribuído um valor de adaptação para cada indivíduo, denominado aptidão, que indica quanto a solução representada por este indivíduo é boa em relação às outras soluções da população. O termo população refere-se ao conjunto de todas as soluções manipuladas pelo algoritmo.

Vale ressaltar que as soluções encontradas pelo algoritmo não precisam ser necessariamente ótimas, mas sim satisfatórias. Ao se lidar com espaços de busca grandes e complexos, o ótimo pode ser difícil de ser atingido e, nesse caso, pode-se apenas esperar achar uma solução satisfatória.

Aos indivíduos mais adaptados é dada a oportunidade de se reproduzirem, através de vários critérios de seleção como, por exemplo, a roleta, que permite uma seleção proporcional ao valor da aptidão de cada indivíduo. A partir daí, esses indivíduos selecionados se reproduzem, mediante cruzamentos com outros indivíduos da população, produzindo descendentes com características de ambas as partes. A mutação também tem um papel significativo, ao alterar algumas características do indivíduo de forma aleatória.

Para determinar o final da evolução pode-se fixar o número de gerações, o número de indivíduos criados, ou ainda condicionar o algoritmo à obtenção de uma solução satisfatória. Outras condições para a parada incluem o tempo de processamento e o grau de similaridade entre os elementos numa população (convergência). O esquema de um Algoritmo Genético, conforme descrito anteriormente, pode ser visto na Figura 3.2.

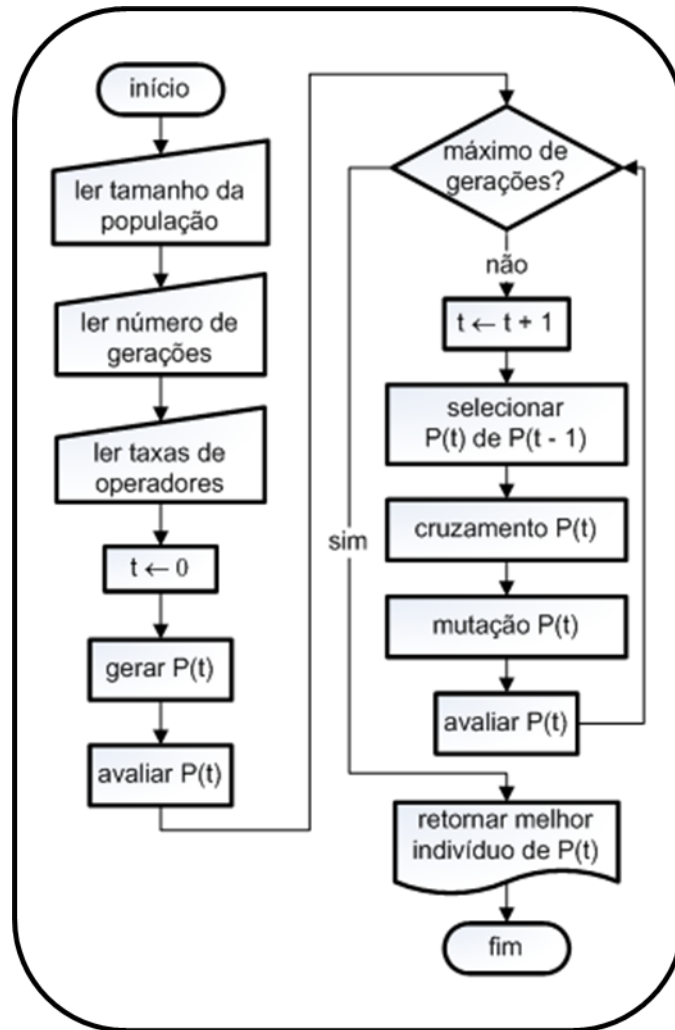


Figura 3.2: Estrutura básica de um Algoritmo Genético

As seções seguintes apresentam mais detalhadamente cada um dos componentes de um Algoritmo Genético.

3.2.2 Representação ou Codificação

A representação é um aspecto fundamental na modelagem de um algoritmo genético para a solução de um problema. Ela define a estrutura do cromossomo, com os respectivos genes que o compõe, de maneira que seja capaz de descrever todo o espaço de busca relevante do problema.

A solução de um problema pode ser representada por um conjunto de parâmetros (genes), unidos para formar uma cadeia de valores (cromossomo) e a este processo chama-se codificação. As soluções (cromossomos) são codificadas através

de uma sequência formada por caracteres de um sistema alfabético. Originalmente, utilizou-se o alfabeto binário (0, 1), porém, novos modelos de Algoritmos Genéticos codificam as soluções com outros alfabetos como, por exemplo, números reais (Emerick et al., 2009).

3.2.3 Decodificação

A decodificação do cromossomo consiste basicamente na construção da solução real do problema a partir do cromossomo. O processo de decodificação constrói a solução para que esta seja submetida à função de avaliação.

3.2.4 Geração da População Inicial

A população inicial de indivíduos é, na maioria das vezes, gerada de forma aleatória. No entanto, existem ocasiões onde é mais apropriada uma geração da população inicial utilizando uma heurística. Assim, logo no início, podem-se introduzir na população inicial indivíduos com características interessantes, como por exemplo, acrescentar soluções aproximadas conhecidas contendo algum tipo de informação prévia. Existem diversos trabalhos que comprovam que a geração da população inicial não é uma fase crítica em Algoritmos Genéticos, no entanto, é necessário que a população inicial contenha indivíduos suficientemente diversificados (Castro, 2001).

3.2.5 Avaliação da População

A avaliação é a ligação entre o Algoritmo Genético e o problema a ser solucionado. Ela é feita através de uma função que melhor representa o problema e tem por objetivo oferecer uma medida de aptidão de cada indivíduo na população corrente, a fim de guiar o processo de busca. A função de avaliação representa o valor da solução, para cada um dos cromossomos, após a decodificação.

3.2.6

Seleção dos Indivíduos

Após a etapa de avaliação dos indivíduos de uma população alguns indivíduos são selecionados para formar uma nova população. O processo de seleção está baseado no princípio da sobrevivência dos melhores indivíduos, ou seja, os indivíduos com melhor aptidão recebem uma maior probabilidade de serem copiados para fazer parte de uma nova população.

Existem vários métodos para selecionar os indivíduos sobre os quais serão aplicados os operadores genéticos. A seguir, apresentam-se resumidamente alguns destes métodos:

Seleção por classificação: os indivíduos da população são ordenados de acordo com seu valor de aptidão e então sua probabilidade de escolha é atribuída conforme a posição que ocupam.

Seleção por roleta: cada indivíduo da população é representado na roleta proporcionalmente ao seu valor de aptidão. Assim, para indivíduos com alta aptidão é dada uma porção maior da roleta, enquanto aos indivíduos de aptidão mais baixa, é dada uma porção relativamente menor. Como o tamanho da população é mantido constante ao longo de todo o processo evolutivo, na transição de uma geração para outra, a roleta deve ser girada um número de vezes igual ao tamanho da população. Devido às características da roleta, espera-se que na geração seguinte, a nova população seja formada pelos indivíduos mais aptos da geração anterior e que os menos aptos sejam eliminados. Um exemplo de uma roleta com cinco indivíduos pode ser visto na Figura 3.3.

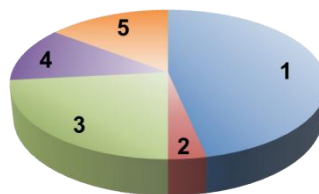


Figura 3.3: Exemplo de seleção por roleta.

É possível observar que o indivíduo identificado como “1” apresenta maior aptidão, uma vez que ocupa um espaço maior na roleta. O contrário acontece com o

indivíduo identificado como “2”. Sendo assim, a probabilidade do indivíduo 1 compor a população na geração seguinte é bem maior que a do indivíduo 2.

Seleção por torneio: a ideia deste método é promover um torneio entre um grupo de n ($n \geq 2$) indivíduos aleatoriamente tomados na população. Assim, o indivíduo que vencer este torneio (indivíduo com melhor valor de aptidão entre o grupo), é selecionado para fazer parte da geração da nova população, enquanto os demais indivíduos do grupo são descartados. O processo de seleção termina quando se realiza uma quantidade de torneios igual ao tamanho da população.

3.2.7 Operadores Genéticos

Os operadores mais utilizados em Algoritmos Genéticos são os de cruzamento (crossover) e mutação.

O Cruzamento consiste em recombinar o material genético de dois indivíduos a fim de criar dois novos indivíduos. Com isso, esse operador tem a função de extrair de diferentes indivíduos os melhores genes, e recombiná-los para formar indivíduos com melhores características. A ideia do operador cruzamento é tirar vantagem (*exploit*) do material genético presente na população. O funcionamento do operador de cruzamento pode ser visto pela Figura 3.4.

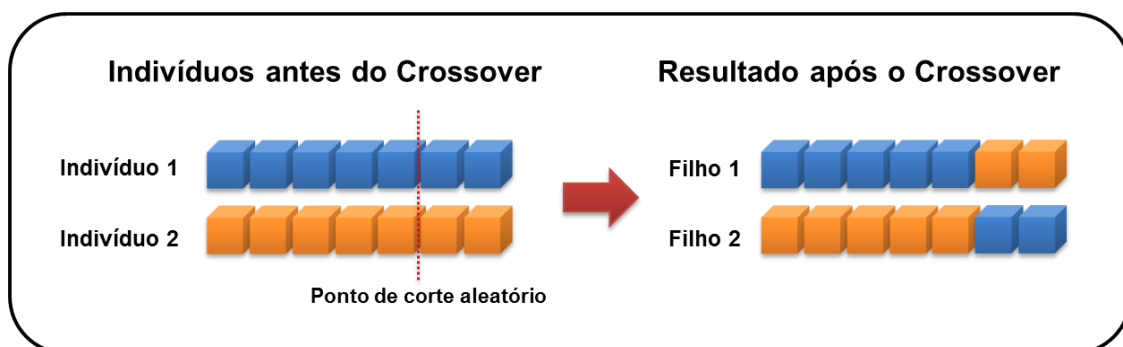


Figura 3.4: Cruzamento de um ponto

O ponto onde ocorre o corte para a realização do cruzamento é escolhido aleatoriamente. No exemplo da Figura 3.4 utilizou-se um único ponto, mas podem ser realizados cortes em mais de um ponto, caracterizando o cruzamento multiponto (Jacinto, 2009; Emerick et al., 2009; Beckner & Song, 1995).

A Mutação é a troca aleatória do valor contido nos genes de um cromossomo por outro valor válido. A mutação garante a diversidade das características dos indivíduos da população e permite que sejam introduzidas informações que não estiveram presentes em nenhum dos indivíduos. Além disso, proporciona uma busca aleatória (*exploration*) no algoritmo genético, oferecendo oportunidade para que mais pontos do espaço de busca sejam avaliados. Um exemplo de mutação pode ser visualizado na Figura 3.5.

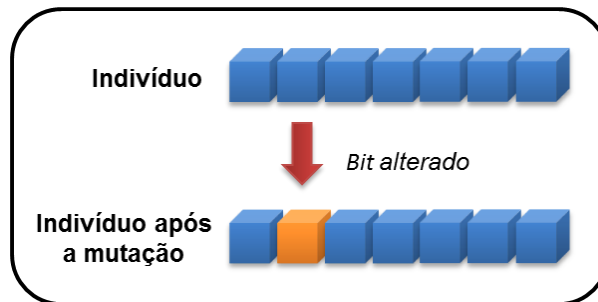


Figura 3.5: Mutação

3.2.8 Parâmetros da Evolução

Os parâmetros que mais influenciam o desempenho do algoritmo genético são:

Tamanho da População: o tamanho da população afeta o desempenho global e a eficiência dos Algoritmos Genéticos. Uma população muito pequena oferece uma pequena cobertura do espaço de busca, causando uma queda no desempenho. Uma população suficientemente grande fornece uma melhor cobertura do domínio do problema e previne a convergência prematura para soluções locais. Entretanto, com uma população grande tornam-se necessários recursos computacionais maiores, ou um tempo maior de processamento do problema. Logo, deve-se buscar um ponto de equilíbrio no que diz respeito ao tamanho escolhido para a população.

Taxa de Cruzamento: probabilidade de um indivíduo ser recombinado com outro. Quanto maior for esta taxa, mais rapidamente novas estruturas serão introduzidas na população. Entretanto, isto pode gerar um efeito indesejável, pois a maior parte da população será substituída, ocorrendo assim perda de variedade genética, podendo ocorrer perda de estruturas de alta aptidão e convergência a uma população com indivíduos extremamente parecidos, indivíduos estes que podem ou não representar boas soluções. Com um valor baixo, o algoritmo pode tornar-se muito lento para oferecer uma resposta aceitável. Uma solução é utilizar uma taxa

adaptativa, onde a taxa é maior no início da evolução e diminui linearmente ao longo da evolução.

Taxa de Mutação: probabilidade do conteúdo de um gene do cromossomo ser alterado. A taxa de mutação previne que uma dada população fique estagnada em um valor, além de possibilitar que se chegue a qualquer ponto do espaço de busca. Porém, deve-se evitar uma taxa de mutação muito alta, uma vez que pode tornar a busca essencialmente aleatória, prejudicando fortemente a convergência para uma solução ótima. Para evitar este problema, utiliza-se a taxa adaptativa, sendo esta baixa no início da evolução e mais alta no final da evolução.

Taxa de *Steady State*: esta taxa controla a porcentagem da população que é preservada de uma geração para a outra. Esse parâmetro garante que os melhores indivíduos de uma geração sejam mantidos na próxima geração, evitando oscilações na curva de evolução. O valor desse parâmetro pode ser uma taxa adaptativa onde no início da evolução um número maior de indivíduos é mantido entre gerações e essa taxa vai diminuindo linearmente ao longo da evolução. O número de indivíduos que será substituído também é conhecido como *gap*.

Número de gerações: representa o número total de ciclos de evolução de um algoritmo genético. O número de gerações é considerado um dos critérios de parada do algoritmo.

3.3

Tratamento de Restrições

Em problemas complexos de otimização, a presença de restrições impostas ao espaço de busca é praticamente inevitável e o tratamento adequado dispensado a estas restrições tem influência direta na eficiência do processo de otimização. A maneira mais trivial de se lidar com restrições é aplicar penalidades às soluções que violem uma ou mais restrições impostas pelo problema. Entretanto, para a penalização das soluções inválidas é necessário avaliá-las, o que pode ser computacionalmente custoso. Outra opção é corrigir o que está tornando a solução inválida. Entretanto, nem sempre é possível fazer essa correção de modo direto e sem prejudicar a evolução devido a modificações efetuadas nos indivíduos sem ser pelos operadores. Uma última opção é remover os indivíduos não válidos e fazer com que um novo

indivíduo seja gerado em seu lugar. No entanto, dependendo da dificuldade de se gerar um indivíduo válido essa opção pode se tornar altamente custosa.

3.3.1 GENOCOP III

Com o intuito de evitar avaliações desnecessárias e melhorar a eficiência do processo de otimização, foi utilizado GENOCOP III (*Genetic algorithm Numerical Optimization for Constrained Problems*) (Michalewicz, 1996). O GENOCOP III é uma técnica de tratamento de restrições que garante a geração apenas de indivíduos válidos ao longo de todo o processo de otimização.

O GENOCOP III incorpora duas populações independentes, uma de busca e uma de referência, onde o desenvolvimento dos indivíduos em uma população influencia as avaliações dos indivíduos na outra população. A população inicial de busca é formada por indivíduos aleatórios que satisfazem apenas as restrições lineares, enquanto a população inicial de referência é formada por indivíduos válidos, que cumprem todas as restrições, tanto as lineares quanto as não lineares.

Ao longo das gerações do algoritmo genético, a evolução acontece sempre na população de busca, que no início, conforme mencionado anteriormente é formada por indivíduos que respeitam apenas as restrições lineares. No início da execução do algoritmo genético, tanto a população de busca quanto a de referência são simuladas. A partir daí, dado um indivíduo S da população de busca, para que este se torne válido, é realizada uma sequência de cruzamentos aritméticos com um indivíduo R da população de referência, até que um indivíduo válido Z seja encontrado. Esse indivíduo Z é simulado e, caso o seu valor de avaliação seja maior que a avaliação do indivíduo R , o indivíduo R é substituído pelo indivíduo Z . Além disso, a cada operação, existe uma probabilidade P de o indivíduo S ser substituído pelo indivíduo Z . Caso a substituição não ocorra, o valor de avaliação do indivíduo Z é atribuído ao indivíduo S da população de busca. Isso acontece porque, uma vez que o indivíduo de busca não é avaliado, ao ser utilizado para a obtenção de um indivíduo válido, é necessário atribuir a ele um valor de avaliação de forma que seja possível selecioná-lo em gerações futuras do processo de evolução.

Devido às substituições que ocorrem nas populações de busca e de referência, à medida que transcorre o processo evolutivo, a população de referência ganha diversidade e a população de busca passa a ser povoada por indivíduos válidos. Assim, a evolução de um algoritmo genético com GENOCOP III tende a ser mais modesta nas primeiras gerações e torna-se mais atrativa nas gerações posteriores. O

número de gerações necessárias, para que se comece efetivamente a evolução, está diretamente relacionado à facilidade de se encontrar indivíduos válidos para o problema em questão. O procedimento generalizado do GENOCOP III está ilustrado no algoritmo da Figura 3.6.

```

Início
  P = p;    // probabilidade de substituição
  se válido(S) == falso
    Z = aS + (1 - a)R;  // a ∈ [0, 1]
    enquanto válido(Z) == falso
      Z = aZ + (1 - a)R;  // a ∈ [0, 1]
    fim enquanto
    se avaliação(Z) > avaliação(R)
      R = Z;
    fim se
    se rand() ≤ P
      S = Z;  // S é substituído por Z com probabilidade P
    senão
      avaliação(S) = avaliação(Z);
    fim se
  fim se
fim

```

Figura 3.6: Procedimento GENOCOP III – Construção de indivíduos válidos

Na Figura 3.7 o indivíduo R2 (referência) cruza com o indivíduo S7 (busca) até que S7 se torne totalmente válido. De uma forma geral, pode se dizer que, os indivíduos de referência são cruzados com os indivíduos de busca até que os indivíduos de busca se tornem válidos.

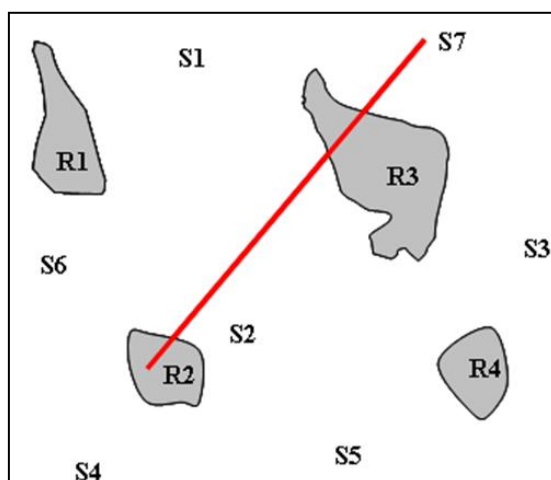


Figura 3.7: Procedimento GENOCOP III – Representação gráfica

Tanto os indivíduos da população de busca quanto os indivíduos da população de referência possuem todos os segmentos do indivíduo, no entanto, apenas o segmento associado ao tratamento de restrições é modificado na transformação de S para Z. Os outros segmentos que compõem um indivíduo da população de referência serão utilizados somente durante a simulação inicial com o objetivo de avaliar o segmento que deve cumprir as restrições. Esse procedimento é ilustrado na Figura 3.8.

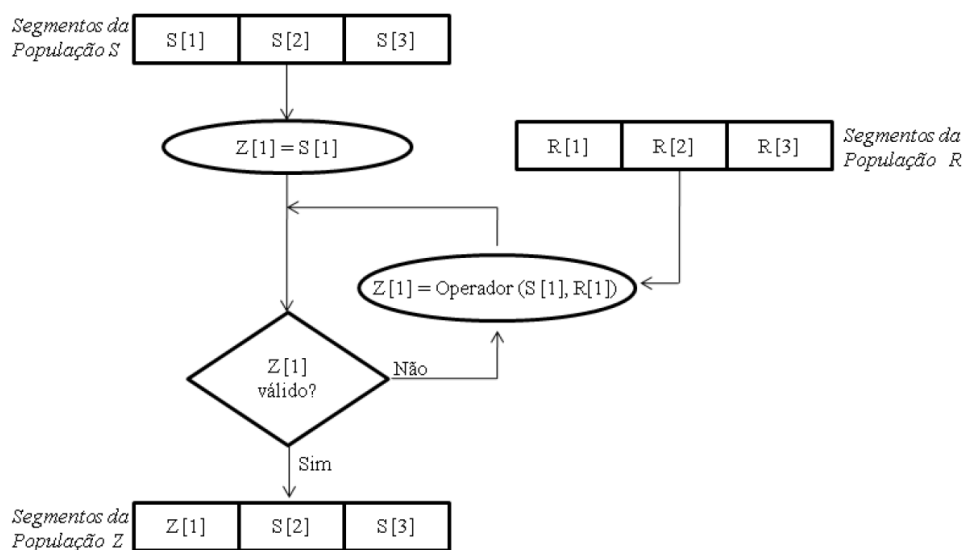


Figura 3.8: GENOCOP III – Diagrama do procedimento com múltiplos segmentos