

Ajustando parâmetros livres de um Algoritmo Genético: uso da metodologia Response Surface

Hélcio Vieira Junior¹, Fabiano Luis de Sousa²

1. Instituto Tecnológico de Aeronáutica, Pça Mal. Eduardo Gomes, 50. 12228-900, São José dos Campos, SP
2. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, Av. dos Astronautas, 1758.12227-010, São José dos Campos, SP.

Resumo — Algoritmos Genéticos (AGs) são algoritmos de otimização e busca fundamentados no princípio da seleção natural de Charles Darwin.

A versão mais rudimentar dos AGs foi a AGS (Algoritmo Genético Simples), na qual é utilizada codificação binária, a seleção da população intermediária é feita por meio da “roda de roleta”, o operador Crossover é de um ponto, o operador de Mutação é bit-a-bit e a substituição da população é geracional. Apesar de ser bem simples, esta versão é bastante efetiva, desde que seus parâmetros (tamanho da população, probabilidade de Crossover e probabilidade de Mutação) sejam bem escolhidos. O objetivo deste trabalho é mostrar que a metodologia Response Surface Methodology possui bons predicados para a definição dos parâmetros ótimos para um AGS.

Palavras-chaves — Algoritmos Genéticos, Response Surface Methodology.

I. INTRODUÇÃO

Algoritmos Genéticos (AGs) são algoritmos de otimização e busca fundamentados no princípio da seleção natural de Charles Darwin. Estes algoritmos foram inicialmente propostos por John Holland em 1975 e são fundamentados pela seguinte afirmação de Darwin: “Quanto melhor um indivíduo se adaptar ao seu meio ambiente, maior será sua chance de sobreviver e gerar descendentes” (Lacerda e Carvalho apud Darwin).

A versão mais rudimentar dos AGs foi a AGS (Algoritmo Genético Simples), na qual é utilizada codificação binária, a seleção da população intermediária é feita por meio da “roda de roleta”, o operador Crossover é de um ponto, o operador de Mutação é bit-a-bit e a substituição da população é geracional.

Apesar de ser bem simples, esta versão é bastante efetiva, desde que seus parâmetros (tamanho da população, probabilidade de Crossover e probabilidade de Mutação) sejam bem escolhidos.

O objetivo deste trabalho é mostrar que a metodologia Response Surface Methodology possui bons predicados para a definição dos parâmetros ótimos para um AGS.

Este artigo está estruturado da seguinte maneira: na seção dois, a metodologia Response Surface Methodology (RSM) é revista; a implementação da RSM a um AGS na avaliação da função teste de Griewangk é apresentada na seção três e a seção quatro compreende nossas conclusões.

II. RESPONSE SURFACE METHODOLOGY

A metodologia Response Surface Methodology, ou RSM, foi introduzida na década de 50 por Box e Wilson (1951) e pode ser definida como “uma coleção de técnicas matemáticas e estatísticas que são úteis para o modelamento e a análise de problemas nos quais a resposta de interesse é influenciada por diversas variáveis e o objetivo é otimizar esta resposta” (Montgomery, 2001).

O gol da RSM é obter uma relação funcional aproximada entre a resposta de interesse (saída) e as variáveis independentes (entradas). Normalmente um polinômio de baixa ordem é utilizado em alguma região das variáveis independentes. Caso a resposta seja bem modelada por uma função linear das variáveis independentes, a função de aproximação será um modelo de primeira ordem:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \varepsilon \quad (1)$$

Após a coleta dos dados e o tratamento estatístico correspondente (regressão linear), temos como resultado o modelo de primeira ordem ajustado:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i \quad (2)$$

A superfície de resposta de primeira ordem ajustada, ou seja, os contornos de \hat{y} , são uma série de linha paralelas (ilustradas por linhas tracejadas), conforme exemplificado na figura 1.

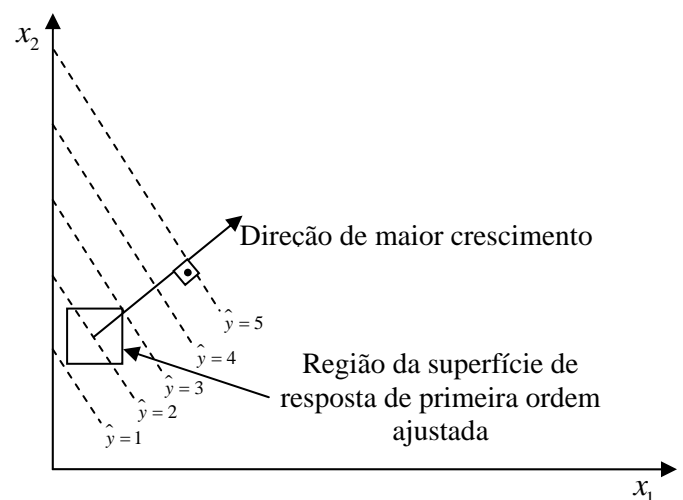


Figura 1 – Superfície de resposta de primeira ordem ajustada

Medições são realizadas na direção de maior crescimento até que não haja mais aumento na resposta de interesse. Então, um novo modelo de primeira ordem é realizado, uma nova direção de maior crescimento é achada e o procedimento se repete. Eventualmente, o experimento irá chegar à proximidade do ótimo. Isto é indicado pela falta de adequação do modelo de primeira ordem. Se houver uma curvatura no sistema, então um polinômio de ordem maior deverá ser utilizado para a estimativa do ótimo. Um modelo de segunda ordem é exemplificado abaixo:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad (3)$$

A equação (3) ajustada, na forma matricial, é:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + x^T b + x^T B x \quad (4)$$

onde: $x = (x_1 \ x_2 \ \dots \ x_k)^T$,

$b = (\hat{\beta}_1 \ \hat{\beta}_2 \ \dots \ \hat{\beta}_k)^T$ e

$$B = \begin{pmatrix} \hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12}/2 & \dots & \hat{\beta}_{1k}/2 \\ \hat{\beta}_{12}/2 & \hat{\beta}_{22} & \dots & \hat{\beta}_{2k}/2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\beta}_{1k}/2 & \hat{\beta}_{2k}/2 & \dots & \hat{\beta}_{kk} \end{pmatrix}$$

A resposta no ponto estacionário de máximo é dada por:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + x_s^T b/2 \quad (5)$$

onde $x_s = -B^{-1}b/2$.

“..., é pouco provável que um modelo polinomial seja uma aproximação razoável da verdadeira relação funcional em todo o espaço das variáveis independentes, mas, para uma pequena região, ele normalmente funciona muito bem” (Montgomery, 2001).

Este procedimento (RSM) pode ser visualizado na figura 2 onde em um problema de minimização tivemos três modelos de primeira ordem (centrados nos pontos θ_1 , θ_2 e θ_3) e um de segunda ordem (centrado no ponto θ_4).

III. RSM APLICADO A UM AGS

Implementamos a RSM a um AGS na avaliação da função teste de Griewangk. Esta função é dada por:

$$\text{Min } f(x) = 1 + \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{4000} - \prod_{i=1}^n \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right) \quad (6)$$

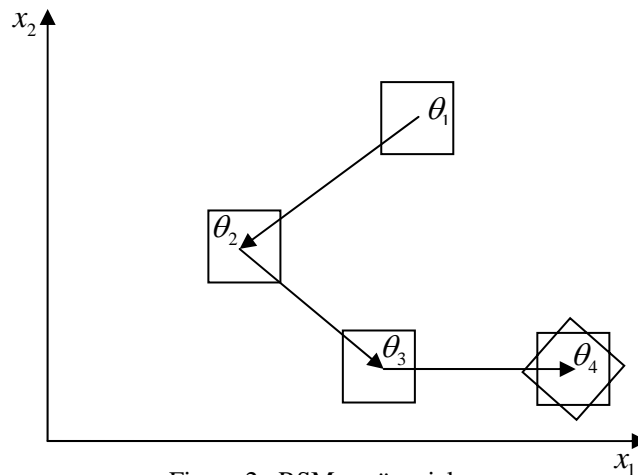


Figura 2– RSM sequencial

A equação (1) foi avaliada para $n = 10$, com a população inicial do AGS sendo gerada aleatoriamente no intervalo $-600 \leq x_i \leq 600$. O número de avaliações da FO para cada rodada do AGS foi limitado em $5 * 10^4$.

As três variáveis independentes são: tamanho da população, probabilidade de Crossover e probabilidade de Mutação. Como ponto central do nosso delineamento inicial, arbitramos o ponto $(80 \ 0,75 \ 0,03)$, que significa uma população de 80 indivíduos, uma probabilidade de Crossover de 75% e uma probabilidade de Mutação de 3%. O valor do tamanho da população foi escolhido aleatoriamente, sendo os dois outros parâmetros escolhidos por serem o ponto médio dos valores normalmente utilizados $[0,50 \ 1,00]$ para Crossover e $[0,001 \ 0,05]$ para Mutação).

Tabela 1 – Delineamento fatorial inicial

Tratamento	Variáveis independentes			Variáveis independentes codificadas			FO
	N	PC	PM	NC	PCC	PMC	
1	60	0,7	0,02	-1	-1	-1	2,0996
2	60	0,7	0,04	-1	-1	1	7,6009
3	60	0,8	0,02	-1	1	-1	1,9848
4	60	0,8	0,04	-1	1	1	6,9331
5	100	0,7	0,02	1	-1	-1	2,0099
6	100	0,7	0,04	1	-1	1	7,1423
7	100	0,8	0,02	1	1	-1	2,001
8	100	0,8	0,04	1	1	1	7,4447
9	80	0,75	0,03	0	0	0	4,4484
10	80	0,75	0,03	0	0	0	4,1785
11	80	0,75	0,03	0	0	0	4,3636
12	80	0,75	0,03	0	0	0	4,5034
13	80	0,75	0,03	0	0	0	4,4883

Utilizou-se a seguinte Função Objetivo para o RSM:

$$FO = 0,9\mu + 0,1\sigma \quad (7)$$

onde μ é a média e σ é o desvio padrão de 50 repetições independentes do AGS.

A tabela 1 ilustra o delineamento fatorial inicial.

A análise estatística pela técnica ANOVA está ilustrada na figura 3. Observe que o modelo linear descreve bem os dados¹, logo podemos continuar com a técnica RSM.

ANOVA; Var.:FO; R-sqr=.99069; Adj.:98759 (Spreadsheet1) 2**(3-0) design; MS Pure Error=.0177887 DV: FO					
Factor	SS	df	MS	F	p
(1)NC	0,00005	1	0,00005	0,003	0,959268
(2)PCC	0,02990	1	0,02990	1,681	0,264534
(3)PMC	55,26001	1	55,26001	3106,465	0,000001
Lack of Fit	0,44844	5	0,08969	5,042	0,071103
Pure Error	0,07115	4	0,01779		
Total SS	55,80956	12			

Figura 3– ANOVA do primeiro delineamento

Realizando a regressão linear dos dados da tabela 1, obtemos o modelo (dos dados codificados) ilustrado na figura 4

Regr. Coefficients; Var.:FO; R-sqr=.99069; Adj.:98759 (Spreadsheet1) 2**(3-0) design; MS Pure Error=.0177887 DV: FO						
Factor	Regressn Coeff.	Std.Err. Pure Err	t(4)	p	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt
Mean/Interc.	4,553731	0,036991	123,1025	0,000000	4,451026	4,656435
(1)NC	-0,002563	0,047155	-0,0543	0,959268	-0,133486	0,128361
(2)PCC	-0,061138	0,047155	-1,2965	0,264534	-0,192061	0,069786
(3)PMC	2,628213	0,047155	55,7357	0,000001	2,497289	2,759136

Figura 4– Regressão linear do primeiro delineamento

Optamos por um incremento de -0,3333 na variável PMC², o que gerou a seqüência de novos pontos ilustrada pela tabela 2 e figura 5.

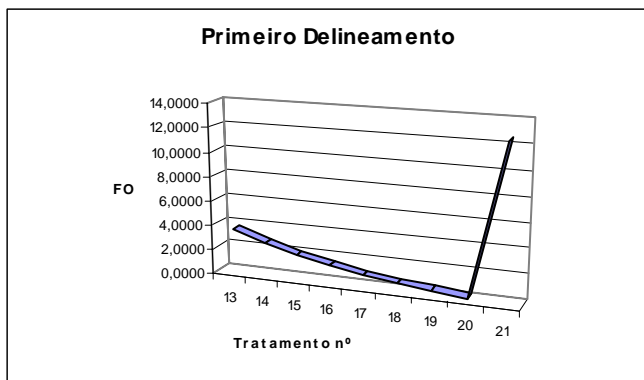


Figura 5– Comportamento da FO dos dados da tabela 2.

¹ Isto pode ser observado pelo *p-value* do *Lack of Fit* superior ao valor de 0,05.

² A equação de regressão obtida é:

$\widehat{FO} = 4,55 - 0,025NC - 0,061PCC + 2,628PMC$. Dividindo todos seus termos por -7,88, temos

$\widehat{FO} = -0,577 + 0,0003NC + 0,0078PCC - 0,3333PMC$. Logo, para um incremento de -0,3333 na variável PMC, teremos um incremento de 0,0003 na NC e 0,0078 na PCC.

Tomando como ponto central de um novo delineamento fatorial as coordenadas do melhor valor encontrado anteriormente (tratamento 20), obtemos os dados ilustrados pela tabela 3.

Aplicando novamente as técnicas estatísticas descritas anteriormente, obtivemos uma nova direção de diminuição da FO, que gerou os novos tratamentos ilustrados na tabela 4 e figura 6

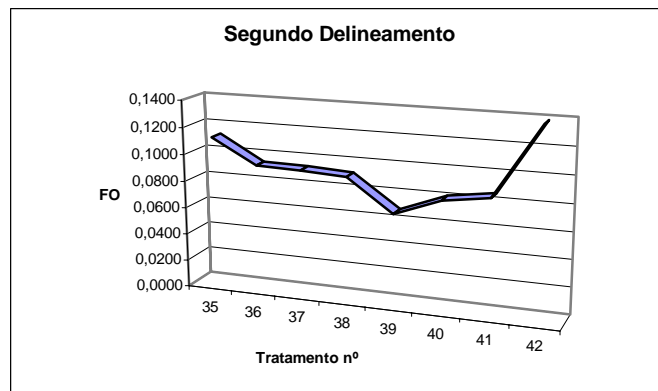


Figura 6– Comportamento da FO dos dados da tabela 4.

Novamente, tomamos como ponto central as coordenadas do tratamento 39, porém, por já acreditarmos estarmos próximos ao ótimo, optamos por ajustar um modelo de 2ª ordem aos dados.

O delineamento fatorial não se presta ao ajuste de modelos de 2ª ordem. O delineamento chamado de CCD (Central Composite Design – Delineamento Composto Central) é o que contém pontos de amostragem suficientes para a construção de tal modelo. Para maiores informações sobre delineamentos fatoriais e CCD o leitor deve consultar Montgomery (2001).

A análise estatística deste último delineamento mostrou que o modelo de 2ª ordem descrevia corretamente os dados. Isto nos mostra que estamos bem próximos do ótimo. A figura 7 ilustra a superfície de resposta ajustada aos dados.

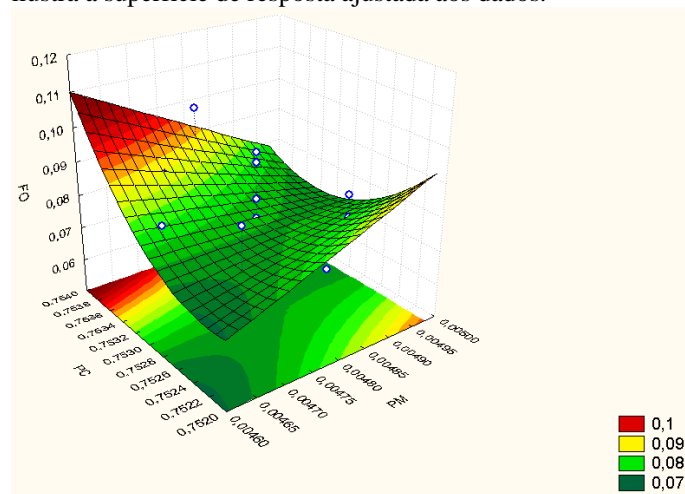


Figura 7– Gráfico de superfície de resposta

Tabela 2 – Resultados colhidos na direção de maior crescimento

Tratamento	Passo	Variáveis independentes			Variáveis independentes codificadas			FO
		N	PC	PM	NC	PCC	PMC	
	Origem	80	0,7500	0,0300	0	0	0	
	Incremento (Δ)	0,0000	0,0004	-0,0033	0,0003	0,0078	-0,3333	
13	Origem + Δ	80	0,7504	0,0267	0,0003	0,0078	-0,3333	3,6195
14	Origem + 2 Δ	80	0,7508	0,0233	0,0007	0,0155	-0,6667	2,6787
15	Origem + 3 Δ	80	0,7512	0,0200	0,0010	0,0233	-1,0000	1,9995
16	Origem + 4 Δ	80	0,7516	0,0167	0,0013	0,0310	-1,3333	1,4514
17	Origem + 5 Δ	80	0,7519	0,0133	0,0016	0,0388	-1,6667	1,0549
18	Origem + 6 Δ	80	0,7523	0,0100	0,0020	0,0465	-2,0000	0,7228
19	Origem + 7 Δ	80	0,7527	0,0067	0,0023	0,0543	-2,3333	0,4247
20	Origem + 8 Δ	80	0,7531	0,0033	0,0026	0,0620	-2,6666	0,1223
21	Origem + 9 Δ	80	0,7535	0,0000	0,0029	0,0698	-3,0000	12,4960

Tabela 3 – Segundo delineamento fatorial

Tratamento	Variáveis independentes			Variáveis independentes codificadas			FO
	N	PC	PM	NC	PCC	PMC	
22	75	0,7431	0,0023	-1	-1	-1	0,1471
23	75	0,7431	0,0043	-1	-1	1	0,0788
24	75	0,7631	0,0023	-1	1	-1	0,1310
25	75	0,7631	0,0043	-1	1	1	0,0818
26	85	0,7431	0,0023	1	-1	-1	0,1682
27	85	0,7431	0,0043	1	-1	1	0,0714
28	85	0,7631	0,0023	1	1	-1	0,1697
29	85	0,7631	0,0043	1	1	1	0,0767
30	80	0,7531	0,0033	0	0	0	0,1015
31	80	0,7531	0,0033	0	0	0	0,1101
32	80	0,7531	0,0033	0	0	0	0,1201
33	80	0,7531	0,0033	0	0	0	0,1045
34	80	0,7531	0,0033	0	0	0	0,1206

Tabela 4 – Resultados colhidos na direção de maior crescimento

Tratamento	Passo	Variáveis independentes			Variáveis independentes codificadas			FO
		N	PC	PM	NC	PCC	PMC	
	Origem	80	0,7531	0,0033	0	0	0	
	Incremento (Δ)	0,0000	0,0000	0,0003	0,0166	-0,0021	0,3000	
35	Origem + Δ	80	0,7531	0,0036	0,0166	-0,0021	0,3000	0,1120
36	Origem + 2 Δ	80	0,7531	0,0039	0,0332	-0,0042	0,6000	0,0937
37	Origem + 3 Δ	80	0,7530	0,0042	0,0499	-0,0063	0,9000	0,0931
38	Origem + 4 Δ	80	0,7530	0,0045	0,0665	-0,0084	1,2000	0,0911
39	Origem + 5 Δ	80	0,7530	0,0048	0,0831	-0,0105	1,5000	0,0675
40	Origem + 6 Δ	80	0,7530	0,0051	0,0997	-0,0125	1,8000	0,0804
41	Origem + 7 Δ	80	0,7530	0,0054	0,1164	-0,0146	2,1000	0,0853
42	Origem + 8 Δ	80	0,7529	0,0057	0,1330	-0,0167	2,4000	0,1385

Tabela 5 – Delineamento CCD

Tratamento	Variáveis independentes			Variáveis independentes codificadas			FO
	N	PC	PM	NC	PCC	PMC	
43	78	0,7525	0,0047	-1,0000	-1,0000	-1,0000	0,0865
44	78	0,7525	0,0049	-1,0000	-1,0000	1,0000	0,0785
45	78	0,7535	0,0047	-1,0000	1,0000	-1,0000	0,0882
46	78	0,7535	0,0049	-1,0000	1,0000	1,0000	0,0715
47	82	0,7525	0,0047	1,0000	-1,0000	-1,0000	0,0604
48	82	0,7525	0,0049	1,0000	-1,0000	1,0000	0,0851
49	82	0,7535	0,0047	1,0000	1,0000	-1,0000	0,0702
50	82	0,7535	0,0049	1,0000	1,0000	1,0000	0,0742
51	80	0,7530	0,0048	0,0000	0,0000	0,0000	0,0957
52	80	0,7530	0,0048	0,0000	0,0000	0,0000	0,0636
53	80	0,7530	0,0048	0,0000	0,0000	0,0000	0,0929
54	80	0,7530	0,0048	0,0000	0,0000	0,0000	0,0612
55	80	0,7530	0,0048	0,0000	0,0000	0,0000	0,0609
56	83	0,7530	0,0048	1,6818	0,0000	0,0000	0,0765
57	77	0,7530	0,0048	-1,6818	0,0000	0,0000	0,0823
58	80	0,7538	0,0048	0,0000	1,6818	0,0000	0,0997
59	80	0,7522	0,0048	0,0000	-1,6818	0,0000	0,0740
60	80	0,7530	0,0050	0,0000	0,0000	1,6818	0,0732
61	80	0,7530	0,0046	0,0000	0,0000	-1,6818	0,0832

O ponto ótimo de operação é mostrado na figura 8 na coluna Critical Values.

Critical values; Variable: FO (Spreadsheet1) Solution: saddlepoint Predicted value at solution: ,0748038				
Factor	Observed Minimum	Critical Values	Observed Maximum	
N	77,00000	80,12623	83,00000	
PC	0,75216	0,75294	0,75384	
PM	0,00463	0,00485	0,00497	

Figura 8– Ponto ótimo de operação

De posse dos valores ótimos dos parâmetros obtidos pelo RSM $(80 \ 0,75294 \ 0,00485)^3$, realizamos 50 rodadas independentes do AGS. A figura 9 ilustra o desempenho destas 50 rodadas, onde a linha azul representa o valor médio, a linha vermelha o maior valor, a linha verde o menor valor e a linha pontilhada o limite superior do intervalo de confiança de 95% para a média.

O esforço computacional gasto para rodar uma instância do AGS, em média, no software MATLAB 7 R14, foi: 28,91 seg em um PC AMD Sempron 1.5 GHz, 1,25 GB RAM, Win XP SP3; e 9,24 seg em um laptop Intel Core Duo 2 GHz, 1 GB RAM, Win XP SP3.

O valor da função de avaliação⁴ foi :

$$F(\mu, \sigma) = 0,9 * 0,075854 + 0,1 * 0,063848 = 0,074654$$

³ Arredondamos aqui, e em todos os momentos anteriores, o valor de n para o inteiro mais próximo.

⁴ $F(\mu, \sigma) = 0,9\mu + 0,1\sigma$

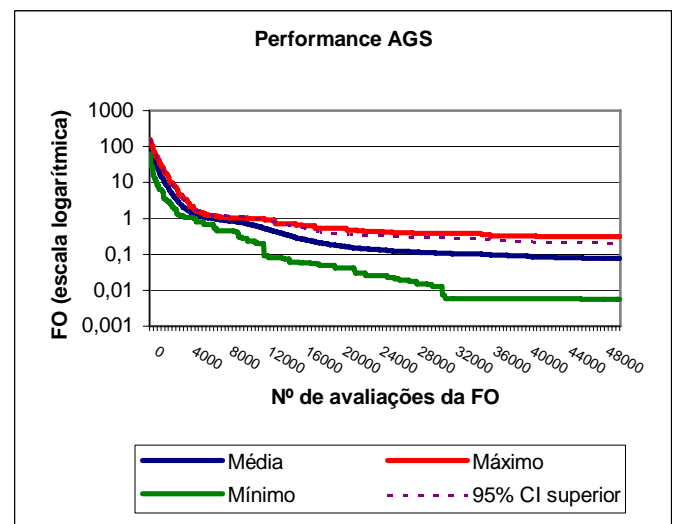


Figura 9- Performance do AGS com $n = 80$,
 $PC = 75,294\%$ e $PM = 0,485\%$

Observe que o valor encontrado para a FO (0,074654) foi muito próximo ao previsto pela figura 8 (0,0748038). A tabela 5 trás os melhores valores da função teste de Griewangk (6) alcançadas pelas 50 rodadas independentes do AGS ilustradas pela figura 9.

Tabela 5 – Melhores valores da função teste de Griewangk

n	$f(x)$	n	$f(x)$	n	$f(x)$	n	$f(x)$	n	$f(x)$
1	0,1380400	11	0,1249700	21	0,0342690	31	0,0270480	41	0,0705930
2	0,0162780	12	0,1458100	22	0,0574500	32	0,0056581	42	0,0988030
3	0,0597740	13	0,0632040	23	0,0599190	33	0,0274760	43	0,1192200
4	0,0578630	14	0,0401290	24	0,0893070	34	0,1102000	44	0,0145540
5	0,1496100	15	0,0301750	25	0,0641070	35	0,0304570	45	0,1173500
6	0,0398730	16	0,0370990	26	0,0195680	36	0,0228800	46	0,0558710
7	0,1509600	17	0,0464870	27	0,0147420	37	0,1000100	47	0,1432300
8	0,0365460	18	0,0357100	28	0,0514360	38	0,1275600	48	0,2979700
9	0,0422160	19	0,0098967	29	0,0696800	39	0,0254110	49	0,0320050
10	0,0345210	20	0,1410600	30	0,1293800	40	0,0704890	50	0,3058600

Tabela 6 – Melhor fenótipo

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}
-0,0275	0,0458	-0,0092	0,1007	0,1190	0,1007	0,0092	-0,1190	0,0458	0,0641

Finalmente, a tabela 6 mostra o fenótipo da melhor solução alcançada nas 50 últimas rodadas do AGS (repetição 32 da tabela 5 [$f(x) = 0,0056581$]).

IV. CONCLUSÕES

Este artigo utilizou a metodologia Response Surface Methodology para a definição dos parâmetros ótimos para um AGS.

Na seção dois, a metodologia Response Surface Methodology foi revista e a implementação da RSM a um AGS na avaliação da função teste de Griewangk foi apresentada na seção três.

Observou-se a metodologia RSM conseguiu inferir os parâmetros ótimos com pouco esforço (61 tratamentos). O valor médio da função teste de Griewangk alcançado por 50 repetições independentes do AGS foi de 0,075854 com um desvio padrão de 0,063848. Como é sabido que o valor ótimo desta difícil função teste é zero, concluímos que os parâmetros sugeridos pela RSM foram muito bons pois, com apenas $5 \cdot 10^4$ avaliações da FO, chegamos bem próximo ao ótimo global. Outra conclusão alcançada é que o tamanho da população teve pouca influência no resultado do AGS, sendo as probabilidades de Mutação e Crossover os fatores que mais influenciaram no desempenho do algoritmo genético simples implementado.

REFERÊNCIAS

- Box, G. E. P., Wilson, K. B. (1951). On the Experimental Attainment of Optimum Conditions. Journal of the Royal Statistical Society, B13, 1-45.
- Montgomery, D. C. (2001). Design and analysis of experiments 5th Ed. John Wiley & Sons, Publishers, New York.
- Lacerda, E. G. M., Carvalho, A. C. P. L., 1999. Introdução aos algoritmos genéticos. In: Sistemas inteligentes: aplicações a recursos hídricos e ciências ambientais [Edited by Galvão, C. O., Valença, M. J. S.], Porto Alegre, Ed. Universidade/UFRGS: Associação Brasileira de Recursos Hídricos, 99-150.
- Darwin, C., 1859. A origem das espécies e a seleção natural. 5 ed. Hemus Editora.