



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος

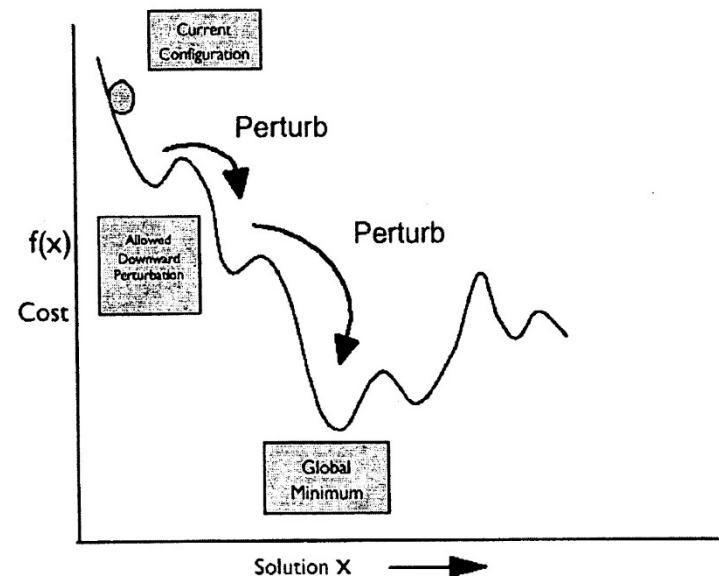
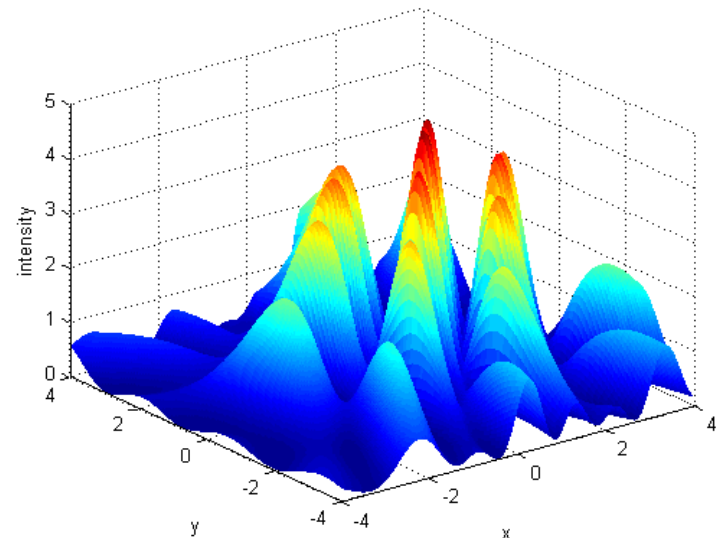
Διαχείριση Υδατικών Πόρων

Βελτιστοποίηση

Προχωρημένες Μέθοδοι

Προβλήματα με την «κλασική» βελτιστοποίηση

- Η στοχική συνάρτηση **σπανίως** είναι συνεχής και παραγωγίσιμη – και ακόμα πιο σπάνια αποδεικνύονται οι συνθήκες *Kuhn-Tucker*...
- Πολλά ακρότατα (τοπικά) σημαίνει δυσκολία στις μεθόδους τύπου *hill-climbing*...
- Ακόμα χειρότερα: για τα περισσότερα προβλήματα **δε μπορούμε καν να διατυπώσουμε σε κλειστή μαθηματική μορφή την στοχική** – γιατί προκύπτει από προσομοίωση...



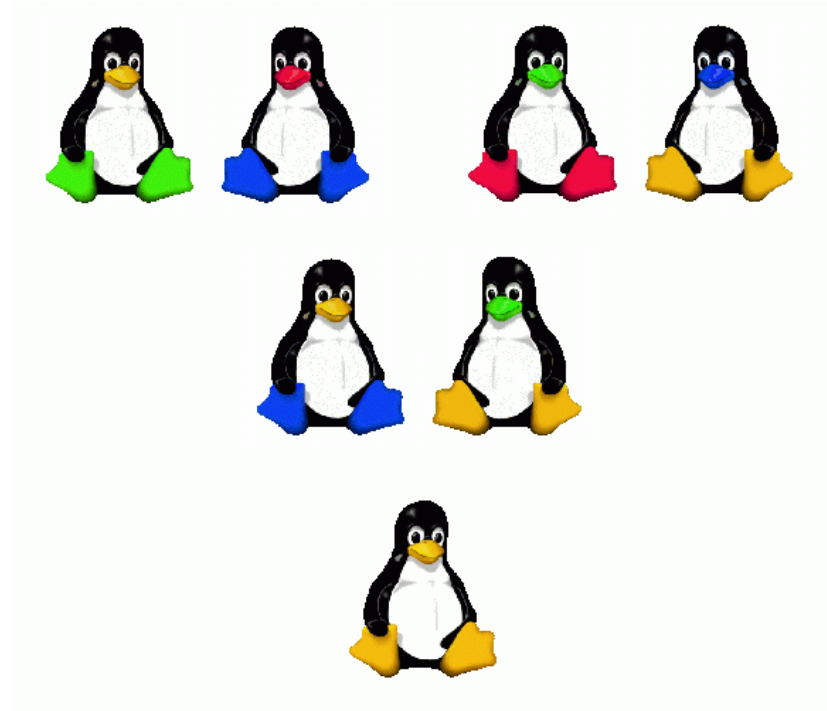
Προχωρημένες (Εξελικτικές) Μέθοδοι Βελτιστοποίησης

- Γενετικοί αλγόριθμοι
(**Genetic Algorithms**)
- Εξελικτικός
προγραμματισμός
(**Evolutionary
Programming**)
- Υβριδικά σχήματα πχ. με
προσομοιωμένη Ανόπτηση
(**Hybrid Optimisation with
Simulated Annealing**)



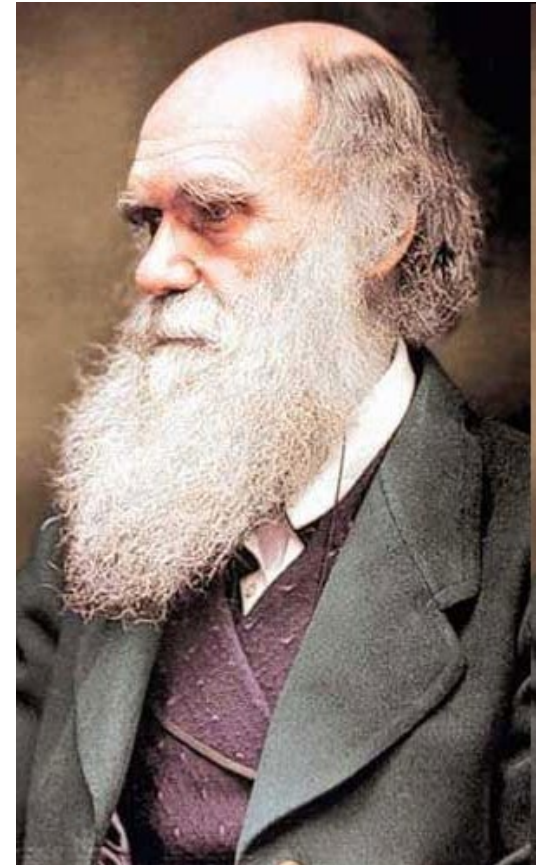
Γενετικοί αλγόριθμοι: Τι είναι;

- Αλγόριθμοι επίλυσης προβλημάτων που βασίζονται (είναι εμπνευσμένοι) από τις αρχές της **Βιολογικής Εξέλιξης** (Δαρβίνος).



Γενετικοί Αλγόριθμοι

- **Θεωρία της εξέλιξης** (C. Darwin, 1858)
 - **Εξέλιξη** = Διαδικασία που οδηγεί στην **αύξηση της ικανότητας** ενός πληθυσμού να επιβιώνει σε ένα δεδομένο **περιβάλλον**: **Εξελικτική προσαρμογή**
 - Με την **αναπαραγωγή**, η ικανότητα αυτή περνά στις επόμενες γενιές (από τα άτομα που την είχαν και άρα **επέζησαν για να αναπαραχθούν**): **Φυσική επιλογή**

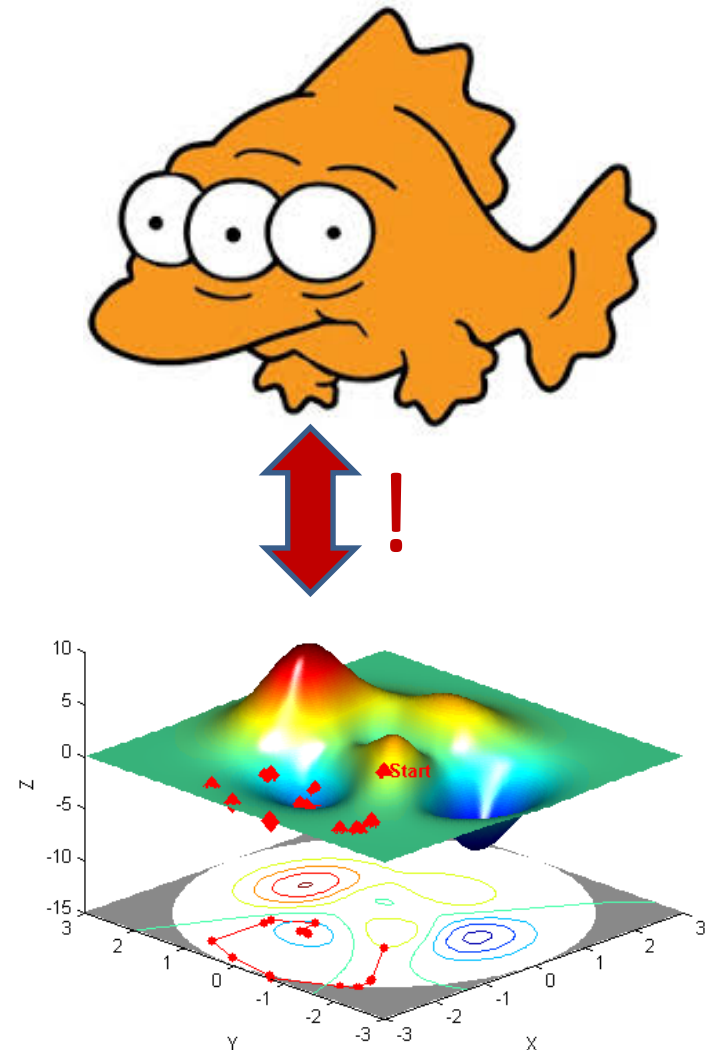


Η αρχή..

- **Holland, John H** (1975), *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, University of Michigan Press, Ann Arbor (η βασική ιδέα)
- **Michalewicz, Zbigniew** (1999), *Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs*, Springer-Verlag (το καλύτερο **textbook** μέχρι σήμερα) – αλλά και άλλα ενδιαφέροντα βιβλία (*Variants of Evolutionary Algorithms for Real-World Applications* (2012); *How to Solve It: Modern Heuristics* (2010) ...

Η βασική αναλογία (Holland)

- αντί για **άτομα** έχουμε **λύσεις**
- πολλές λύσεις (όχι απαραίτητα καλές) είναι ένας **πληθυσμός**
- ικανότητα επιβίωσης σε **συγκεκριμένο περιβάλλον** είναι η επίδοσή της λύσης σε σχέση με την **στοχική συνάρτηση**
- τώρα πως οι λύσεις **αναπαράγονται** είναι το (βασικό) θέμα μας ...



Γενετικοί Αλγόριθμοι: Ορολογία...

- Δανεισμένη από το χώρο της Γενετικής.
- Αναφερόμαστε σε **άτομα** μέσα σε ένα **πληθυσμό**. Πολύ συχνά αυτά τα άτομα καλούνται επίσης **χρωμοσώματα**.
- Τα **χρωμοσώματα** αποτελούνται από διάφορα στοιχεία που ονομάζονται **γονίδια**.
- Κάθε γονίδιο επηρεάζει την **κληρονομικότητα** ενός ή περισσότερων χαρακτηριστικών του ατόμου (είναι δηλαδή συνδεδεμένο με **μια παράμετρο της λύσης**)

Ο βασικός εξελικτικός κύκλος

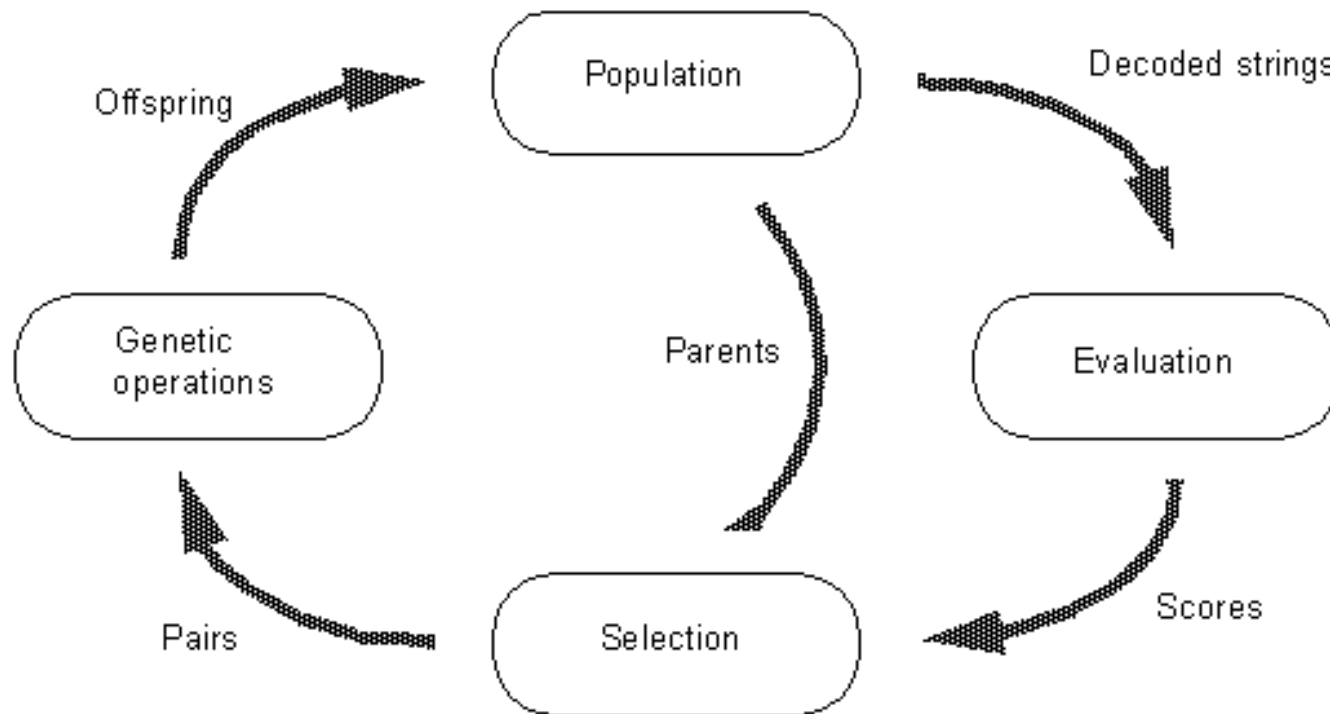


Figure 5.2: The “reproduction” cycle.

Πληθυσμιακή βελτιστοποίηση

Γενετικοί αλγόριθμοι: Πώς λειτουργούν;

- **Δημιουργούν** έναν πληθυσμό κωδικοποιημένων πιθανών λύσεων
- Υπολογίζουν την στοχική συνάρτηση για κάθε άτομο (λύση) του δημιουργούμενου πληθυσμού (**fitness evaluation** - επίδοση)
- **Εξελίσσουν** τον πληθυσμό εφαρμόζοντας γενετικές διαδικασίες (**τελεστές**) που επηρεάζονται από την επίδοση:
 - Διαδικασίες **επιλογής**,
 - Διαδικασίες **διασταύρωσης**,
 - Διαδικασίες **μετάλλαξης**.
- Δημιουργούν νέο πληθυσμό που αντικαθιστά τον προηγούμενο με βάση την επίδοση.
- Επαναλαμβάνουν τη διαδικασία μέχρι να «βρουν λύση».

Γενετικοί Τελεστές

- **Επιλογή:** επιλέγει με κάποιο τρόπο τα «καταλληλότερα» μέλη του πληθυσμού και τα χρησιμοποιεί για:
- **Διασταύρωση:** συνδυάζει τα στοιχεία δύο χρωμοσωμάτων γονέων για να δημιουργήσει δύο νέους απογόνους ανταλλάσσοντας αντίστοιχα κομμάτια από τους γονείς.
- **Μετάλλαξη:** αλλάζει αυθαίρετα ένα ή περισσότερα γονίδια ενός συγκεκριμένου χρωμοσώματος.

...Γενετικοί αλγόριθμοι: Πώς λειτουργούν;

Για να έχουμε έναν Γ.Α. χρειαζόμαστε 5 πράγματα:

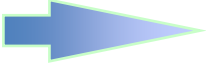
1. Γενετική αναπαράσταση
2. Τρόπο δημιουργίας ενός αρχικού πληθυσμού
3. Στοχική συνάρτηση αξιολόγησης
4. Γενετικούς τελεστές
5. Τιμές για τις διάφορες παραμέτρους (του ΓΑ)

...Γενετικοί αλγόριθμοι: Πώς λειτουργούν;

Για να έχουμε έναν Γ.Α. χρειαζόμαστε 5 πράγματα:

- 1. Γενετική αναπαράσταση**
2. Τρόπο δημιουργίας ενός αρχικού πληθυσμού
3. Στοχική συνάρτηση αξιολόγησης
4. Γενετικούς τελεστές
5. Τιμές για τις διάφορες παραμέτρους (του ΓΑ)

Γενετική Αναπαράσταση: (δυαδική) κωδικοποίηση

(11, 6, 9)  1011 0110 1001

Στο δυαδικό κάθε αριθμός είναι μια αύξουσα δύναμη του 2 ξεκινώντας από το 2^0

π.χ. $100101 = [(1) \times 2^5] + [(0) \times 2^4] + [(0) \times 2^3] + [(1) \times 2^2] + [(0) \times 2^1] + [(1) \times 2^0] = 37$

1010=?

Excel: =dec2bin(), =bin2dec()

...Γενετικοί αλγόριθμοι: Πώς λειτουργούν;

Για να έχουμε έναν Γ.Α. χρειαζόμαστε 5 πράγματα:

1. Γενετική αναπαράσταση
2. Τρόπο δημιουργίας ενός αρχικού πληθυσμού
3. Στοχική συνάρτηση αξιολόγησης
4. Γενετικούς τελεστές
5. Τιμές για τις διάφορες παραμέτρους (του ΓΑ)

1. Δημιουργώ μεγάλο αριθμό από τυχαίες λύσεις: [111011010101], [011011010111], [111111010101], [000111010101], [001111000001], ...
2. Για κάθε λύση μπορώ να βρω την τιμή της στοχική συνάρτησης. Πως;
3. [1011|0110|1001] = [11, 6, 9] $\rightarrow$ F(x=11, y=6, z=9) = ...

...Γενετικοί αλγόριθμοι: Πώς λειτουργούν;

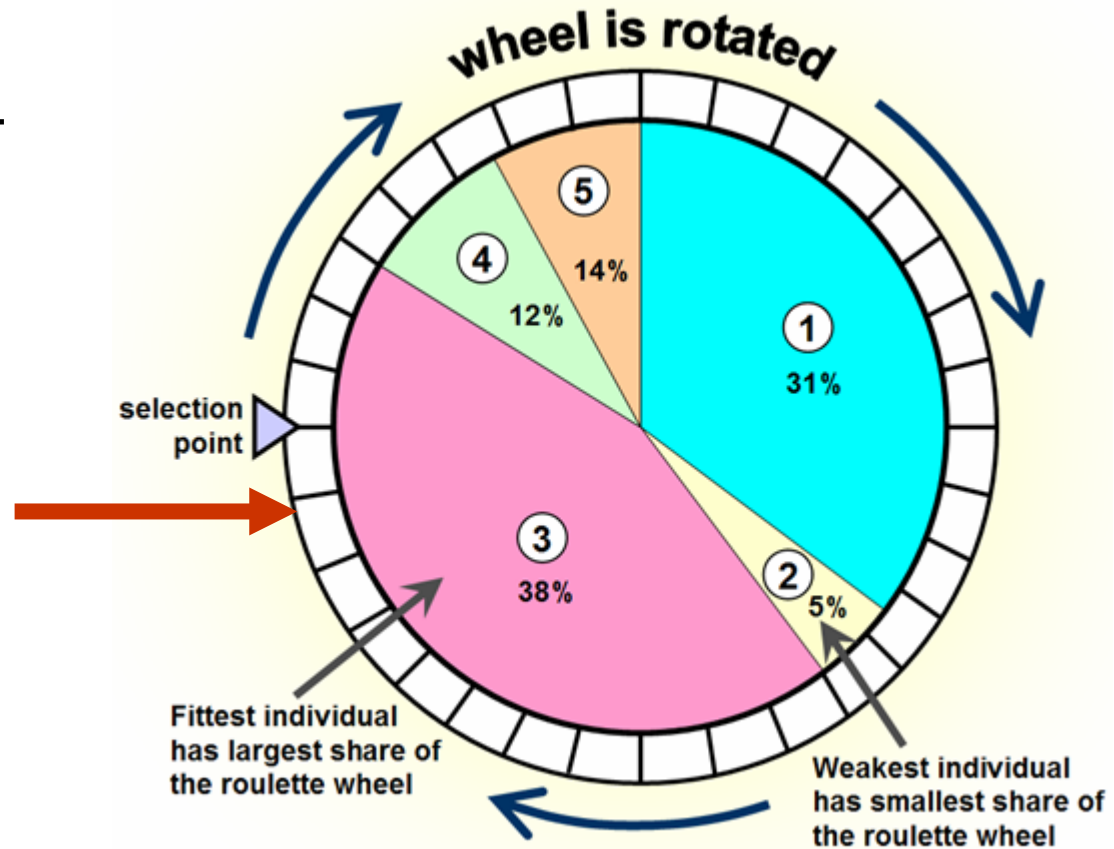
Για να έχουμε έναν Γ.Α. χρειαζόμαστε 5 πράγματα:

1. Γενετική αναπαράσταση
2. Τρόπο δημιουργίας ενός αρχικού πληθυσμού
3. Στοχική συνάρτηση αξιολόγησης
4. **Γενετικούς τελεστές (Επιλογή, Διασταύρωση, Μεταλλαξη)**
5. Τιμές για τις διάφορες παραμέτρους (του ΓΑ)

Επιλογή: Μηχανισμός ρουλέτας

$$\Pr(x_i) = \frac{f(x_i)}{\sum_j f(x_j)}$$

Όπου $f(x)$: η τιμή της στοχικής
στο x



Πως «γυρνάμε» τον τροχό;

Γενετικοί Τελεστές

1. Επιλέγω ζεύγος με ρουλέτα
2. Να διασταυρώσω/μεταλλάξω; $a\%/b\%$
3. Αν προκύψει να διασταυρώσω/μεταλλάξω, τότε:
4. Επιλέγω **τυχαίο** σημείο (διασταύρωσης και μετάλλαξης), και:

Διασταύρωση

1 0 0 1 | 1 1 1 0
1 0 1 1 | 0 0 1 0



1 0 0 1 | 0 0 1 0
1 0 1 1 | 1 1 1 0

Σημείο διασταύρωσης

Μετάλλαξη

1 0 0 1 1 1 1 0



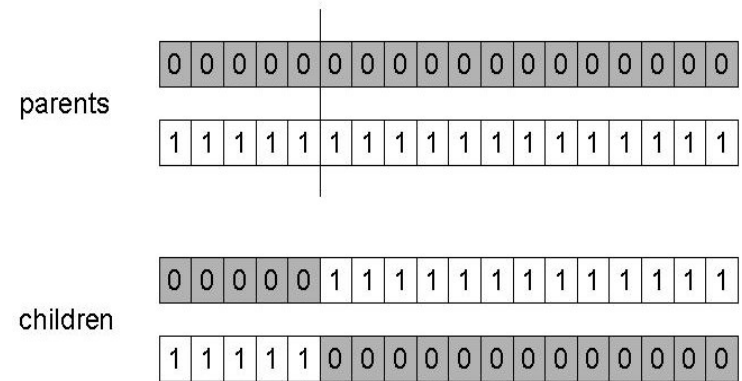
1 0 0 1 1 0 1 0

Ψηφίο μετάλλαξης

Ποια η πιθανότητα
μετάλλαξης ενός γονιδίου;

Προβλήματα με διασταύρωση 1 σημείου...

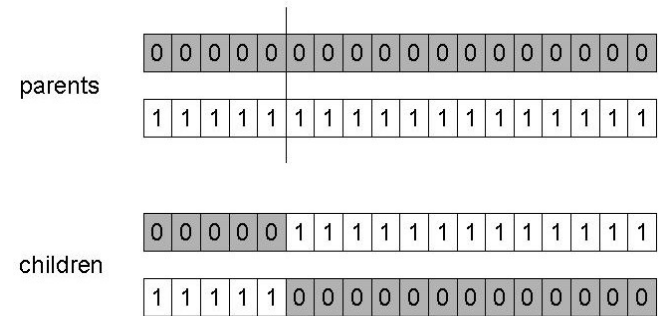
- πιο πιθανό να κρατήσει μαζί γονίδια που βρίσκονται κοντά το ένα στο άλλο
- δεν μπορεί να κρατήσει μαζί γονίδια που βρίσκονται σε αντίθετα άκρα του χρωμοσώματος.
- Το πρόβλημα είναι γνωστό ως *Positional Bias*



Υπάρχουν διάφορες εναλλακτικές σχεδιασμού τελεστών

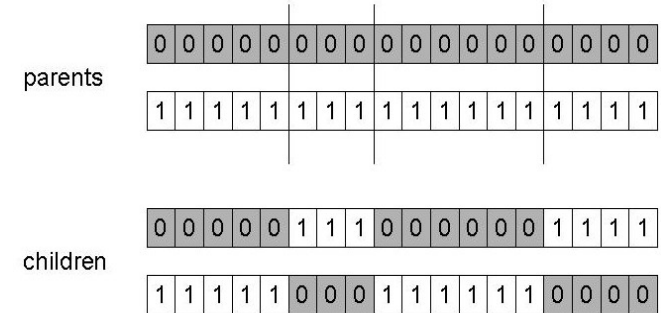
1-point crossover:

Επιλέγεις (τυχαία) 1 σημείο



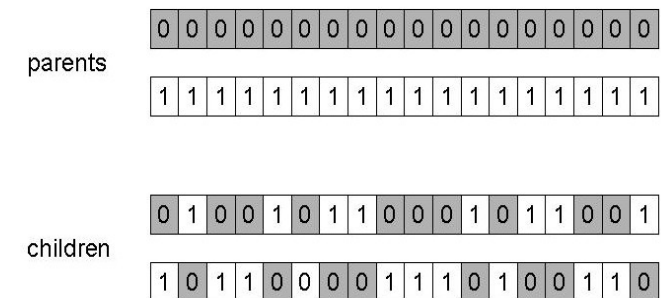
N-point crossover:

Επιλέγεις (τυχαία) n σημεία



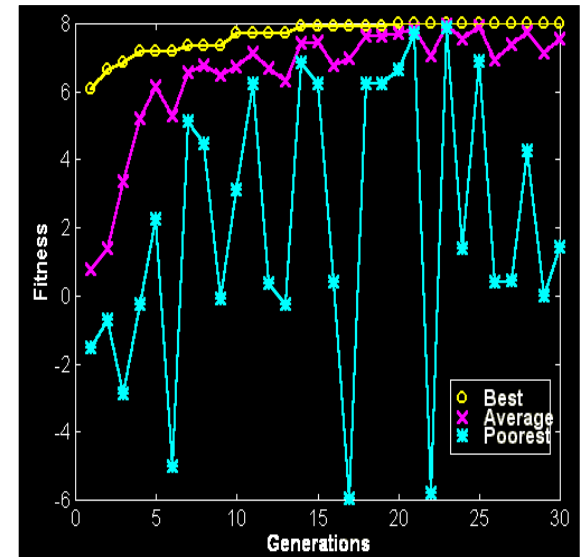
Uniform crossover:

Ρίχνεις ρουλέτα για κάθε
γονίδιο (με συγκεκριμένη
πιθανότητα διασταύρωσης)



Διασταύρωση ή μετάλλαξη: τι προτιμάτε;

- **Διασταύρωση:** χρήση της υπάρχουσας πληροφορίας
- Μοιάζει με “τοπική αναζήτηση”
- **Μετάλλαξη:** αναζήτηση νέας πληροφορίας
- Μοιάζει με “τυχαία αναζήτηση”
- Προφανώς χρειάζονται και τα δύο
- Μπορούμε να συνδυάσουμε τις δυνατότητες τους;
- $P(\text{mutation})_{\max} \rightarrow \min$ όσο εξελίσσεται η βελτιστοποίηση



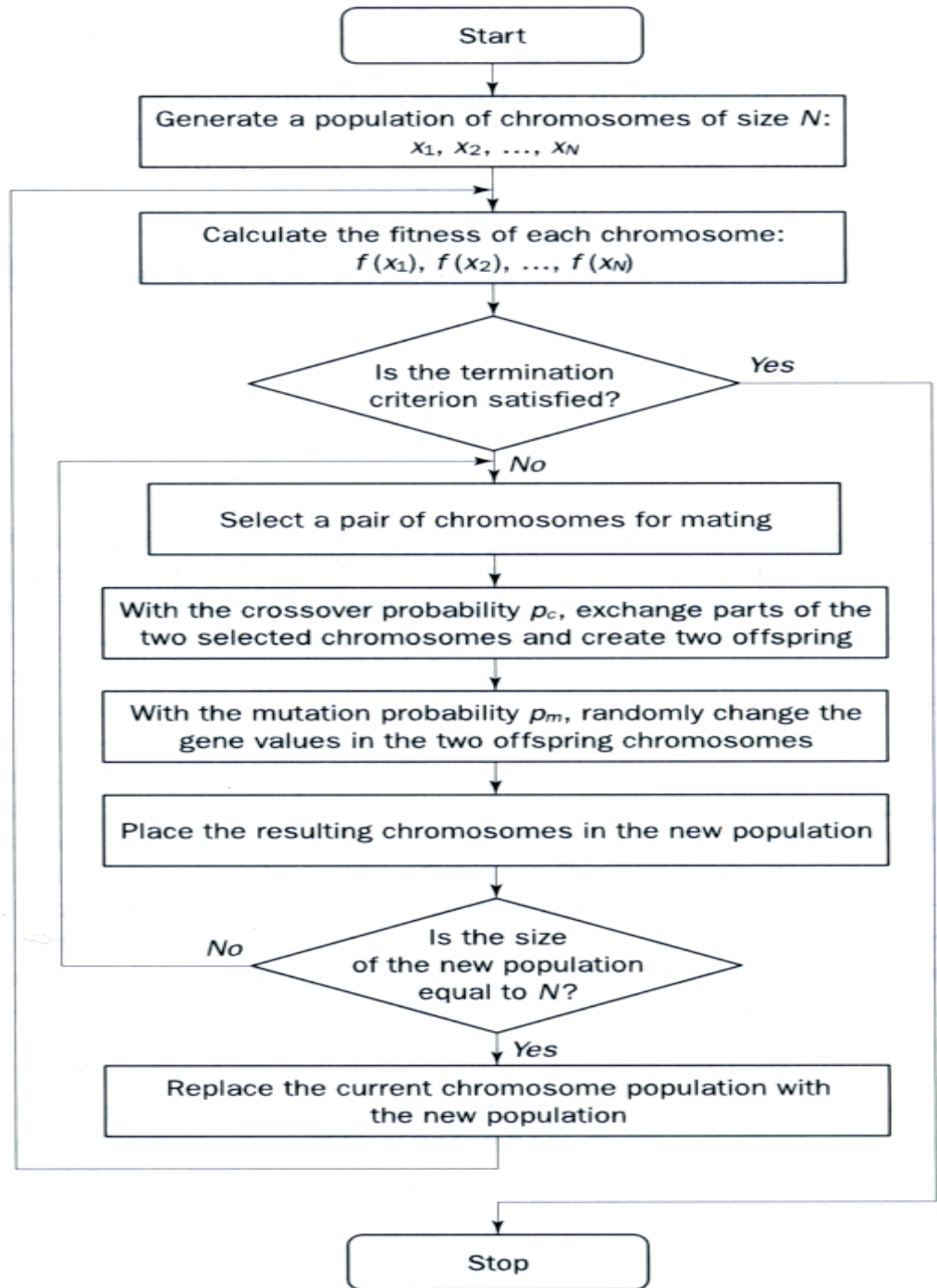
Επαναλήψεις (γενιές)

- Η κάθε επανάληψη μεταφέρει στην επόμενη γενιά **κάποια** χαρακτηριστικά από **κάποιες** από τις **καλύτερες λύσεις** από την προηγούμενη γενιά.
- Όσο πιο υψηλό fitness (ουσιαστικά μεγαλύτερη τιμή στην στοχική συνάρτηση) τόσο μεγαλύτερη η πιθανότητα να συμπεριληφθεί στον πληθυσμό της επόμενης γενιάς.
- Οι γενετικοί αλγόριθμοι χρειάζονται **πολλές επαναλήψεις** των διαδικασιών που αναφέρθηκαν.
- Κάθε επανάληψη (ή γενιά) είναι καλύτερη από την προηγούμενη (σαν μέσος όρος).
- **Βλέπετε κάποιο πρόβλημα με αυτό;**
- Η απόλυτα καλύτερη λύση κάθε γενιάς συνήθως μεταφέρεται αυτούσια στην επόμενη γενιά (**ελιτισμός**).
- Ο ΓΑ τελειώνει όταν οι επαναλήψεις δεν επιτυγχάνουν βελτίωση των λύσεων.
- **Ερώτηση (προς σκέψη)**: είναι η τελική λύση που βρήκε ο ΓΑ είναι η (απολύτως) βέλτιστη;

Διάγραμμα ροής

Γενετικός Κύκλος:

Η κάθε γενιά είναι κατά μέσο όρο **καλύτερη** από τη προηγούμενη (και τουλάχιστον το ίδιο καλή)

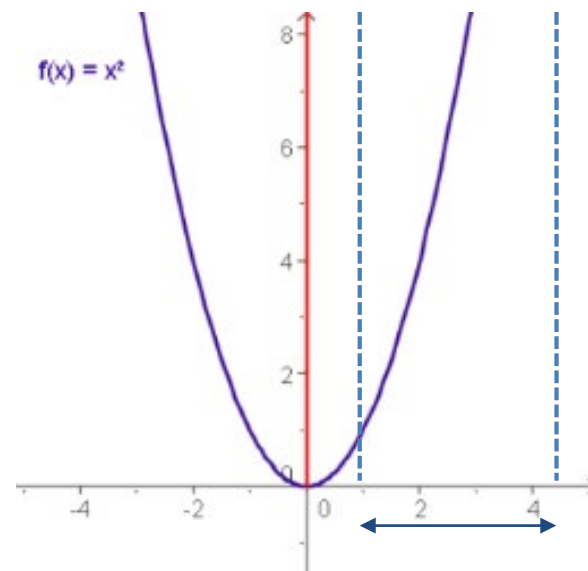


Παράδειγμα:

Εύρεση μεγίστου της

$$F(x)=x^2$$

όπου x είναι ακέραιος στο
διάστημα $[1, 31]$.



Παράδειγμα: Η κωδικοποίηση

- Θέλουμε να **αναπαραστήσουμε** αριθμούς μέχρι το 31, οπότε θα χρησιμοποιήσουμε χρωμοσώματα των πόσων γονιδίων στο δυαδικό;
- (Και πόσα θα θέλαμε για τον αριθμό 32=?)

Παράδειγμα: Η αρχικοποίηση

- Δημιουργία αρχικού πληθυσμού (έστω μεγέθους 4) με τυχαίο τρόπο:

$$A_1 = 0\ 1\ 1\ 0\ 1 = 13_{10}$$

$$A_2 = 1\ 1\ 0\ 0\ 0 = 24_{10}$$

$$A_3 = 0\ 1\ 0\ 0\ 0 = 8_{10}$$

$$A_4 = 1\ 0\ 0\ 1\ 1 = 19_{10}$$

Παράδειγμα: Η αξιολόγηση

$$F(A_1) = 13^2 = 169$$

$$F(A_2) = 24^2 = 576$$

$$F(A_3) = 8^2 = 64$$

$$F(A_4) = 19^2 = 361$$

Συνολική Απόδοση: 1170

Μέση απόδοση: 293

Παράδειγμα: Η επιλογή

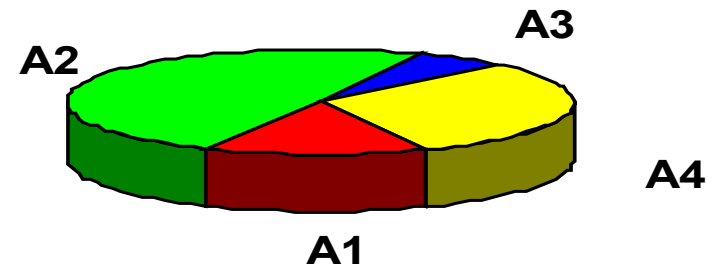
Ρουλέτα με βάρη: κάθε μέλος του πληθυσμού έχει πιθανότητα επιλογής ίση με τη **σχετική του απόδοση** στον τρέχοντα πληθυσμό.

$$P(A_1) = 169/1170 = 0.14$$

$$P(A_2) = 576/1170 = 0.49$$

$$P(A_3) = 64/1170 = 0.06$$

$$P(A_4) = 361/1170 = 0.31$$



Παράδειγμα: Η αναπαραγωγή

- Ο προσωρινός πληθυσμός μετά την εφαρμογή της ρουλέτας (μετά την επιλογή δηλαδή):

$$A'_1 = 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ 1$$

$$A'_2 = 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0$$

$$A'_3 = 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0$$

$$A'_4 = 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 1$$

Με αρχικό:

$$A1 = 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ 1$$

$$A2 = 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0$$

$$A3 = 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0$$

$$A4 = 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 1$$

Παράδειγμα: Η διασταύρωση

Έστω $p_c=1$. Από αυτούς που έχω επιλέξει, έστω ότι διασταυρώνονται:

- το A'_1 με το A'_2 με σημείο διασταύρωσης το 4 και
- το A'_3 με το A'_4 με σημείο διασταύρωσης το 2

$$\begin{array}{l} A'_1 = 0 \ 1 \ 1 \ 0 \mid 1 \\ A'_2 = 1 \ 1 \ 0 \ 0 \mid 0 \end{array} \xrightarrow{\text{red arrow}} \begin{array}{l} A''_1 = 0 \ 1 \ 1 \ 0 \mid 0 \\ A''_2 = 1 \ 1 \ 0 \ 0 \mid 1 \end{array}$$

$$\begin{array}{l} A'_3 = 1 \ 1 \mid 0 \ 0 \ 0 \\ A'_4 = 1 \ 0 \mid 0 \ 1 \ 1 \end{array} \xrightarrow{\text{red arrow}} \begin{array}{l} A''_3 = 1 \ 1 \mid 0 \ 1 \ 1 \\ A''_4 = 1 \ 0 \mid 0 \ 0 \ 0 \end{array}$$

Παράδειγμα: Η μετάλλαξη

Έστω $p_m = 0.25$. Επιλέγω το A''_4 και μετά ένα γονίδιο (με πιθανότητα $1/5$) του οποίου η τιμή αντιστρέφεται:

$$A''_1 = 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0$$

$$A''_2 = 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1$$

$$A''_3 = 1 \ 1 \ 0 \ 1 \ 1$$

$$A''_4 = 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0$$



$$A'''_1 = 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0$$

$$A'''_2 = 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1$$

$$A'''_3 = 1 \ 1 \ 0 \ 1 \ 1$$

$$A'''_4 = 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0$$

Παράδειγμα: Ο νέος πληθυσμός

$$A_1 = 0\ 1\ 1\ 0\ 0 = 12_{10} \Rightarrow F(12) = 144$$

$$A_2 = 1\ 1\ 0\ 0\ 1 = 25_{10} \Rightarrow F(25) = 625$$

$$A_3 = 1\ 1\ 0\ 1\ 1 = 27_{10} \Rightarrow F(27) = 729$$

$$A_4 = 1\ 0\ 0\ 1\ 0 = 18_{10} \Rightarrow F(18) = 324$$

Συνολική Απόδοση: 1822 (από 1170)

Μέση απόδοση: 455.5 (από 293)

Προσέξτε ότι ο αλγόριθμος **δεν γνωρίζει** τη μορφή του χώρου των λύσεων...

Είναι όμως το δυαδικό το μόνο σύστημα κωδικοποίησης;

Υπάρχουν 3 συνήθη συστήματα:

- **Δυαδικό** (το αρχικό, 'κλασσικό')
- **Ακέραιοι** (image processing, κατηγορίες, λίστες πχ. το TSP!)
- **Μεταβλητές πραγματικών αριθμών** (με σταθερή ή κινούμενη υποδιαστολή – fixed/floating point)

0	1	1	1	0	1
---	---	---	---	---	---

1	3	5	8	7	9
---	---	---	---	---	---

1.4	0.2	0.8	7.1	6.4	2.9
-----	-----	-----	-----	-----	-----

Τελεστές για μη-δυναμικές κωδικοποιήσεις (συγκεκριμένα στους ακέραιους)

Προφανώς υπάρχουν κάποια προβλήματα με τους τελεστές σε κωδικοποίηση με ακέραιους...

- **Διασταύρωση;**

- Γενικά οι διασταυρώσεις (ενός και n σημείων, και η ομοιόμορφη) δουλεύουν.
- Μπορούμε να προσθέσουμε «δύναμη αναζήτησης» υπολογίζοντας τα γονίδια των παιδιών (z) όχι με **αντικατάσταση** από τα γονίδια των γονέων (x, y) αλλά με **υπολογισμό** ($z_i = \alpha x_i + (1 - \alpha) y_i$ όπου $\alpha : 0 > \alpha > 1$). Το α μπορεί να είναι σταθερό, να αλλάζει με τη γενιά, να είναι τυχαίο από ομοιόμορφη κατανομή.
- Μερικές φορές μπορεί να οδηγούν σε μη αποδεκτές λύσεις και στη περίπτωση αυτή έχουμε **ειδικότερους τελεστές διασταύρωσης** (πχ. Order 1 Crossover για προβλήματα μετάθεσης (permutations – πχ. TSP)

- **Μετάλλαξη;**

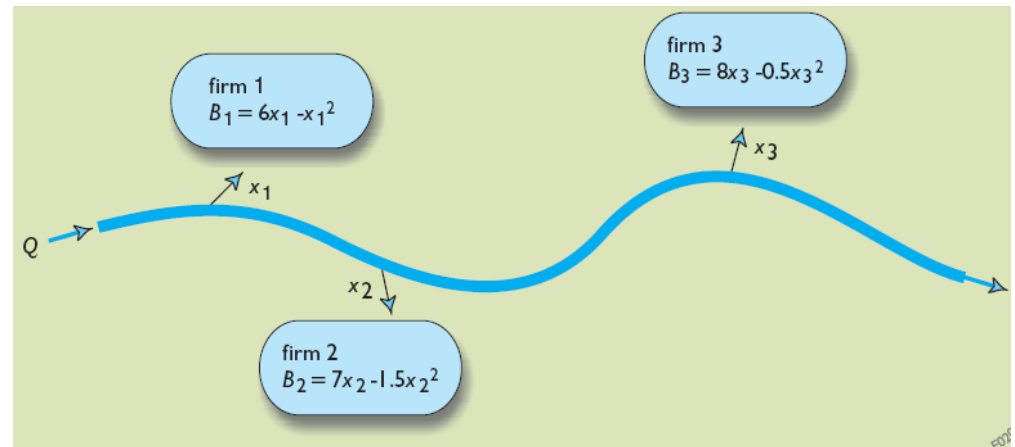
- Συνήθως ορίζουμε ένα **διάστημα** εντός του οποίου μπορεί να πάρει τιμές το γονίδιο z [a b] και μετά
- ορίζουμε ένα **κανόνα (μικρής) μεταβολής** (creep): πχ. προσθέτω αλγεβρικά τυχαία μεταβολή από κανονική κατανομή $N(0, \sigma)$, όπου το σ ορίζει το πόσο 'μικρή' είναι η μεταβολή (και στρογγυλοποιώ σε ακέραιο)
- Αν η μεταβολή **βγάζει τη μεταβλητή από το διάστημα ορισμού της**, τότε δίνουμε στο γονίδιο που μεταλλάσσεται τη μέγιστη ή ελάχιστη τιμή (αντίστοιχα).

Παράδειγμα: Υδατικοί Πόροι

- Κατανομή νερού σε 3 χρήστες
- Μέγιστη ποσότητα νερού σε κάθε χρήστη να μην υπερβαίνει το 5
- Το συνολικό διαθέσιμο νερό είναι = 6

$$0 \leq x_i \leq 5 \quad \text{for } i = 1, 2, \text{ and } 3.$$

$$x_1 + x_2 + x_3 \leq 6$$



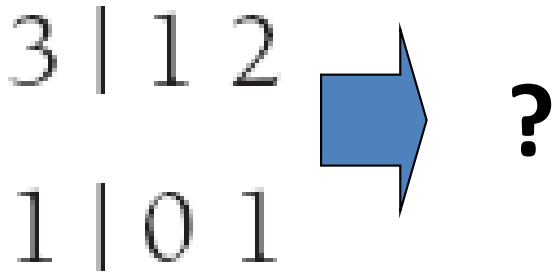
$$\begin{aligned} \text{Maximize } B(X) = & (6x_1 - x_1^2) + (7x_2 - 1.5x_2^2) \\ & + (8x_3 - 0.5x_3^2) \end{aligned}$$

Διαδικασία επίλυσης

- Ας αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα με κωδικοποίηση με **ακεραίους**.
- Δημιουργούμε (τυχαία) ένα πληθυσμό εφικτών λύσεων
- Μια πιθανή λύση μπορεί να είναι η **[3, 1, 2]** που καθορίζει κατανομή $x_1=3$, $x_2=1$, and $x_3=2$.
- Μια άλλη λύση μπορεί να είναι η **[1,0,1]**
- Οι δύο αυτές λύσεις μπορούν να συνδυαστούν και να δώσουν 2 «απογόνους».
- Το πως συνδυάζονται προκύπτει από την εφαρμογή των γενετικών τελεστών διασταύρωσης και μετάλλαξης.

Διαδικασία επίλυσης: διασταύρωση

Με διασταύρωση σε 1 σημείο



Με ομοιόμορφη διασταύρωση

- Ορίζουμε **για κάθε ζεύγος γονιδίων** τη πιθανότητα διασταύρωσης (πχ. σε 0.30).
- Άρα **κάθε ζεύγος γονιδίων** έχει 30% πιθανότητα να διασταυρωθεί.
- Για παράδειγμα θα μπορούσε να καταλήξει μόνο το μεσαίο από τα ζεύγη των λύσεων 312 και 101 να διασταυρωθεί: 3**0**2 and 1**1**1.

Διαδικασία επίλυσης: μετάλλαξη

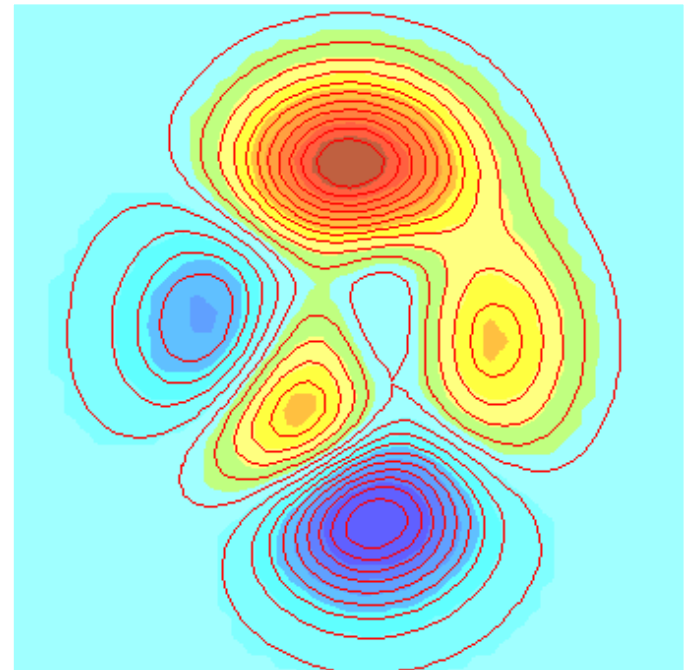
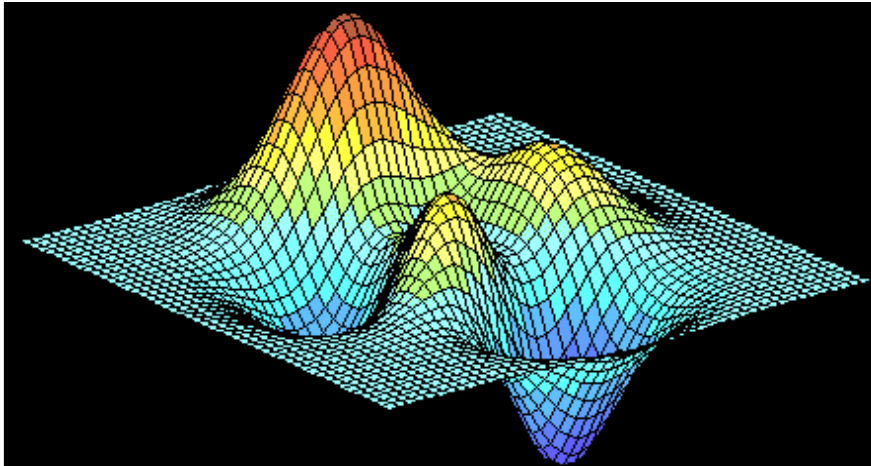
- Χρειαζόμαστε **πεδίο ορισμού**. Εδώ $[0, 5]$
- Χρειαζόμαστε επίσης ένα **κανόνα (μικρής) μεταβολής**.
πχ, ας αποφασίσουμε ότι μετάλλαξη σημαίνει -1 (δηλ. το 2 γίνεται 1)
- Χρειαζόμαστε τέλος ένα κανόνα για το τι κάνουμε όταν η μεταβολή **βγαίνει εκτός** πεδίου ορισμού πχ. εδώ αν βγαίνει εκτός αντικατέστησε με το μέγιστο: δηλ. το -1 γίνεται 5.
- Ας υποθέσουμε ότι μεταλλάσσουμε το μεσαίο ψηφίο του **112** και άρα έχουμε **102**.

Διαδικασία επίλυσης: επιλογή νέου πληθυσμού

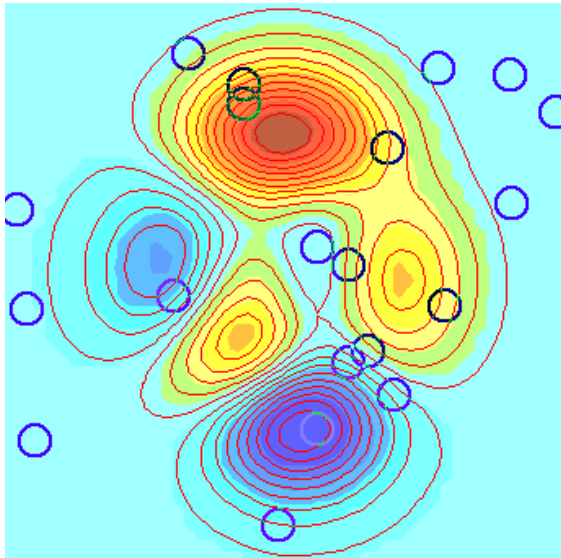
- Η διαδικασία μας έδωσε από **312** και **101** $\rightarrow$ **301** και **102**.
- Πρέπει να υπολογίσουμε το **όφελος** για τις νέες λύσεις
 - $301 \rightarrow 16.5$
 - $102 \rightarrow 19.0$
 - Το άθροισμα είναι 35.5.
- Ορίζουμε ως **πιθανότητα επιλογής**
 - της λύσης 301 το $16.5/35.5 = 0.47$ και
 - της λύσης 102 το $19/35.5 = 0.53$
- Επιλέγουμε τυχαίο αριθμό από την ομοιόμορφη κατανομή $[0, 1]$
- Αν ο αριθμός αυτός είναι μεταξύ 0 to 0.47 τότε επιλέγουμε το 301.
- Αν είναι μεγαλύτερος επιλέγουμε το 102.
- Και η διαδικασία συνεχίζεται για μια ακόμα γενιά.

Παράδειγμα: μέγιστο της συνάρτησης peak

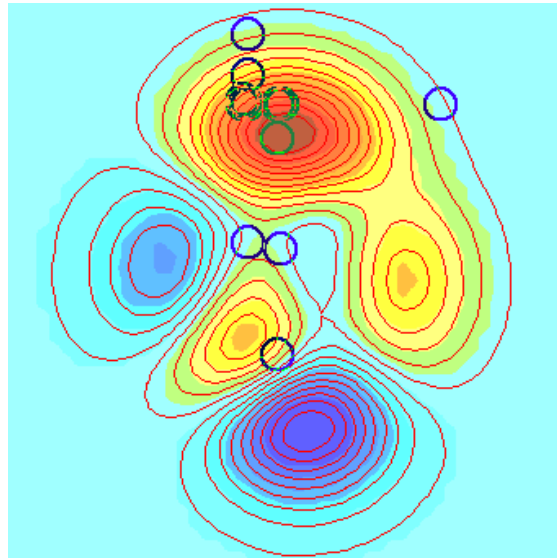
$$z = f(x, y) = 3(1 - x)^2 \exp[-(x^2) - (y + 1)^2] - 10\left(\frac{x}{5} - x^3 - y^5\right) \exp(-x^2 - y^2) - 1/3 \exp[-(x + 1)^2 - y^2]$$



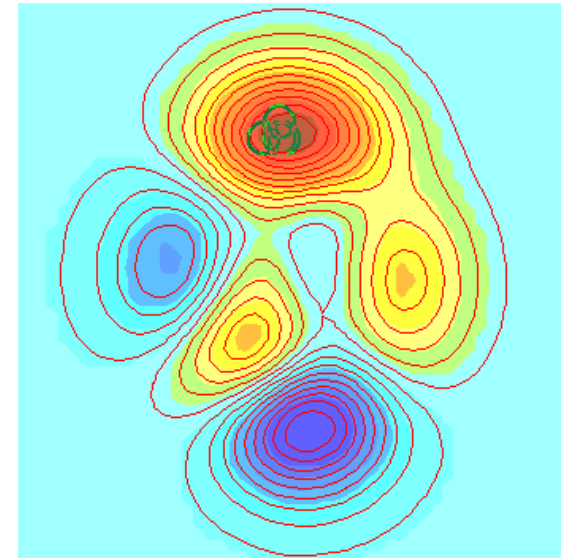
Παράδειγμα επίλυσης



Αρχικός πληθυσμός

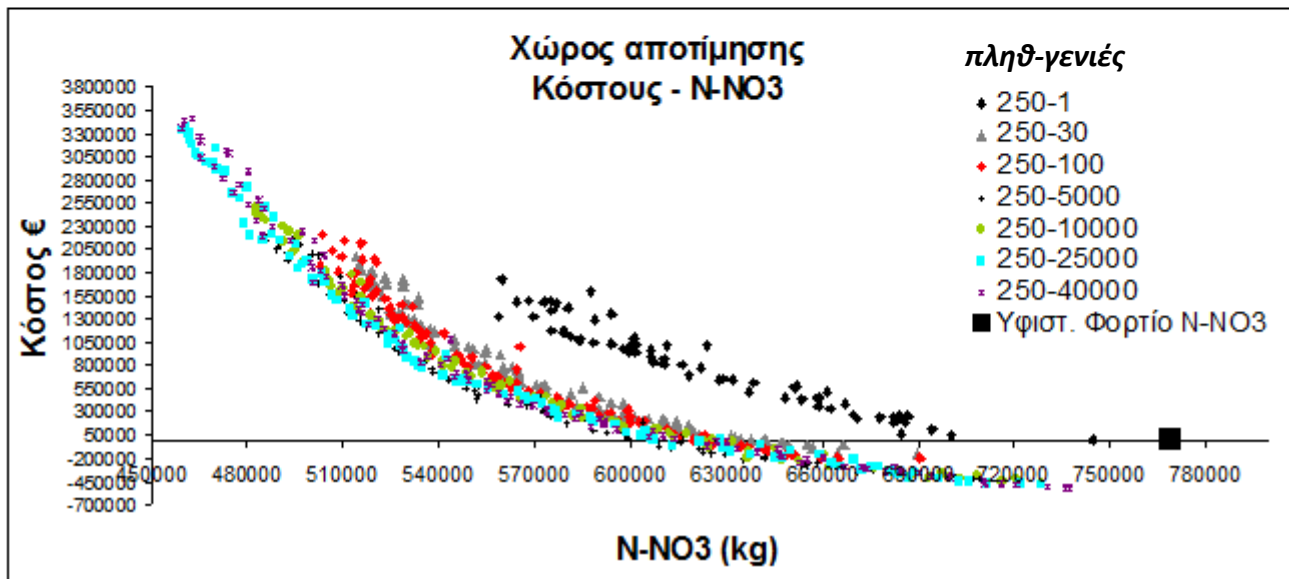
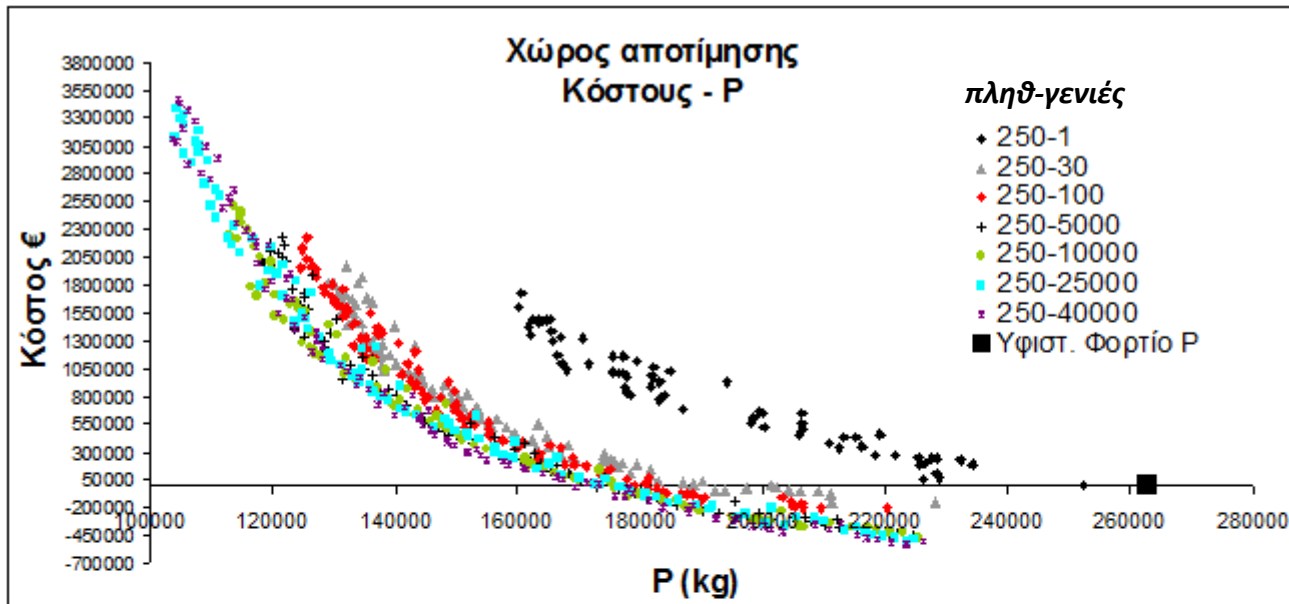


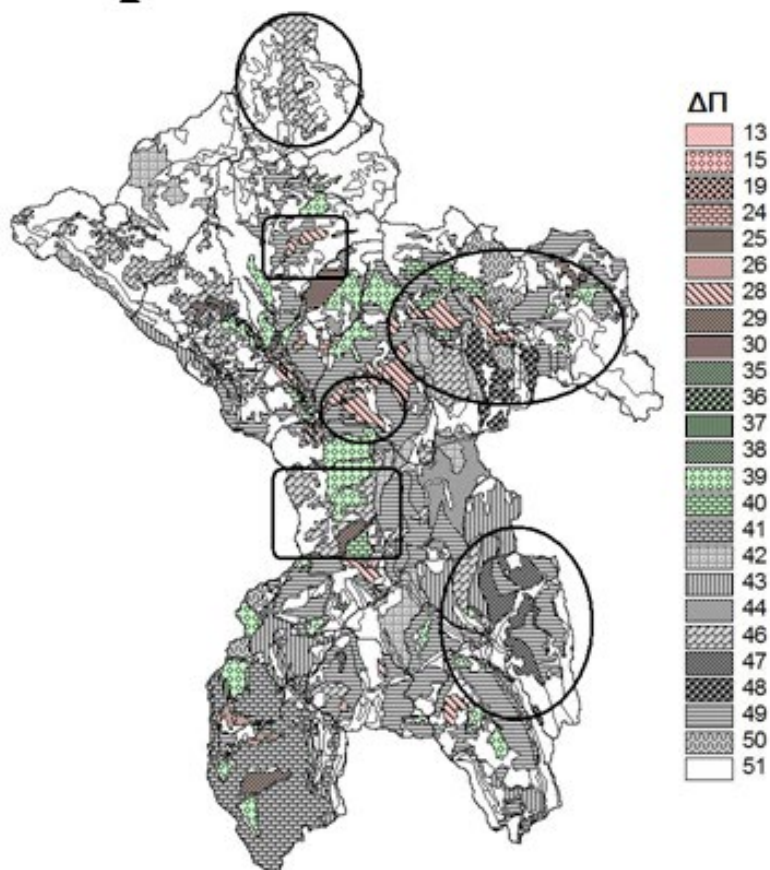
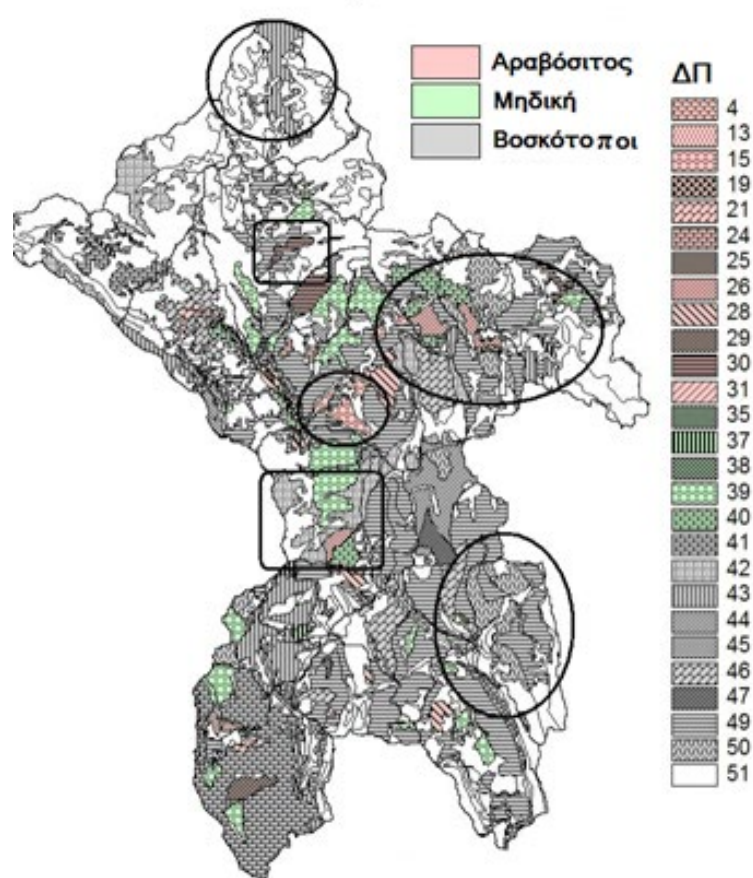
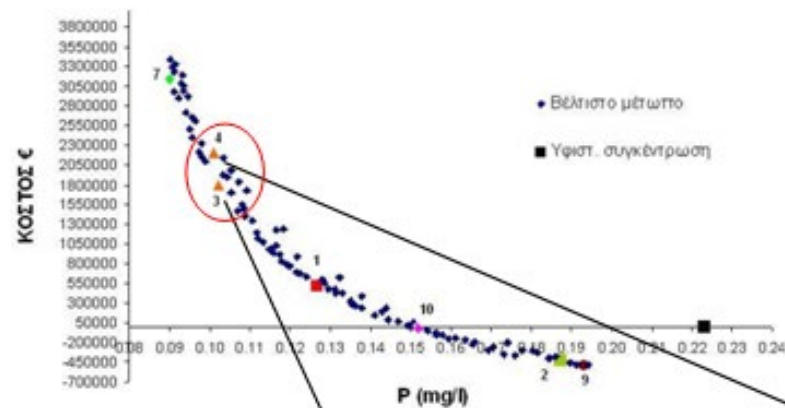
5η γενιά



10η γενιά

Παράδειγμα εξέλιξης λύσεων ΓΑ για πρόβλημα διαχείρισης μη-σημειακής ρύπανσης





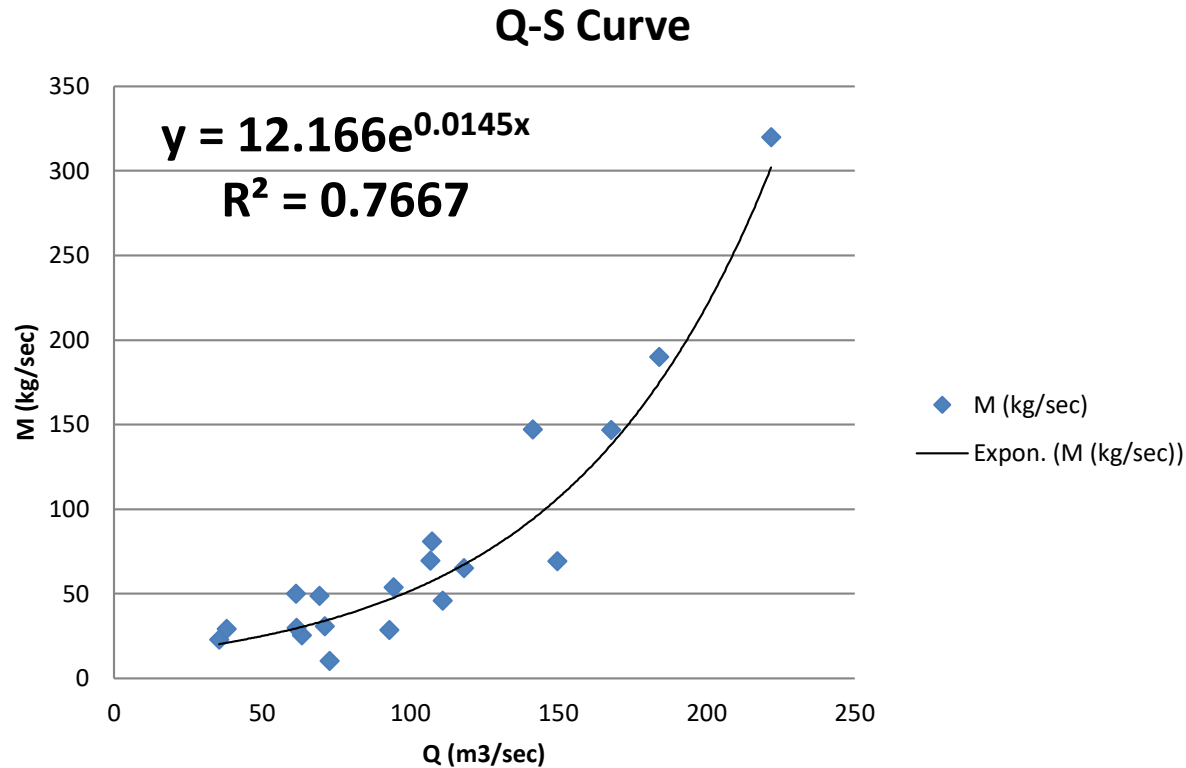
Εξελικτικοί αλγόριθμοι: Άλλες μέθοδοι

- Ant Colony Optimisation
 - Αναλογία με τον τρόπο επιλογής του συντομότερου δρόμου από αποικίες μυρμηγκιών
- Particle Swarm Optimisation
 - Αναλογία με τον τρόπο αναζήτησης τροφής από σμήνος πουλιών
- Surrogate-Based-Optimization
 - Αντικατάσταση της αντικειμενικής συνάρτησης με υποκατάστατα μοντέλα (μετα-μοντέλα) για την επιτάχυνση της διαδικασίας
- Genetic Programming
 - Η εξέλιξη μιας συνάρτησης που αποτελεί λύση του προβλήματος.

Γενετικός Προγραμματισμός (Genetic Programming - GP)

- Εξέλιξη **μιας συνάρτησης** για την επίλυση ενός προβλήματος
- Δομικά στοιχεία:
 - Πρωτογενείς συναρτήσεις και δεδομένα εισόδου/εξόδου (εκπαιδευτικά δεδομένα)
 - Στοχική Συνάρτηση: σφάλμα εξόδου σε σύνολο εκπαιδευτικών δεδομένων
 - Τελεστές: Επιλογή (κλωνοποίηση), διασταύρωση, μετάλλαξη
- *Παράδειγμα: Evolutionary Programming Regression (EPR; Giustolici and Savic, 2006)*

Για ποιό λόγο να θέλουμε να εξελίξουμε μια ... συνάρτηση!;



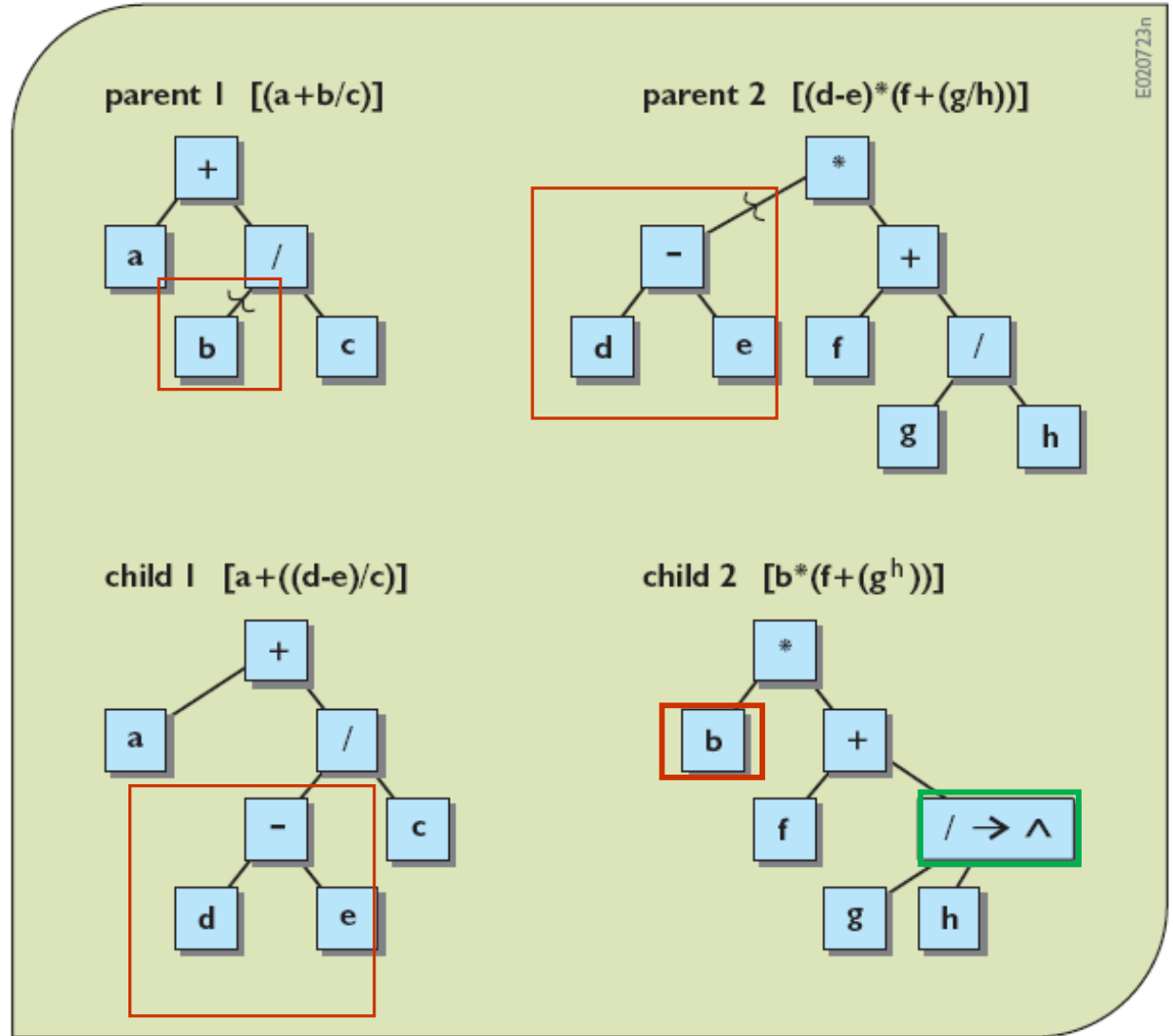
Παράδειγμα Γενετικού Προγραμματισμού

πχ. Κατασκευή συναρτήσεων για την επεξήγηση δεδομένων (προσαρμογή - data fitting)

Ποια θα μπορούσε να είναι η στοχική συνάρτηση εδώ;

(Nash Sutcliff):

$$E = 1 - \frac{\sum_{t=1}^T (Q_0^t - Q_m^t)^2}{\sum_{t=1}^T (Q_0^t - \overline{Q_0})^2}$$



διασταύρωση

μετάλλαξη

Ολικοί ή τοπικοί αλγόριθμοι;

Μέθοδοι τοπικής αναζήτησης

- **Γενική περιγραφή:** Προσδιοριστικές τεχνικές βήμα προς βήμα αναζήτησης, στην κατεύθυνση βελτίωσης της τιμής της συνάρτησης.
- **Πλεονέκτημα:** Γρήγορος και εγγυημένος εντοπισμός του τοπικού ακροτάτου, στην περιοχή έλξης του οποίου βρίσκεται το σημείο εκκίνησης του αλγορίθμου.
- **Μειονέκτημα:** Εγκλωβισμός σε τοπικά ακρότατα, κακή συμπεριφορά σε μη κυρτές επιφάνειες απόκρισης.

Μέθοδοι ολικής αναζήτησης

- **Γενική περιγραφή:** Εξελικτικές, κατά κανόνα, τεχνικές, που χρησιμοποιούν *συνδυασμούς προσδιοριστικών και στοχαστικών* κανόνων αναζήτησης.
- **Πλεονέκτημα:** Ευελιξία διερεύνησης μη κυρτών χώρων, μη χρήση παραγώγων, δυνατότητα απεγκλωβισμού από τοπικά ακρότατα.
- **Μειονέκτημα:** Αργή σύγκλιση, ασάφεια ορισμού των αλγοριθμικών παραμέτρων, μη εγγυημένη εύρεση του ολικού ακροτάτου

Δεν χρειάζεται να διαλέξουμε!

Υβριδικά Σχήματα

- Διάφοροι συνδυασμοί:
 - Χρησιμοποιούν το τελικό πληθυσμό λύσεων ως σημείο εκκίνησης για τοπική αναζήτηση
 - Διαμόρφωση στοχαστικών εξελικτικών σχημάτων, που για τη γέννηση νέων λύσεων χρησιμοποιούν υπολογιστικές διαδικασίες των μεθόδων τοπικής αναζήτησης, για αύξηση της ταχύτητας σύγκλισης.

Παραδείγματα Υβριδικών Αλγορίθμων

- **Υβριδικοί εξελικτικοί αλγόριθμοι:** Για την επιτάχυνση της διαδικασίας αναζήτησης εφαρμόζουν πρότυπα των μεθόδων **άμεσης αναζήτησης** (πχ. αντί του τελεστή διασταύρωσης προς το τέλος της αναζήτησης)
- **Εξελικτικοί αλγόριθμοι με έλεγχο διασποράς:** Επέμβαση στη διαδικασία επιλογής, που ευνοεί την επιβίωση απομακρυσμένων λύσεων (προς όφελος της διατήρησης **μεγαλύτερης διασποράς** στον πληθυσμό, και συνεπώς πιο εκτενούς διερεύνησης του εφικτού χώρου), σε σχέση με λύσεις που συσσωρεύονται γύρω από τοπικά ακρότατα.
- **Εξελικτικοί αλγόριθμοι με ανόπτηση:** Στοιχεία των γενετικών τελεστών (πχ. πιθανότητα μετάλλαξης) εξαρτώνται από την τρέχουσα «θερμοκρασία» του συστήματος η οποία πέφτει με το χρόνο
 - **Ανόπτηση** (annealing) είναι η διεργασία ανακατανομής των ατόμων **κατά την ψύξη** ενός θερμοδυναμικού συστήματος (π.χ. μετάλλου). Σε υψηλές θερμοκρασίες, τα μόρια του μετάλλου κινούνται ελεύθερα προς όλες τις κατευθύνσεις. Καθώς το μέταλλο ψύχεται, η κινητικότητα των μορίων του περιορίζεται. Όταν η θερμοκρασία μειωθεί αρκετά, διαμορφώνεται μια κρυσταλλική δομή, που αποτελεί την κατάσταση **ελάχιστης ενέργειας** του συστήματος.
 - Αντίστοιχα, η **πιθανότητα αποδοχής μιας χειρότερης κατάστασης** είναι συνάρτηση της **θερμοκρασίας** και της χειροτέρευσης της **στοχικής**. Όσο πέφτει η θερμοκρασία τόσο **μειώνεται η πιθανότητα** να γίνει αποδεκτή μια χειρότερη τιμή. Για $T=0$, δεν επιτρέπεται χειροτέρευση

«Βέλτιστη» μέθοδος βελτιστοποίησης;

- Η «ολικά βέλτιστη» μέθοδος βελτιστοποίησης θα πρέπει να συνδυάζει τα δύο ακόλουθα θεμελιώδη χαρακτηριστικά επίδοσης (Duan *et al.*, 1992):
 - **αποτελεσματικότητα** (effectiveness), δηλαδή υψηλή αξιοπιστία εντοπισμού (ή προσέγγισης) του ολικού ακροτάτου της συνάρτησης.
 - **αποδοτικότητα** (efficiency), δηλαδή υψηλή ταχύτητα σύγκλισης (εγγυημένος εντοπισμός του ολικού ακροτάτου, με εύλογο πλήθος δοκιμών).
- Τα χαρακτηριστικά αυτά είναι **αντικρουόμενα** (π.χ. η **εξονυχιστική αναζήτηση** σε πλέγμα πυκνής διακριτοποίησης προσεγγίζει το ολικό βέλτιστο με ακρίβεια, αλλά και απαιτεί ανέφικτα υψηλό υπολογιστικό φόρτο, ενώ οι γρήγορες τεχνικές άμεσης αναζήτησης (hill climbing) εγκλωβίζονται εύκολα σε τοπικά ακρότατα).
- Η επίδοση ενός αλγορίθμου ελέγχεται μόνο **πειραματικά**.
- Τα **εξελικτικά υβριδικά σχήματα** βελτιστοποίησης υπερτερούν, στις περισσότερες κατηγορίες προβλημάτων βελτιστοποίησης της πράξης.

Ανακεφαλαιώνοντας: οι ΓΑ..

- Βασίζονται σε μια απλή αλλά ευέλικτη κεντρική ιδέα και άρα είναι εύκολα επεκτάσιμοι και εξελίξιμοι (δεκάδες την ημέρα!)
- Χρησιμοποιούν μόνο την **στοχική συνάρτηση** και καμία επιπρόσθετη πληροφορία και αυτό τους κάνει γενικής φύσης – μπορούν να εφαρμοστούν σε οποιοδήποτε πρόβλημα.
- Χρησιμοποιούν πιθανοτικούς κανόνες αναζήτησης νέων λύσεων και όχι ντετερμινιστικούς και άρα
 - αντέχουν σε θόρυβο/αβεβαιότητα
 - μπορούν να επιλύουν δύσκολα προβλήματα (με πολλαπλά άγνωστα ακρότατα) γρήγορα και αξιόπιστα.
- Μπορούν εύκολα να συνδεθούν με υπάρχοντα μοντέλα και συστήματα
- Μπορούν να συνδυαστούν (σε υβριδικές μορφές) με άλλες μεθόδους βελτιστοποίησης
- Κάνουν αναζήτηση σε πολλά σημεία ταυτόχρονα και όχι μόνο σε ένα και άρα
 - υποστηρίζουν πολύ-κριτηριακή βελτιστοποίηση
 - έχουν από τη φύση τους το στοιχείο του παραλληλισμού και άρα προσφέρεται για παράλληλη υλοποίηση.
- Βγάζουν πάντα μια απάντηση, η οποία και βελτιώνεται με το χρόνο
- Αλλά – **τίποτα** δεν μας εγγυάται ότι η απάντηση αυτή είναι η **απολύτως βέλτιστη**.