Genetické algoritmy

Ing. Petr Honzík, Ph.D.
honzikp@feec.vutbr.cz

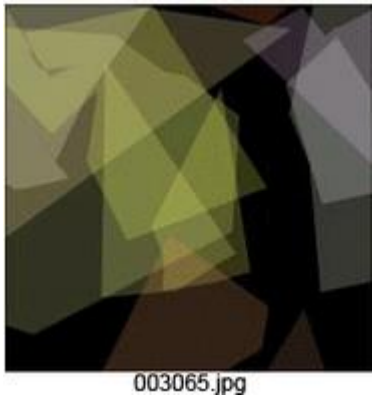
Obsah přednášky

1. Optimalizační algoritmy
2. Genetické algoritmy
3. Genetické programování

Prostě takový nápad…

(Roger Alsing, 2008)

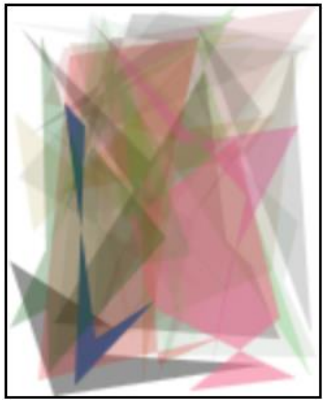
- Lze pomocí **50 polygonů** (částečně transparentních) nakreslit **repliku obrazu** Mona Lisa?



http://rogeralsing.com/2008/12/07/genetic-programming-evolution-of-mona-lisa/

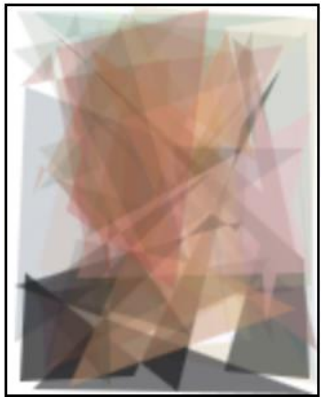
I toto je možné…

- **Co vidíte na obrázku?** Kdo to uhodne, tomu zkusím zajistit **body navíc**… (*platilo v roce 2015*)



5 bodů

4 body



3 body

2 body

1 bod

Je však možné i jiné využití, např.

- Návrh designu listů turbín a vrtulí pro motory, větrné elektrárny… (maximalizace účinnosti)
- Rozmístění elektráren ve větrné farmě (maximalizace efektivity)
- Profily karosérie závodních vozů (minimalizace aerodynamického odporu)
- Rozmístění vyřezávaných profilů na pásu (minimalizace odpadu)
- Routování, hledání optimální cesty (minimalizace času, nákladů)
- Vývoj nových chemických sloučenin, molekul (maximalizace užitné vlastnosti)
- Finančnictví (maximalizace výnostu, minimalizace rizika, …)
- …

Optimalizace

- Snaha o nalezení minimální nebo maximální hodnoty tzv. **účelové nebo cílové funkce**

- **Geometrický problém** v prostoru o D+1 dimenzích, kde D je počet parametrů účelové funkce a zbývající rozměr je výstupní hodnota účelové funkce, jejíž extrémní hodnota je hledána

- Dva základní **typy kombinatorických problémů**:
  - variační (s opakováním, min/max funkce, …)
  - permutační (variace bez opakování, obchodní cestující)

Úvod – co dělají GA

- Genetické algoritmy slouží k prohledávání prostoru hypotéz (např. nastavení modelu) napodobováním přirozeného vývoje v přírodě (evoluce) – přežívá přizpůsobenější jedinec
- Zmražená evoluce – nová biologická evoluční teorie

- **Přednosti**:
  - lze řešit libovolně složitý problém bez apriorní znalosti
- **Omezení**:
  - pokaždé nalezeno jiné řešení
  - nemožnost rozpoznat optimum
  - ne vždy dostatečně přesné
  - řada parametrů algoritmu – stupňů volnosti

Historie

- 19. stol. Charles Darwin „O původu druhů“
- 1960 I. Rechenberg – idea GA
- 1975 John Holland „Adaptation in Natural and Artificial Intelligence“ – uvedení GA
- 1989 David Goldberg – obecné využití GA
- 1992 J. R. Koza – genetické programování
- 1996 Zbiwgniew Michalewicz – vylepšení

Terminologie

- **Operandy**
  - gen
  - chromozom
  - *genom, genotyp, fenotyp*
  - *jedinec (rodič, potomek)*
  - generace, populace
- **Ostatní**
  - adaptace
  - evoluční počítání
  - genetický algoritmus
- **Operátory**
  - kódování
  - fitness (kvalita)
  - selekce
  - křížení
  - mutace
  - elitismus
  - ukončovací podmínka

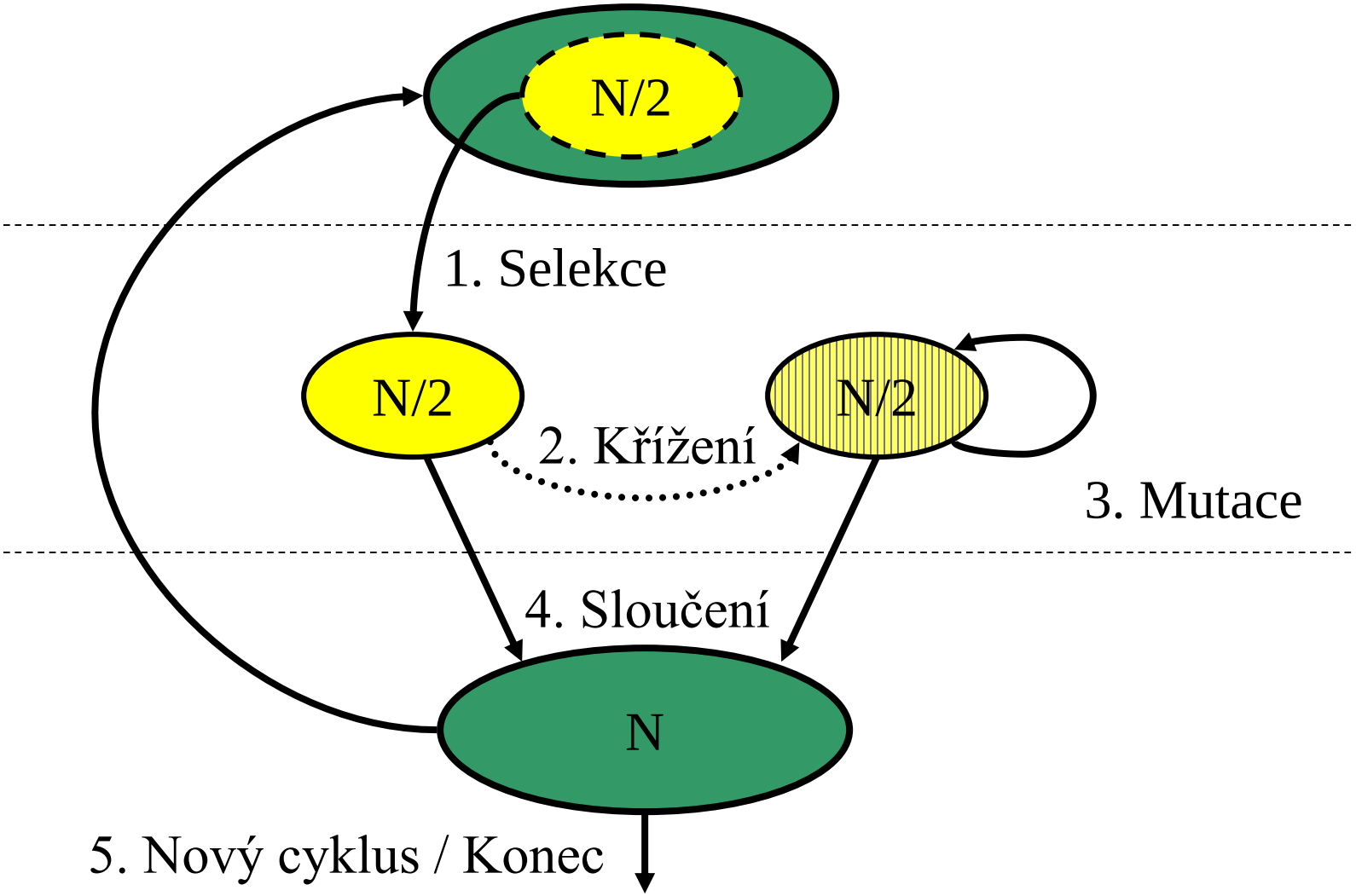
VIS: ? *Co je ...? (kromě termínů označených kurzívou)*

Princip GA – obdoba evoluce

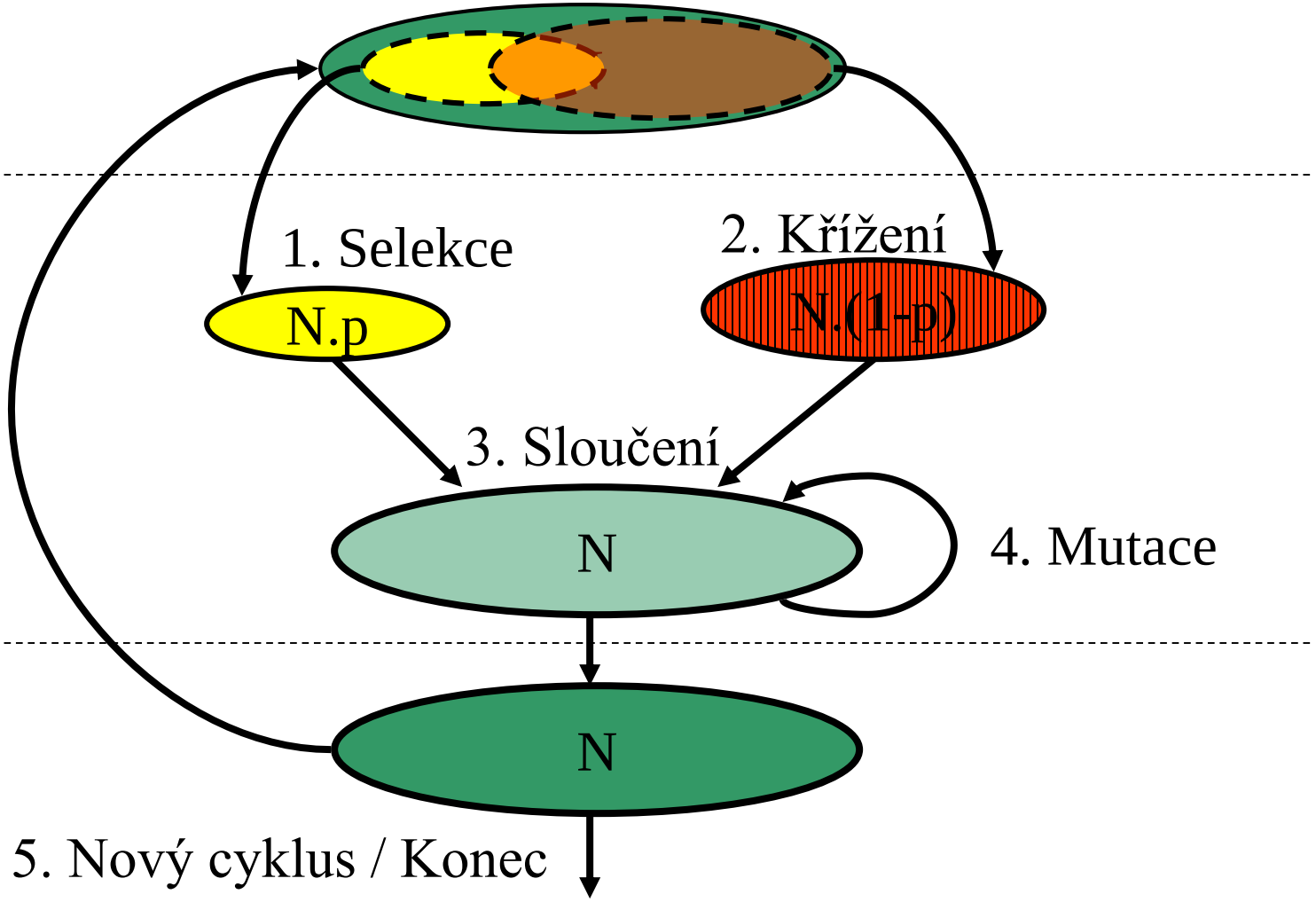
1. vytvoření počáteční generace
2. vyhodnocení počáteční generace
3. selekce
4. křížení, mutace
5. vyhodnocení nové generace
6. ukončovací podmínka
   - nesplněna – návrat do 3. bodu
   - splněna - konec

VIS: ? *Napište ideové schéma genetického algoritmu.*

Princip GA – varianta I.



Princip GA – varianta II.



Kódování

chromozom = ***kódování*** (skutečné vlastnosti);

- binární kódování

chromozom: | *0* | *1* | *0* | *1* | *0* | *0* | *1* | *0* | *1* |

- kódování do reálných čísel

chromozom: | *2,36* | *0,057* | *-3600* |

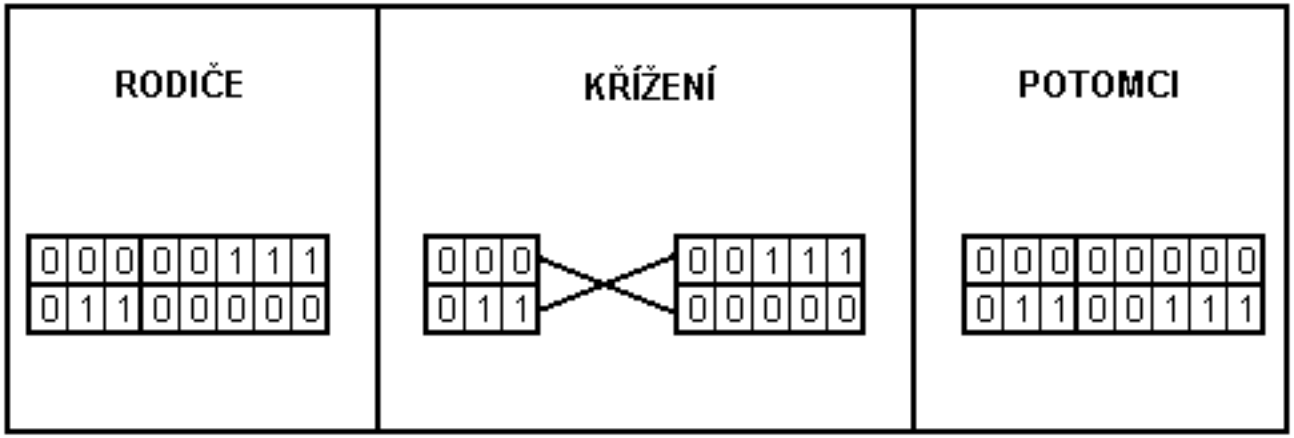
Křížení

jedinec = ***křížení*** (rodič1,rodič2);

- Základní „evoluční“ operátor GA
- Na základě křížení může ze dvou slabých rodičů vzniknout silný potomek
- Různé typy křížení podle typu kódování chromozomu (bin., real.)

Křížení – binární kódování

8 genů, 7 pozic pro křížení, 3. pozice křížení



Křížení – reálné kódování

- **Simple crossover** [Goldberg 1989]
- Two point crossover [Eshelman, 1989]
- Uniform crossover [Syswerda 1989]
- Flat crossover [Radcliffe 1991]
- Arithmetic crossover [Michalewicz 1992]
- **Convex crossover**
- Fuzzy crossover
- **Blend crossover-α (BLX-α)** [Eshelman, 1993]
- Linear BGA crossover [Schlierkamp-Voosen, 1994]
- Simulated binary crossover (SBX) [Voigt, 1995]
- CIXL1 [Hervás-Martínez, 2003]
- CIXL2 [Ortiz-Boyeret, 2005]
- ...

Křížení – reálné kódování

- **Simple crossover**
  - obdoba binárního křížení
  - není příliš efektivní

R1:	7,8	41	12,3	13	17
R2:	12	-53	123	4	1

P1:	7,8	41	12,3	4	1
P2:	12	-53	123	13	17

- **Convex crossover**

$$\boldsymbol{P} = p \cdot \boldsymbol{R}_1 + (1 - p) \cdot \boldsymbol{R}_2$$

  - kde p je náhodné čílso z intervalu <0;1>, R_1 a R_2 jsou rodiče, P je potomek

Blend Crossover – BLX-α

- Mějme rodiče R_1 a R_2, pak gen $\boldsymbol{g}$ potomka P na stejné pozici jako u obou rodičů g_1 a g_2 je vygenerován jako náhodné číslo z intervalu v závorce výrazu:

$$\boldsymbol{g} = rand\left(\min(g_1, g_2) - \alpha \cdot |g_1 - g_2|,\ \max(g_1, g_2) + \alpha \cdot |g_1 - g_2|\right)$$

- Empiricky zjištěno, že stabilně dobré výsledky dává algoritmus pro α=0,5
- Variantou je metoda definující 3 potomky dle výše uvedeného algoritmu pro extrémy intervalu a průměr. Ze 3 potomků jsou vybárni 2 s největší zdatností

$$\boldsymbol{P}_1 = \frac{\boldsymbol{R}_1 + \boldsymbol{R}_2}{2} \qquad \boldsymbol{P}_2 = \frac{3 \cdot \boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{R}_2}{2} \qquad \mathrm{P}_3 = \frac{-\boldsymbol{R}_1 + 3 \cdot \boldsymbol{R}_2}{2}$$

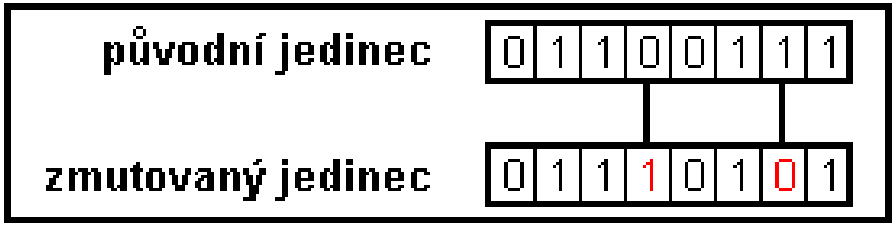
Mutace

jedinec = ***mutace*** (jedinec);

- dochází k ní zřídka
- změna genu „ladící“ konečnou kvalitu
- dělení na 2 typy podle typu kódování chromozomu

Mutace – binární kódování

- binární kódování



Mutace – reálné kódování

- změna o předem danou hodnotu, o náhodnou hodnotu
- nahrazení náhodným číslem z daného intervalu
- dynamická mutace (Michalewicz), mění svou velikost v čase

- x_i je původní hodnota genu před mutací
- x_i* je nová hodnota zmutovaného genu
- *XMAX* je maximální možná hodnota x_i
- *XMIN* je minimální možná hodnota x_i
- T je maximální počet generací
- r je náhodné číslo z intervalu (0;1)
- *B (=5)* je parametr nelinearity mutace
- *t* index generace (maximálně T)

$$x_i^* = \begin{cases} x_i + \Delta(t, X_{MAX} - x_i) \\ nebo \\ x_i + \Delta(t, x_i - X_{MIN}) \end{cases}$$

$$\Delta(t, y) = y\left(1 - r^{\left(1-\frac{t}{T}\right)^B}\right)$$

Problém opuštění definičního oboru

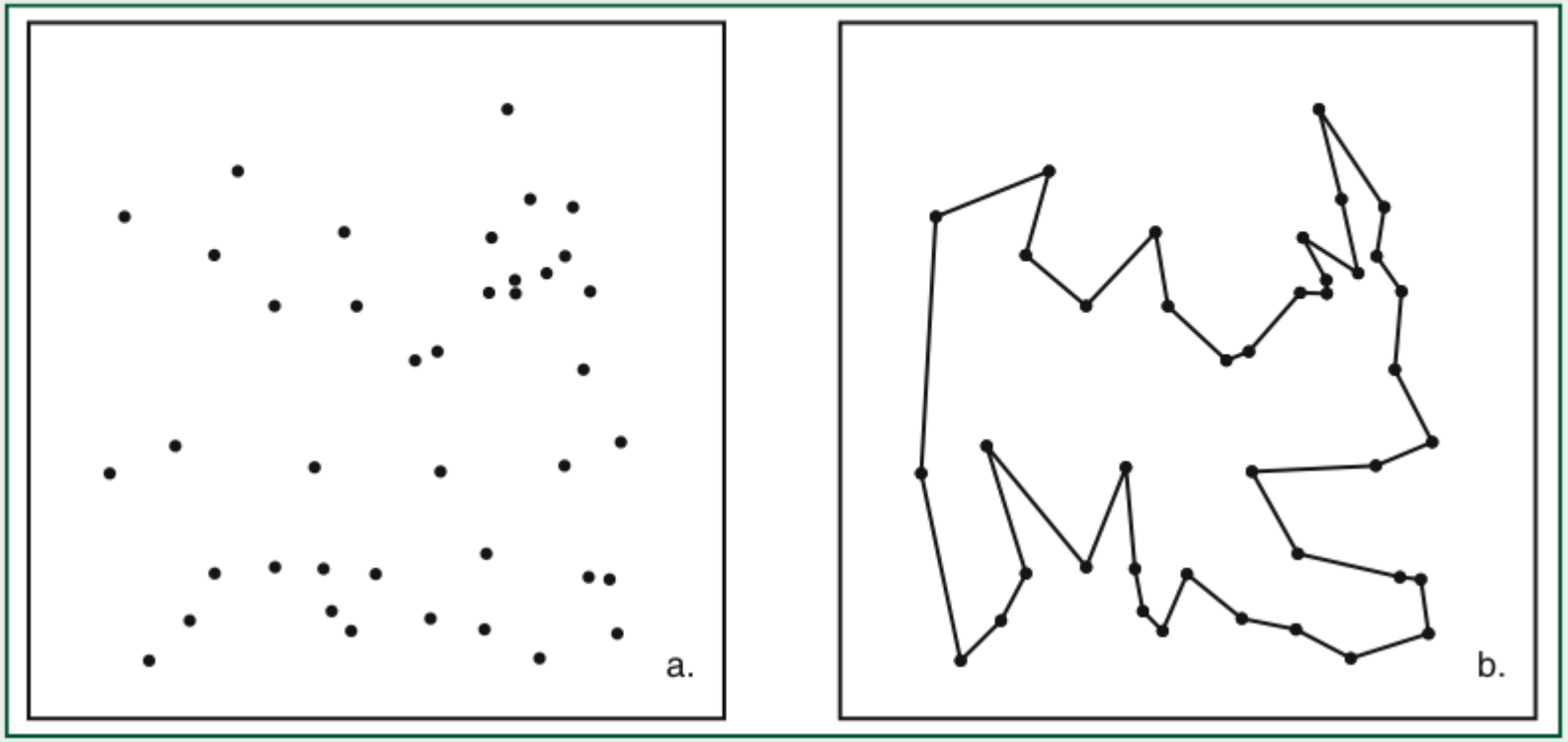
- nový jedinec je mimo definiční obor
  - vygenerování nové náhodné hodnoty (doporučovaný postup)
  - zaokrouhlení na mezní hodnotu (riziko stagnace)
  - odečtení o velikost přetečení (nutno ošetřit riziko opětovného překročení meze z druhé strany)

Permutační úlohy

- Existují úlohy, jejichž cílem je dosáhnout optimálního **uspořádání *N* prvků** na základě nějaké metriky definující vzdálenost mezi dvěma libovolnými prvky.
- Typickou úlohou je **problém obchodního cestujícího** (TSP – traveling salesman problem), cílem je najít v mapě měst co nejkratší trasu začínající a končící ve stejném městě a procházejícím každým dalším městem právě jednou.
- Jedná se o **NP-těžkou** úlohu (not polynomial).
- Počet možných způsobů jak města projít určuje počet **variací bez opakování ze všech *N* prvků = permutace,** při *N* městech existuje (*N*-1)! různých cest.
- Pro tento typ **permutačních úloh** je třeba upravit implementaci křížení i mutace oproti variačním úlohám.

Permutační úlohy - TSP

Figure 1.
Example 40-node TSP (a) and path-following (b) arrays.



http://www.i-cherubini.it/mauro/blog/wp-content/uploads/2007/08/images/Dry_TSP_experiment.png

Permutační křížení - některé algoritmy

- Partially Mapped Crossover (PMX) [Goldberg, 1985]
- **Order Crossover (OX) [Davis, 1985]**
- Edge Crossover (EX) [Whitley, 1989]
- Subtour Exchange Crossover (SXX) [Yamamura, 1992]
- Edge Exchange Crossover (EXX) [Maekawa, 1996]
- Edge Assembly Crossover (EAX) [Nagata, 1997]
- Partition Crossover (PX) [Whitley, 2009]
- Order Based Crossover (OBX)
- **Edge Recombination Crossover (ERX)**
- **Cycle Crossover (CX)**
- Maximal Preservative Crossover (MPX)
- Alternating-Position Crossover (APX)
- Position Based Crossover (PBX)
- Adaptive Goal Guided Recombination (AGGX) [Gog, 2006]
- Best-Worst Recombination (BWX) [Gog, 2007]
- Best Order Crossover (BOX)

Křížení s rekombinací hran (ERX)

- mějme sekvence měst:
  1-2-3-4-5-6 a 5-6-3-1-4-2
- to tabulky vypíšu každému městu sousedy v rodičích
- potomek vytvořen postupným výběrem prvků, které mají **nejméně sousedů**
- po výběru každého prvku jej smažu v tabulce měst i sousedů
- potomek např. 5-6-1-2-3-4

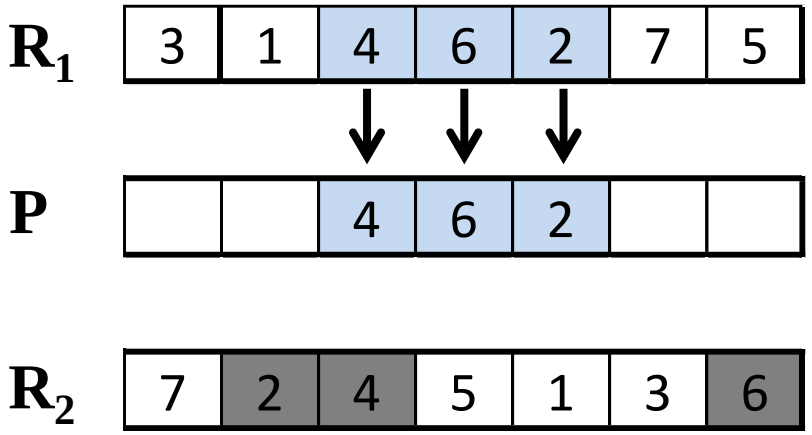
Město	Sousedé	Město	Sousedé
1	2,3,4,6	4	1,2,3,5
2	1,3,4,5	5	2,4,6
3	1,2,4,6	6	1,3,5

Město	Sousedé	Město	Sousedé
1	2,3,4,6	4	1,2,3
2	1,3,4	6	1,3
3	1,2,4,6		

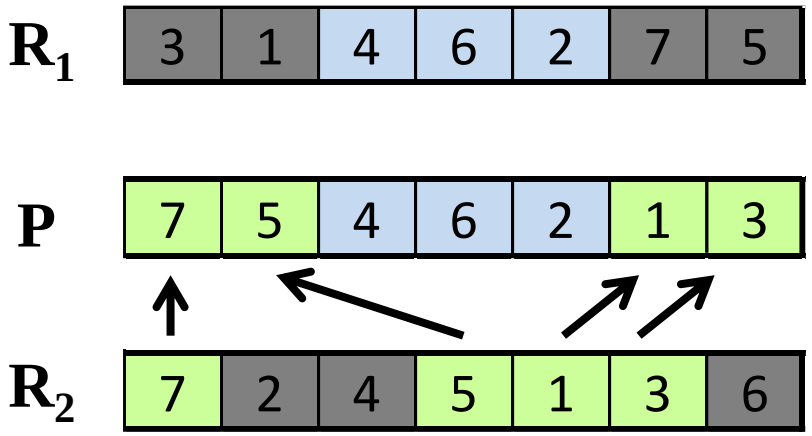
Město	Sousedé	Město	Sousedé
1	2,3,4	3	1,2,4
2	1,3,4	4	1,2,3

Order Crossover (OX)

- Vyber v prvním rodiči $\mathbf{R_1}$ libovolný podřetězec a zkopíruj jej do potomka **P**.
- Ve rodiči $\mathbf{R_2}$ tyto uzly odstraň (již jsou použity).

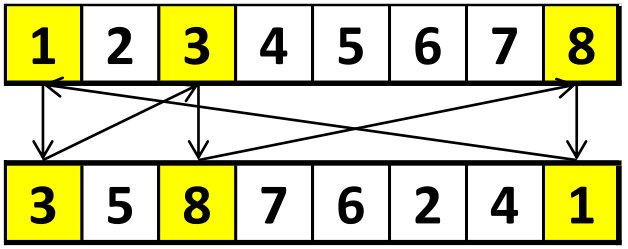


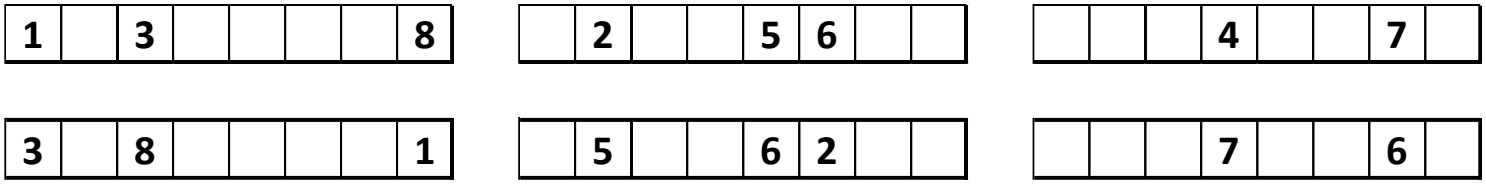
- Ze druhého rodiče $\mathbf{R_2}$ kopíruj do volných míst potomka **P** zbývající uzly v pořadí, v jakém se ve druhém rodiči vyskytují.



Cycle Crossover (CX)

- Najdi v rodičích vzájemné cykly (žlutě označen 1. cyklus)
- Níže cykly 1., 2. a 3.





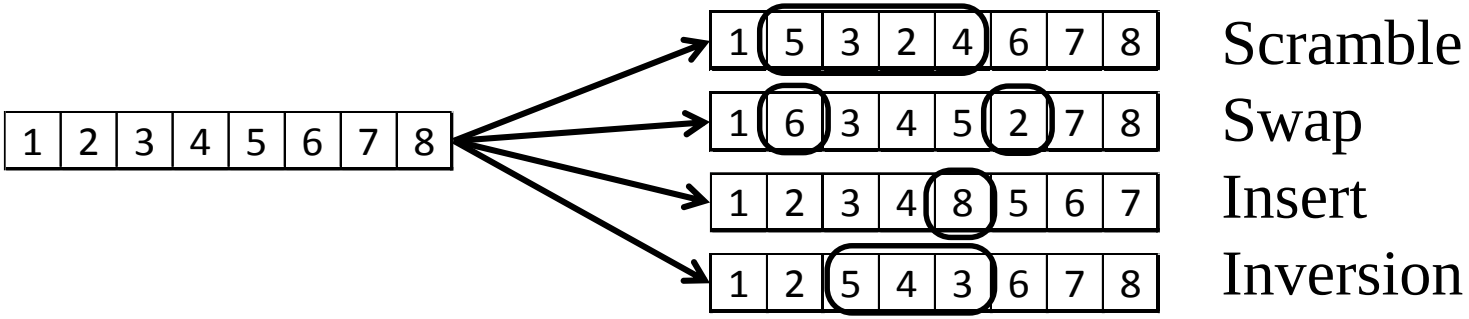
- Do prvního potomka zahrň liché cykly (1., 3., …) z prvního a sudé z druhého rodiče, u druhého potomka postupuj obráceně.

1	5	3	4	6	2	7	8

3	2	8	7	5	6	4	1

Mutace – permutační úloha

- **Swap mutation**
  - prohození dvou náhodně vybraných prvků
- **Insert mutation**
  - Jsou náhodně vybrány 2 prvky, druhý prvek umístěn za první
- **Inversion mutation**
  - V náhodné sekvenci a je změněno pořadí prvků
- **Scramble mutation**
  - V náhodné sekvenci je náhodně změněno pořadí prvků



Selekce

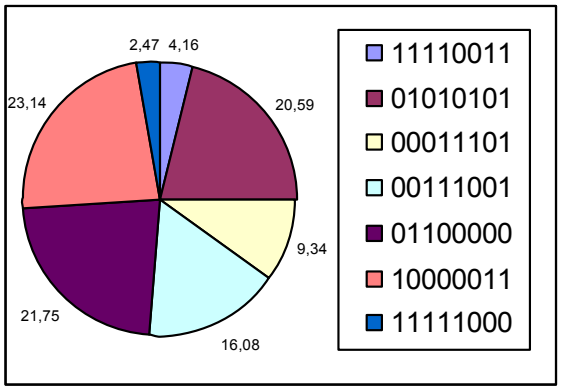
rodiče_generace_N = ***selekce*** (generace[N-1]);

- na základě selekce jsou vybráni jedinci, kteří se stanou rodiči
- 3 základní typy selekce
  - vážená ruleta
  - poziční selekce
  - metoda TURNAJ

? *Uveďte tři základní typy selekce.*

Selekce – 3 typy

- vážená ruleta
  - lokální extrém



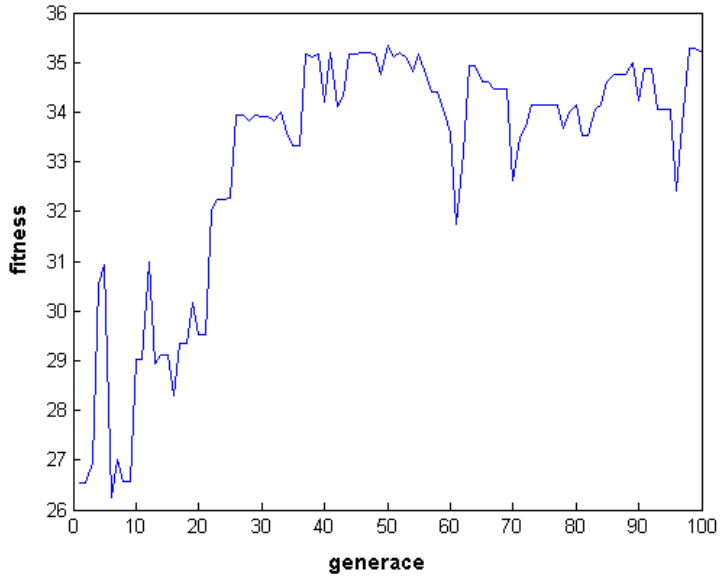
JEDINEC								KVALITA
0	0	1	1	1	0	0	1	6,943
0	1	0	1	0	1	0	1	8,889
0	0	0	1	1	1	0	1	4,031
0	1	1	0	0	0	0	0	9,389
1	0	0	0	0	0	1	1	9,992
1	1	1	1	1	0	0	0	1,067
0	1	1	0	0	0	0	0	9,389

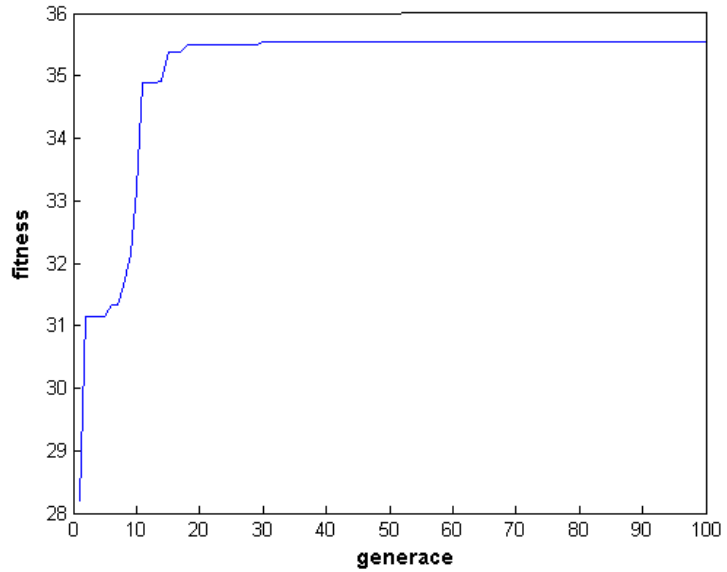
- poziční selekce
  - modifikace rulety, práce s pořadím (ordinalita)
- metoda TURNAJ
  - Vyber náhodně *k* jedinců (např. 3) s pravděpod. *p* (např. 0,8) vyber nejlepšího, s pravděpod. *p*(1-*p*) druhého nejlepšího až po *k*-1 (poslední z *k*-tice má *p* rovnu doplňku součtu předešlých pravděpodobností do 1).

Elitismus

jedinci[] = ***elitismus*** (generace);

- nejlepší jedinec/jedinci nepodstupují selekci





VIS: ? *Vysvětli PRICNIP a SMYSL elitismu.*

Fitness

kvalita = ***fitness*** (jedinec)

- hodnoticí funkce, funkce vhodnosti, kriteriální funkce, účelová funkce, cílová funkce
- hledání maxima – fitness je samotná funkce
- může být i záporná
- hledání minima (přímo MNČ, ML)

Parametry GA I.

- volba kódování *(reál.č. binárně, přesnost)*
- velikost počáteční populace *(lok.extr.,rychlost)*
- volba hodnoticí funkce *(LF, finance/čas)*
- typ selekce *(v.r.-rychlá,lok.extr., různé)*
- typ křížení *(1-2 body, reálné 2. a 3. metoda)*
- pravděpodobnost křížení *(uváděno 0,6 – 1, spíše větší hodnota)*

Parametry GA II.

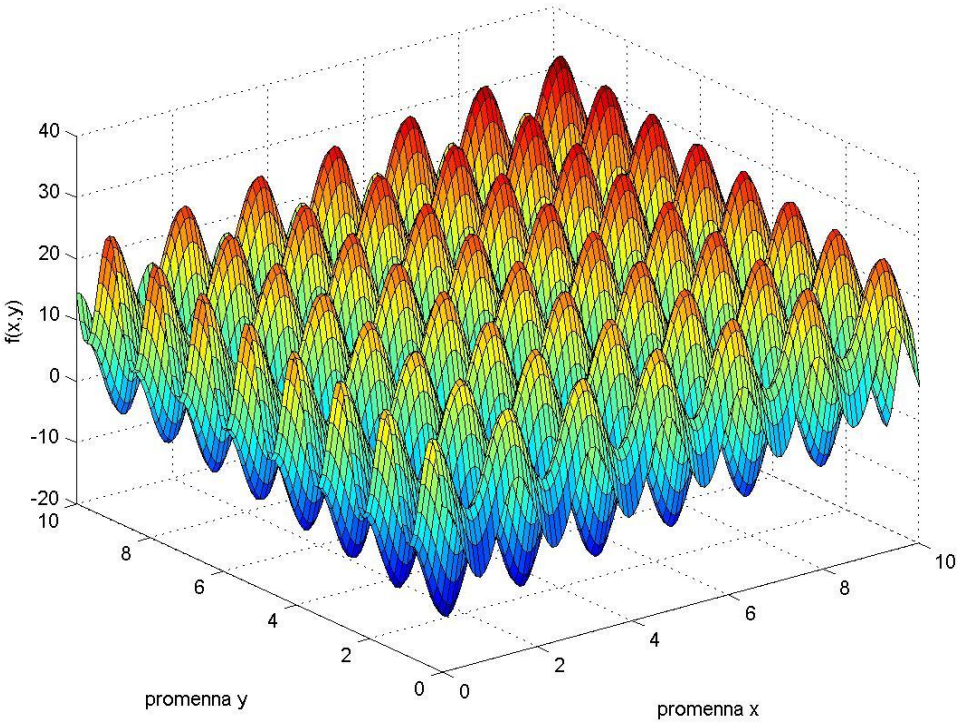
- typ mutace *(u reálného kódování dynamická)*
- pravděpodobnost mutace *(bin. 0,001–0,15; reálné kódování 0,01 – 0,5)*
- ukončovací podmínka *(počet generací, nejlepší jedinec stejný po K generací)*

Příklad - zadání

$$f(x,y) = x + (10 \cdot \sin(5 \cdot x)) + (7 \cdot \cos(4 \cdot y)) + y$$

$$x \in \langle 0,10 \rangle$$

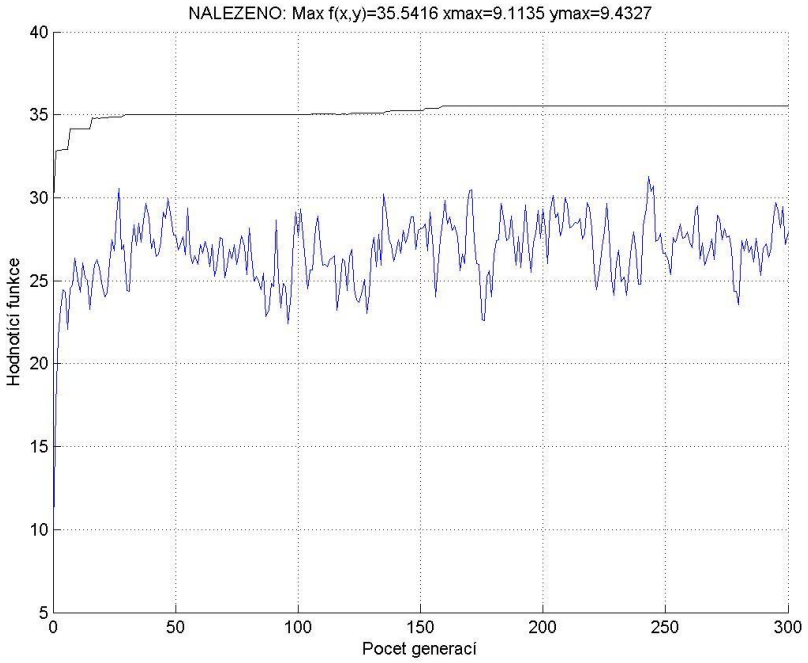
$$y \in \langle 0,10 \rangle$$

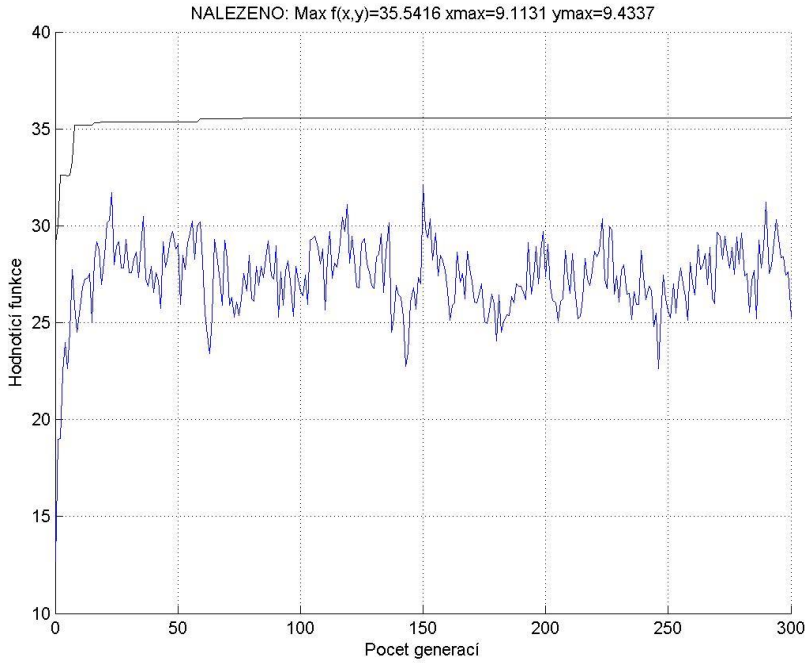


Příklad – zvolené parametry

	Binární kódování	Reálné kódování
Velikost počáteční populace	25	25
Elitismus	Ano	Ano
Typ selekce	Vážená ruleta	Vážená ruleta
Typ křížení	Jednobodové	Vnitřní soutěž
Pravděpodobnost křížení	0,95	0,95
Typ mutace	-	Z intervalu (–0,005;0,005)
Pravděpodobnost mutace	0,05	0,56
Ukončovací podmínka	Počet generací: 300	Počet generací: 300

Příklad – výsledek





Shrnutí GA

- GA vycházejí z **evolučního počítání**, které je součástí umělé inteligence. Hlavní myšlenka má kořeny v Darwinově teorii o přirozeném vývoji na základě schopnosti **adaptace**. Podobně jako u biologický předloh jsou vlastnosti jedinců **kódovány** do **genů**, jejichž soubor vytváří **chromozom** jedince. Kódování rozlišujeme **binární** a **kódování do reálných čísel**.
- Na počátku aplikace řešící problém pomocí GA je vytvořena nultá **generace**. Následuje cyklus, ve kterém je spočtena všem jedincům velikost jejich **hodnoticí funkce** (**fitness**); následuje **selekce**, na jejímž základě jsou vybráni **rodiče;** operandy **křížení** a **mutace** pak dávají vzniknout novým **potomkům**; pokud nová generace splňuje **ukončovací podmínky**, je cyklus ukončen, jinak se opět vrací na svůj začátek.
- Existuje řada typů genetických operátorů. Jejich správná volba a nastavení zásadně ovlivňují kvalitu konečného výsledku. Velký počet možných nastavení, z nichž jen některá vedou k řešení, představuje hlavní problém při použití GA. Přesto v praxi existuje řada jejich úspěšných aplikací.

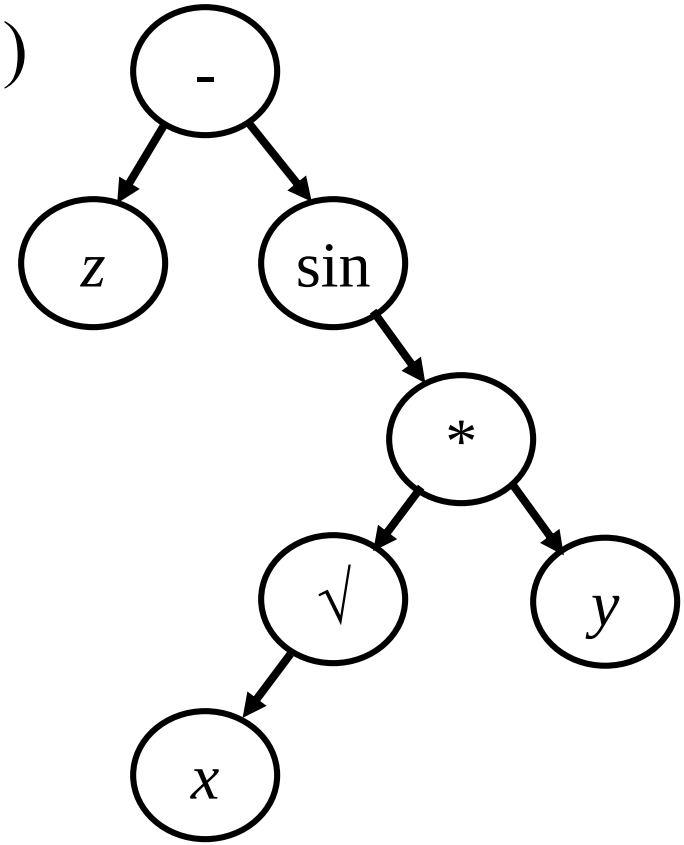
Genetické programování (GP)

- GP – kódování nejen parametrů, ale i struktury modelu (typicky do stromových struktur)
  - Uzly – funkce (*operátory*)
  - Listy – proměnné, konstanty (*operandy*)
- Vhodná volba kódování klíčová (vhodná volba operátorů, operandů)
- Existuje řada kódování pro různé typy problémů (algebraické výrazy, algoritmy,…)

Jaký je rozdíl mezi genetickým programováním a genetickým algoritmem?

Ideový příklad kódování

- Operátory (unární, binární, …)
  - typ I: + - * / ^ , … *(01234)*
  - typ II: sin, √, …*(56)*
- Operandy
  - x,y,z,…*(789)*
- Kódování (prefixový zápis)
  - 1 9 5 2 6 7 8
  - - z sin * √ *x y*
  - -(z,sin(*(√(*x*),*y*)))

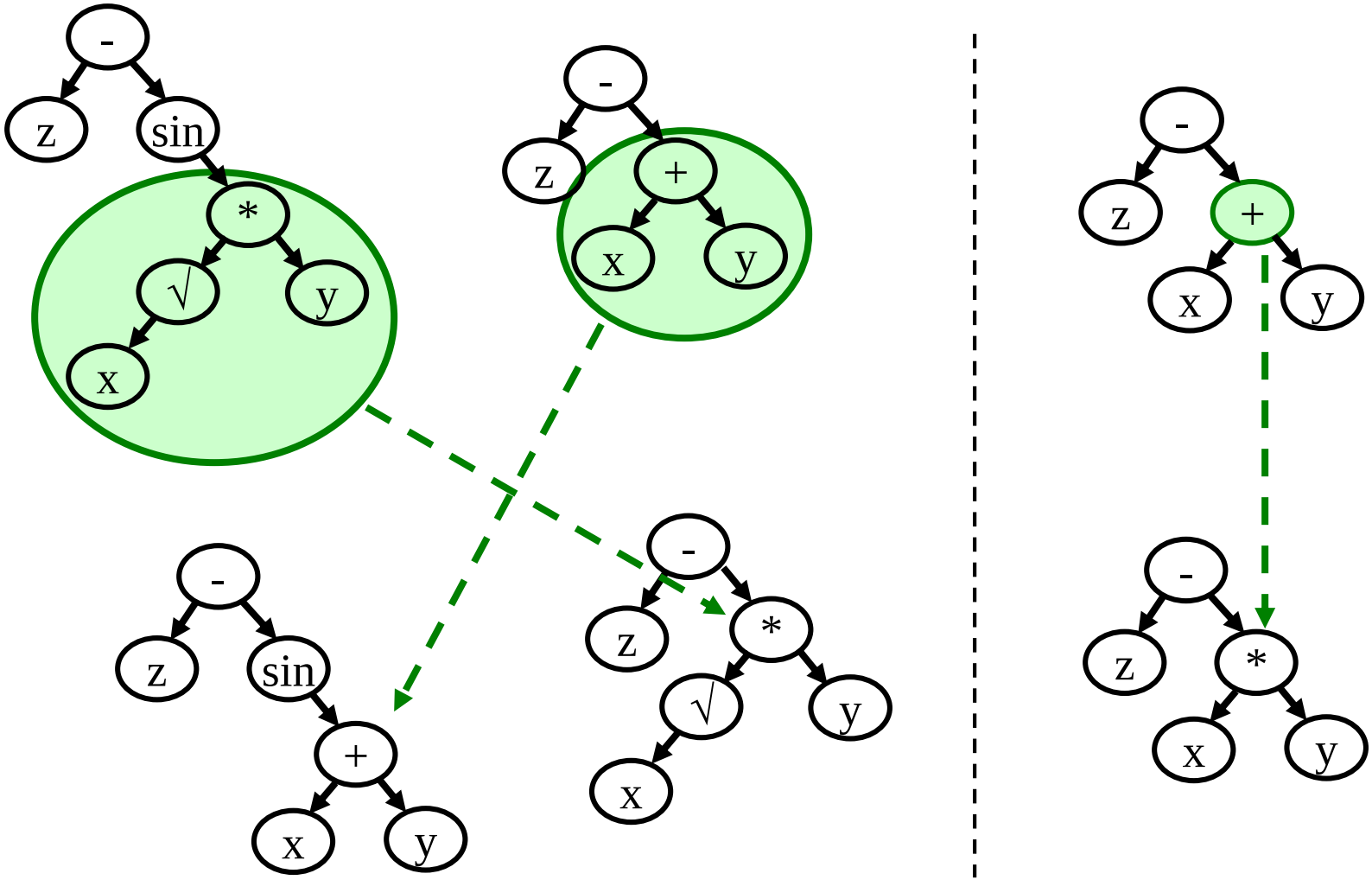


Př.: převeď posloupnost 30574986278 do algebraického výrazu

Při zadaném kódování přepište číselný výraz do stromové struktury

Vyjádřete formou stromové struktury a prefixového zápisu z(x+y) a z*x+y*

Křížení, mutace



Doporučená literatura

[1] Honzík, P.: *Strojové učení*, elektronická skripta VUT.

[2] Mitchell, T.: *Machine Learning*. MacGraw Hill Science, 1997.

[3] Hastie T.et.al.: *The Elements of Statistical Learning*. Springer, 2001.

[4] Mařík, V. a kol.: *Umělá inteligence 4*, 2003.

[5] …nepřeberné množství materiálů na internetu…