Evolúciós algoritmusok

Sáfár Orsolya

2019 tavasz

Tárgykövetelmények

- Páratlan héten előadás, páros héten labor, jelenlét kötelező
- Jegyet az otthon elkészített házi feladatokra kapnak
- Hetente van házi, a félév alatt három nagyobb témából
- Összesen 12 házi, egy alkalommal legfeljebb 10 pontért
- Emailben kell elküldeni az evolalghf@gmail.com címre
- Témánként 12 pontot kell elérni
- A ponthatárok: 40, 50, 60, 70.

Motiváció

Optimalizálási feladat: adott potenciális megoldások halmazából válasszuk ki „belátható időn belül” a legjobbat vagy legjobbakat. Példák:

1. Keressük optimális útvonalat egy gyalogtúrához
2. Készítsünk órarendet (az egész egyetemnek)
3. Találjunk legjobb útvonalat egy robotkarnak
4. Keressünk jó stratégiát amőbában/bridzsben/sakkban

Futásidő jellemzése

Legyen a bemenet hossza $n \in \mathbb{N}$. Az mondjuk, hogy az algoritmus $\mathbf{O}(f(n))$ futásidejű, ha $f(n)$-nek valamely (n-től független) konstansszorosával felülről becsülhető a futás közben végzett elemi műveletek száma.

Egy algoritmus polinomidejű, ha $\mathbf{O}(n^k)$ futásidejű valamely $k \in \mathbb{N}$-re, exponenciális futásidejű ha $\mathbf{O}(a^n)$ valamely $a > 1$-re.

Példák futásidőre

Egy n elemszámú, rendezhető elemekből (pl. számok, nevek, dátumok...) álló tömb elemeit szeretnék növekvő sorrendbe rendezni.

Kiválasztásos rendezés: Egy pointerrel lépkedek jobbra. A pointertől balra eső elemek már rendezettek, a jobbra esők még nem.

Minden körben kiválasztom a még rendezetlen tömb legkisebb elemét, majd helyére illesztem. A következő körben a maradék, eggyel rövidebb rendezetlen tömbben keresem a minimumot.

Ekkor az $n - i$. körben $i - 1$ összehasonlítást végzek, és legfeljebb egy cserét, így a lépésszám $\sum_{i=1}^{n} i = \frac{n(n+1)}{2}$, azaz ez rendezés $\mathbf{O}(n^2)$ futásidejű.

Példák futásidőre

Összefésüléses rendezés:
Egy lépésben kettéválasztjuk a listát, a két részlistát rendezzük valahogy (pl rekurzívan), majd a rendezett részlistát összefésüljük.

A futásidő így n_1, n_2 elemszámú bontás esetén, ha egy n elemszámú listára $T(n)$-el jelöljük a szükséges lépésszámot :

- az összefésülés $n_1 + n_2$ összehasonlítás,
- résztömb rendezése $T(n_1) + T(n_2)$ lépés

Mivel T(1)=0 és $T(n) \leq n + 2 \cdot T\left(\frac{n}{2}\right)$, így

$$T(n) \leq n + 2\frac{n}{2} + \cdot + 2^{k-1} T\left(\frac{n}{2^{k-1}}\right) \leq n[\log_2 n]$$

Így az összefésülés $\mathbf{O}(n \log n)$ futásidejű rendezés.

Lépésszám becslése

Tegyük fel, hogy egy program futásideje $\mathbf{O}(n^k)$ valamilyen ismeretlen k kitevővel.

Célunk, hogy a futásidők ismeretében adjunk jó becslést a kitevőre. Ebben az esetben két ismeretlen van: a k kitevő és konstans szorzó, és annyi egyenlet ahány mérést végeztünk a futásidőre. Sajnos a probléma túlhatározott, tipikusan nincs a klasszikus értelemben vett megoldása.

Jelöljük $T(n)$-el az n hosszú bemenetre az algoritmus lépésszámát. Ekkor $T(n) = cn^k$,a logaritmus azonosságai miatt

$$\log(T(n)) = \log c + k \log(n).$$

Ha a futásidő logaritmusát $\log(n)$ függvényeként ábrázoljuk (ezt nevezik log-log skálának), akkor megközelítőleg egy egyenest kapunk, amelynek meredeksége az ismeretlen kitevő. Ezzel ellentéteben az exponenciális futásidejű algoritmus a log-log skálán is exponenciális függvényként ábrázolódik.

A brute force

A brute force az összes eset ellenőrzését jelenti véges sok potenciális megoldás esetén. Ez természetesen nem lehetséges folytonos optimalizálási feladatoknál.

Általában egyszerű megvalósítani az ilyen algoritmust, de bizonyos esetekben a futásidő a probléma méretével elfogadhatatlanul megnő.

Kis méretű problémáknál nem biztos, hogy megéri mást megvalósítani.

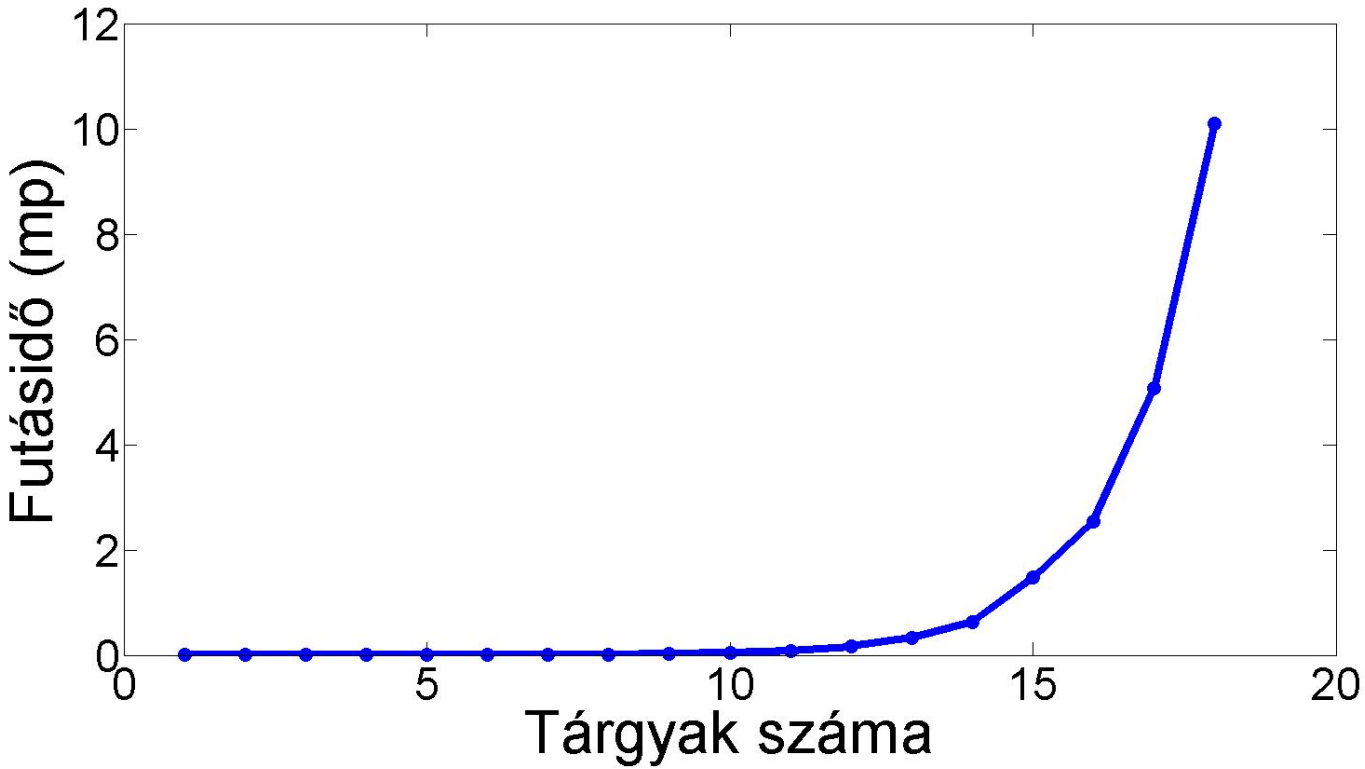
A hátizsákpakolás

Adott n darab tárgy, mindegyiknek ismert a súlya $\mathbf{s} = (s_1, s_2, \ldots, s_n)$ és az értéke $\mathbf{v} = (v_1, v_2, \ldots, v_n)$. Célunk, hogy egy ismert $C \in \mathbb{R}^+$ teherbírású hátizsákba minél nagyobb összértékű tárgyakat pakoljunk be.

Mivel minden egyes tárgy vagy bekerül vagy nem, ezért összesen 2^n féle pakolás lehetséges. A brute force megoldás az összeset végignézi, ez exponenciálisnál is rosszabb futásidőt jelent.

Ha n nagy akkor keresnünk kell jobb megoldást. Létezik egy dinamikus programozást alkalmazó eljárás, amellyel polinomidőben megoldható a feladat, ha a súlyok egészek. A mi esetünkben azonban más megoldást kell keresnünk, ezért ezen a feladaton keresztül megismerkedünk az evolúciós algoritmusokkal.

Futásidő brute force megvalósításra



Biológiai párhuzam

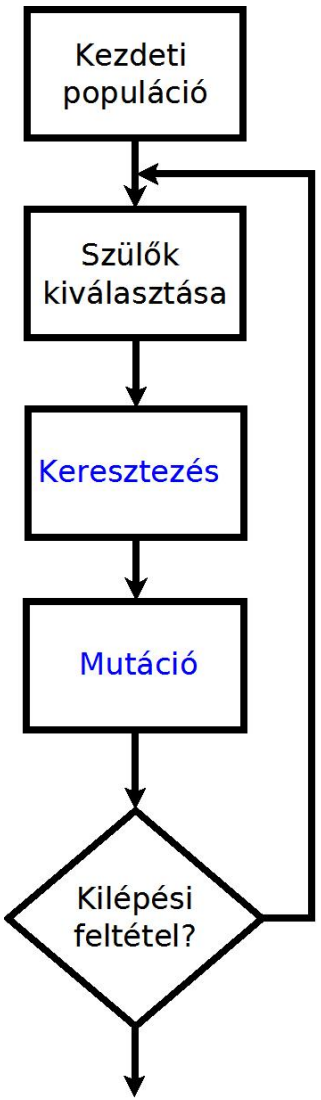
Az evolúciós algoritmus egy olyan, véletlent is felhasználó optimumkereső eljárás, amely a darwini evolúció működését utánozza. A potenciális megoldások egy multihalmazából (populáció) újabb megoldásokat készítünk (szaporodás), ahol az új egyedek (utódok) hasonlítanak a régiekre (szülők). Az evolúcióra pedig azért hasonlít, mert annak az egyednek lesz több utóda, aki maga jó minőségű megoldás.

Környezet	Probléma
Egyed	Potenciális megoldás
Populáció	Megoldások egy multihalmaza
Fitnesz	A megoldás minősége
Genom	A megoldások reprezentációja

Hátizsák pakolás genetikus algoritmussal

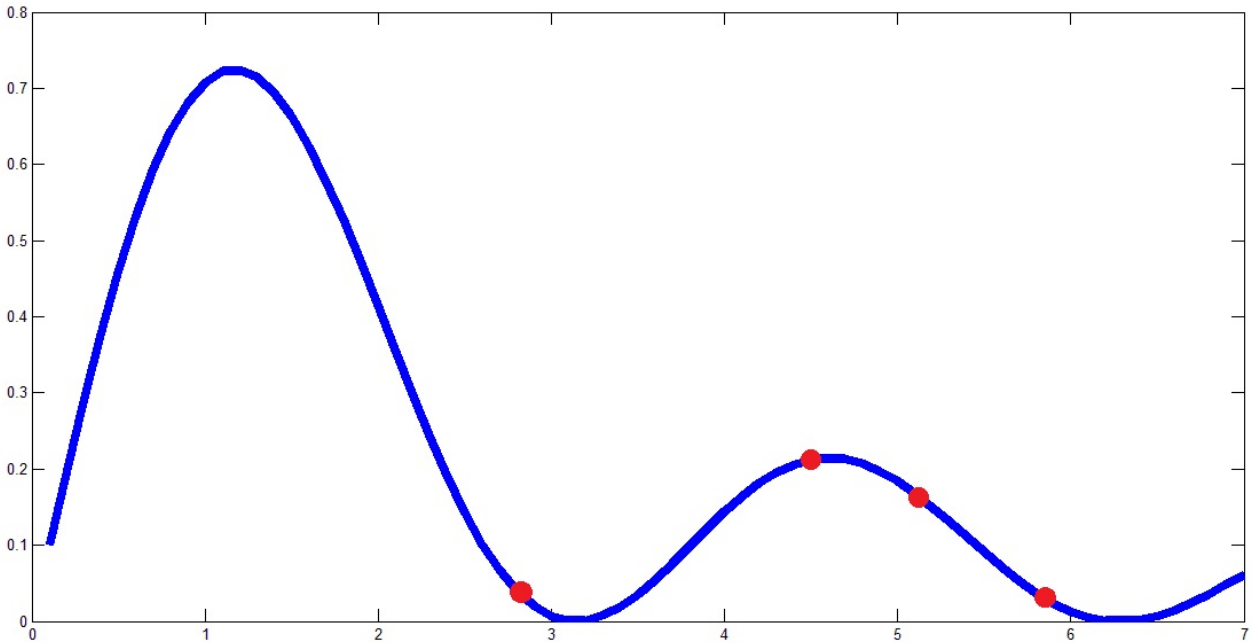
- Reprezentáció: egy n hosszú $0-1$ sorozat. Ha az i. pozícióba 0-t írunk, akkor azon tárgy nem kerül be a hátizsákba, ha 1-et, akkor bekerül
- Fitnesz: a bekerült tárgyak összértéke, ha a súlykorlát alatt vagyok, nulla egyébként. Cél ennek a maximalizálása
- Egyed: egy lehetséges pakolás
- Populáció: lehetséges pakolások egy részhalmaza, ismétlődés előfordulhat köztük
- Genotípus: az egyedet leíró $0-1$ sorozat
- Fenotípus: egy konkrét pakolás

Az általános séma



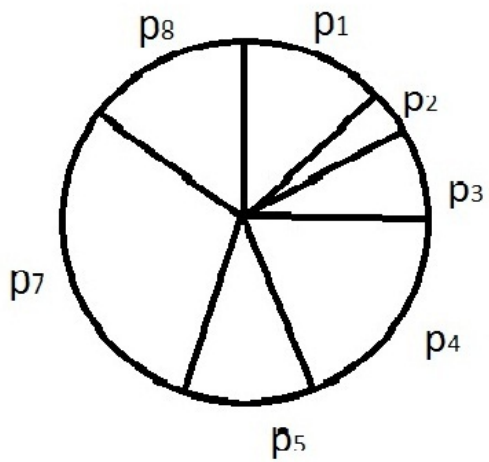
Szülők kiválasztása

A jó minőségű, azaz magas fitneszű megoldáskát választjuk ki a következő generáció számára. Fontos, hogy a rossz minőségű megoldások is kapjanak egy kicsi, de pozitív esélyt, hogy megakadályozzuk a lokális optimumba beleragadást. Azaz fenntartjuk a populáció diverzitását.



Rulettkerék módszer (Fitnesz-arányos kiválasztás)

Tegyük fel, hogy az adott populáció egyedeinek fitnesze sorra $f_1, f_2, \ldots, f_k \geq 0$. Ebből készítünk egy valószínűség eloszlást, úgy hogy a fitnesz vektort normáljuk, hogy az elemeinek összege 1 legyen, így kapjuk a $p_1, p_2, \ldots, p_k$ valószínűségeket.



Majd kiválasztunk egymástól függetlenül k darab egyedet (szülőt), úgy, hogy a i. egyed p_i eséllyel lesz kiválasztva minden körben.

Problémák a rulettkerék kiválasztással

- Egy kimagasló megoldás túl gyorsan elterjedhet, így az eljárás beleragad a lokális optimumba
- Az eljárás végén kicsi a különbség az egyedek között, így nagyon lelassul a konvergencia
- A kiválasztott egyedek elfordulása nagyon eltérhet az elméleti valószínűségtől
- Nagy hatással van az eljárás konvergenciájára a fitneszfüggvény alakja, például egy konstans hozzáadása.

Az első két probléma megoldására skálázást alkalmazhatunk.

Skálázás

A fitneszarányos kiválasztásnál problémákat vet fel az optimális skálázás megtalálása, hogy fenntartsuk a megfelelő szelekciós nyomást a konvergencia lassuló fázisában.

A különbségek növelésére alkalmazhatunk x^n illetve $\exp(x)$ jellegű skálázást, a fitneszértékek különbségét csökkenthetjük $\ln(x)$ illetve $\sqrt{x}$ típusú skálázófüggvénnyel.

Ugyanakkor ami az eljárás elején segít fenntartani a populáció diverzitását, az a végén lassítja a konvergenciát. Így a skálázást a futásidő közben kellene változtatni.

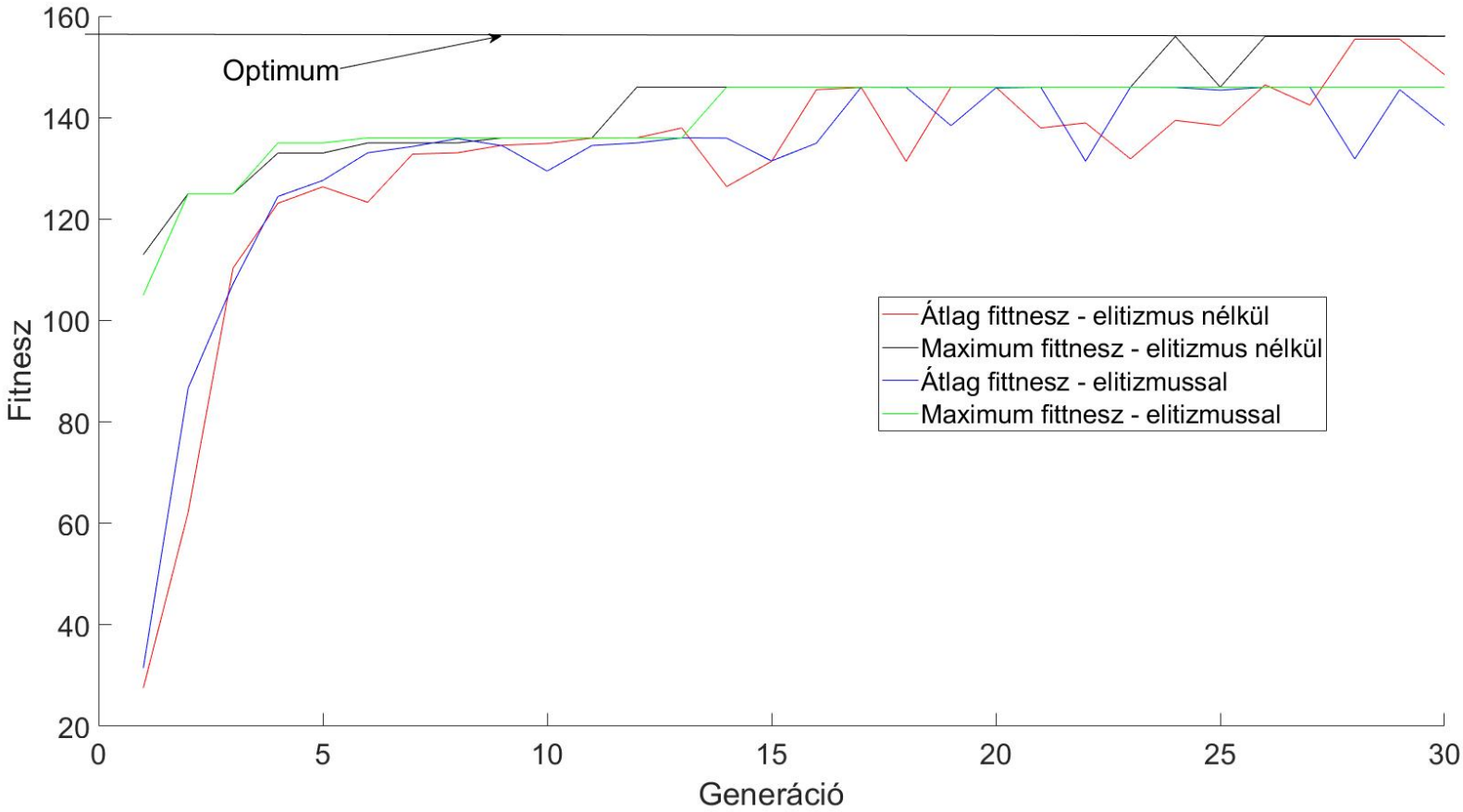
Elitizmus

Hiába találja meg akár az optimális megoldást az algoritmus, mégis idővel csökkenhet a megoldások minősége.

Ennek a jelenségnek a kiküszöbölésére alkalmazhatjuk az elitizmust (elitism), ami azt jelenti, hogy az adott generáció legmagasabb fitneszű egyede változtatás nélkül átkerül a következő generációba (egyetlen példányban).

Ez az elit megoldás helyettesíthet egy véletlenszerűen kiválasztott utódot, vagy a legkisebb fitneszűt. Az elitizmus garantálja, hogy a következő generációban a legjobb fitneszű egyed fitnesze sohasem csökken, viszont használata növeli a korai konvergencia veszélyét.

Elitizmus hatása



Tournament kiválasztás

Egy másik lehetséges megoldás a szülők kiválasztására a tournament kiválasztás. Ekkor úgy választjuk ki a szülőket, hogy kiveszünk néhány (mondjuk k darab) egyedet a populációból véletlenszerűen, majd közülük a legjobb lesz a szülő. Ezt az eljárást megismételjük annyiszor, ahány szülőre szükség van.

Ha k értéke nagy, akkor kisebb eséllyel kerül a szülők közé alacsony fitneszű egyed, ezért ez a k érték egyben a genetikus algoritmus egy bemenő paramétere, mellyel a szelekciós nyomás szabályozható. Ezen paraméter akár futás közben is változtatható (a lassuló konvergencia gyorsítására növeljük k értékét).

Genetikus operátorok

A kiválasztott szülőkből hozzuk létre az utódokat. Első lépésben néhány kiválasztott szülőt keresztezünk. A keresztezés lehet

- egypontos kiválasztunk egy pozíciót, mindkét szülőt félbetörjük ott, majd a darabokat keresztben összeragasztjuk pl 11100 és 00011 utódai a 2 pocizóban törve: 11011 és 00100
- többpontos hasonló az egypontoshoz, de több helyen törünk
- uniform minden pozícióban $\frac{1}{2}$ eséllyel döntünk az egyik vagy a másik szülő génje mellett

A keresztezés célja, hogy a magas fitneszű egyedek tovább örökítsék a jó tulajdonságaikat. Ehhez szükséges a problémát jól kódolni.

A mutáció

A mutáció célja a keresési tér felderítése és a megoldások lokális optimumba ragadásának megakadályozása. Viszont, ha túl erős a hatása, akkor tönkreteszi a konvergenciát. Az optimális paraméter megtalálása ezért fontos feladat.

Ökölszabály a mutáció valószínűségére: általában egy gén/generáció és egy egyed/generáció között legyen a mutációk számának várható értéke.

Példánkban megfelel mutáció operátornak az, hogy az egyed $0-1$ sorozatának egy véletlen pozíciójában kicserélem az értéket valamekkora eséllyel.

Kilépési feltétel

A legegyszerűbb kilépési feltétel, hogy lefuttatunk előre adott számú generációt, majd az összes addigi generáció legmagasabb fitneszű egyede lesz a tippünk a globális optimumra.

A későbbiekben lesz szó ennél összetettebb feltételekről is, például megfigyelhetjük az eljárás konvergenciáját, majd ez alapján döntünk a kilépésről.