H adanie globálneho extrému reálnej funkcie reálnej premennej pomocou genetického algoritmu

Tomáš Kaláb, FMFI UK

Tomas.Kalab@st.fmph.uniba.sk

Genetický algoritmus

Genetický algoritmus je jednou z metód na riešenie optimaliza ných úloh. Pomocou genetického algoritmu je asto možné rieši problémy, ktoré sú analiticky neriešite né, alebo je ich riešenie príliš náro né na výpo tový as. Existujú úspešné približné riešenie NP úplných problémov využívajúce práve genetický algoritmus (napríklad problém obchodného cestujúceho). Pri vhodnej vo be parametrov dokáže genetický algoritmus v mnohých prípadoch nájs riešenie blízke optimálnemu za cenu omnoho menšiu než akú vyžaduje exaktné riešenie. Použitie genetického algoritmu však nezaru uje nájdenie optimálneho riešenia, nezaru uje dokonca vôbec nájdenie nejakého riešenia. Výsledok práce genetického algoritmu je závislý od náhody. Riešenie je dosiahnuté len s ur itou pravdepodobnos ou, menšou ako 1. Preto je genetický algoritmu zaradený do triedy pravdepodobnostných algoritmov.

Myšlienka genetických algoritmov je inšpirovaná darwinovskou evolúciou v prírode. Pozíciu jedincov v prírode tu zastávajú jednotlivé riešenia (resp. kandidáti na riešenie) problému. Evolu ným tlakom sú postupne slabé jedince (riešenia aleko od optima) eliminované, a naopak silnejším je poskytnutý priestor na alší vývoj. Vývoj jedinca nastáva prostredníctvom malých zmien. V prípade že zmena jedinca oslabí (riešenie sa zhorší), nový jedinec je eliminovaný evolu ným tlakom. V prípade že zmena povedie k vylepšeniu vlastností jedinca, má novovzniknutý jedinec vysokú pravdepodobnos zachovania a alšieho vývoja.

Základné pojmy

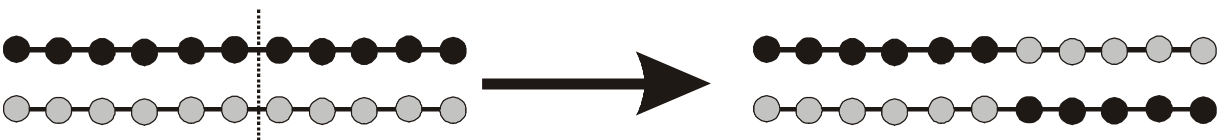
Pri použití genetického algoritmu je nutné zakódova potenciálne riešenia do štruktúr, ktoré umož ujú ahkú manipuláciu s informáciou o riešení. Takéto zakódované riešenie sa nazýva chromozóm. Konkrétny tvar chromozómu závisí od riešeného problému. Môže to by binárny vektor, re azec znakov nejakej abecedy, permutácia a podobne.

Významným rozdielom genetického algoritmu oproti iným približným riešeniam je to, že nepracuje s jediným riešením problému, ale s celou množinou N nezávislých riešení. Táto množina sa nazýva populácia chromozómov. Ve kos populácie je jedným z dôležitých parametrov na ktorom závisí úspešnos a rýchlos konvergencie algoritmu.

innos genetického algoritmu prebieha v diskrétnych etapách – generáciách. Prvá generácia je tvorená náhodne vygenerovanými chromozómami. Každá alšia generácia je vytváraná z chromozómov predchádzajúcej generácie. Chromozómy sa do novej (detskej) generácie môžu dosta jedným z nasledujúcich spôsobov:

1. Priamym prechodom z rodi ovskej generácie – chromozóm sa do detskej generácie priamo bezo zmeny skopíruje
2. Mutáciou –chromozóm je s malou zmenou skopírovaný z rodi ovskej generácie do detskej
3. Krížením **-** detský chromozóm vznikne ako kombinácia dvoch alebo viacej rodi ovských dhromozómov
4. Kombináciou kríženia a mutácie.

Konkrétny tvar operácií mutácie a kríženia závisí od tvaru chromozómu. Napríklad pri použití chromozómu tvaru binárneho vektora môže by operácia mutácie realizovaná zámenou hodnoty niektorého bitu vektora. Operácia kríženia dvoch chromozómov môže by v tomto prípade realizovaná napríklad tak, že po ur itú pozíciu i sa skopíruje obsah prvého rodi a a od tejto pozície obsah druhého, ím vznikne prvý potomok a zo zvyšných astí vznikne druhý. Pod a po tu pozícií na ktorých sa mení zdrojový chromozóm možno kríženie deli na jednobodové, dvojbodové, at . Mutácia alebo kríženie nastáva s dopredu zadanými pravdepodobnos ami. Tieto pravdepodobnosti sú alšími dôležitými parametrami, na ktorých závisí úspešnos algoritmu.



Obr 1: Príklad jednobodového kríženia

Výber rodi ovských chromozómov prebieha kvázináhodne. To znamená, že výber síce nieje deterministický a závisí od náhod, ale je vykonávaný tak, aby pravdepodobnos výberu úspešnejších jedincov bola vyššia ako menej úspešných. Aby bolo možné takýto výber vykona , musí by úspešnos jednotlivých chromozómov

vyjadrená takou formou, aby bolo možné jednotlivé chromozómy navzájom porovnáva . Túto úlohu plní takzvaná Fitness funkcia. Fitness funkcia je reálna funkcia definovaná na priestore chromozómov. Hodnota Fitness nejakého chromozómu vyjadruje ako dobrým riešením zadaného problému je tento chromozóm. Cie om genetického algoritmu je teda nájs chromozóm s maximálnou hodnotou Fitness funkcie.
Jedným z asto používaných operátorov výberu je algoritmus rulety (Roulette wheel). Názov je odvodený z predstavy, že sa obvod kolesa rulety rozdelí na N intervalov, pri om každý interval zodpovedá jednému chromozómu populácie. Ve kos intervalu je rovná hodnote Fitness príslušného chromozómu. Ke sa takáto pomyselná ruleta rozto í, pravdepodobnos že sa zastaví na ur itom chromozóme je priamo úmerná ve kosti intervalu prislúchajúceho k chromozómu, iže ve kosti Fitness. Výber ruletou teda preferuje výber silnejších jedincov pred slabšími.
Výpo et genetického algoritmu je ukon ený po splnení kritéria ukon enia. Kritériá ukon enia môžu ma rôzny tvar.
Jedným z najjednoduchších je napríklad dopredu pevne stanovený po et generácií. alšou možnos ou je zastavenie výpo tu v prípade ak sa najlepšie nájdené riešenie nezmení v priebehu stanoveného po tu generácií. V prípade že sa h adá riešenie ktoré má sp a nejaké dopredu stanovené podmienky, je možno ako kritérium ukon enia použi práve splnenie požadovaných podmienok.

Kódovanie reálnych ísel

Niektoré problému majú riešenie v tvare reálneho ísla z nejakého intervalu. Reálne íslo však nieje dobrou reprezentáciou chromozómu, pretože sa na reálnych íslach sa obtiažne definujú operátory mutácie a kríženia ktoré sú základom genetického algoritmu. Ako chromozóm sa ove a astejšie používa binárny vektor. Ke že je však problém definovaný nad reálnymi íslami, je nutné zadefinova transformáciu binárneho vektora na reálne íslo z intervalu <a,b>. Ke že binárnym vektorom d žky M je možné prirodzeným spôsobom kódova celé ísla z intervalu <0,2^M-1>, sta í na požadovanom intervale definova 2^M rovnomerne rozmiestených bodov, z ktorých každý je reprezentovaný celým íslom od 0 po 2^M-1. Transformácia binárneho vektora reprezentujúceho celé islo d na reálne íslo r bude vyzera nasledovne:

$$r = a + d\frac{b-a}{2^M - 1}$$

Problémom s ktorým je spojené takéto kódovanie je takzvaná Hammingova bariéra. Problém Hammingovej bariéry spo íva v tom, že niektoré ísla, ktoré na íselnej osi tesne susedia, majú v štandartnom binárnom kódovaní ve kú Hammingovu vzdialenos – inými slovami, líšia sa vo ve kom po te bitov. Pri použití v genetickom algoritme to znamená, že na prechod medzi takýmito dvoma íslami je nutný ve ký po et mutácií naraz, o kvôli malej pravdepodobnosti v praxi nenastáva (Tabu ka 1).

íslo	Štandartné kódovanie	Grayov kód
127	0001111111	0001000000
128	0010000000	0011000000
Hammingova vzdialenos :	8	1

Tabu ka 1: Príklad binárnej reprezentácie ísel v štandartnom binárnom kódovaní a Grayovom kóde

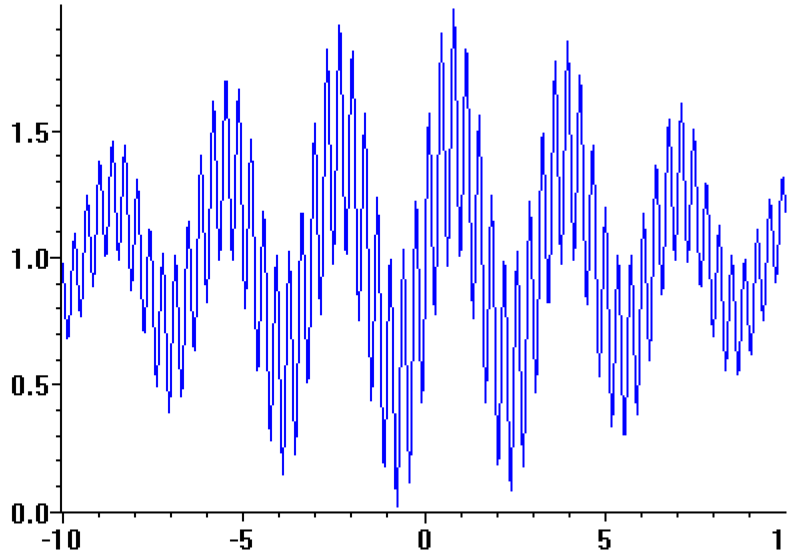
Riešením, ktoré problém Hammingovej bariéry eliminuje je použite Grayovho kódu. Grayov kód binárneho vektora je znovu binárny vektor rovnakej d žky. Neobsahuje však priamo bity pôvodného vektora ale na i-tom mieste je rozdiel bitov pôvodného vektora nachádzajúcich sa na pozíciách i a i-1 (tretí st pec Tabu ka 1). Na rozdiel od štandartného kódovania sa Grayov kód dvoch susedných ísel líši maximálne v jednom bite.

Použitie genetického algoritmu na nájdenie globálneho minima predpísanej reálnej funkcie reálnej premennej.

Opisovaný genetický algoritmus bol použitý na h adanie globálneho minima funkcie

$$f(x) = e^{-0.01x^2}\sin(10x)\cos(8x) + 0.993851231$$

na intervale <-10,10>. Funkcia f(x) je príkladom funkcie s množstvom lokálnych extrémov. (vi   Obr 2). Nájs globálny extrém takejto funkcie približnými metódami je dos obtiažne, pretože výpo et môže ve mi ahko skon i v lokálnom extréme. Napríklad použitie metód založených na gradiente funkcie povedie do lokálneho extrému, ktorý sa nachádza najbližšie k po iato nému bodu.

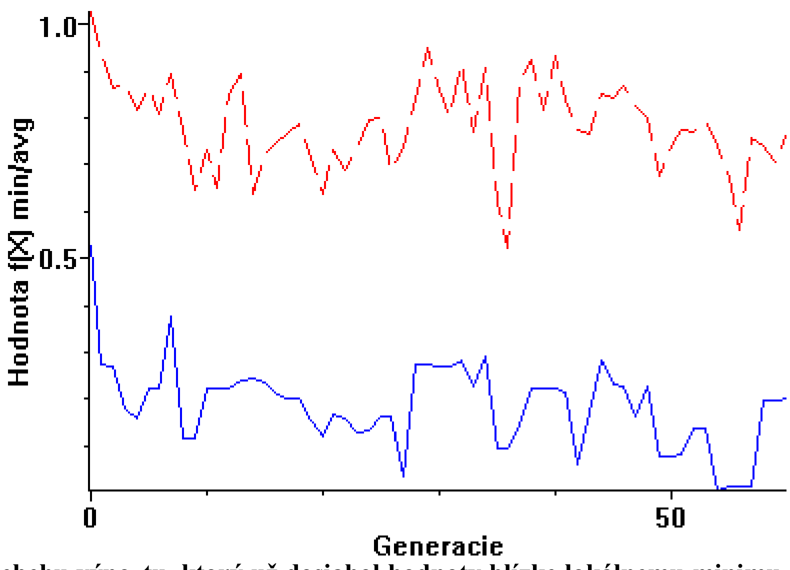


Obr 2: Graf funkcie f(x) na intervale <-10,10>

Popis algoritmu.

Pri riešení problému globálneho extrému funkcie bol ako chromozóm použitý binárny re azec d žky 32 ako v štandartnom tak aj v Grayovom kódovaní. Mutácia bola realizovaná zámenou hodnoty jedného bitu. Mutácia bitu bola pritom realizovaná s pravdepodobnos ou p_{mut} ktorá nadobúdala hodnoty od 0.01 po 0.3.
Ako operácia kríženia bolo použité jednobodové kríženie binárnych vektorov 2 rodi ia , 2 potomkovia.
Po iato né pokusy boli robené s dvoma tvarmi fitness funkcie:

1. Fitness(x) = 2-f(x)
2. Fitness(x) = 1/f(x)

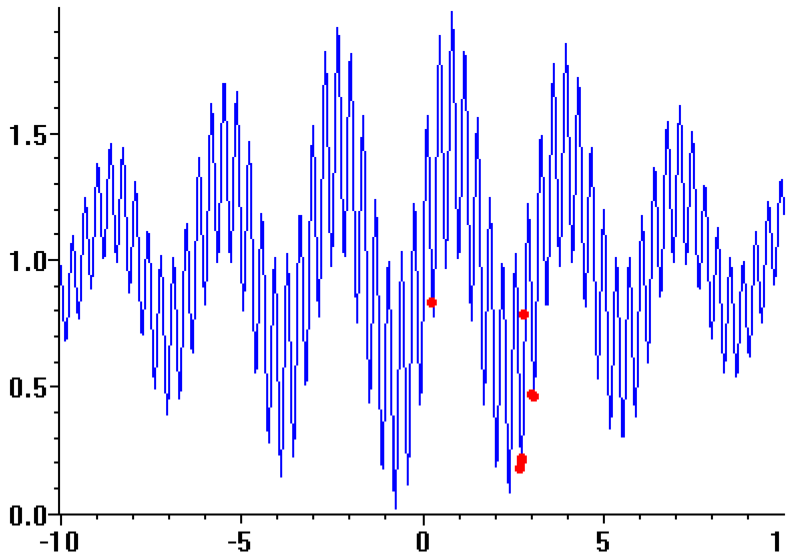


Obr 3: Príklad priebehu výpo tu, ktorý už dosiahol hodnoty blízke lokálnemu minimu, ale nebol schopný udrža   sa v okolí dosiahnutých výsledkov. Graf znázor uje priebeh hodnoty f(x) momentálne najlepšieho (modrá plná) a priemernej hodnoty f(x) v rámci populácie (ervená prerušovaná).

Funkcia 2-f(x) sa ukázala ako nedostato ná, pretože pri použití malej pravdepodobnosti mutácie nastávalo uviaznutie výpo tu aj v lokálnych minimách ktorá boli aleko od optimálneho riešenia. Pri zvä šení hodnoty p_{mut} sa zase dochádza k opusteniu už dosiahnutých výsledkov. Príklad takéhoto priebehu je na **Obr 3**. Je tu možné pozorova nemonotónny priebeh funk nej hodnoty najlepšieho prvku populácie
Všetky alšie výpo ty boli preto realizované s použitím predpisu Fitness(x) = 1/f(x). Tento predpis Fitness funkcie dostato ne zvýhod uje lepších jedincov, preto nedochádza k ich vymiznutiu z populácie ani pri použití vyšších pravdepodobností mutácie.

Vplyv pravdepodobnosti mutácie na úspešnos výpo tu

Pravdepodobnos mutácie je jedným zo základných faktorov ktorý ovplyv uje úspešnos genetického algoritmu. V prípade, že je hodnota p_{mut} príliš nízka, priestor riešení preh adávaný algoritmom sa sústre uje zpravidla v tesnej blízkosti momentálne najlepšieho jedinca. Dôsledkom je, že výpo et sa upne na momentálne (lokálne) najlepšie riešenie a je len malá pravdepodobnos výraznej zmeny. Výsledkom takéhoto výpo tu je teda niektoré z lokálnych miním funkcie. (Obr 4).

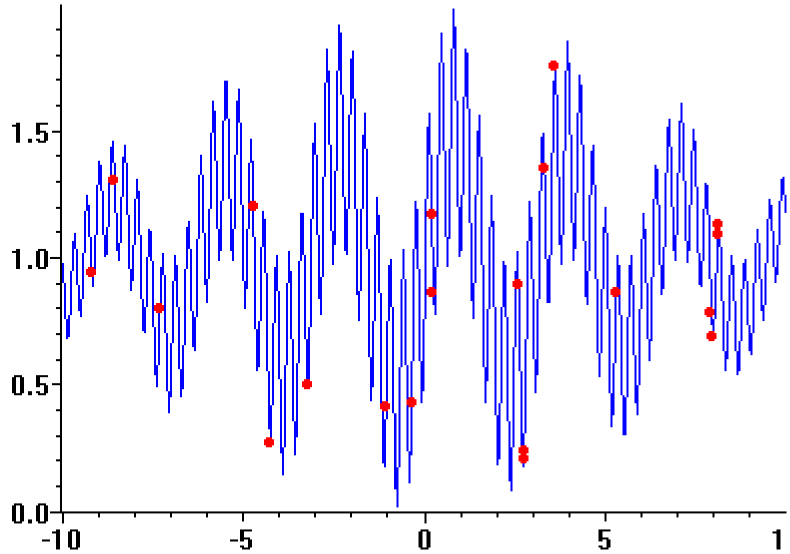


Obr 4: Použitie malej pravdepodobnosti mutácie – algoritmu preh adáva len malé okolie momentálne najúspešnejšieho jedinca

Naopak, použitie príliš ve kej pravdepodobnosti mutácie má za následok že populácia je príliš rozptýlená v priestore riešení. V takomto prípade sa najlepší jedinci v populácii nemusia udrža (najmä pri použití fitness funkcie ktorá nedostato ne uprednost uje silnejšie jedince) a výpo et nikdy nekonverguje k prijate nému riešeniu. (Obr 3 a Obr 5).

Vplyv ve kosti populácie

Ve kos populácie ovplyv uje nepriaznivé správanie spôsobené príliš malou alebo ve kou hodnotou pravdepodobnosti mutácie. Ovplyv uje pritom hlavne hornú hranicu použite nej pravdepodobnosti mutácie – ím vä šia populácia, tým vä šiu hodnotu p_{mut} je možné použi bez ujmy na úspešnosti výpo tov. Spodnú hranicu použite nej p_{mut} zvyšovanie populácie taktiež pozitívne ovplyv uje, ale v ove a menšej miere ako hornú.



Obr 5: Príliš ve ká pravdepodobnos mutácie – chromozómy sú príliš rozptýlené po priestore riešení.

Vplyv pravdepodobnosti kríženia

Na rozdiel od pravdepodobnosti mutácie, hodnota pravdepodobnosti kríženia (p_{cros}) neovplyvnila pozorované výsledky. Túto skuto nos možno odôvodni tým, že kríženie pomáha v prípadoch, kedy sa riešenie problému skladá z nezávislých astí, pri om spojením dvoch rodi ovských chromozómov, z ktorých každý ma niektorú z astí riešenia dobre vyvinutú môže vzniknú chromozóm v ktorom sa práve tieto úspešné asti skombinujú. Skúmaný problém nezapadá do kategórie takýchto problémov, preto kríženie výsledok neovplyv uje.

Dosiahnuté výsledky

Najlepší výsledok dosiahnutý algoritmom bol x = -0.7853024804, f(x) = 0.00000000005692. Pre vyhodnotenie úspešnosti v závislosti od pravdepodobnosti mutácie a ve kosti populácie, boli vykonávané série 100 pokusov pre hodnoty $p_{mut} \in <0.01, 0.32>$ a $pop \in <5, 65>$. Každý výpo et bol ukon ený, ak sa hodnota najlepšieho jedinca celého výpo tu nezmenila posledných 1000 generácií. Týchto 1000 generácií sa nezarátava do d žky výpo tu. Správnos výsledkov bola posudzovaná s presnos ou 10^{-9} vzh adom k funk nej hodnote f(x). Grafické znázornenie úspešnosti možno pozorova na Obr 6 a Obr 7. Na dosiahnutie 90% úspešnosti je potrebná minimálne populácia 20 chromozómov. V tomto prípade je výber pravdepodobnosti mutácie obmedzený ma interval <0.12, 0.14>. Zvä šovanie populácie rozširuje interval na ktorom je možné dosiahnu úspešnos aspo 90%. Pri populáciách ve kosti aspo 55 chromozómov je možné dokonca voli také hodnoty p_{mut} aby bola úspešnos algoritmu 100%.

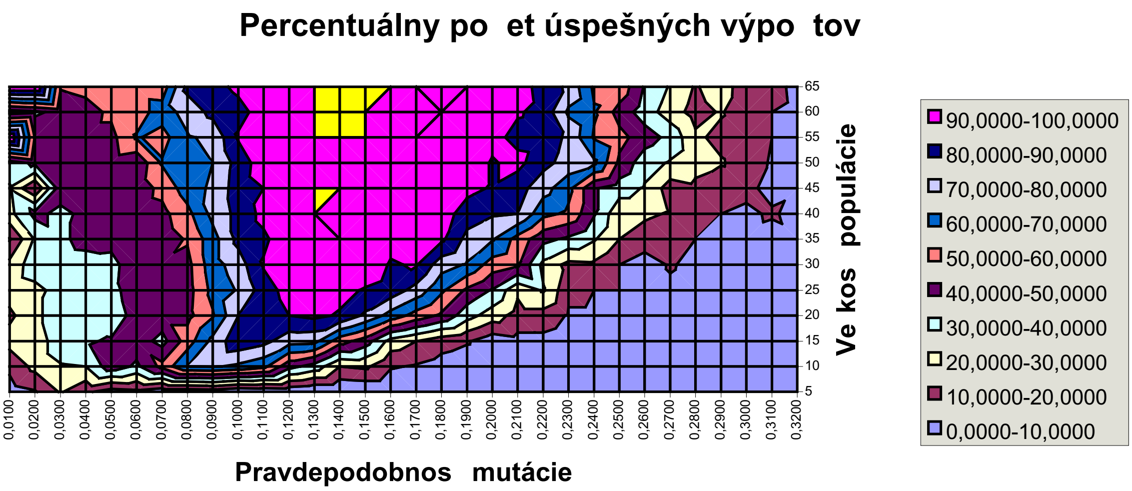
Použitie Grayovho kódu nijak výrazne nezasiahne do úspešnosti algoritmu. Ako je možné pozorova porovnaním obrázkov Obr 6 a Obr 7, priebeh závislosti úspešnosti algoritmu od skúmaných parametrov je ve mi podobný a rozdiely sú spôsobené skôr náhodnými faktormi ako rozdielnym kódovaním.

D žka výpo tu

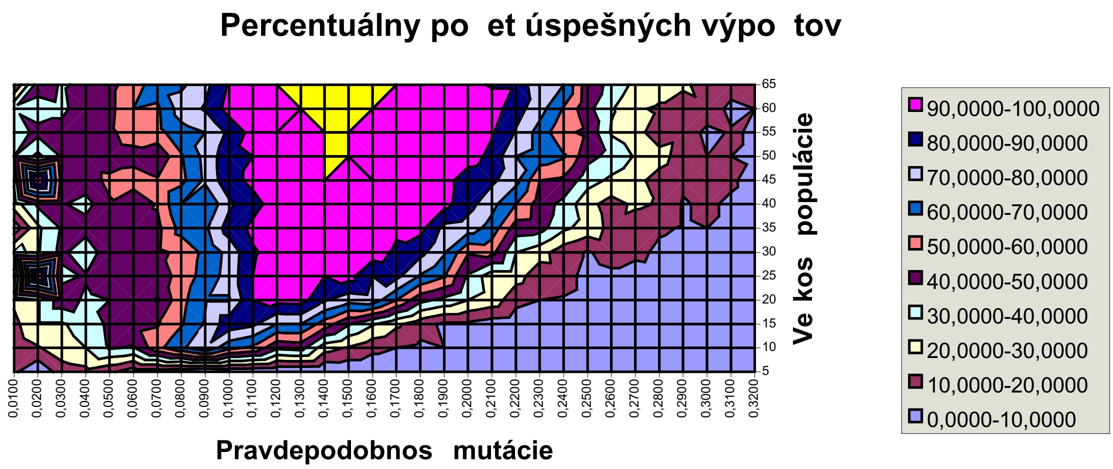
Na obrázkoch 8 a 9 je zobrazený graf závislosti priemernej d žky úspešného výpo tu od vo by hodnôt. Pre praktické použitie sú v om zaujímavé hlavne asti, v ktorých má algoritmus úspešnos aspo 90%. Toto je možné porovnaním s grafmi na Obr 6 a Obr 7. Ako z grafov vidno, takmer na celej tejto asti je priemerná d žka výpo tu medzi 750 a 1000 generáciami. V praxi teda hodnoty pravdepodobnosti mutácie a ve kosti populácie majú vplyv hlavne na po et úspešných pokusov, na d žku výpo tu vplývajú iba malou mierou.

Záver

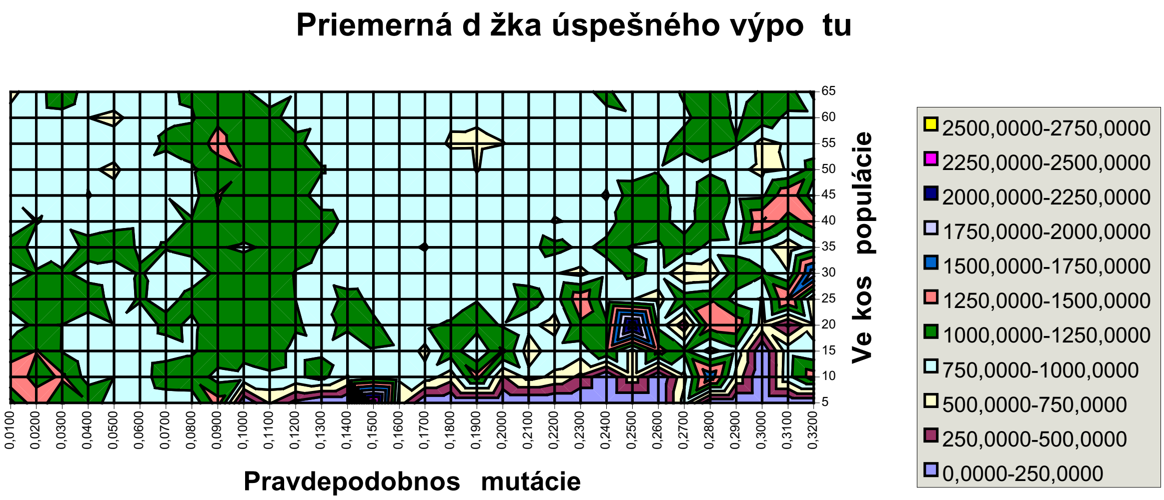
Genetický algoritmus je vhodná metóda na h adanie globálnych extrémov reálnych funkcií s mnohými lokálnymi extrémami, na ktorých zlyhávajú algoritmy založené na znalosti gradientu, alebo preh adávaní lokálneho okolia prípadných riešení (hill climbing). Úspešnos algoritmu závisí hlavne na vo be hodnôt pravdepodobnosti mutácie a ve kosti populácie. Naopak, nezávisí od vo by pravdepodobnosti kríženia. V tomto prípade sa neprejavil vplyv Hammingovej bariéry, takže úspešnos neovplyvnilo ani prípadné použitie Grayovho kódovania. Priemerná d žka úspešných výpo tov príliš nezávisela od skúmaných parametrov. Z h adiska asu procesora je preto výhodné voli spodnú hranicu použite nej ve kosti populácie (20 chromozómov).



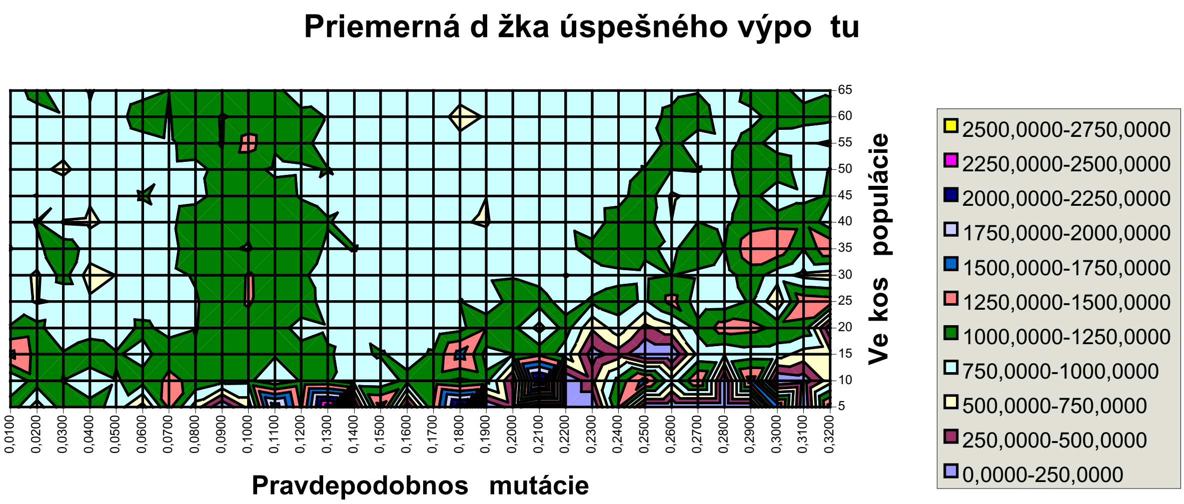
Obr 6: Po et úspešných výpo tov v závislosti od ve kosti populácie a pravdepodobnosti mutácie. (Štandardné kódovanie)



Obr 7: Po et úspešných výpo tov v závislosti od ve kosti populácie a pravdepodobnosti mutácie. (Grayov kód)



Obr 8: Závislos priemernej d žky výpo tu od parametrov genetického algoritmu (štandardné kódovanie)



Obr 9: Závislos priemernej d žky výpo tu od parametrov genetického algoritmu (Grayov kód)