

## TSP

- Co to je
- Reprezentace
  - Adjacency
    - City  $j$  na pozici  $i$   $\iff$  existuje hrana z  $i$  do  $j$
    - Neintuitivní
    - Nefungují klasické crossovery
    - Funguje se schémata
  - Normální
    - Nefungují klasické crossovery, viz následující seznam
    - První idea každého člověka
  - Reálná čísla
- Crossover
  - PMX
    - <https://www.rubicite.com/Tutorials/GeneticAlgorithms/CrossoverOperators/PMXCrossoverOperator.aspx>
  - CX
    - <https://www.rubicite.com/Tutorials/GeneticAlgorithms/CrossoverOperators/CycleCrossoverOperator.aspx>
  - ER
    - <https://www.rubicite.com/Tutorials/GeneticAlgorithms/CrossoverOperators/EdgeRecombinationCrossoverOperator.aspx>
  - OX
    - <https://www.rubicite.com/Tutorials/GeneticAlgorithms/CrossoverOperators/Order1CrossoverOperator.aspx>
- Initialization
  - Nearest neighbor
    - Hledáme k poslednímu městu
  - Edge insertion
    - Jako nearest neighbor, ale pro všechny města
- Mutation
  - Náhodně prohodit dvě města
  - 2-opt
  - Inverze
    - 123456789 -> 127654389
  - Prohodit dvě podcesty
    - 123456789 -> 127856349

## Michigan vs Pittsburgh (Evolutionary machine learning)

- Learning of rules = classifiers system
- Cílem je naučit se skupinu pravidel, která korektně klasifikuje data
- Dvě školy genetických algoritmů, aplikujeme je na evoluční machine learning

- Jak má být pravidlový systém reprezentován
- Learning dělíme na
  - Classification
    - Speciální případ supervised learning - máme odpovědi
  - Reinforcement learning
    - Obvykle agent v nějakém prostředí a okolí odesílá nějaká data (sensory na robotovy) a dává nám nějaké rewards (robot se dostal na nějaké místo v prostředí), ale tyto odměny nejsou okamžité (po aplikaci jednoho pravidla)
- Výhoda genetických algoritmů je, že obvykle není velký problém je změnit z klasifikace na reinforcement learning (a naopak), obvykle je potřeba nějak změnit vyhodnocování fitness funkce
- Machine learning
  - Chceme získat nějaká data a z nich vytvořit model
- Rule = pravidlo
  - Speciální podmnožina modelu
  - Uvažujeme tvar IF □ THEN □
- Obě dva přístupy jsou použitelné na klasifikaci (Michigan a Pittsburgh)
- Michigan je lepší na reinforcement learning
- Dneska se na klasifikaci používá hlavně Pittsburgh
- Klasifikační systémy postavené na pravidlech mohou mít horší výsledky než modely postavené na neuronových sítích, ty ale není možné tak dobře rozumět, proč tak fungují
- Další problém např. Deep learningu je, že potřebuje **obrovské** množství dat oproti ostatním (klasickým pravidlovým) způsobům
- **Michigan**
  - University of Michigan
  - John Holland zde pracoval
  - Založeno na jeho původní práci (Simple genetic algorithm)
  - Individuál = 1 pravidlo
  - Máme populaci pravidel = kompletní klasifikační systém
  - Jde použít v reinforcement learning i supervised learning
  - Supervised learning je lehčí (máme správné hodnoty)
  - LCS (learning classifier system)
    - 80' Holland
    - Pouze binární řetězce a hvězdička (znamená 0, nebo 1)
    - Příklad s ideálním partnerem
      - Intelligent - 1
      - Hair color - \*
      - Woman - 1
      - Likes music - 1
    - Každý jedinec má jednu hodnotu z reálných čísel často zvanou strength nebo weight - použití jako fitness nebo váha pravidla
    - Části: Environment, populace pravidel, mechanismus selekce akce, mechanismus distribuce odměny, GA

- Bucking brigade algorithm (patří k LCS)
  - Původní práce Hollanda
  - Chceme použít s reinforcement learning
  - Strength pravidla by měla mít komplexnější způsob definice
  - Příklad s robotem:
    - Robot provádí sekvenci akcí iniciovanou pravidly
    - $R_i \rightarrow R_j \rightarrow R_k \rightarrow R_{\text{lucky}}$
    - $R_{\text{lucky}}$  bude pravidlo po jehož provedení robot dostane "odměnu" za to, že dosáhl nějaké požadované akce
    - Celou odměnu dostane pravidlo  $R_{\text{lucky}}$ , ačkoliv to není fér, protože celá sekvence akcí předtím způsobila, že robot udělal co udělal
    - Bucking brigade algorithm redistribuje odměnu do předchozích pravidel
    - Podmínka pro aplikaci pravidla je, že se okousne trochu z jeho strength za spuštění jeho akce, takto se akumulují jakoby penízky a když dojde k odměně, tak ji redistribujeme podle ukousnuté strength
    - I gave up some of my strength, but I will receive more in return
  - Málo používané, je obtížné správně zvolit právě tu správnou hodnotu investice ze strength a správnou hodnotu odměnu kterou pak zaplatit zpátky
  - Dobrá myšlenka, v praxi obtížně implementované, dnes opuštěný koncept
  - Jsou tam messages a rules
  - GA operuje nad rules
  - Komplikované i implementovat
- ZCS (Zero classifier system)
  - Nová generace lidí v 90' (Wilson)
  - Zjednodušení (žádné messages a bucket brigade)
  - Nejprve úspěšné
  - Bez bucking brigade, ale historii si nějak pamatovat budeme
  - Příklad
    - Jsem neaplikovatelné pravidlo  $\rightarrow$  nic se nestane
    - Jsem aplikovatelný  $\rightarrow$  ale vím, že nejsem správný, nedostanu se aplikací tohoto pravidla do požadovaného stavu, tak snížíme strength (WUT jak to poznám)
    - Každé pravidlo musí dát nějaký strength (malé množství)
    - Zvýšíme strength pravidel, které správně odpověděli, **ale pouze těch v předchozím kroku** (použiji naakumulované penízky)
  - Nějak jestli jsem pochopil, tak neřešíme komplexní historii, ale pouze jeden dva stavy dozadu
  - COVER operátor (tohle je důležitá součást ZCS)
    - Je těžký mít pořad pravidla, která jsou aplikovatelná na každou situaci

- Řeší právě tuto situaci, nemám pravidlo na aplikování v dané situaci
  - Aplikací COVER operátoru vytvoříme nové pravidlo (podle vstupu, na které nebylo aplikovatelné žádné pravidlo)
  - Přidáme toto nové pravidlo do populace
  - Charakterizace
    - Mnohem jednodušší mechanismus, který si pamatuje pouze několik předchozích kroků
    - Odměňuje aktuální a několik posledních
    - COVER operátor
- XCS (Extended classifier systems)
  - Vylepšená verze ZCS (také od Wilsona)
  - State-of-the-art pro learning klasifikátory
  - Spousta různých popravených variant se dnes používá
  - ZCS fungovali stále dobře, ale měli několik nevýhod
    - Odměny fungují dobře pro předchozí krok, ale ne úplně dobře v dlouhodobém měřítku
    - Vyhrávající pravidla jsou obvykle ta, co jsou více obecně aplikovatelná v různých situacích (oproti specializovaných pravidlům, ačkoliv ty mohou být stejně důležité)
  - Předchozí systémy byly všechny strength based
    - Když bylo víc pravidel na výběr, vybíralo se podle strength
  - Strength is good for reward and výběr akce ale vývoj evoluce by měl být zaměřený na nejspolehlivější pravidla, které dávají přesnější predikce
  - Nová pravidla z úspěšných pravidel
  - Používá GA na Action set (kandidáti na úspěšná pravidla)
- **Pittsburgh**
  - Specializované na klasifikaci
  - První generaci studentů Johna Hollanda
  - Tohle je šílené
  - Individuál = množina pravidel = klasifikační systém
  - Definujeme, že třeba potřebujeme 5 pravidel na ovládání robota, budeme tedy mít takového individuála a vylepšovat ho v rámci nějaké populace, kde všichni individuálové mají 5 pravidel.
  - Z více pravidel na jedince vyplývají i složitější genetické operátory
    - Jak provést crossover na všechny pravidla? (mezi jedinci, nebo uvnitř jedince - je to stále crossover?)
    - Mutace i crossover na více úrovních
  - GIL
    - Jednoduché a prakticky použitelné
    - Specializované na binární klasifikaci (prvek spadá do kategorie 0, nebo 1)
    - Pravidla mají implicitní klasifikační skupinu
    - Typy pravidel
      - Complex

- Konjunkce selektorů
  - S1 & S2 & S3
  - Jedno pravidlo
- Selector
  - Disjunkce proměnné je disjunkce hodnot z domény
  - $(C = R) \text{ or } (C = B)$
- Variable
  - Domain (diskrétní)
  - Values (z této domény)
- Příklad: color (R, G, B)
  - Domain (0, nebo 1)
- Individual je množina komplexů
- Jednoduše reprezentovatelné bitmapou → jdou aplikovat standardní genetické operátory
- Existují operátory na úrovni komplexů i selektorů a je jich spousta
- Jednoduchá mutace na selektoru (přehodím bit)
- Reduction
  - Specializovaná mutace na selektoru změním  $1 \rightarrow 0$
  - Děláme selektor menší
- Extension
  - Opak reduction
  - $0 \rightarrow 1$

## Úvod

- Důležitá inspirace biologií
  - Darwinova teorie přirozeného výběru (Darwinova evoluční teorie)
    - Polovina 19. Stol.
    - Opravdová komplexní teorie jak evoluce funguje, reprodukce je klíč života
    - Lépe adaptovaní jedinci mají větší šanci se reprodukovat (a tak se v populaci více rozšířit své geny)
    - Založené na pozorování, Darwin procestoval svět na lodi
    - Žil ve spoustě prostředí
    - Neměl žádný důkaz (fyzikální, biologický) pro jeho teorii
  - Mendelova genetika
    - Pravidla genetiky (založená na logice a statistických experimentech)
    - V podobné době co Darwin
    - Nepovšimnuté polovinu století
    - Na začátku 20. stol znovu objeveno britskými biology
    - Existuje nějaká základní jednotka dědičnosti → dnes ji říkáme gen
    - Gen je diskrétní věc → máme ho, nebo ne
    - Mendel ale nevěděl, jak je gen reprezentován v přírodě
    - Máme 2 páry genů, který vytvoří relevantní informaci o našem fenotypu
    - Pioneer základů genetiky

- Nyní ale víme, že to je více komplikované, genotyp a fenotyp není 1:1 mapování
- DNA
  - Čekali jsme dalších 100 let
  - Základ jak reprezentovat genetický kód v biologických organismem
  - Double helix (dvojité šroubovice)
  - Vždy trojice nukleotypů
    - 3 písmena, která kódují jeden z 23 aminokyselin (základní stavební struktura všeho v živých organismech)
  - Dnes v molekulární genetice rozumíme, že DNA přes kodon obsahuje informace, potom existuje proces transkripce do RNA (bijektivní funkce)
  - RNA je pak detailní návrh pro výrobu proteinů
  - Takhle máme mapování z genotypu na fenotyp (DNA → RNA → Protein)
  - Neexistuje cesta zpět fenotyp nemůže ovlivnit genotyp
- Existují další teorie jako např. Lamarkismus, který tvrdí, že získané vlastnosti je možné dědit, dnes víme, že toto není pravda, ale pro evoluční algoritmy se to může hodit.
- Altruismus vs Darwinismus
  - Mnoho kooperace existuje i v přírodě (mimo lidi)
  - Jak se mohlo altruistické chování vyvinout, když darwinismus snižuje fitness altruistických individuí
  - Tímto se zabývá social biology
- EA je meta algoritmus
  - No free lunch theorem (neexistuje jeden nejlepší algoritmus)
  - Vyplatí se vytvářet specifické varianty EA pro různé účely

## Exploration (průzkum) vs exploitation (vykořisťování)

- Co by hledací algoritmy měly dělat
- Exploration: Měli bychom trávit čas explorační nových oblastí možných řešení
- Exploitation: Měli bychom využít naše aktuální znalosti a prohledat do hloubky
- Holland původně vymyslel adaptivní plán motivovaný přírodou
  - Explorace a exploitace jsou v rovnováze
  - Pouze explorace → jenom budu hledat a nikdy znalosti nevyužiji
  - Pouze exploitace → velká šance, že skončím v lokálním optimu
- Jak zajistíme rovnováhu?
  - Inspirace z 2-Armed bandit
  - 1-armed
    - Obyčejný gambling mat, s páčkou, kde vyhraješ money, když dostaneš 3x jablíčko třeba
  - 2-armed je zajímavější z matematického hlediska
    - Máme omezené množství coinů
    - Jak identifikovat a využít "arm", který lépe platí
    - Každé arm má jiné Expected value a varianci...
    - Snažíme se odhadnout statistické hodnoty

- Řešení: Lepší arm hrajeme exponenciálně vícekrát než druhý arm (zajímavé je, že ten druhý ale stále hrajeme) → náš odhad nemusí být správný
- K-armed bandit
  - Důležitý problém reinforcement learningu a optimalizace
  - Zajímavé když nevíme žádné statistické údaje
- Holland tedy použil, že genetický algoritmus alokuje více pokusů pro úspěšnější schémata

## Evoluční strategie

- Efektivní a populární způsoby jak optimalizovat floating point problémy
- Alternativa k genetickým algoritmům (GA)
- 60' Rechenberg, Schwefel (Německo)
- Měli optimalizační problém s příliš mnoho proměnnými pro analytické řešení
- Experimenty s randomizovanými algoritmy, které hledají řešení
- Nakonec přišli s tím, čemu dnes říkáme evoluční strategie
- Řeší optimalizaci reálných funkcí, pracují s floating point čísly (vektory) (žádné binary jako u Hollanda)
- Individuum má dvě části
  - Genetic parameters (numbers - original individual)
    - $x_1, \dots, x_n$
  - Endogenous parameters (ovlivňuje evolution)
    - Můžeme sem dát třeba sigma, jejíž hodnotu můžeme vyvíjet např. Násobením  $N(0,1)$
    - Tomuto se říká metaevoluce, parametry evoluce procházejí také procesem evoluce
- Nové individuum je akceptováno pouze pokud je lepší
- Výběr rodičů se liší oproti GA → zde můžeme mít více rodičů
- Máme ale vždy pouze jednoho potomka (v GA máme 2 obvykle)
- Stále máme spoustu aplikací v deep learningu nebo reinforcement learning
- Máme dvě možnosti na další populaci
  - Buďto vždycky vyměníme starou populaci za novou (jako v GA)
  - Nebo vyrobíme množinu nových a pak vybereme novou populaci ze starých a nových individuí (jako vybereme ty nejlepší)
- Příklad (nejjednodušší evoluční strategie):
  - Minimalizujeme funkci
  - Individuum je vektor
  - Populace je jedno individuum
  - Vytváříme jednoho potomka
  - Provádíme na něj mutaci (z normálního rozdělení - upravíme nějakou složku vektoru)
  - V tomto případě nemáme crossover
- Jak velká by měla být mutace (krok mutace)?
  - Určuje parametr sigma normálního rozdělení

- Když je sigma velká → děláme exploration
- Když je malá → exploitation
- Experimentálně ověřeno, že nejlepší je, když mutace vytvoří lepšího jedince ve 20%
- Můžeme udělat algoritmus tak, že budeme kontrolovat, jak je mutace úspěšná a podle toho dynamicky měnit sigma parametr
- Selekce (detailněji, něco bylo už výše)
  - Parental
    - totálně random (nevybíráme podle fitness), u GA to bylo ruletou nebo turnajem
  - Environmental
    - Vybereme nejlepšího z populace
    - Potom nová populace jsou buďto nový jedinci (comma strategy)
    - Nebo společně s rodiči (plus strategy) (asi vyberu nejlepší)
    - Comma strategy
      - Noví kandidáti jsou označeni jako L
      - Starý jsou M
      - $L > M$  (musí)
      - Příklad
        - $M = 10$
        - $L = 100$  (vygenerujeme kandidáty)
        - Vybereme 10 z nich a uděláme nové M
      - Sklony k zaseknutí v lokálním optimu
      - Doporučné pro domény z reálných čísel
    - Plus strategy
      - L může být jakékoliv, klidně  $L=1$  což je speciální případ (steady state evolution strategy)
      - Doporučené pro diskrétní domény
- Mutace (detailněji)
  - Nejdříve se vždy mutují endogenous parametry (metaevoluce)
  - Pravidlo 1/5
- Crossover (detailněji)
  - Libovolné množství rodičů
  - Uniformní (dominant)
  - Aritmetický (intermediate)

## Věta o schématech

- První pokus formalizace genetických algoritmů
- John Holland
- Snaží se popsat teoreticky jak genetický algoritmus funguje
- Staré, ne tak dobré
- Jedna z mála teorií o genetických algoritmech
- Dnes ale máme lepší teorii a poznatky
- Není příliš obecná



- $o(S)$  ... počet pevných pozic schématu (počet 0 a 1)
- $d(S)$  ... vzdálenost mezi první a poslední pevnou pozicí
  - Index poslední pevné pozice - index první pevné pozice
- $F(S)$  ... průměrná fitness jedinců v populaci, kterým schéma  $S$  odpovídá
- Přeformulovaná verze, nepoetická
  - $\forall$  schémata, která mají malou definující délku  $d(S)$ , malý řád  $o(S)$  a nadprůměrnou fitness  $F(S)$  platí, že při běhu GA se exponenciálně množí
    - nadprůměrnou fitness  $F(S) \sim$  velká šance, že schéma bude vybráno
    - Malá definující délka  $d(S) \sim$  malá šance, že crossover zničí schéma
    - malý řád  $o(S) \sim$  malá šance, že mutace zničí schéma
- Budeme se zabývat jak souvisí selection, crossover a mutation se schématy
- Máme nějaká schémata, kterých odpovídají jedinci, kteří jsou využity v GA. Nás bude zajímat které ze schémat budou v další generaci mít nějakého jedince, kterému odpovídají. **Jaké jsou vlastnosti schémat, které se stanou součástí další populace?**
- O tomhle se budeme bavit v kontextu genetických operátorů (selekce, mutace, crossover)
- Jaká je dobrá vlastnost schématu aby bylo vybráno? (selekce)
  - Selekcce je podle fitness
  - Pravděpodobnost souvisí s  $F(S)$
- Mutace
  - Bavíme se o jedincích v populaci, kteří odpovídají schématu
  - Když mutace chce změnit hodnotu, kde je hvězdička, nic se neděje  $\rightarrow$  schéma přežije
  - Problém je, když se mutace trečí do 0, nebo 1
  - Pravděpodobnost přežití schématu souvisí s  $o(S)$
- Crossover
  - Kdy může crossover zničit schéma?
  - Pokud máme hvězdičky na konci nebo začátku, a crossover dělicí čára oddělí tyto hvězdičky, tak schéma nebude zničeno
  - Kdekoliv jinde ho ale může zničit
  - Pravděpodobnost přežití schématu souvisí s  $d(S)$
- Nyní rozumíme všemu co je potřeba, přesuneme se k důkazu (minimálně nějaký náznak chce)
- Půjdeme od jedné populaci k druhé a budeme se koukat na pravděpodobnost přežití schématu
- $C(S, t)$  ... počet individuálů odpovídající schématu  $S$  v populaci  $P(t)$
- Zajímá nás  $C(S, t + 1)$ 
  - Vypočítáme ve třech krocích (selection, crossover, mutation)
- Selekcce
  - $F(t) = \sum F(u)$  kde  $u \in P(t)$  (součet fitness prvků v populaci v čase  $t$ )
  - $P_S(v) = \frac{F(v)}{F(t)}$  (pravděpodobnost selekcce prvku  $v$ )
  - $P_S(S) = \frac{F(S)}{F(t)}$  (pravděpodobnost výběru schématu)

- $C(S, t + 1) = C(S, t) \cdot n \cdot P_s(S)$ 
  - Selekcí děláme  $n$  - krát
  - Pro každou selekcí máme spočítanou pravděpodobnost výběru schématu
- Jde to přepsat na  $C(S, t + 1) = C(S, t) \cdot \frac{F(S)}{F_{avg}(t)}$ 
  - $F_{avg}(t) = \frac{F(t)}{n}$  (průměrná hodnota fitness v populaci v čase  $t$ )
- My jsme ale předpokládali, že schémata mají nadprůměrnou fitness
  - $F(S, t) = F_{avg}(t) + \varepsilon \cdot F_{avg}(t)$   $t$  je celé číslo  $\geq 0$
  - $C(S, t + 1) = C(S, t) \cdot (1 + \varepsilon)$
  - $C(S, t + 1) = C(S, 0) \cdot (1 + \varepsilon)^t$ 
    - Geometrická řada
- Crossover
  - Víme, že schémata mají malou definující délku  $d(S)$
  - $P_d(S) = \frac{d(S)}{m-1}$ 
    - $m$  ... délka individua (počet 0 a 1)
    - $m - 1$  ... počet pozic pro crossover
    - Pravděpodobnost, že schéma bude zničeno
  - $P_s(S) = 1 - \frac{d(S)}{m-1}$ 
    - Pravděpodobnost, že schémat přežije
  - Nesmíme zapomenout, že obvykle to, že crossover nastane má nějakou pravděpodobnost, tu označíme  $P_c$
  - $P_s(S) \geq 1 - P_c \cdot \frac{d(S)}{m-1}$
  - Dohromady s selekcí máme
    - $C(S, t + 1) \geq C(S, t) \cdot \frac{F(S)}{F_{avg}(t)} \cdot (1 - P_c \cdot \frac{d(S)}{m-1})$
- Mutace
  - $P_m$  ... bit nepřežije
  - $1 - P_m$  ... bit přežije
  - $P_s(S) = (1 - P_m)^{o(S)}$ 
    - Toto je korektní definice, nicméně, pravděpodobnost mutace je nízká
  - $P_s(S) \approx 1 - P_m \cdot o(S)$
  - Zkombinujeme se selekcí a crossoverem
    - $C(S, t + 1) \geq C(S, t) \cdot \frac{F(S)}{F_{avg}(t)} \cdot (1 - P_c \cdot \frac{d(S)}{m-1} - P_m \cdot o(S))$
    - Vidíme, že pokud  $F(S)$  je velké,  $d(S)$  je malé a  $o(S)$  je malé, dostaneme růst (exponenciální)

- Problém věty je, že důkaz je postaven na tom, že  $C(S, t)$  je vlastně expected value, tedy věta dobře funguje na nekonečných populacích, v praxi to nefunguje na malých populacích
- Hypetéza o stavebních blocích (neplatí, nefunguje)
  - GA hledá optimální řešení problému kombinací schémat, která mají malou definující délku  $d(S)$ , malý řád  $o(S)$  a nadprůměrnou fitness  $F(S)$

## Další věci

- Evoluční programování
  - 1965 Fogel, Owens a Walsh
  - Evoluce konečných automatů
  - Smazán rozdíl mezi genotypem a fenotypem
  - Důraz na mutace
  - Neexistuje křížení
- Genetické programování
  - 1992 Koza
  - Evoluce jedinců zakódovaných jako LISPovské stromy
  - Použití (nejen) k evoluci programů
- V původní SGA používal Holland ještě jeden genetický operátor, který dneska nepoužíváme – inverze
  - Obrácení části řetězce
  - Neukázala se jako výhodná