

Jak se matematika poučila v biologii

René Kalus

IT4Innovations, VŠB-TUO

Role matematiky v (nejen) přírodních vědách

Matematika inspirující a sloužící

- ✓ jazyk pro komunikaci s přírodou

$$V = \frac{4}{3}\pi r^3$$

Matematika inspirující a sloužící

- ✓ jazyk pro komunikaci s přírodou
- ✓ prostředky pro jeho použití

$$V = \frac{4}{3}\pi r^3 \quad \longrightarrow \quad r = \sqrt[3]{\frac{3V}{4\pi}}$$

Matematika inspirující a sloužící

- ✓ jazyk pro komunikaci s přírodou
- ✓ prostředky pro jeho použití

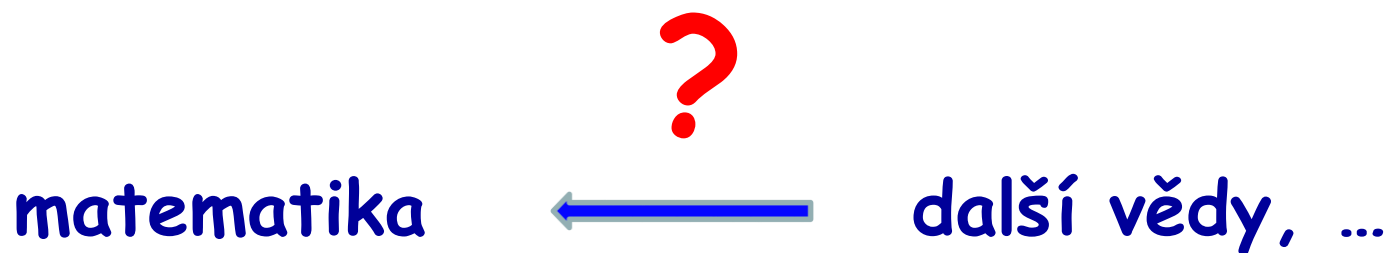
$$V = \frac{4}{3}\pi r^3 \quad \longrightarrow \quad r = \sqrt[3]{\frac{3V}{4\pi}}$$

matematika



další vědy, ...

Matematika inspirovaná



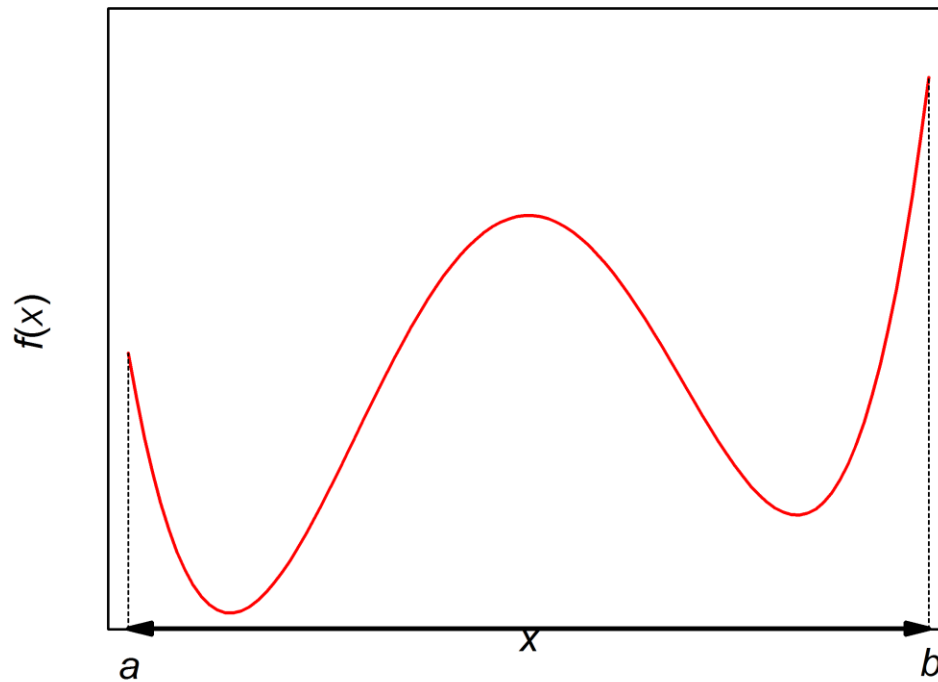
Problém

Problém

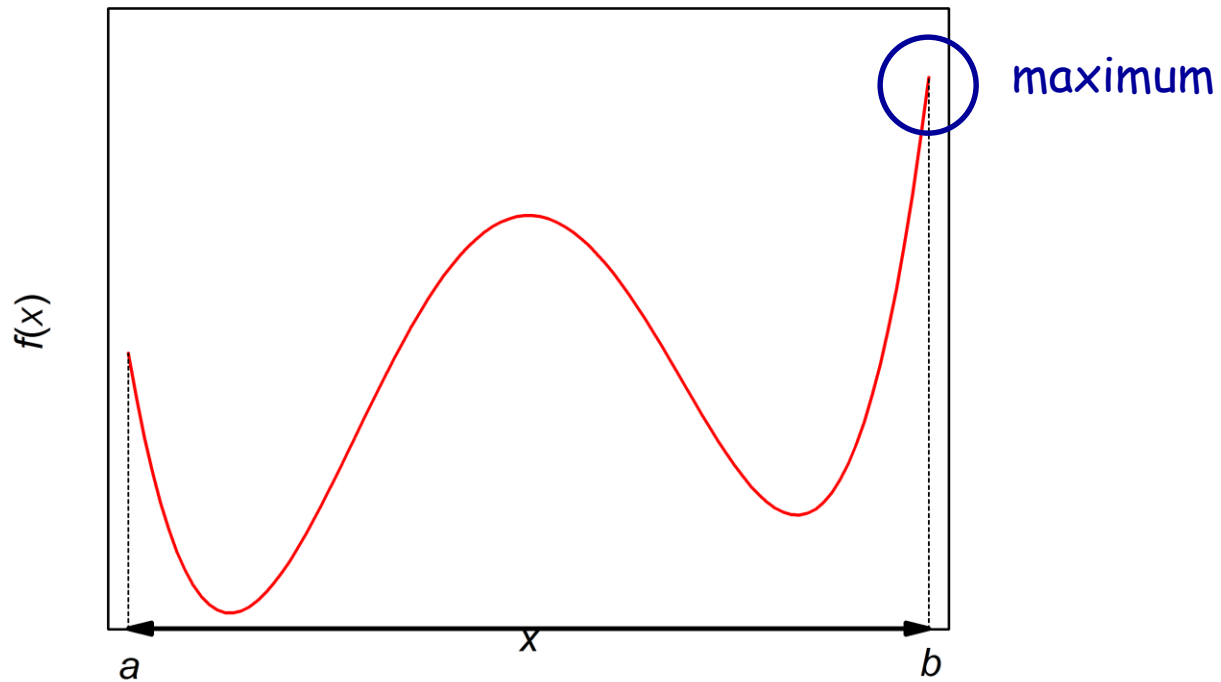
$$\min_{\langle a, b \rangle} f(x) = ?$$

$$\max_{\langle a, b \rangle} f(x) = ?$$

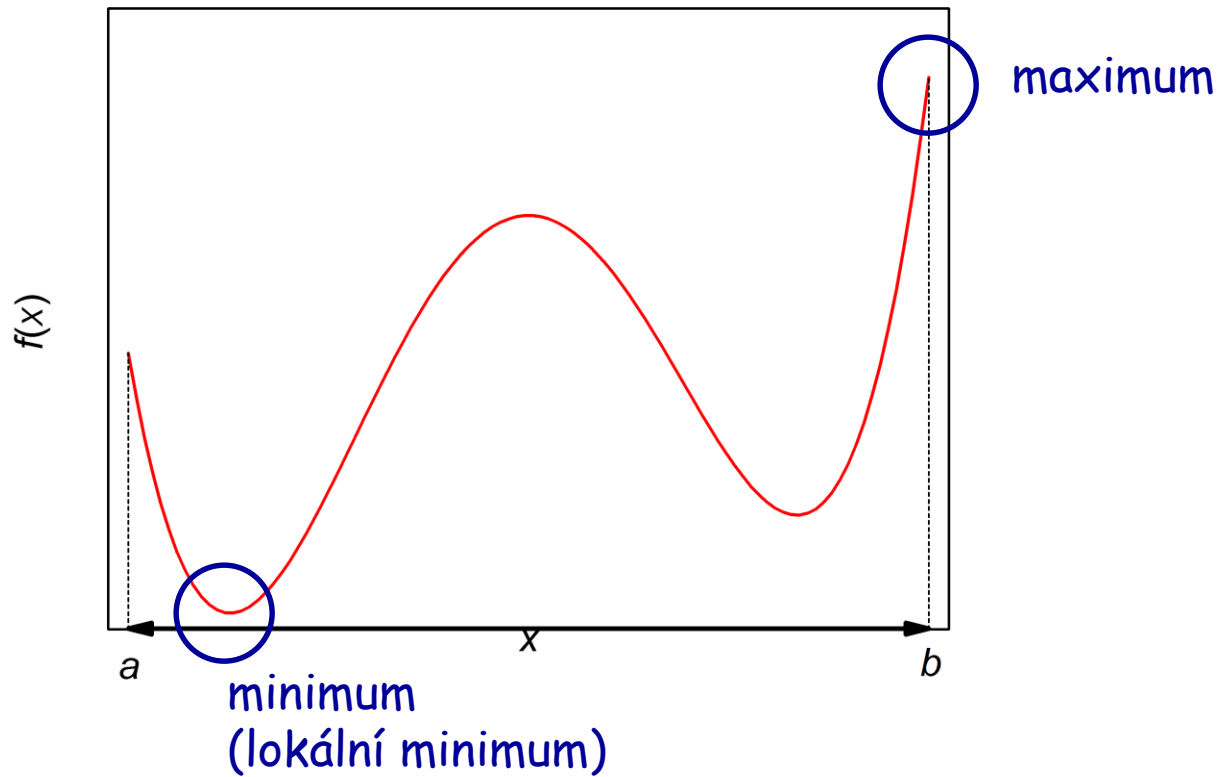
Problém



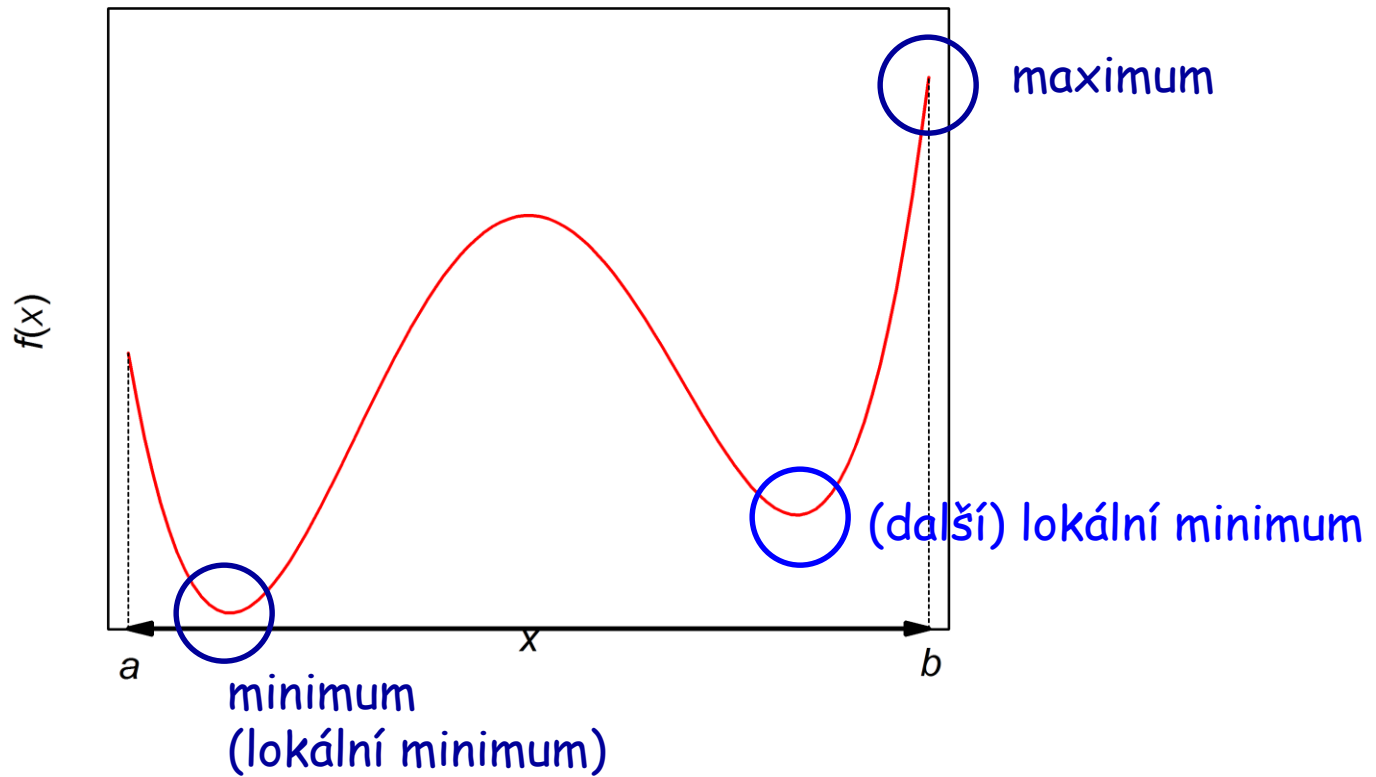
Problém



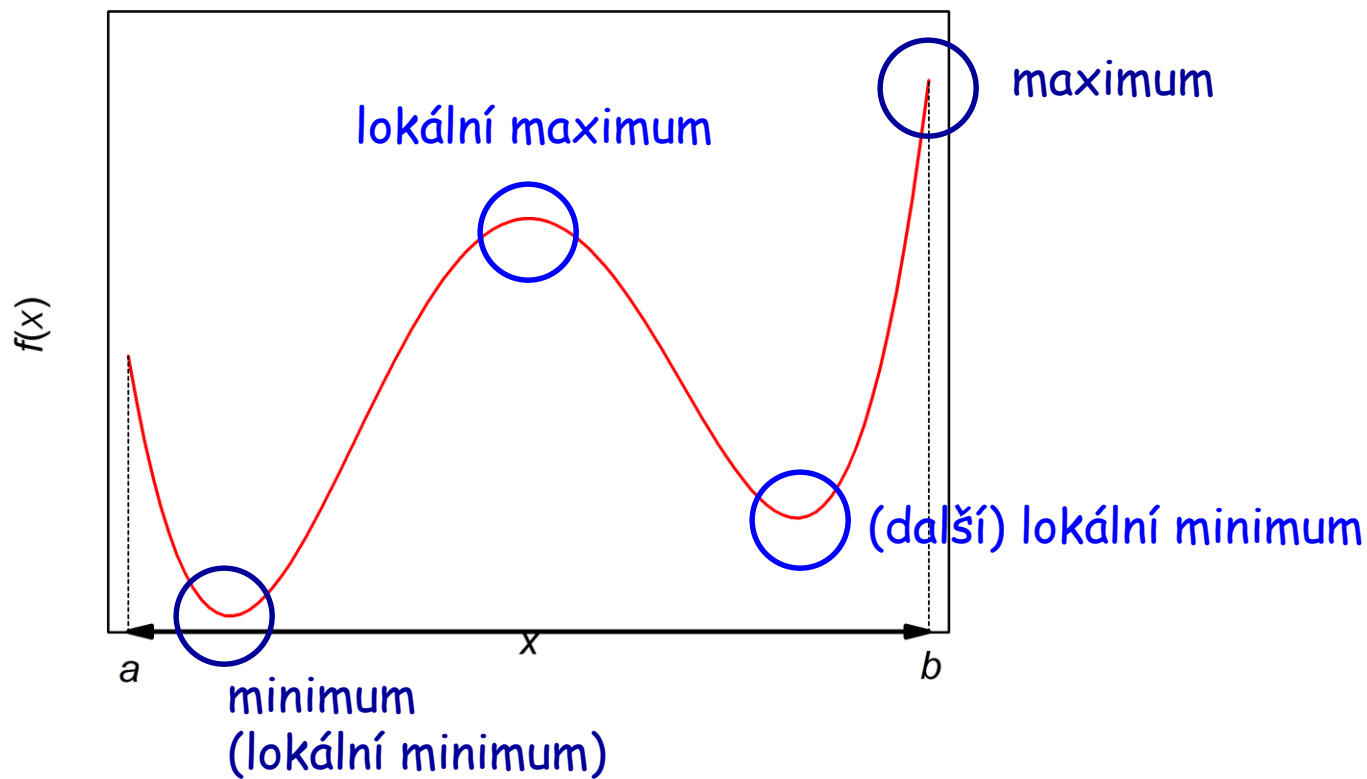
Problém



Problém



Problém



Problém

✓ rozšíření na ND případ $f(x_1, x_2, \dots, x_N)$

$$\min_{\Omega} f(x_1, x_2, \dots, x_N) = ?$$

$$\max_{\Omega} f(x_1, x_2, \dots, x_N) = ?$$

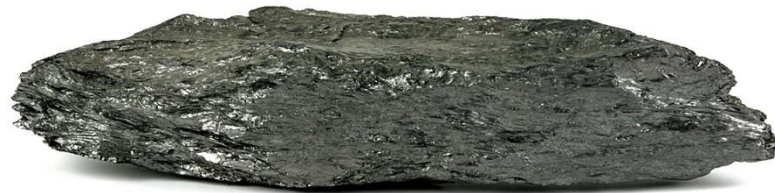
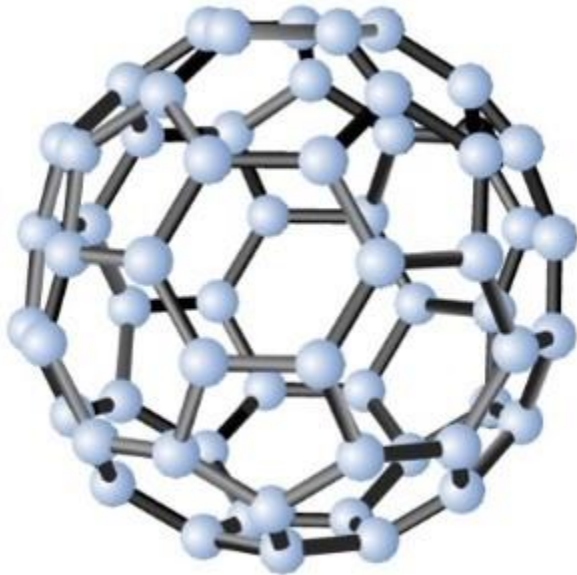
K čemu je to vlastně dobré?

- ✓ tvarová optimalizace



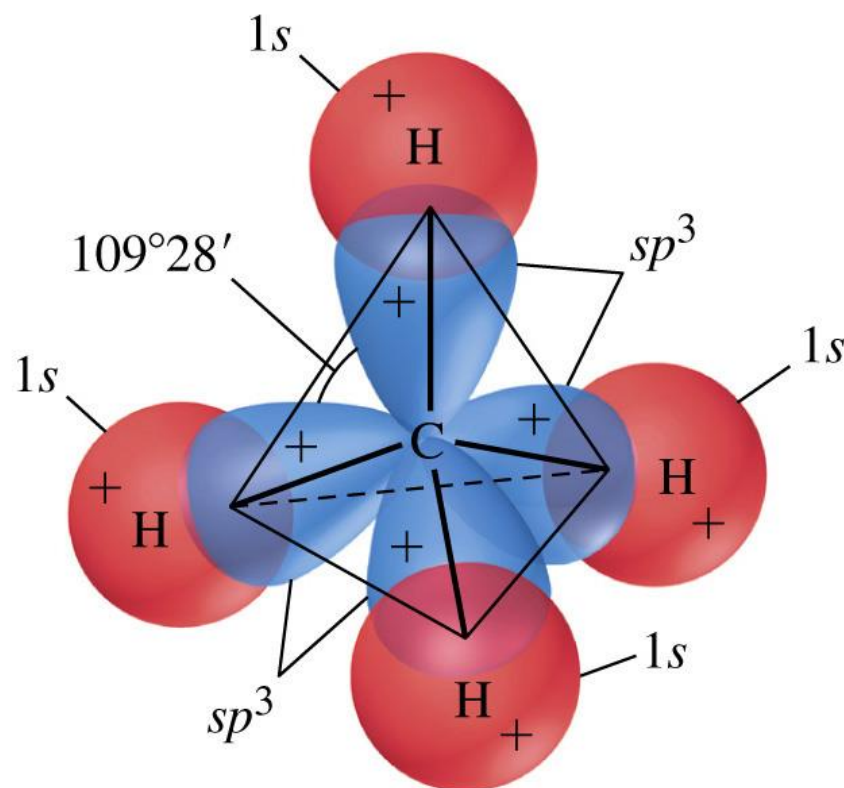
K čemu je to vlastně dobré?

- ✓ struktura molekul, nanočástic, krystalů ...



K čemu je to vlastně dobré?

- ✓ (nejen) chemické vazby



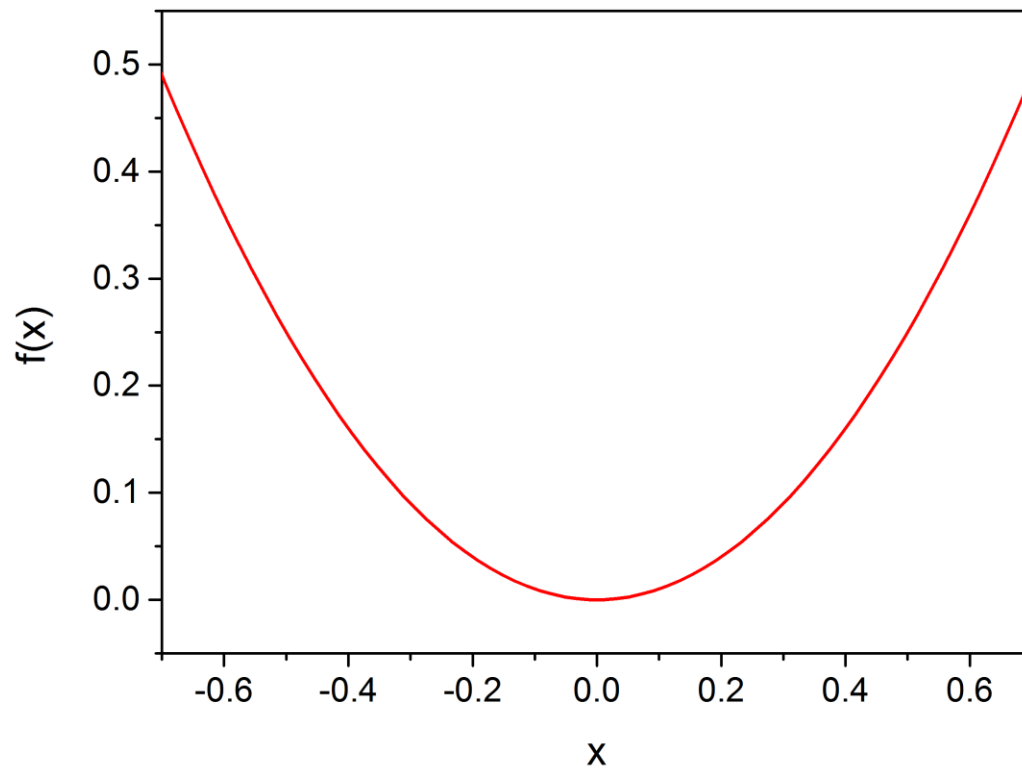
Problém

$$\min_{\langle a, b \rangle} f(x) = ?$$

$$\max_{\langle a, b \rangle} f(x) = ?$$

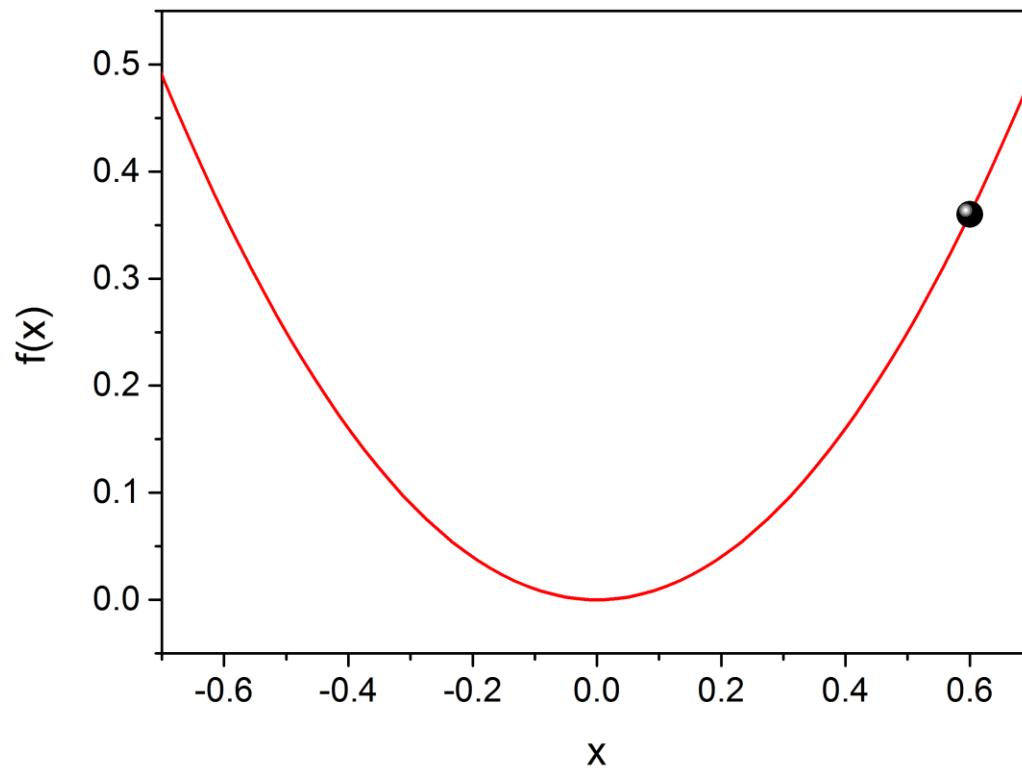
Řešení

Spádové metody - jedno lokální minimum



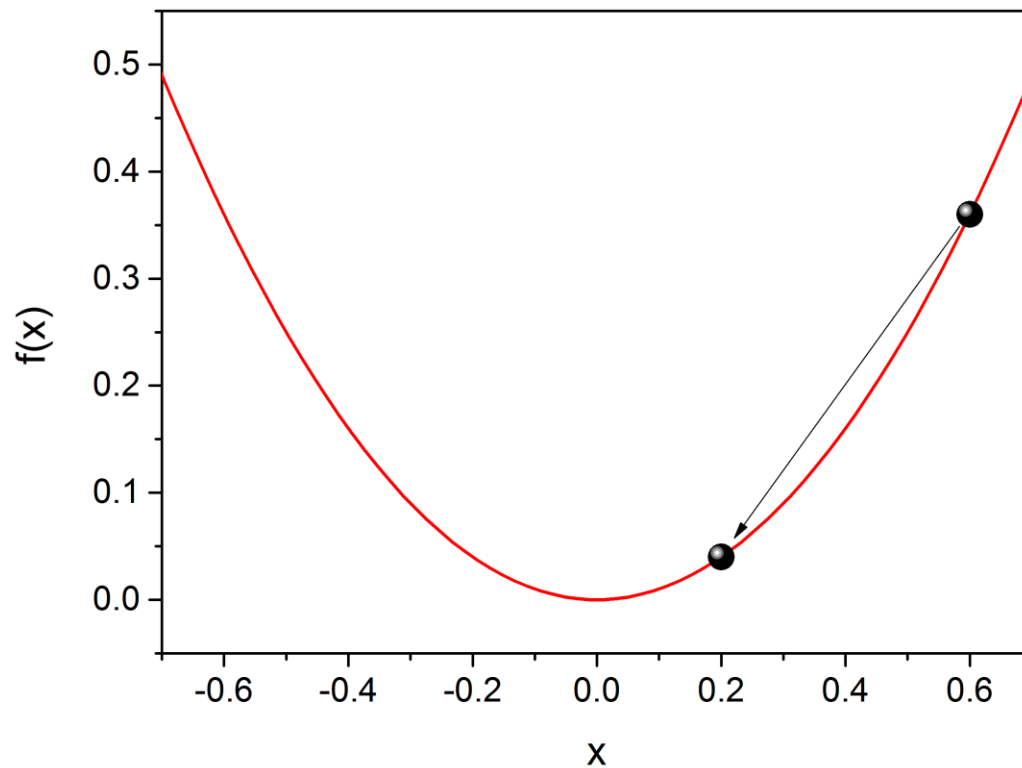
Řešení

Spádové metody - jedno lokální minimum



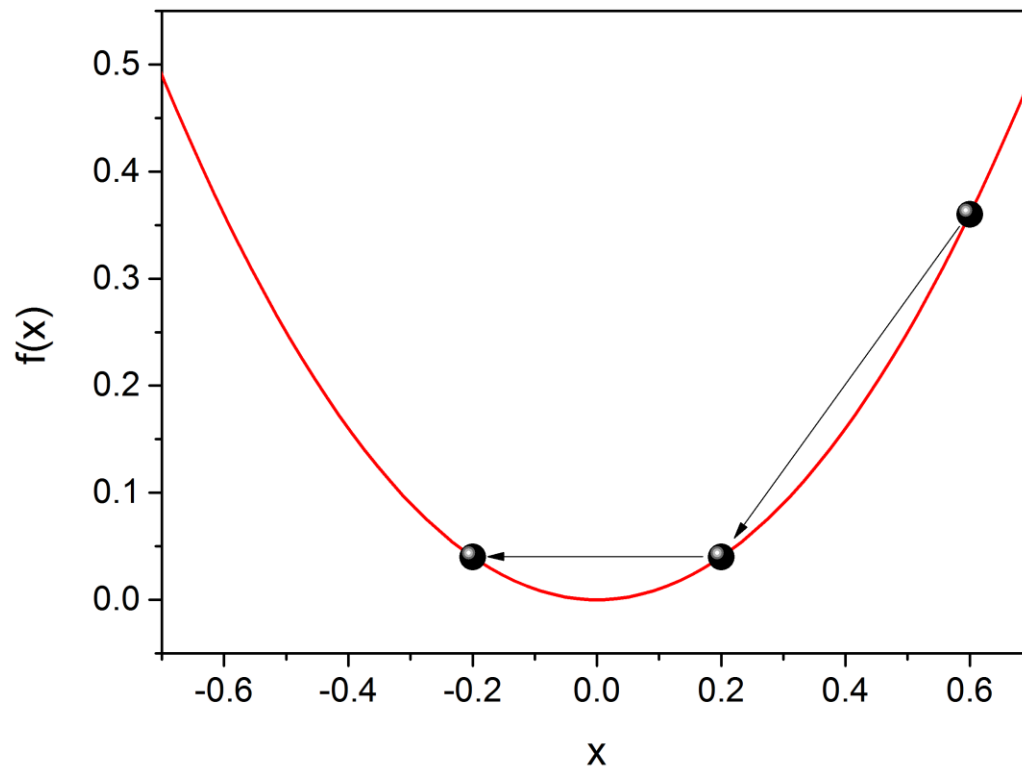
Řešení

Spádové metody - jedno lokální minimum



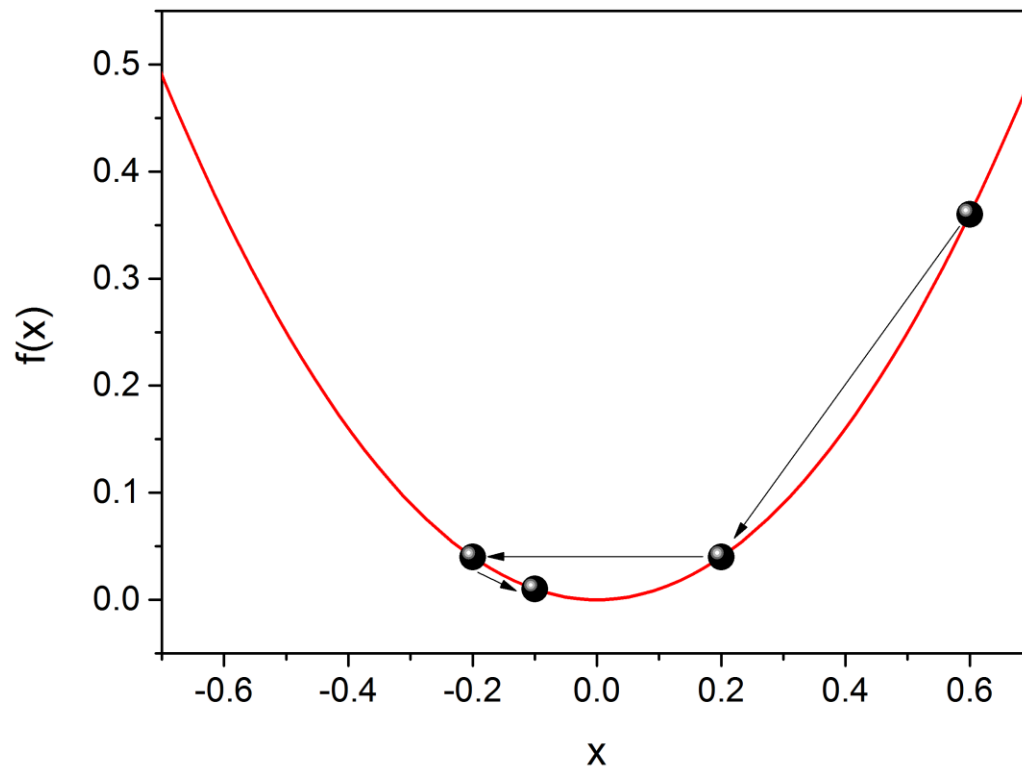
Řešení

Spádové metody - jedno lokální minimum



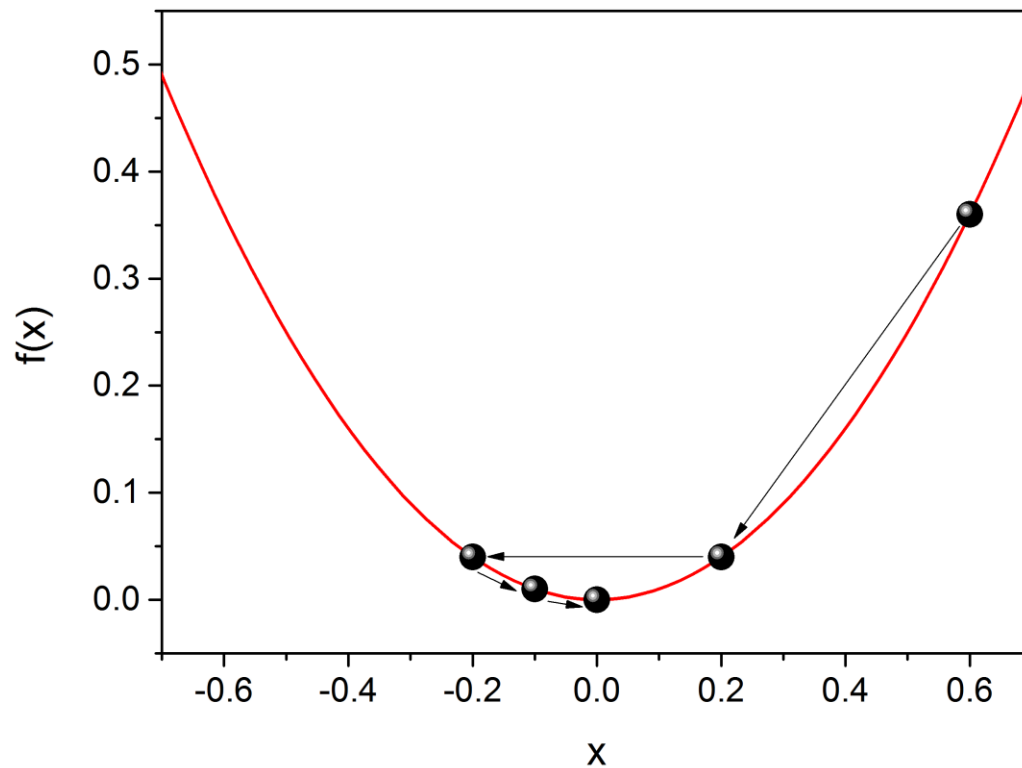
Řešení

Spádové metody - jedno lokální minimum



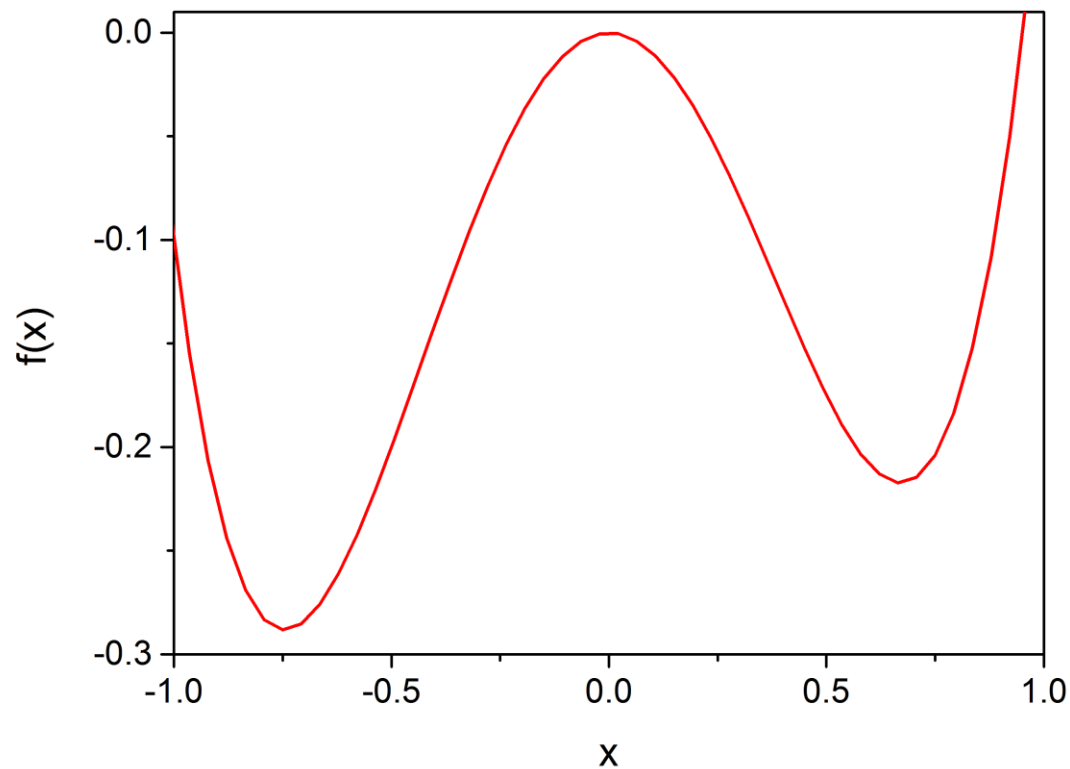
Řešení

Spádové metody - jedno lokální minimum



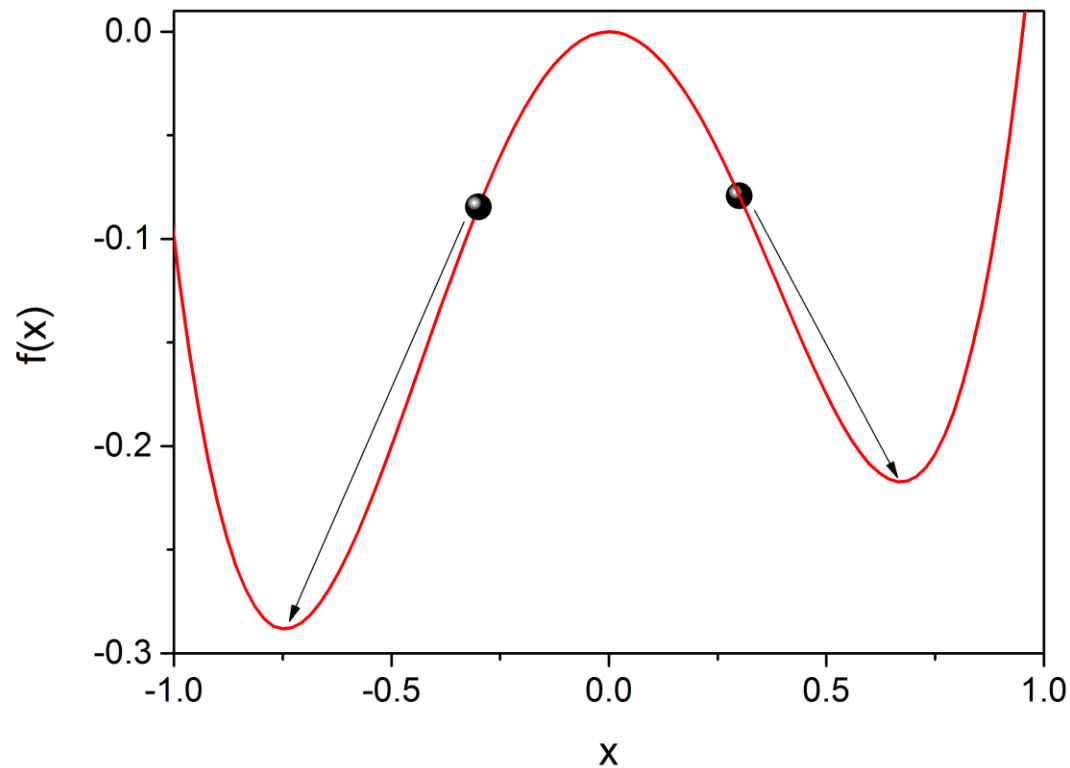
Řešení

Spádové metody - více lokálních minim



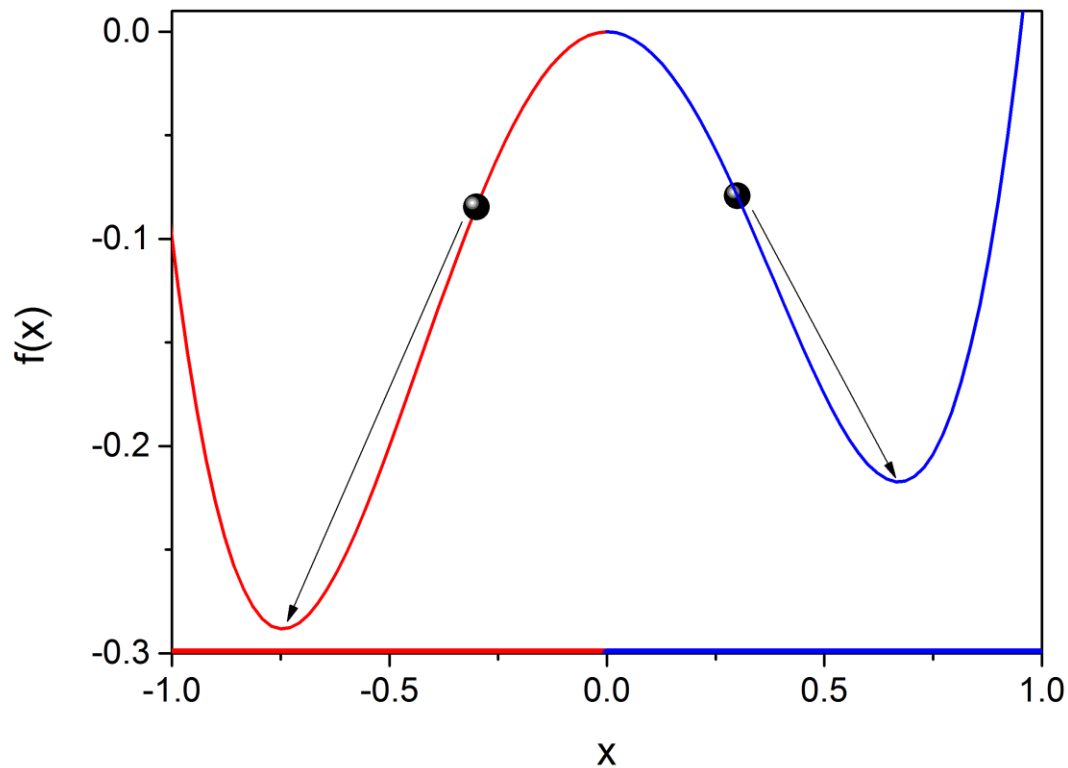
Řešení

Spádové metody - více lokálních minim



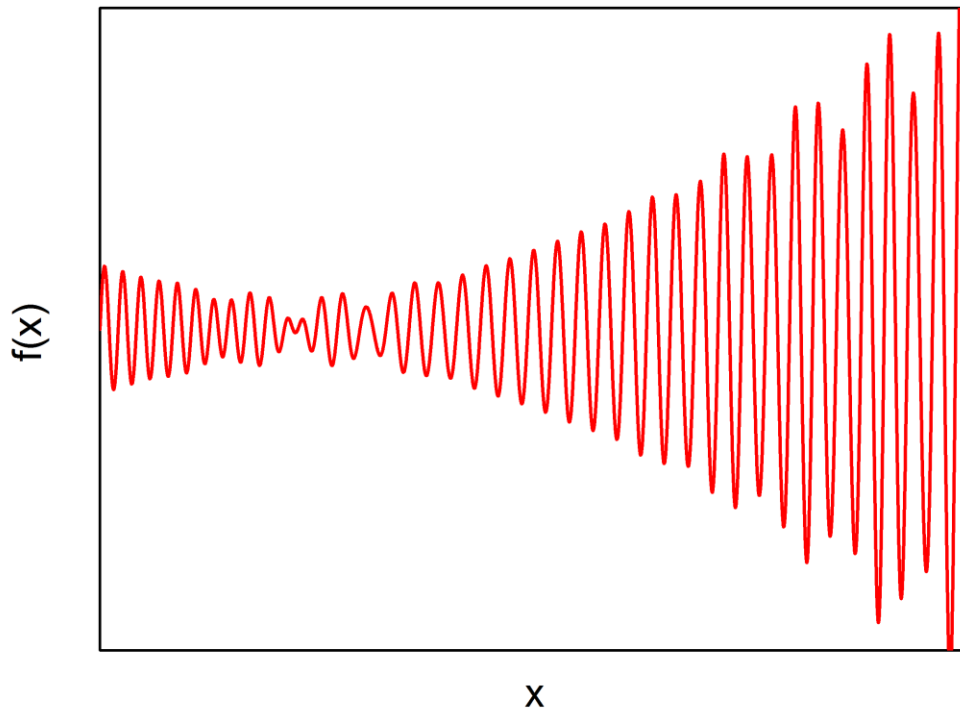
Řešení

Spádové metody - více lokálních minim

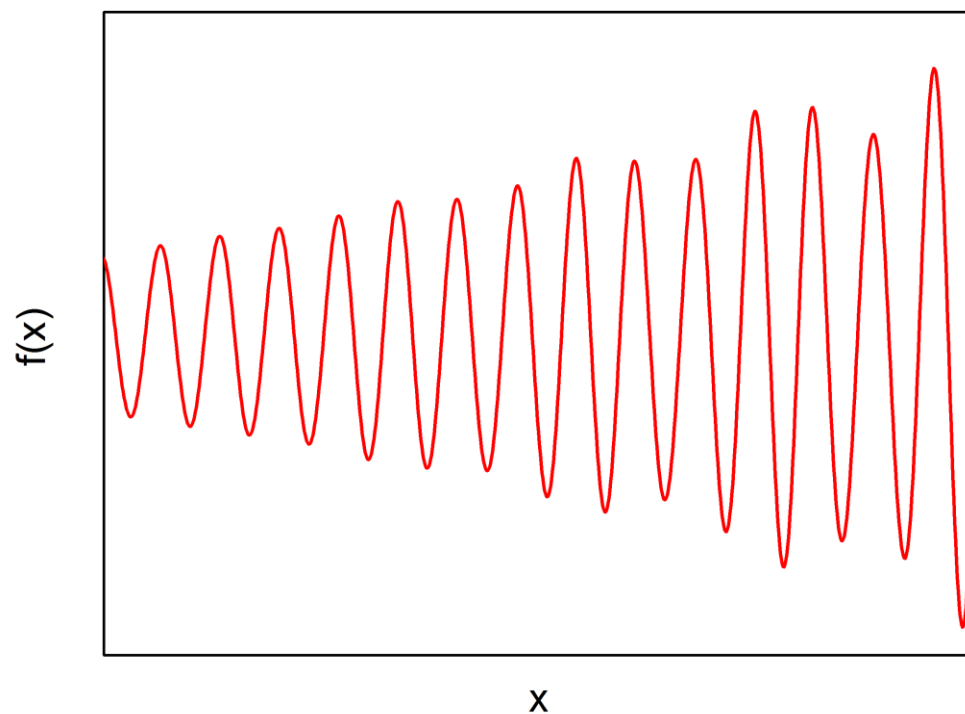


Řešení

Spádové metody – více lokálních minim

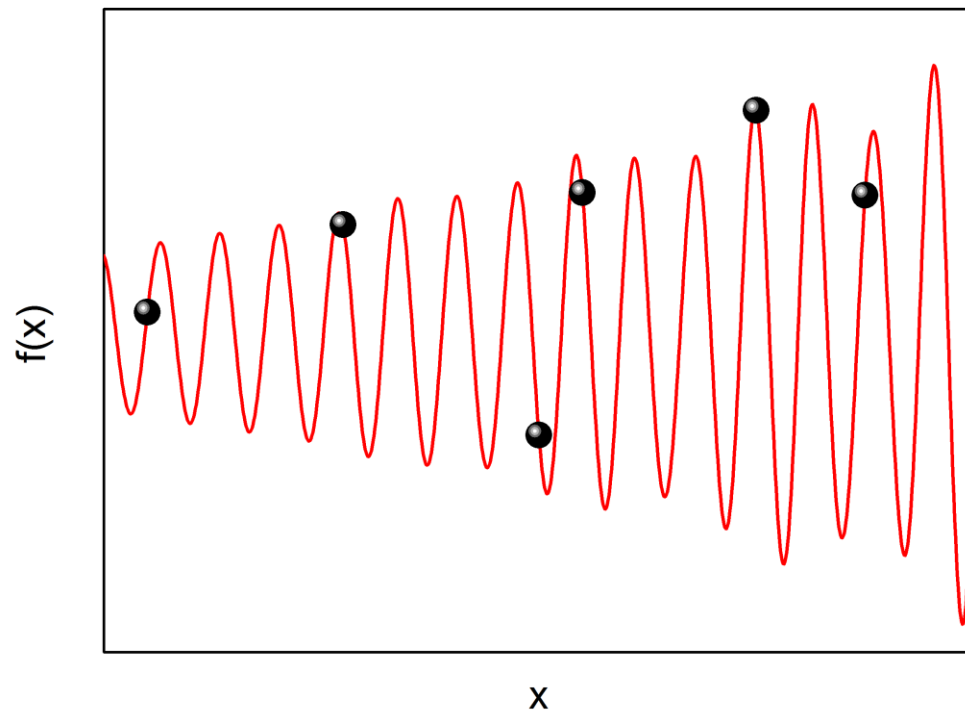


Ingredience řešení



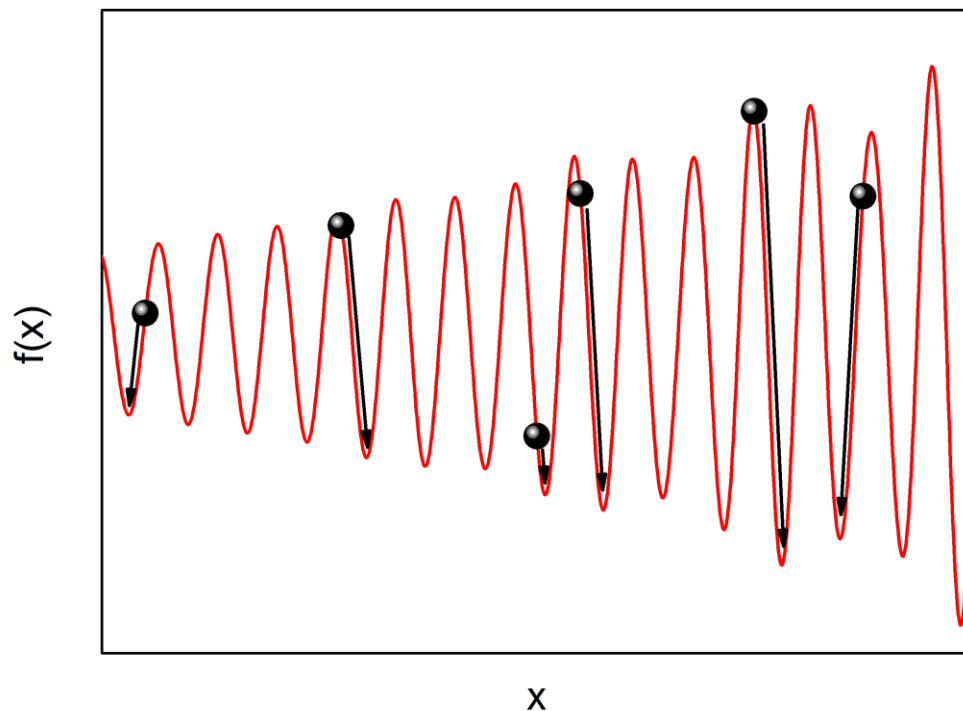
Ingredience řešení

✓ prohledávání



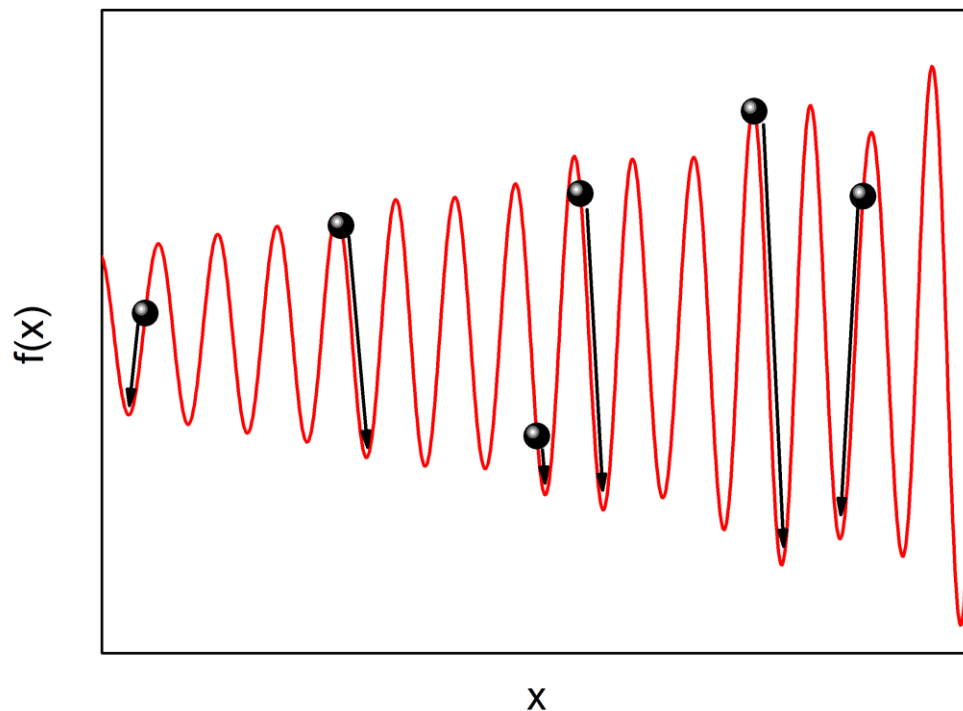
Ingredience řešení

- ✓ prohledávání
- ✓ dohledávání



Ingredience řešení

- ✓ **prohledávání**
- ✓ **dohledávání**



Biologická inspirace

Biologická evoluce

Biologická evoluce

CO?

hledání maxim(a) fyzické zdatnosti

$$FZ = f(G)$$

[G = kombinace genů]

Biologická evoluce

CO?

hledání maxim(a) fyzické zdatnosti

$$FZ = f(G)$$

[G = kombinace genů]

JAK?

Změny G

- ✓ mutace
- ✓ dědičnost (křížení)

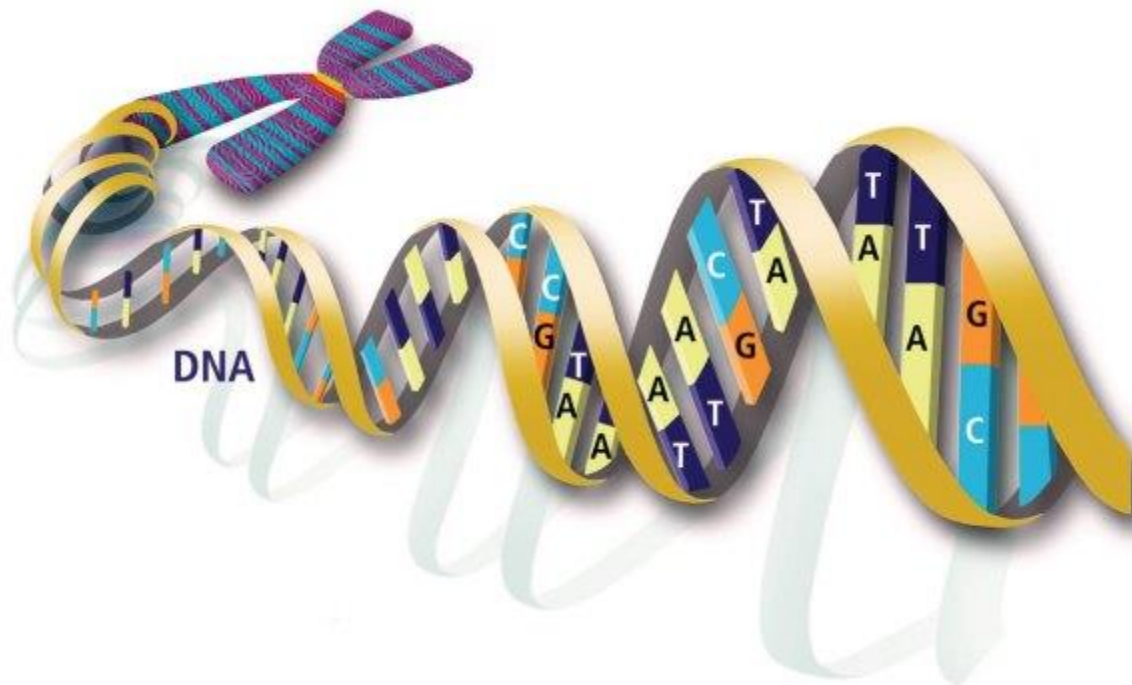
tak, aby $f(G)$ dosáhla maximální hodnoty

- ✓ přírodní výběr (selekce)

Genetická informace

DNA

...|CGG|TAC|GAT|...



Expresa genetické informace

geny $\rightarrow$ proteiny $\rightarrow$... $\rightarrow$ organismus

$$G \xrightarrow{\text{proteiny, ...}} \text{FZ} = f(G)$$

Expresse genetické informace

geny $\rightarrow$ proteiny $\rightarrow$... $\rightarrow$ organismus

$$G \xrightarrow{\text{proteiny, ...}} FZ = f(G)$$

Inspirace

$$x \xrightarrow{f} y = f(x)$$

Jak na to?

Změny x :

- ✓ mutace
- ✓ dědičnost (křížení)

tak, aby $f(x)$ dosáhla maximální/minimální hodnoty

- ✓ přírodní výběr (selekce)

Genetické algoritmy

Problém

Minimum funkce na (uzavřeném) intervalu

$$\min_{x \in \langle a, b \rangle} f(x)$$

Biologická reprezentace problému

Populace „jedinců“ (geny, chromozomy)

$$x_1, x_2, \dots, x_N; \quad x_k \in \langle a, b \rangle$$

Biologická reprezentace problému

Populace „jedinců“ (geny, chromozomy)“

$$x_1, x_2, \dots, x_N; \quad x_k \in \langle a, b \rangle$$

Binární reprezentace nezávislé proměnné

$x \rightarrow \vec{\xi} \in \{0,1\}^n$, např. $\vec{\xi} = [1,0,0,1,1]$, tedy $\xi_1 = 1, \xi_2 = 0, \dots$

$$x = a + \frac{b-a}{2^n - 1} \sum_{k=1}^n \xi_k 2^{n-k}$$

Biologická reprezentace problému

Populace „jedinců“ (geny, chromozomy)“

$$x_1, x_2, \dots, x_N; \quad x_k \in \langle a, b \rangle$$

Binární reprezentace nezávislé proměnné

$x \rightarrow \vec{\xi} \in \{0,1\}^n$, např. $\vec{\xi} = [1,0,0,1,1]$, tedy $\xi_1 = 1, \xi_2 = 0, \dots$

$$x = a + \frac{b-a}{2^n - 1} \sum_{k=1}^n \xi_k 2^{n-k}$$

Příklad $\vec{\xi} = [1,0,0,1,1], a=0, b=1 \Rightarrow x = \frac{1 \times 2^4 + 0 \times 2^3 + \dots + 1 \times 2^0}{2^5 - 1} = \frac{19}{31} \approx 0,6129\dots$

Biologická reprezentace problému

Evoluce (střídání generací)

0: $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_N^{(0)}$

1: $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_N^{(1)}$

n : $x_1^{(n)}, x_2^{(n)}, \dots, x_N^{(n)}$



1) POTOMSTVO

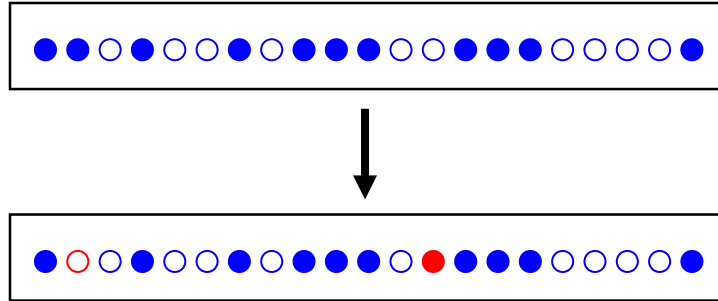
mutace

křížení

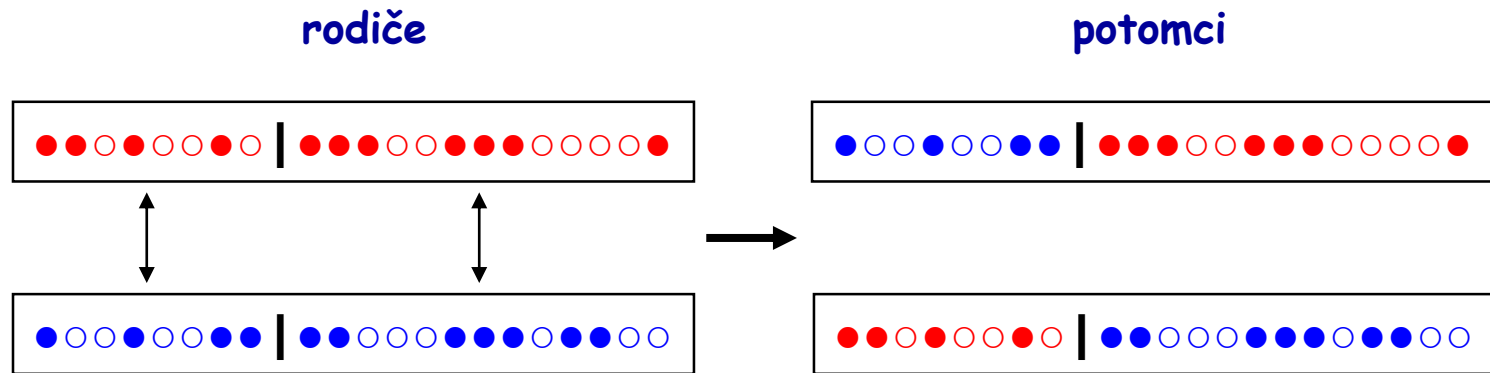
2) SELEKCE

fyzická zdatnost

Mutate



Křížení



Selekce

rodiče + potomci

$$x_1^{(K)}, x_2^{(K)}, \dots, x_N^{(K)}; x_1^{(K)}, x_2^{(K)}, \dots, x_M^{(K)}$$

Selekce

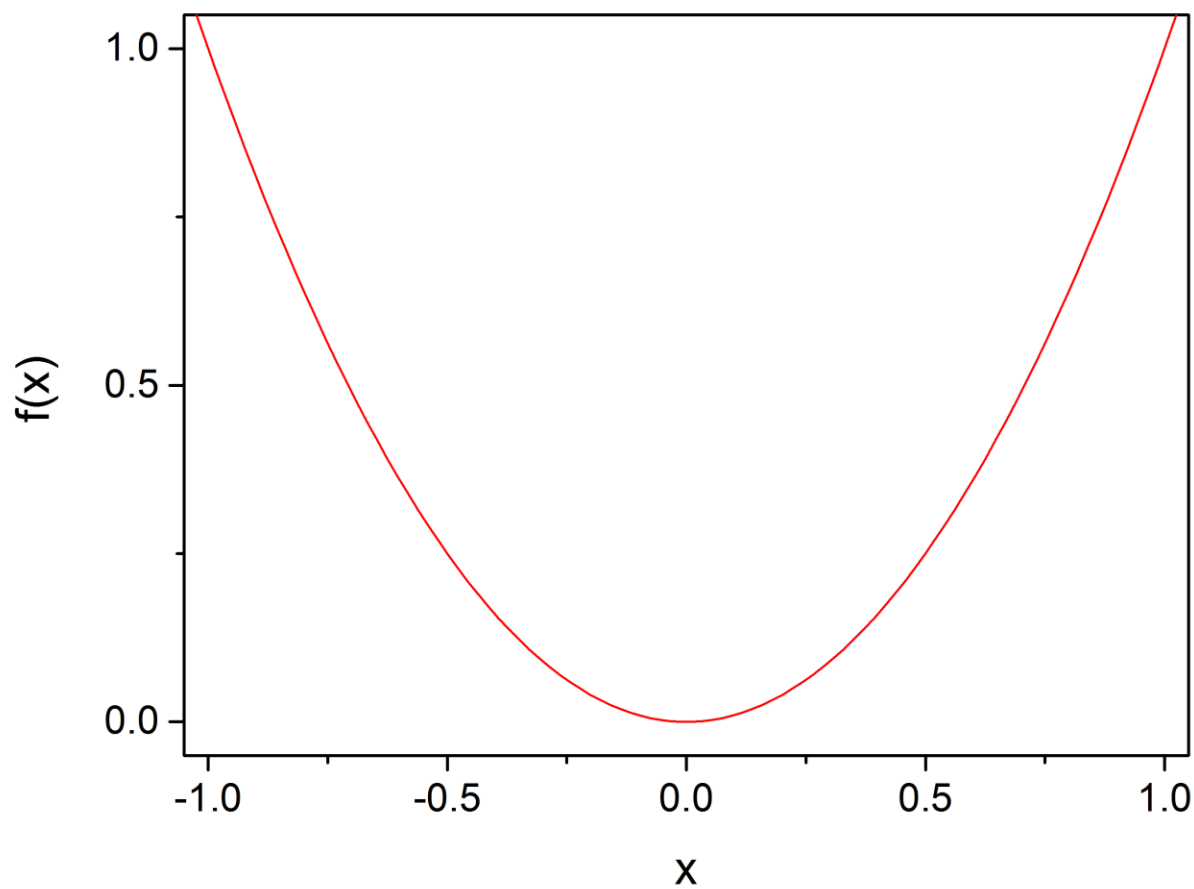
rodiče + potomci

výběr do další generace dle fyzické zdatnosti
[hodnoty $f(x)$]

$$x_1^{(K)}, x_2^{(K)}, \dots, x_N^{(K)} ; x_1^{(K)}, x_2^{(K)}, \dots, x_M^{(K)} \rightarrow x_1^{(K+1)}, x_2^{(K+1)}, \dots, x_N^{(K+1)}$$

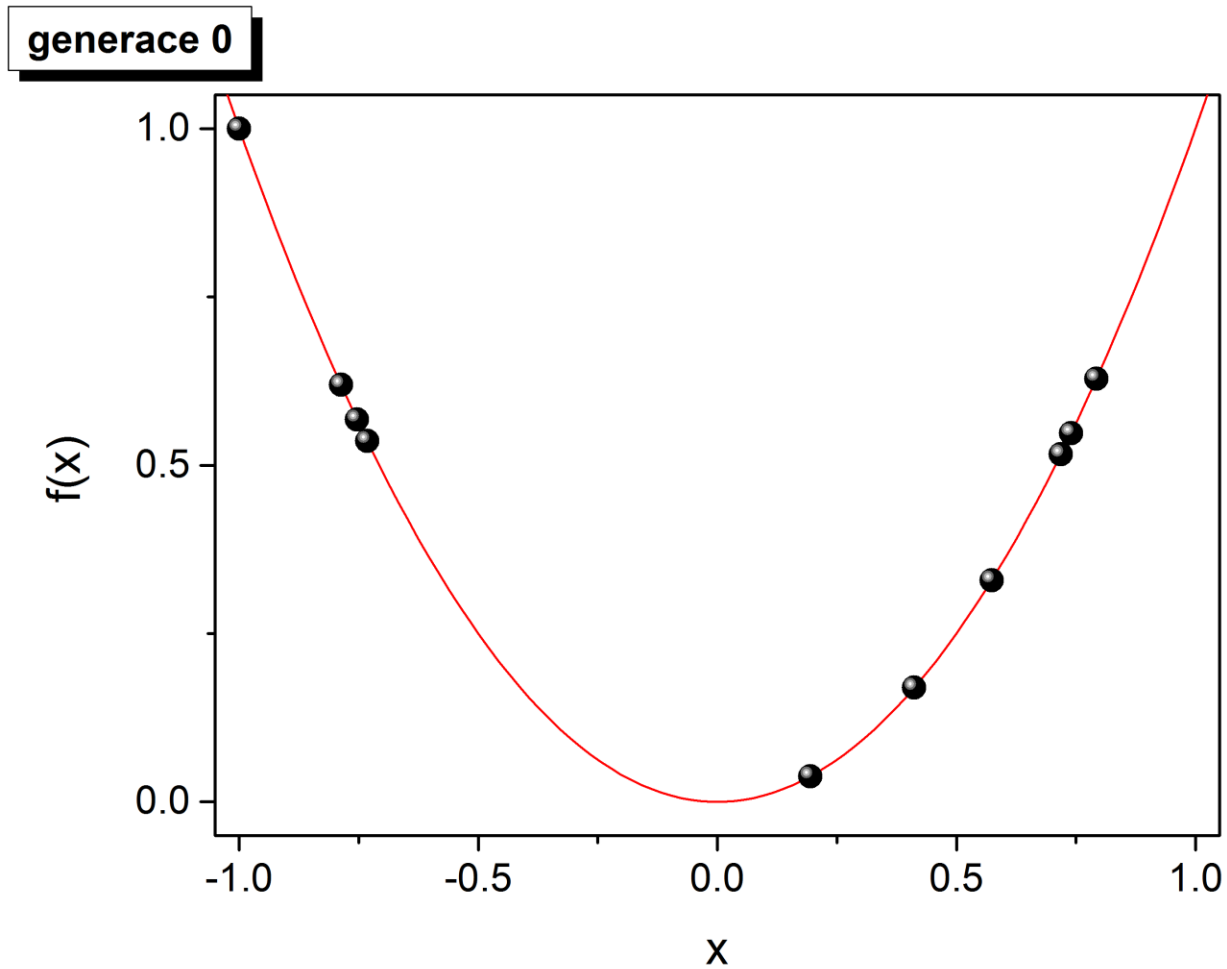
Ukázka 1

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^2 \}$$



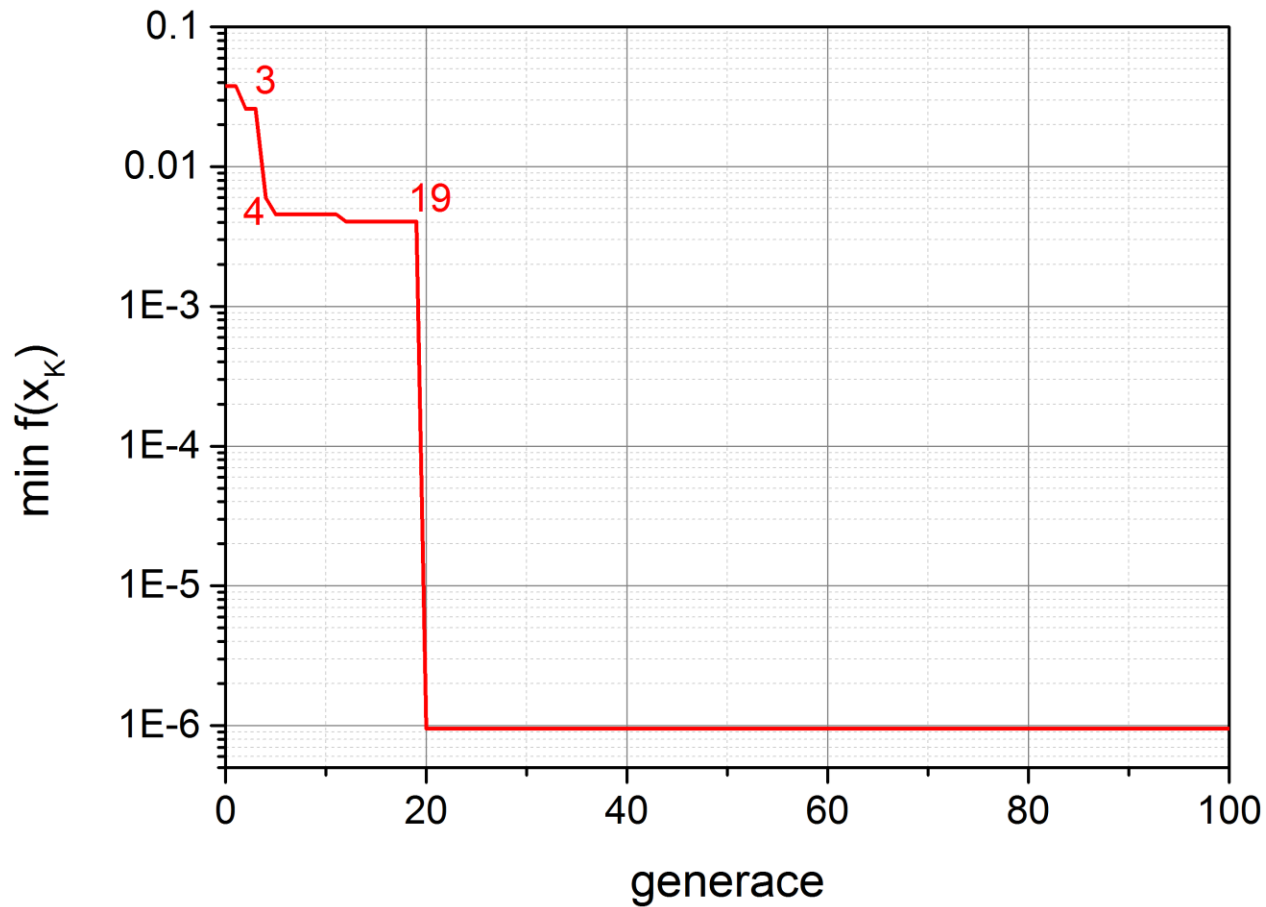
Ukázka 1

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^2 \}$$



Ukázka 1

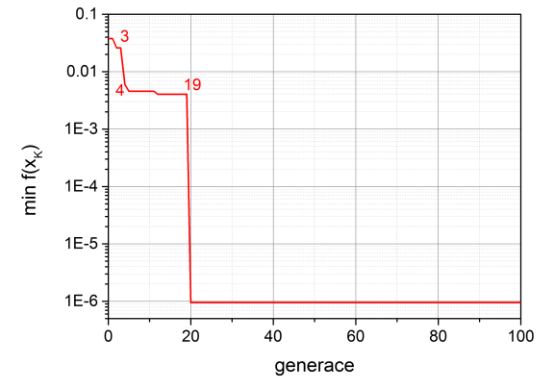
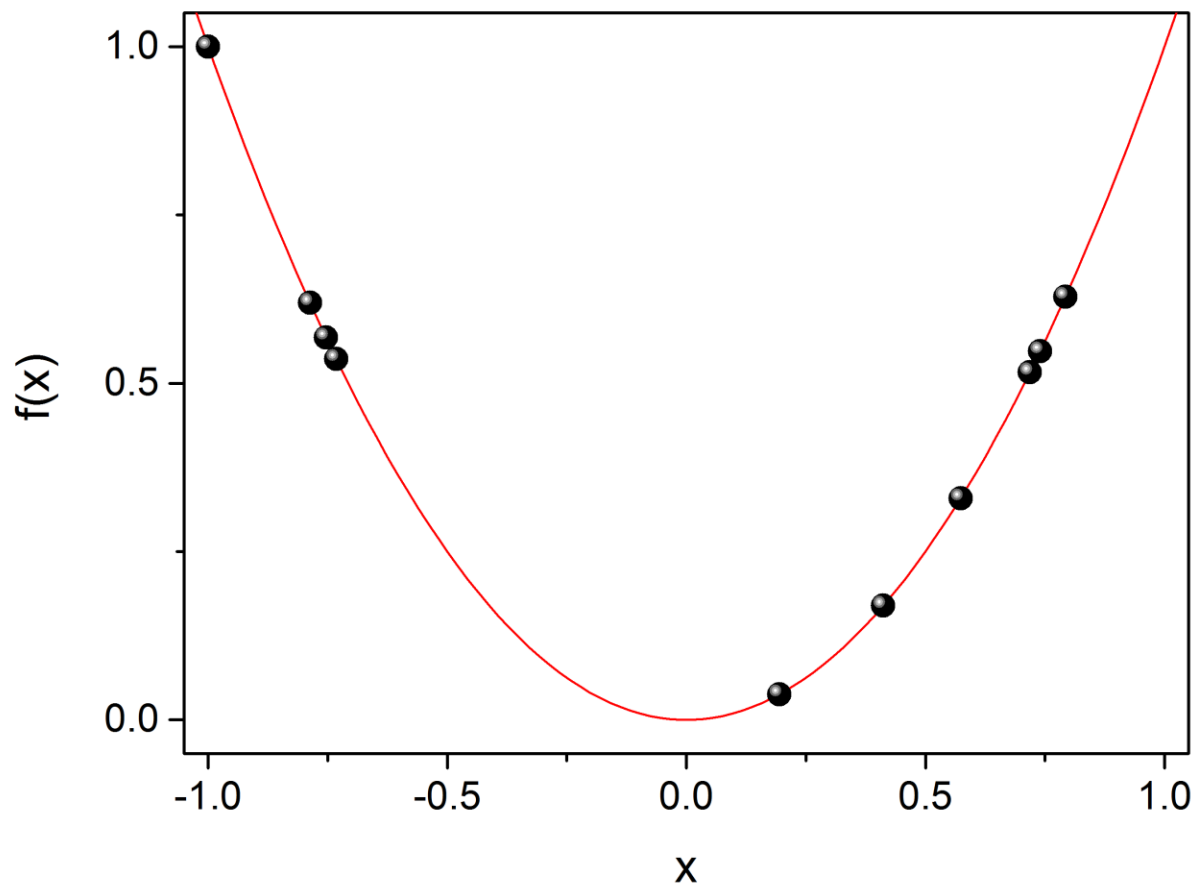
$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^2 \}$$



Ukázka 1

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^2 \}$$

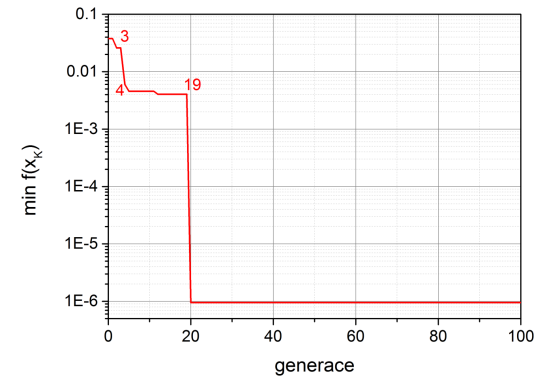
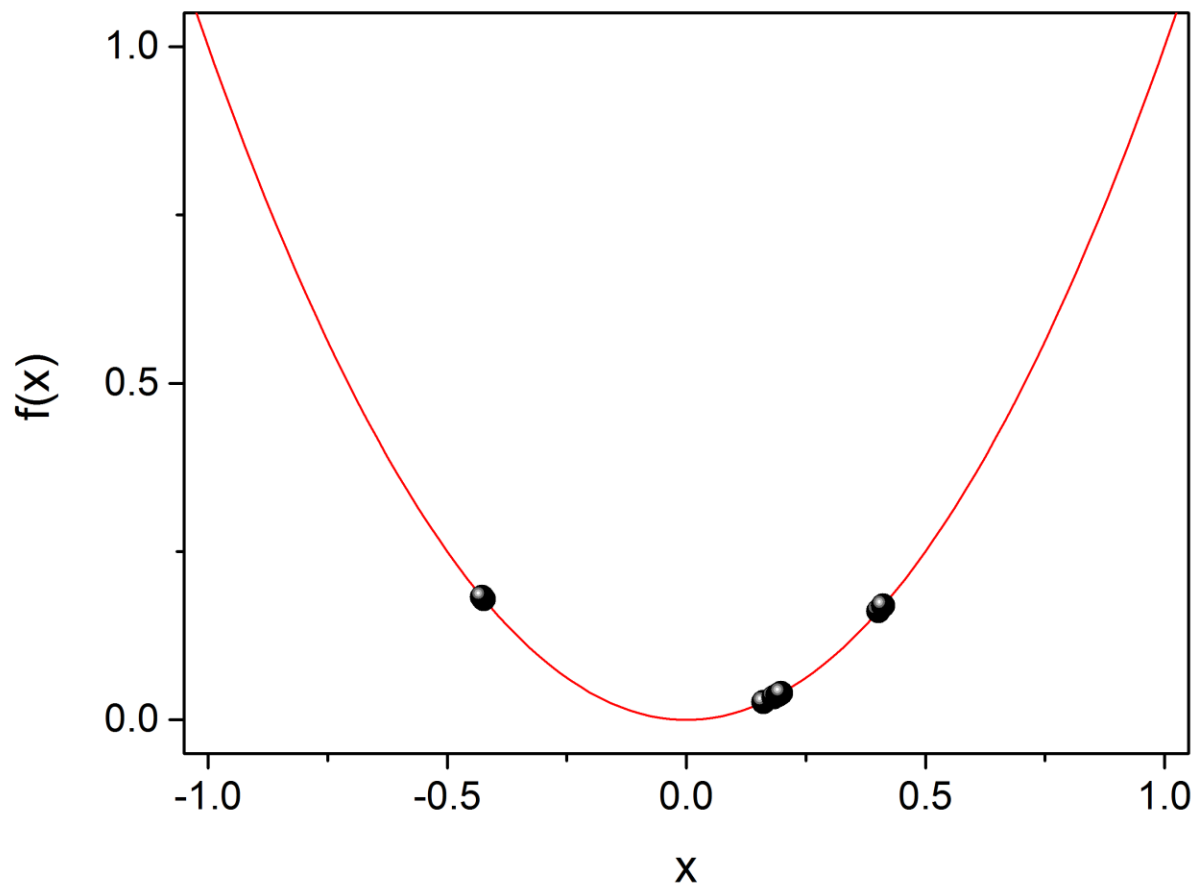
generace 0



Ukázka 1

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^2 \}$$

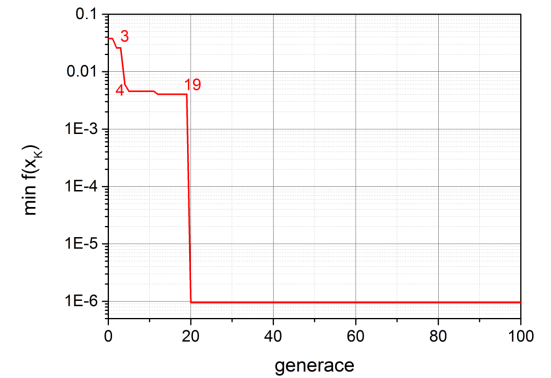
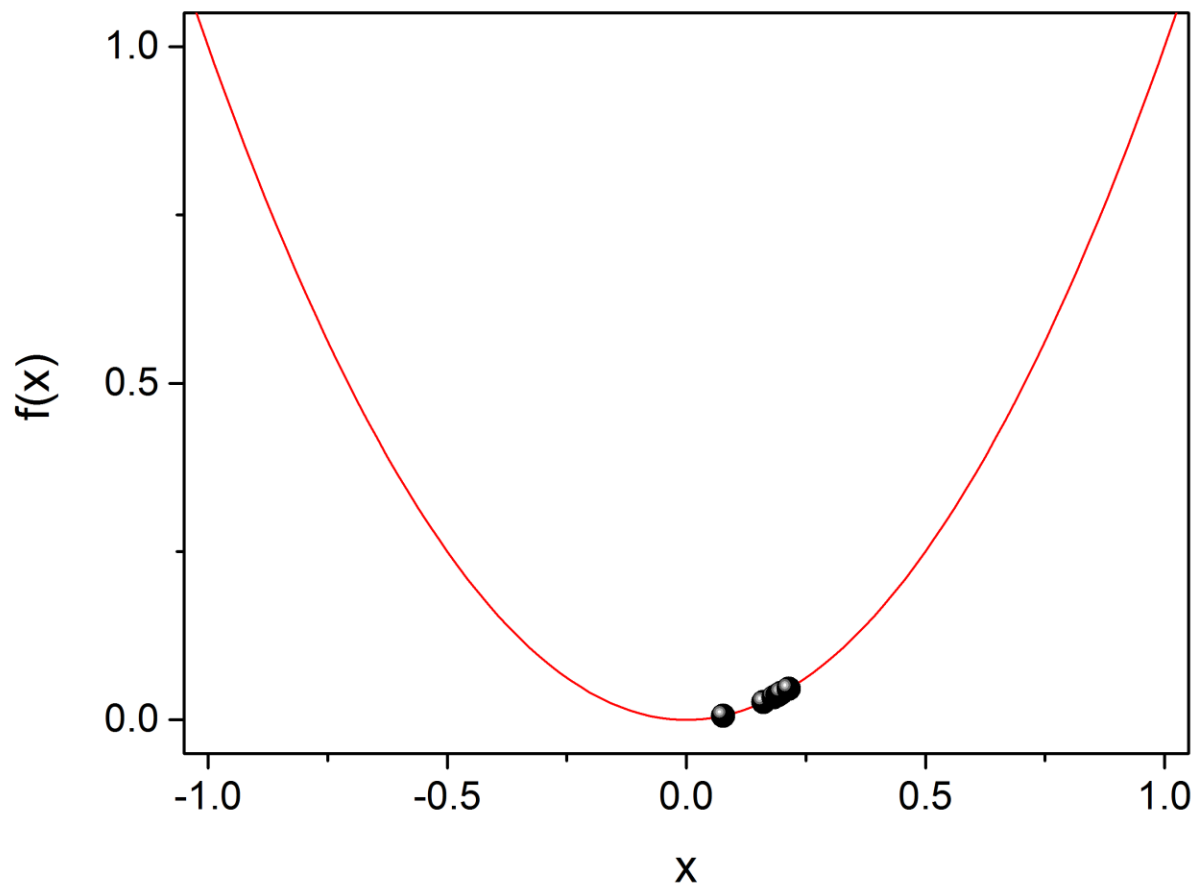
generace 3



Ukázka 1

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^2 \}$$

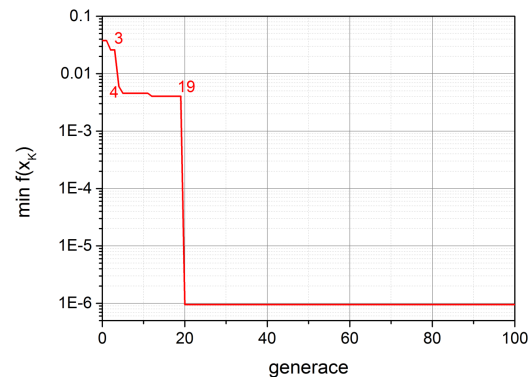
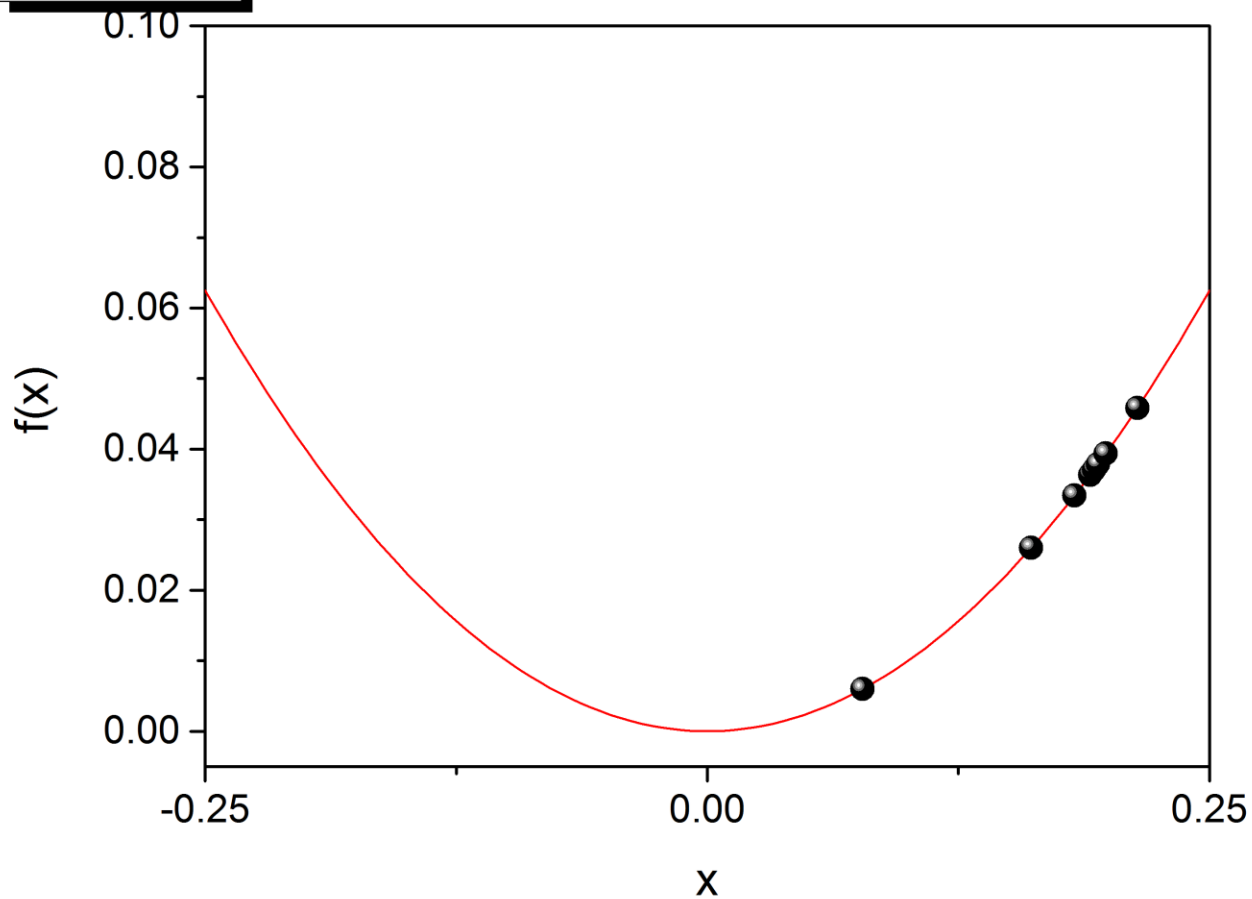
generace 4



Ukázka 1

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^2 \}$$

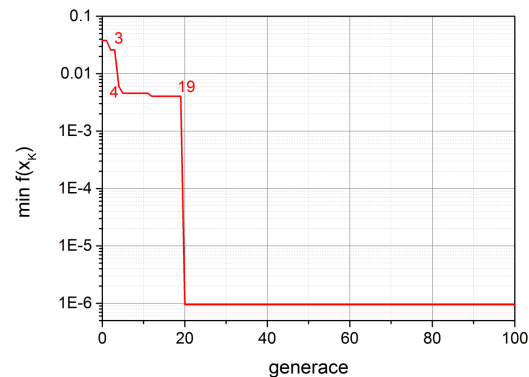
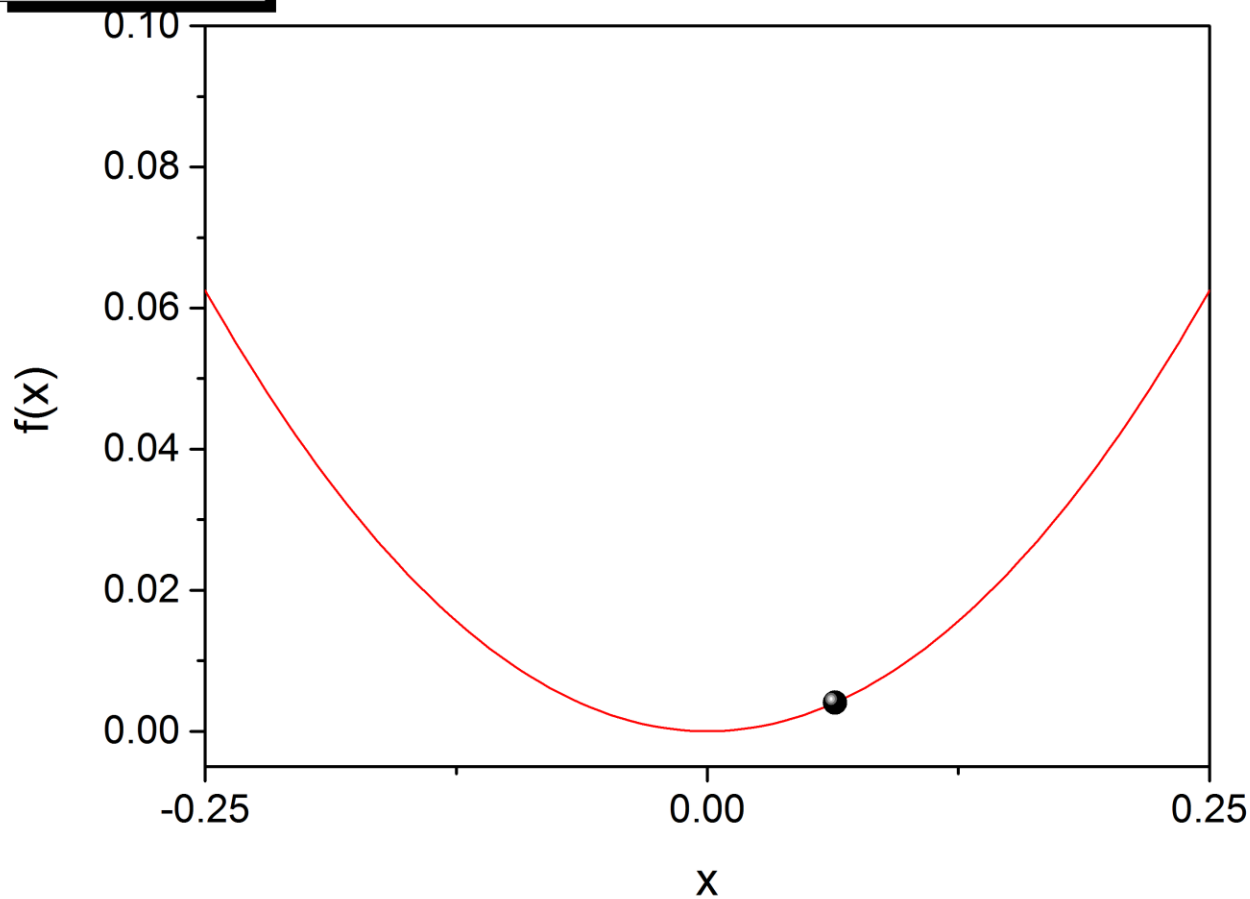
generace 4



Ukázka 1

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^2 \}$$

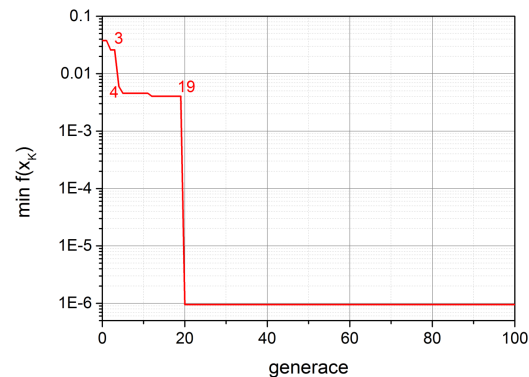
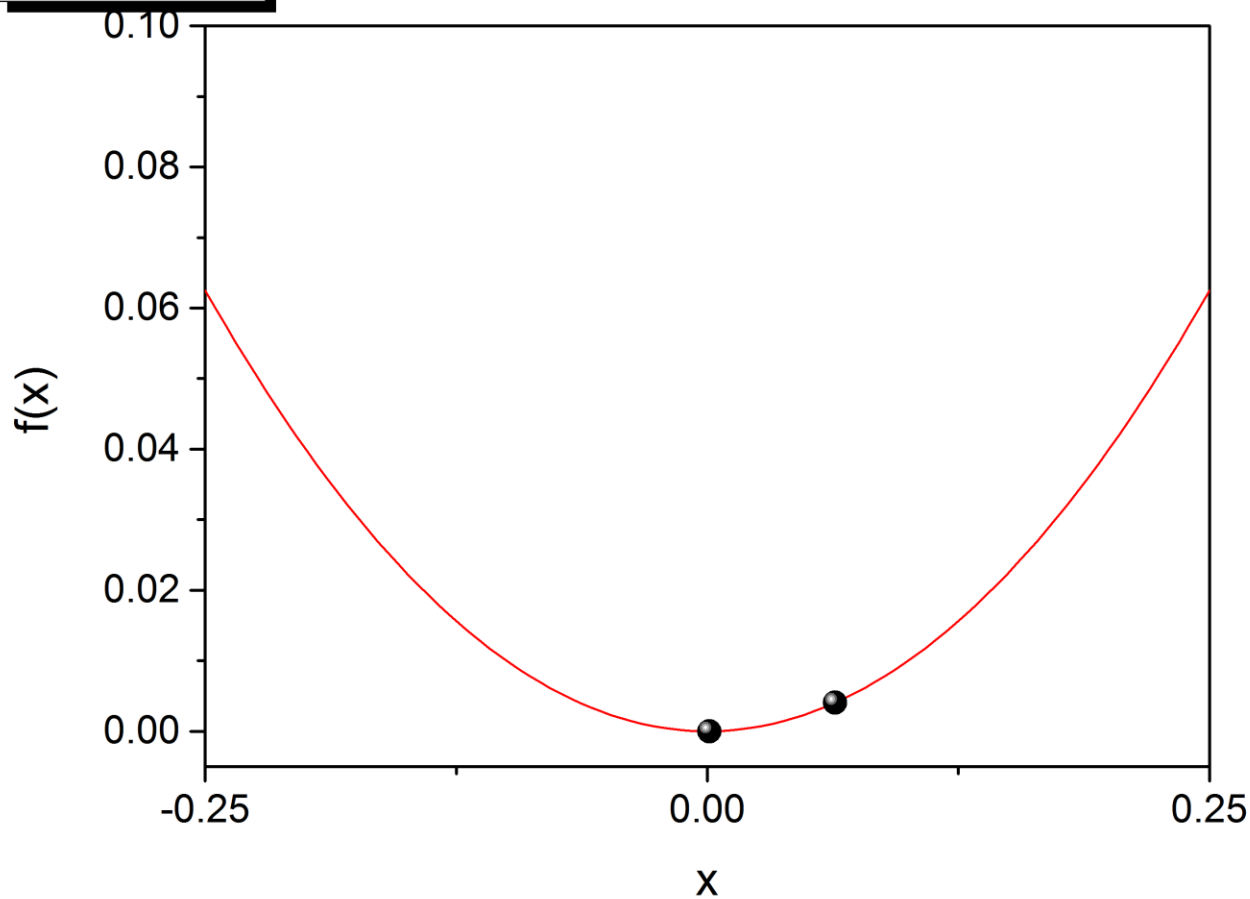
generace 19



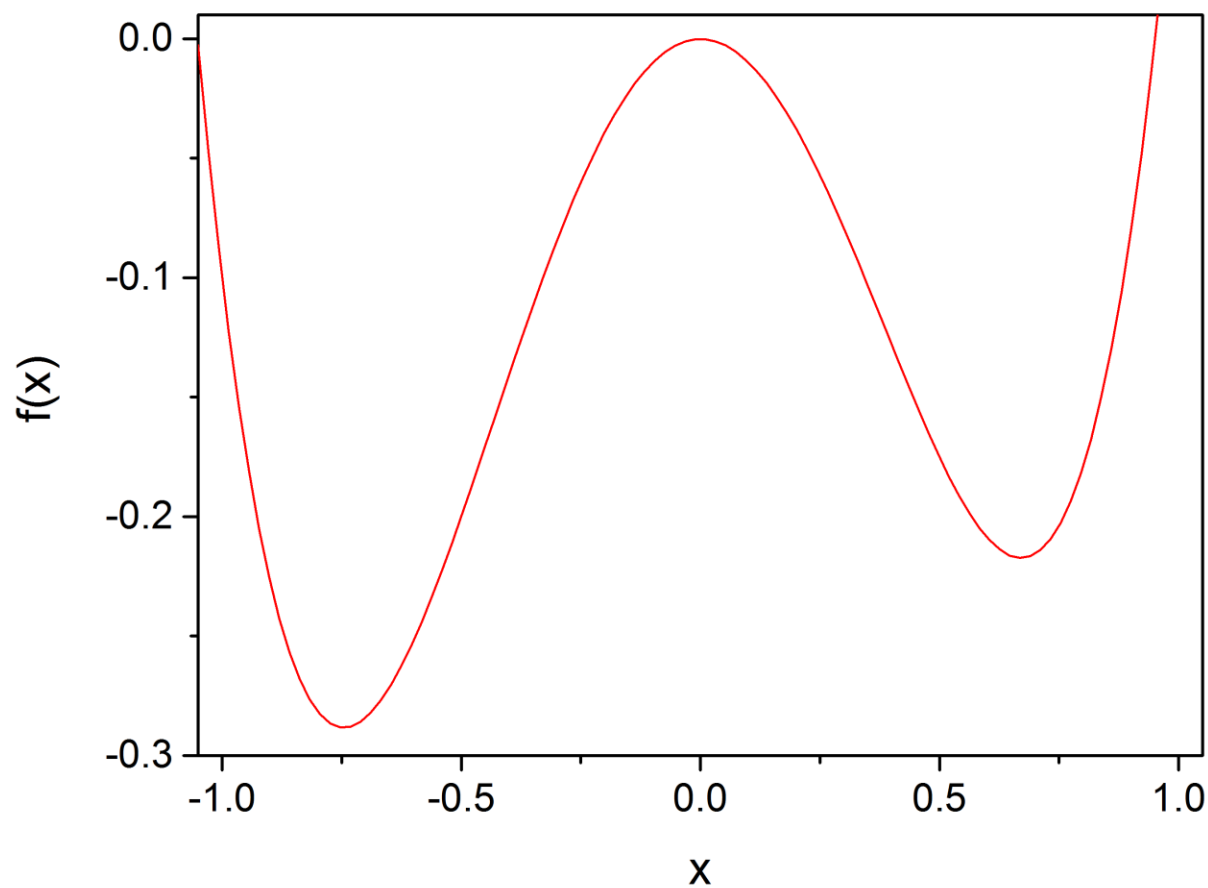
Ukázka 1

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^2 \}$$

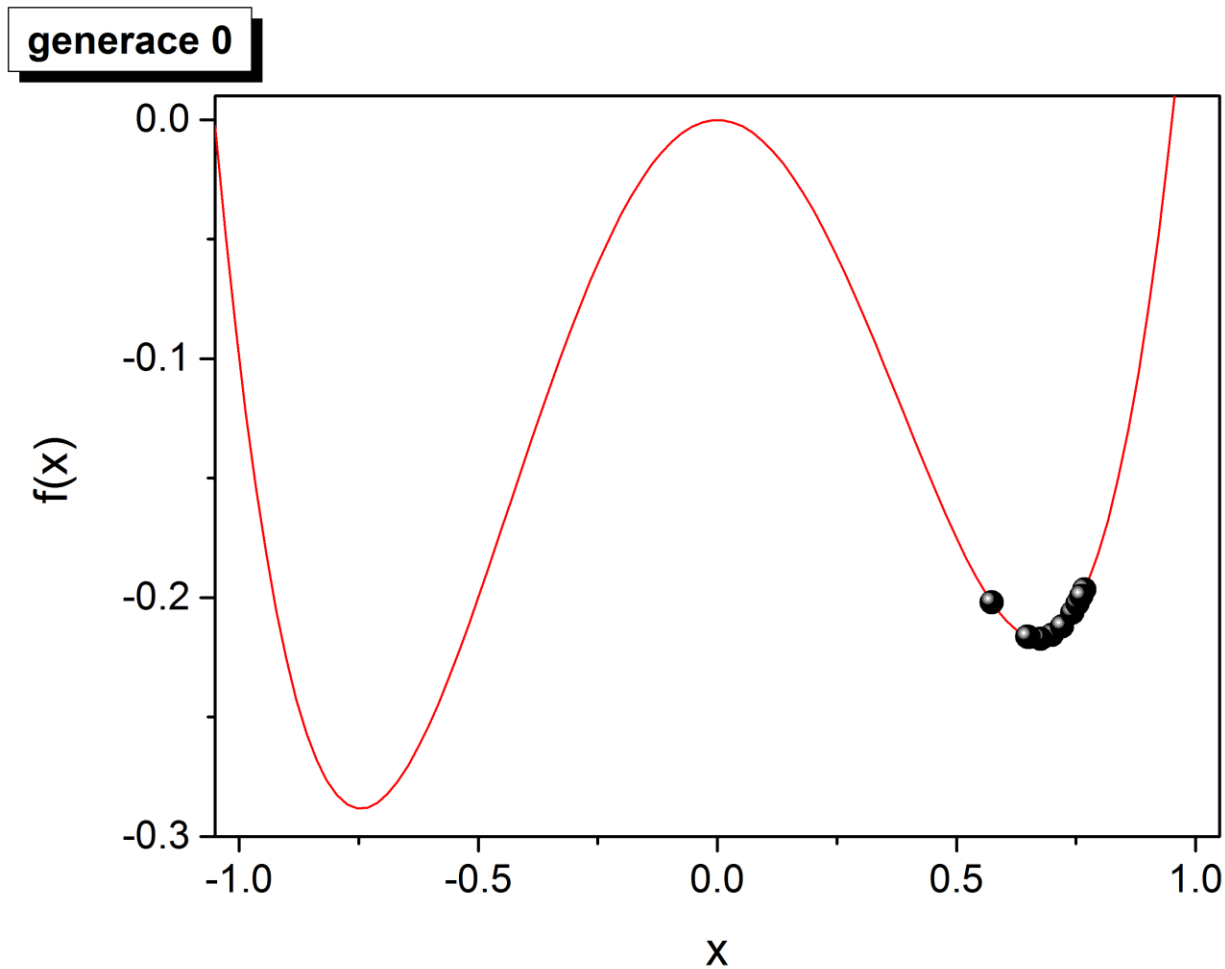
generace 20



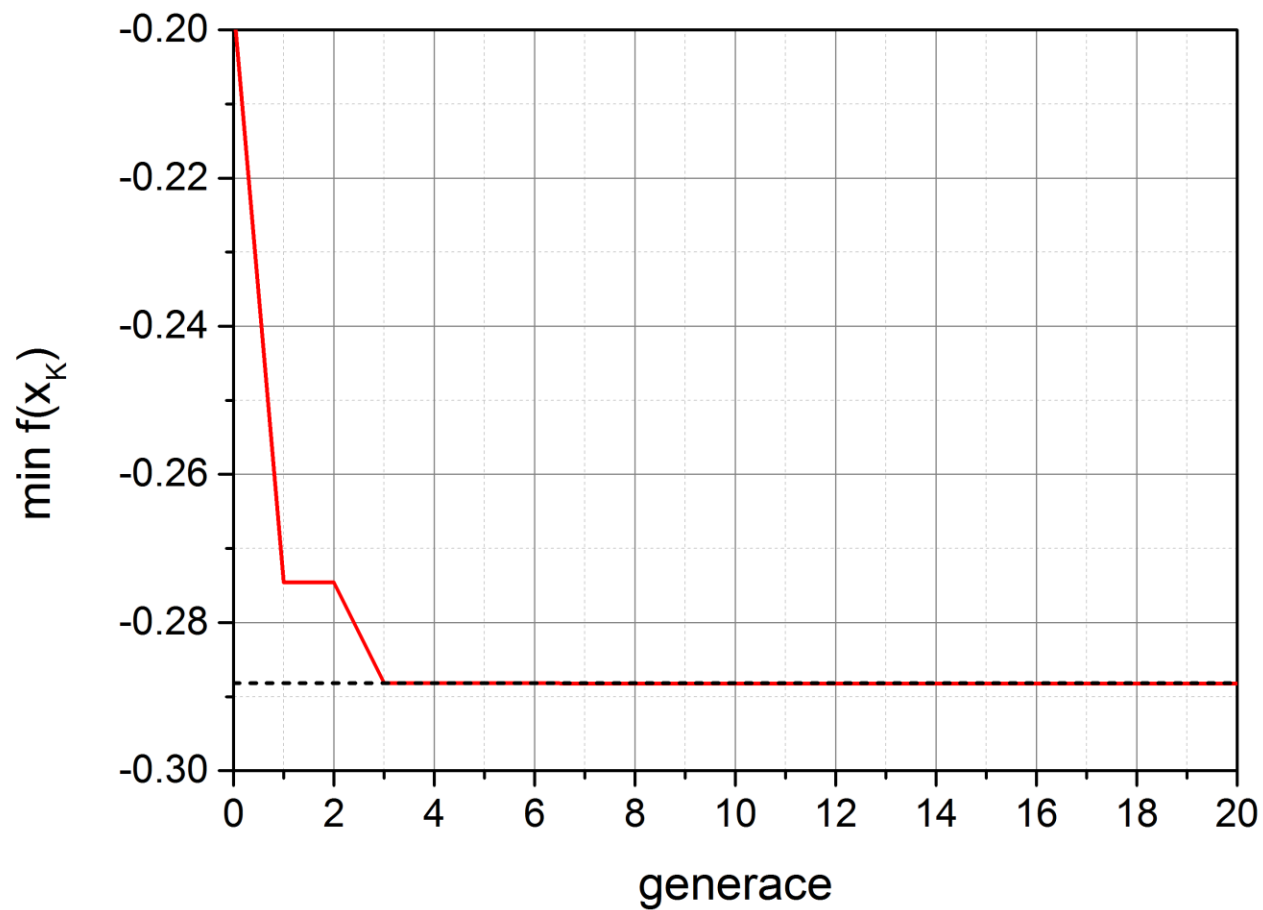
Ukázka 2 $\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^4 + 0,1x^3 - x^2 \}$



Ukázka 2 $\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{f(x) = x^4 + 0,1x^3 - x^2\}$

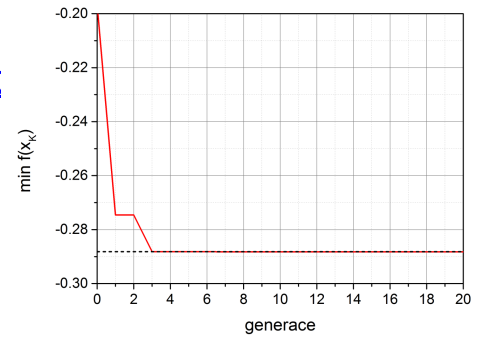


Ukázka 2 $\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^4 + 0,1x^3 - x^2 \}$

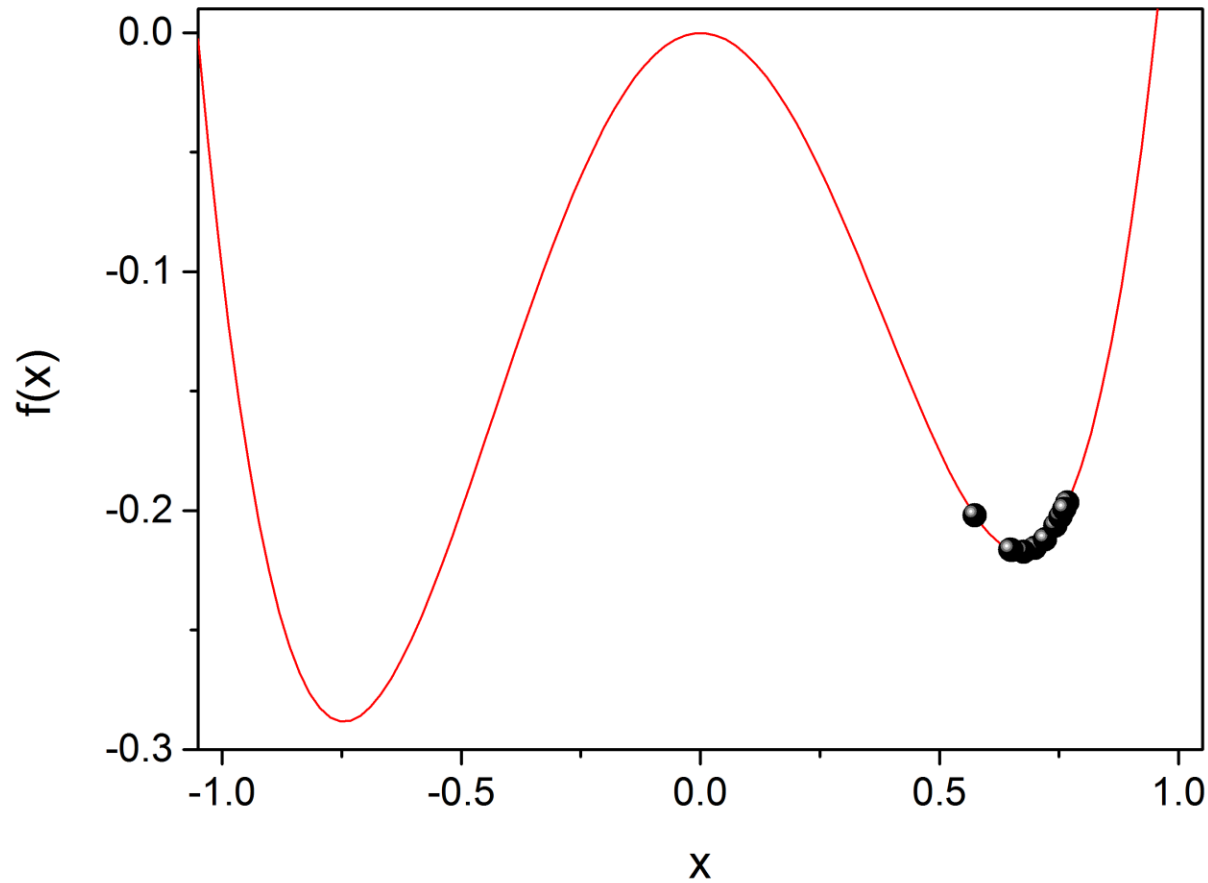


Ukázka 2

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^4 + 0,1x^3 - x^2 \}$$

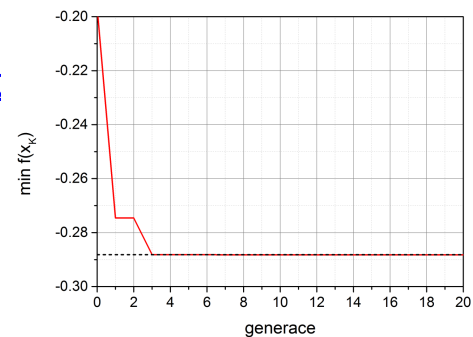


generace 0

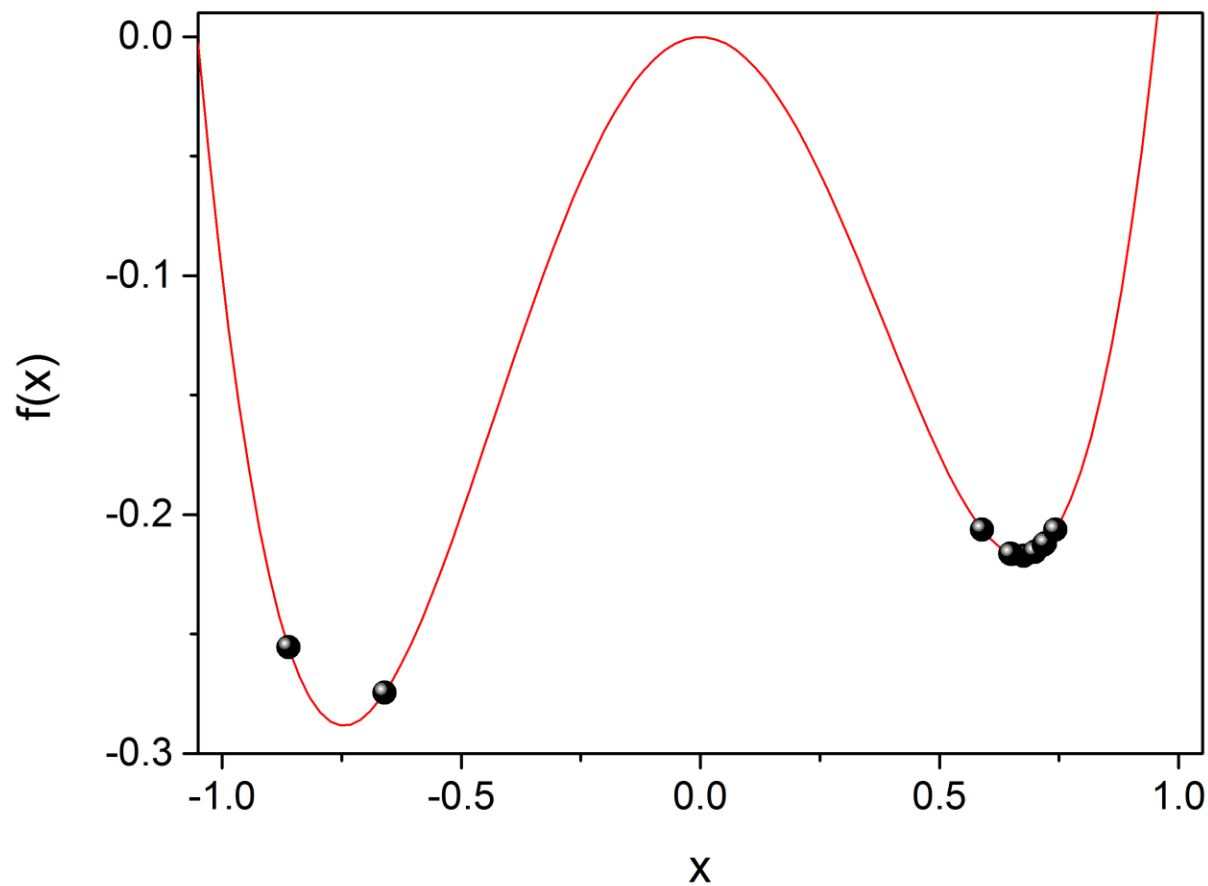


Ukázka 2

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^4 + 0,1x^3 - x \}$$

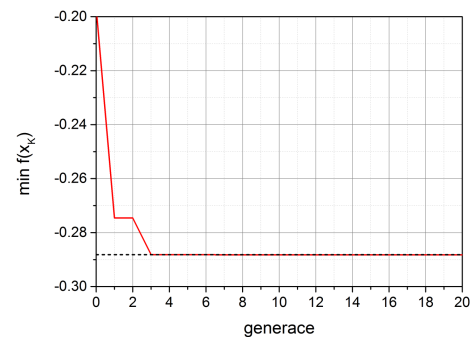


generace 1

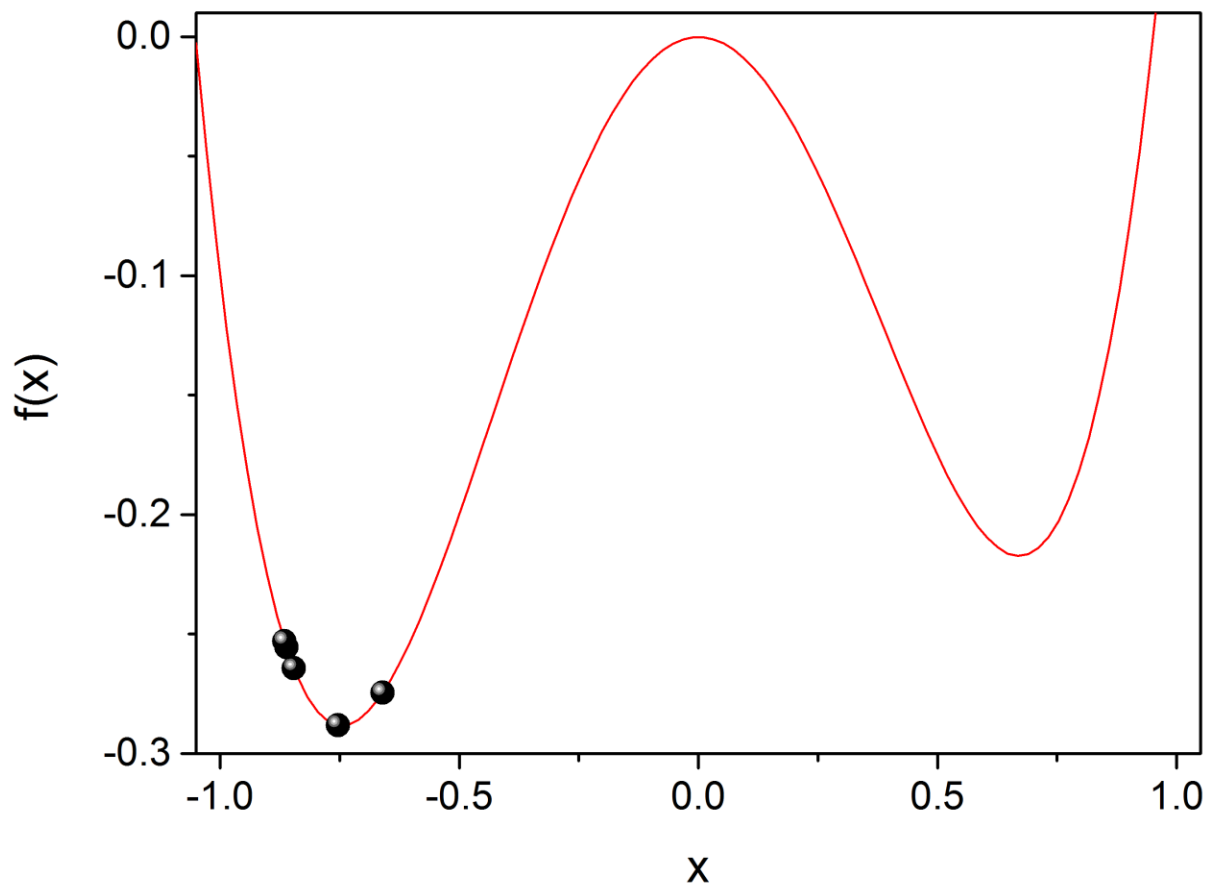


Ukázka 2

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^4 + 0,1x^3 - x^2 \}$$

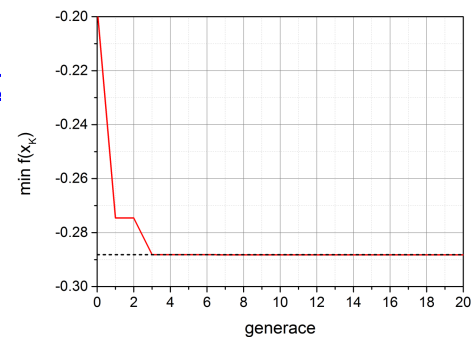


generace 3

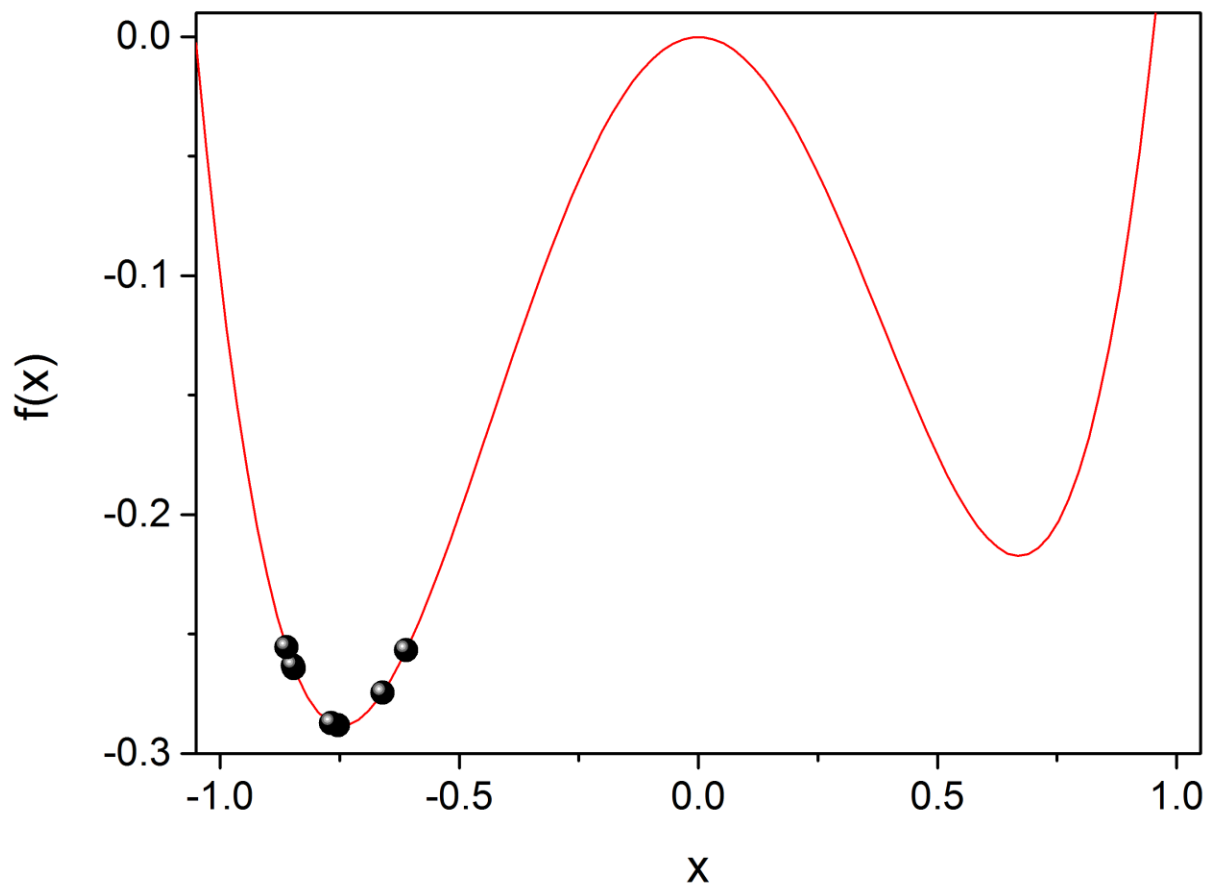


Ukázka 2

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^4 + 0,1x^3 - x^2 \}$$

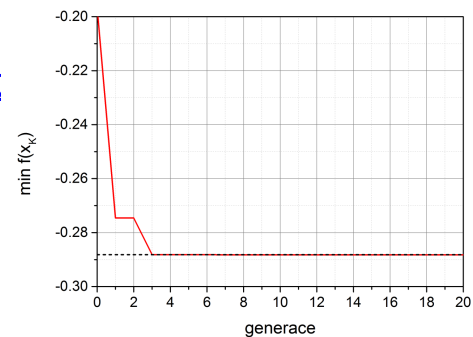


generace 4

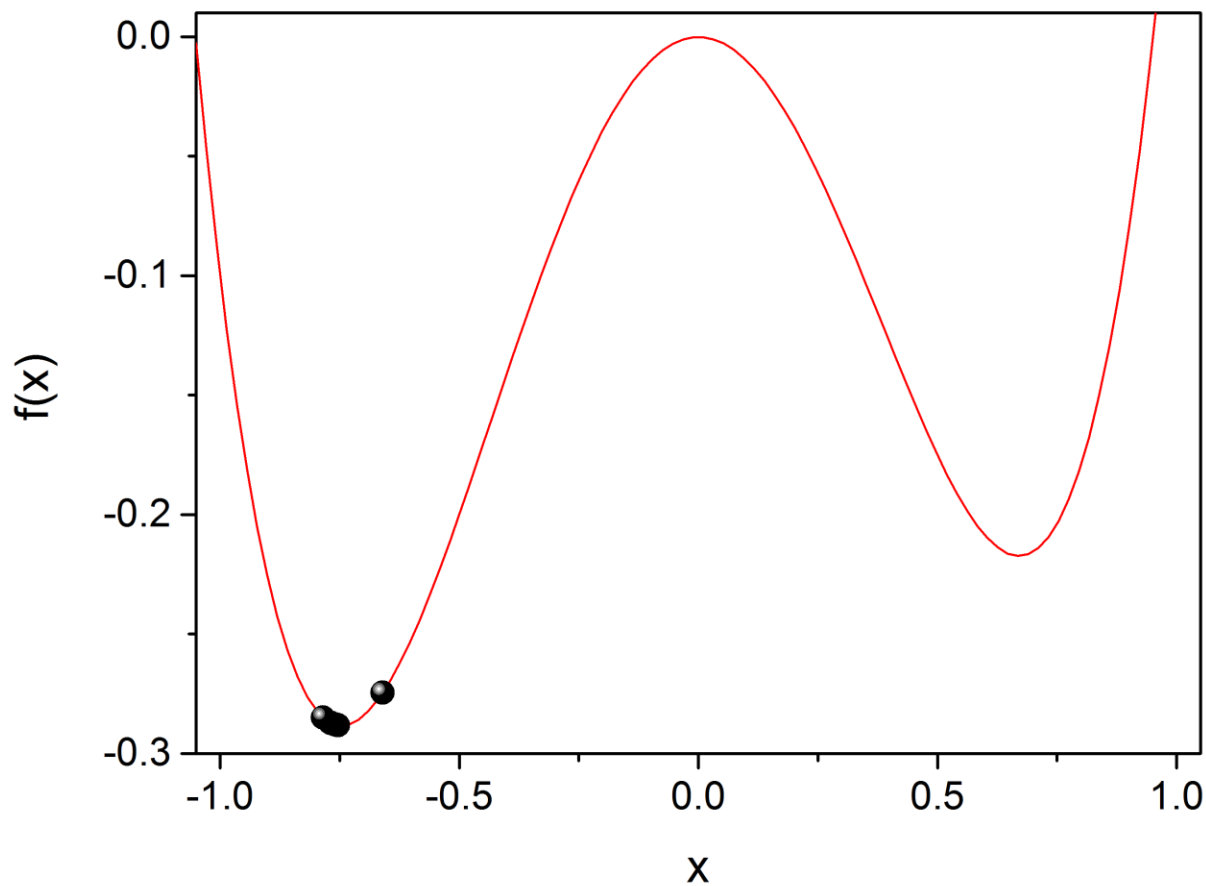


Ukázka 2

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^4 + 0,1x^3 - x^2 \}$$

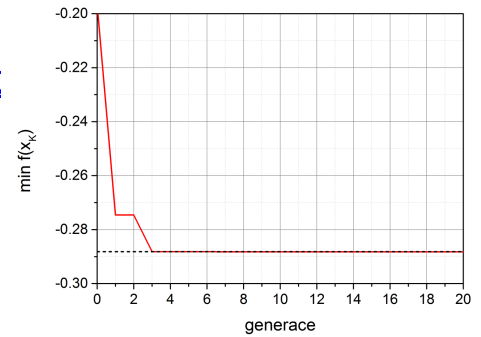


generace 6

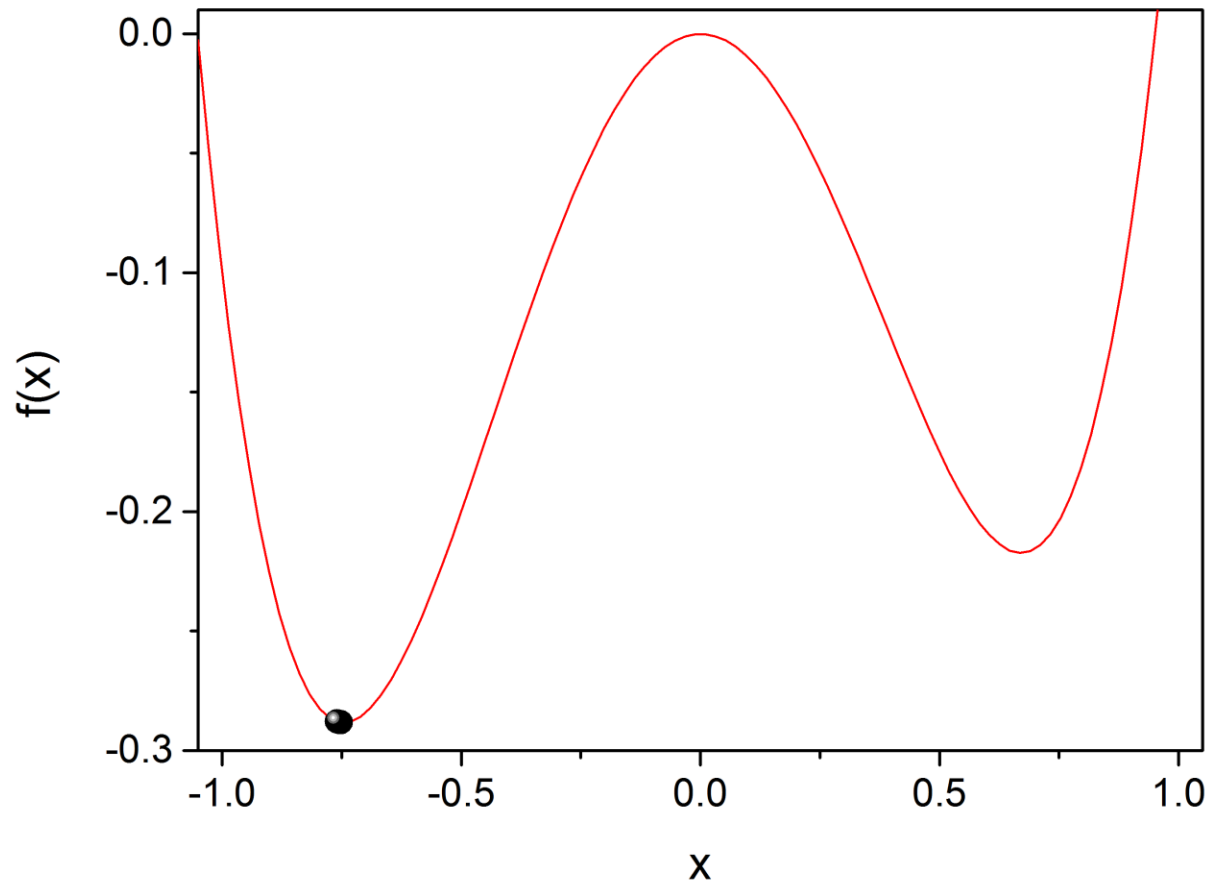


Ukázka 2

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^4 + 0,1x^3 - x \}$$

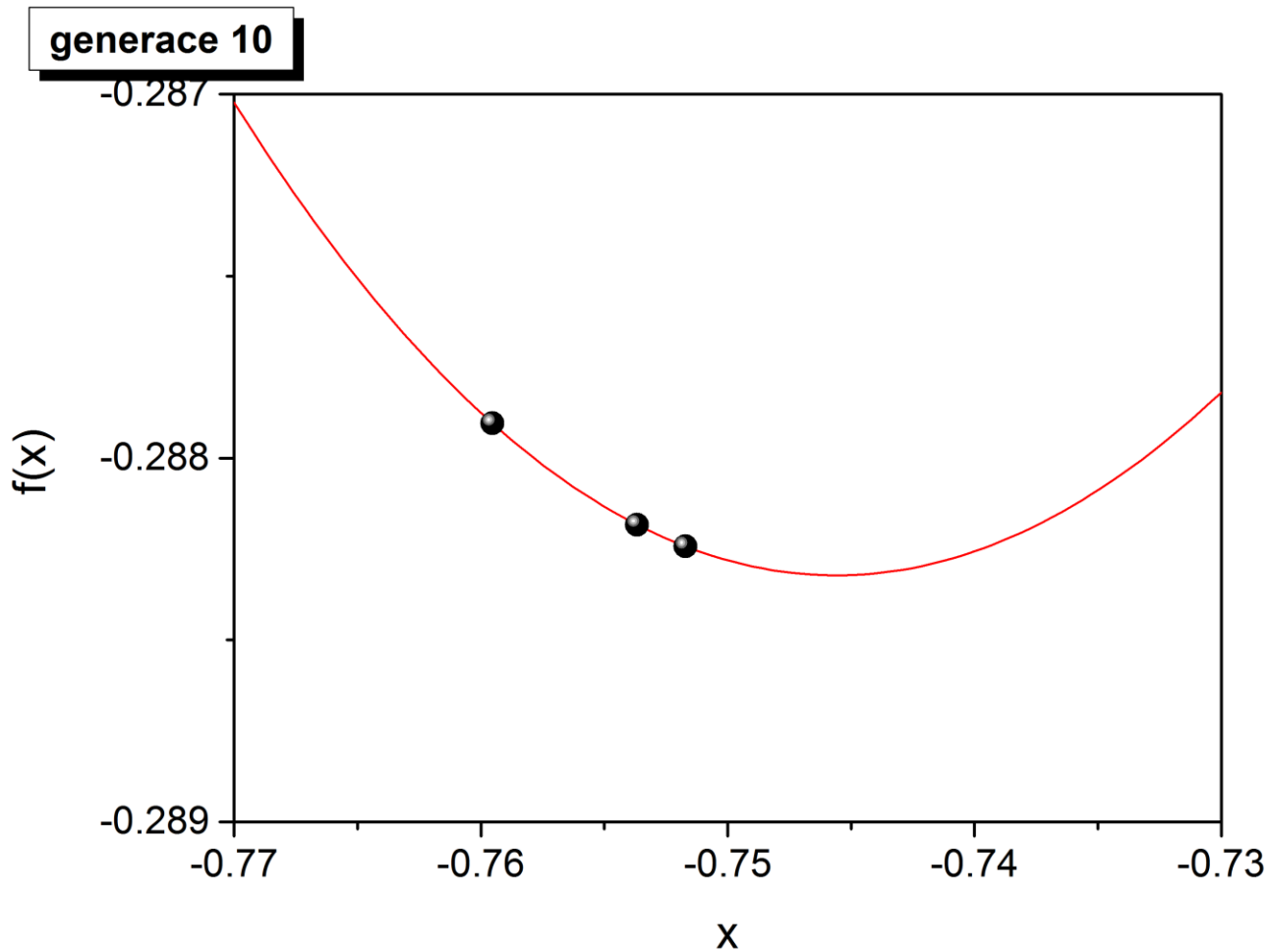
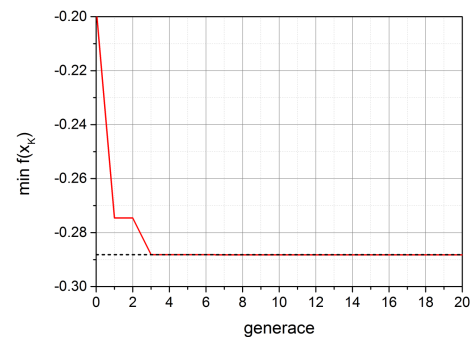


generace 10



Ukázka 2

$$\min_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \{ f(x) = x^4 + 0,1x^3 - x \}$$



Take home message(s)

Take home message(s)

- ✓ biologie poučila matematiku, jak řešit optimalizační úlohy (minimalizace / maximalizace)

Take home message(s)

- ✓ biologie poučila matematiku, jak řešit optimalizační úlohy (minimalizace / maximalizace)
- ✓ **genetické (evoluční) algoritmy** - imitace (zjednodušené) biologické evoluce

Take home message(s)

- ✓ biologie poučila matematiku, jak řešit optimalizační úlohy (minimalizace / maximalizace)
- ✓ **genetické (evoluční)** algoritmy - imitace (zjednodušené) biologické evoluce
- ✓ princip: střídání generací - dědičnost (křížení), mutace, selekce

Take home message(s)

- ✓ biologie poučila matematiku, jak řešit optimalizační úlohy (minimalizace / maximalizace)
- ✓ **genetické (evoluční)** algoritmy - imitace (zjednodušené) biologické evoluce
- ✓ princip: střídání generací - dědičnost (křížení), mutace, selekce
- ✓ velmi efektivní pro komplikované problémy (mnoho lokálních extrémů, ND)

Take home message(s)

- ✓ biologie poučila matematiku, jak řešit optimalizační úlohy (minimalizace / maximalizace)
- ✓ **genetické (evoluční) algoritmy** - imitace (zjednodušené) biologické evoluce
- ✓ princip: střídání generací - dědičnost (křížení), mutace, selekce
- ✓ velmi efektivní pro komplikované problémy (mnoho lokálních extrémů, ND)
- ✓ **stochastické algoritmy** (náhoda!!!)

Konec

Přídavek

**Další (biologií) inspirované
algoritmy**

Příklady stochastických algoritmů

BIOLOGIE

- ✓ hejnové algoritmy
 - ✓ mravenci, včely, světlušky, netopýři, kukačky

Příklady stochastických algoritmů

BIOLOGIE

- ✓ hejnové algoritmy
 - ✓ mravenci, včely, světlušky, netopýři, kukačky

FYZIKA

- ✓ simulované žíhání

Příklady stochastických algoritmů

BIOLOGIE

- ✓ hejnové algoritmy
 - ✓ mravenci, včely, světlušky, netopýři, kukačky

FYZIKA

- ✓ simulované žíhání

HAZARDNÍ HRY

- ✓ Monte Carlo

Konec.