

О поисковых способностях эволюционных алгоритмов

Под поисковыми способностями (ПС) эволюционных алгоритмов (ЭА) будем понимать способности ЭА к генерации хромосомы, соответствующей произвольной точке в пространстве поиска (ПП) (пространстве решений). Поскольку ЭА представляют собой методы эвристического поиска, то ПС определяет, совместно с рядом других факторов (скорость работы, дополнительное распараллеливание поиска и др.), эффективность ЭА с точки зрения возможного качества получаемых решений.

При рассмотрении ПС важно учитывать скорость перемещения популяции в пространстве поиска, которая существенным образом влияет на скорость эволюционного поиска в целом. Скорость эволюции, в свою очередь, зависит от используемых генетических операторов скрещивания и мутации и от выбранной схемы ЭА.

Далее будут рассмотрены некоторые общие факторы и особенности ПС ЭА с бинарными операторами скрещивания и мутации.

Поисковые способности ЭА с бинарными операторами скрещивания

В случае операторов скрещивания для бинарных хромосом важную роль играет распределение аллелей (нулевых и единичных разрядов) в популяции, которое можно охарактеризовать частотами встречаемости в i -й позиции

нулевых разрядов $p_{0,i}(t) = \frac{\sum_{j=1}^n [S_{j,i}(t) = 0]}{n}$, $i = 1, \dots, L$, где $S_{j,i}(t)$ – значение i -го

разряда в j -й хромосоме популяции в поколении t , $[\cdot]$ – предикат:

$$[V] = \begin{cases} 1, & V = TRUE, \\ 0, & V = FALSE. \end{cases}$$

Частота встречаемости единичных разрядов равна $p_{1,i}(t) = 1 - p_{0,i}(t)$. Зная частоты $p_{0,i}(0)$ и $p_{1,i}(0)$ можно, согласно теореме Гейрингера [Geiringer, 1944, Spears, 2001], рассчитать предельную вероятность $p_{S_i}(t)$ появления в популяции, эволюционирующей с использованием только оператора скрещивания (без селекции и мутации), произвольной хромосомы S_i :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p_{S_i}(t) = \prod_{i=1}^L p_{[S_{i,j}=1],i}(0).$$

Таким образом, при использовании оператора скрещивания для бинарного кодирования в пределе для бесконечного времени возможна генерация любой хромосомы, при условии, что все аллели, входящие в хромосому, будут представлены в популяции. Другими словами, *потеря аллелей* [De Jong, 1975] отрицательно сказывается на размере ПП, исследуемого с помощью оператора кроссовера (ОК). В общем случае, при потере аллелей в k позициях бинарной хромосомы доступная для ОК область ПП уменьшается в 2^k раз.

Более точные оценки времени, необходимого для генерации произвольной бинарной строки, могут быть получены при анализе способности операторов скрещивания к смешиванию (*mixing, shuffling*) [Goldberg, Thierens, Deb, 1993, Rabani, Rabinovich, Sinclair, 1998, Thierens, 1999, Prugel-Bennett, 2000, Spears, 2001]. Здесь под способностью к смешиванию понимается способность ОК к генерации потомков, хромосомы которых максимально отличаются от хромосом родительских особей. В целом, смешивающие и разрушающие способности ОК равнозначны. Рассмотрим более подробно оценку времени смешивания в зависимости от используемых операторов скрещивания.

Для строк (хромосом) $S_i = \{S_{i,j} \mid j = 1, \dots, L\}$, $i = 1, \dots, n$, содержащих символы k -арного алфавита $\mathbf{B} = \{b_i \mid i = 1, \dots, k\}$, в [Prugel-Bennett, 2001] определены меры *смешивания* как для отдельных строк:

$$m_b = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L [S_{i,j} = b],$$

так и для популяции из n строк в поколении t :

$$Q(t) = \frac{1}{n} \sum_{b=1}^k \sum_{i=1}^n (m_b^i(t))^2,$$

где $m_b^i(t)$ – величина смешивания для i -й строки в поколении t . Для случая популяции из минимально смешанных строк $Q = 1$. Для предельного случая популяции максимально смешанных строк параметр Q принимает следующее значение:

$$Q(\infty) = \frac{n + L - 1}{nL}.$$

Скорость смешивания (mixing rate) r , соответствующая скорости, с которой оператор скрещивания (работающий без операторов селекции и мутации) обеспечивает получение максимально смешанной популяции из минимально смешанной популяции, определяется следующим соотношением [Prugel-Bennett, 2001]:

$$r = \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{Q(t+1) - Q(\infty)}{Q(t) - Q(\infty)} \right).$$

Полученные в [Prugel-Bennett, 2001] оценки характерного времени смешивания для 1-точечного, 2-точечного и однородного ОК имеют порядок соответственно $O(L \ln(L))$, $O(L \ln(L))$ и $O(\ln(L))$, где L – длина хромосомы в битах, и совпадают с оценками из [Rabani, Rabinovich, Sinclair, 1998]. Данные оценки, а также результаты экспериментов [De Jong, Spears, 1990, De Jong, Spears, 1992, Rana, 1999] позволяют сделать вывод, что использование ОК с большими способностями к разрушению имеющихся хромосом способствует более быстрому смешиванию в популяцию. Следовательно, применение сильно разрушающих ОК ведет к более активному поиску за счет большего разнообразия хромосом в популяции. Однако, вопрос о том, является ли однородный кроссовер (или любой другой сильно разрушающий оператор)

более эффективным по сравнению с 2-точечным кроссовером, остается открытым.

Поисковые способности ЭА с бинарными операторами мутации

Для битового оператора мутации (ОМ) с вероятностью однократной мутации p_m вероятность $p_{m,k}$ изменения (инвертирования) k разрядов в L -разрядной бинарной хромосоме подчиняется биномиальному распределению:

$$p_{m,k} = C_L^k p_m^k (1 - p_m)^{L-k},$$
$$C_L^k = \frac{L!}{k!(L-k)!}.$$

Поскольку в среднем будет инвертировано $\langle k \rangle = p_m L$ разрядов, то с ростом значения p_m число «мутировавших» разрядов также увеличивается. Одновременно с этим повышается и скорость перемещения популяции в ПП. Однако, при превышении p_m некоторого граничного значения, известного как *порог ошибки* $p_{m,\max}$ [Эйген, Шустер, 1982, Nowak, Schuster, 1989, Редько, 2001], эволюционный направленный поиск «вырождается» в случайный поиск, соответствующему хаотичному блужданию популяции в ПП [Nowak, Schuster, 1989]. В общем случае, для обеспечения направленного поиска необходимо выполнение условия [Редько, 2001]:

$$p_m < p_{m,\max} \approx b,$$

где b – параметр, характеризующий давление селекции. Таким образом, максимально допустимое значение p_m находится в прямой зависимости от интенсивности отбора, а «активность» эволюционного поиска под влиянием ОМ определяется селективным давлением.

Более наглядная картина получается при геометрической интерпретации эволюционного поиска, ведомого мутационными изменениями. Для этого рассмотрим L -мерный единичный гиперкуб, построенный на осях ортогональной системы координат. Каждая вершина гиперкуба помечена

бинарной строкой, соответствующей координатам этой вершины. Т.е. вершина гиперкуба, расположенная в начале координат будет иметь метку «0...0», а вершина, наиболее удаленная от начала координат – «1...1». Пусть каждой хромосоме соответствует вершина гиперкуба, метка которой совпадает с содержимым хромосомы. Тогда популяции будет соответствовать множество вершин рассматриваемого гиперкуба.

Однократная мутация в хромосоме S_i «переводит» эту хромосому на соседнюю вершину гиперкуба, а последовательность из k мутаций задает маршрут на вершинах гиперкуба длины k (полагаем, что мутации каждый раз происходят в различных разрядах хромосомы). Тогда в течение одного поколения каждая хромосома популяции «сместится» на гиперкубе в среднем на $\langle k \rangle = p_m L$ «шагов». Рассмотрев эволюцию популяции хромосом под действием только ОМ, при условии бесконечного времени эволюции $t \rightarrow \infty$, очевидно, можно утверждать, что любая хромосома популяции побывает в каждой вершине гиперкуба.

Добавление селекции делает обход гиперкуба направленным, в результате чего могут возникнуть ситуации, когда ни одна особь в популяции не соответствует ни одной вершине некоторой гиперплоскости. Ясно, что имеет место потеря аллели, однако мутация в позиции хромосомы, соответствующей потерянной аллели, «вернет» утраченное значение разряда с вероятностью $1 - (1 - p_m)^n$. Об этом также свидетельствует результат, полученный в [Spears, 2001], который характеризует предельную вероятность генерации произвольной хромосомы S_i с использованием только ОМ (без селекции и скрещивания):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p_{S_i}(t) = \prod_{i=1}^L \frac{1}{C}.$$

где C – мощность алфавита, из символов которого состоят строки (хромосомы).

Чем больше значение p_m , тем более хаотичным становится обход гиперкуба и в случае $p_m > p_{m,\max}$ для популяции бесконечного размера $n \rightarrow \infty$, особи распределяются по вершинам гиперкуба в соответствии со стационарным распределением [Nowak, Schuster, 1989]:

$$p_r(t) = p_r(0) = p_r = 2^{-L} C_L^r, \quad r = 1, \dots, L,$$

где r – расстояние по Хэммингу между меткой данной вершины гиперкуба и меткой вершины в начале координат, $p_r(t)$ – доля хромосом в популяции, находящихся на расстоянии r от начала координат, в момент времени t .

Таким образом, ОМ позволяет сгенерировать любую хромосому в пространстве поиска. При этом потеря аллелей уже не является критическим фактором, влияющим на эффективность поиска, из-за случайного характера мутационных изменений, в результате чего возможно «восстановление» потерянных разрядов. Однако, превышение вероятностью мутации p_m порога ошибки $p_{m,\max}$ делает эволюционный поиск хаотическим.

Выводы

Рассмотрены особенности влияния операторов скрещивания и мутации для бинарных хромосом на ПС ЭА.

Использование сильно разрушающих операторов скрещивания способствует более активному эволюционному поиску [De Jong, Spears, 1990], который выражается в более быстром перемещении популяции в ПП. В то же время остается неясным, являются ли более разрушающие ОК и более эффективными (с точки зрения решения оптимизационных задач), из-за отсутствия явных свидетельств их преимущества [De Jong, Spears, 1990, De Jong, Spears, 1992, Rana, 1999]. При этом ПС при использовании ОК существенно зависят от разнообразия аллелей в популяции, т.к. потеря аллелей приводит к уменьшению области ПП, доступной для исследования.

В отличие от ОК при использовании ОМ ПС мало зависят от частоты встречаемости аллелей в популяции, и, в общем случае, для ОМ вероятность генерации произвольной хромосомы S_i зависит только от длины хромосомы L и мощности используемого алфавита C [Spears, 2001].

Таким образом, можно сделать вывод, что в случае совместного использования ОК и ОМ возможности эволюционного поиска повышаются, т.к. ОМ позволяет поддерживать разнообразие аллелей, а использование ОК делает возможной рекомбинацию участков хромосом различных особей. При этом отметим, что и в этом случае для ОМ также существует порог ошибки, однако он не совпадает с порогом ошибки для ЭА, использующим только мутацию без скрещивания [Barnett, 2000].

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

[Barnett, 2000] Barnett L. The Effects of Recombination on a Haploid Quasispecies Evolving on a Single-peak Fitness Landscape // Journal of Theoretical Biology, 2000. See also: <http://www.cogs.susx.ac.uk/users/lionelb/download/recom.ps.gz>

[De Jong, 1975] De Jong K.A. An analysis of the behavior of a class of genetic adaptive systems. Unpublished PhD thesis. University of Michigan, Ann Arbor, 1975. (Also University Microfilms No. 76-9381)

[De Jong, Spears, 1990] De Jong K.A., Spears W.M. An Analysis of the Interacting Roles of Population Size and Crossover // Proceedings of the International Workshop «Parallel Problems Solving from Nature» (PPSN'90), 1990, pp. 38-47.

[De Jong, Spears, 1992] De Jong K.A., Spears W.M. A formal analysis of the role of multi-point crossover in genetic algorithms. // Annals of Mathematics and Artificial Intelligence, no. 5(1), 1992, pp.1–26.

Цой Ю.Р. О поисковых способностях эволюционных алгоритмов. 2006.
<http://qai.narod.ru/GA/easearch.pdf>

[Geiringer, 1944] Geiringer H. On the probability theory of linkage in Mendelian heredity // Annals of mathematical statistics, 15, 1944, pp. 25-57.

[Goldberg, Thierens, Deb, 1993] Goldberg D.E., Thierens D., Deb K. Toward a better understanding of mixing in genetic algorithms. // Journal of the Society of Instrument and Control Engineers, no. 1(32), 1993, pp. 10–16. (Also IlliGAL Report No. 92009).

[Nowak, Schuster, 1989] Nowak M., Schuster P. Error thresholds of replication in finite populations: Mutation frequencies and the onset of Muller's ratchet. // Theoretical Biology, no. 137, 1989, pp. 375-395.

[Rabani, Rabinovich, Sinclair, 1998] Rabani Y., Rabinovich Y., Sinclair A. A computational view of population genetics // Random Structures & Algorithms, no. 12(4), 1998, pp. 313-334.

[Rana, 1999] Rana S. The distributional biases of crossover operators. // Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO 99), 1999, pp. 549–556.

[Spears, 2001] Spears W. The equilibrium and transient behavior of mutation and recombination // Foundations of Genetic Algorithms, 6, 2001, pp. 241–260.

[Thierens, 1999] Thierens D. Scalability problems of simple genetic algorithms // Evolutionary Computation, no. 4(7), 1999, pp. 331–352.

[Редько, 2001] Редько В.Г. Эволюционная кибернетика. М. - Наука, 2003. - 156с. - (Информатика: неограниченные возможности и возможные ограничения)

[Эйген, Шустер, 1982] Эйген М., Шустер П. Гиперцикл. Принципы самоорганизации макромолекул. М.: Мир, 1982.