

## МИТЧЕЛЛ М. ПОДХОДЫ НА ОСНОВЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ<sup>1</sup>

По моему [М. Митчелл – Ю.Ц.] убеждению, более плодотворным подходом к пониманию и прогнозированию поведения ГА будет подход, используемый в статистической механике в физике: вместо того, чтобы отслеживать изменение большого числа отдельных параметров системы (т.е. пытаться принимать во внимание точный генетический состав популяции), этот подход нацелен на «получение» законов динамики ГА, описываемых макроскопическими статистиками, такими как «средняя приспособленность в популяции» или «средний показатель симметричности хромосом». Т.е. прослеживается аналогия с традиционной в статистической механике целью описать законы в физической системе в терминах макроскопических понятий, таких как давление и температура, вместо того, чтобы использовать данные о микроскопических частицах (например, молекулах), составляющих эту систему<sup>2</sup>.

Один из подходов, в котором явно используется аналогия со статистической механикой и где применяются методы из этой области, является подход физиков Адама Пругеля-Беннета (Adam Prügel-Bennett) и Джонатана Шапиро (Jonathan Shapiro). Их работа содержит немало технически непростых элементов, поэтому для ее понимания необходимо знакомство со статистической механикой. Далее, вместо того, чтобы углубляться в математические подробности, я лишь в общих чертах опишу их работу, чтобы показать идею, лежащую в основе рассматриваемого подхода.

Пругель-Беннет и Шапиро использовали методы статистической механики, чтобы предсказать макроскопические свойства динамики ГА в течение его работы, а также, чтобы показать какие параметры ГА и способы кодирования могут быть более эффективными. В ранней работе [Prügel-Bennett, Shapiro, 1994] они проиллюстрировали свои методы на примере простой оптимизационной задачи: нахождения состояний с минимальной энергией для одномерного «спинового стекла» (spin glass). Спиновое стекло это простая модель вещества, обладающего магнитными свойствами. Одномерная модель, используемая Пругелем-Беннетом и Шапиро состоит из вектора, описывающего смежные «спины» ( $\vec{S} = (S_1, S_2, \dots, S_{N+1})$ ), где каждый компонент  $S_i$  равен либо «-1» либо «+1». Каждая пара соседних спинов ( $i, i+1$ ) «связана» с использованием вещественного веса  $J_i$ . Полная энергия системы  $E(\vec{S})$  для конфигурации спинов  $\vec{S}$  равна:

$$E(\vec{S}) = -\sum_{i=1}^N J_i S_i S_{i+1},$$

Формулировка спин-стекольных моделей (как правило, более сложных) и поиск спиновых конфигураций, при которых энергия минимальна, представляют интерес для физиков, т.к. это способствует пониманию поведения магнетических систем в природе (для которых состояние с минимальной энергией, как ожидается, соответствует минимуму температуры).

---

<sup>1</sup> Глава 4.4 Statistical mechanics approaches из книги Mitchell M. An Introduction to Genetic Algorithms. Fifth printing. Cambridge, MA: The MIT Press, 1999.

Перевел Ю.Р. Цой. Любые замечания, касающиеся перевода, просьба присылать по адресу [gai@mail.ru](mailto:gai@mail.ru)

Данный текст доступен по адресу: [http://gai.narod.ru/GA/mitchell\\_4\\_4.pdf](http://gai.narod.ru/GA/mitchell_4_4.pdf)

<sup>2</sup> Не совсем верно. Макропараметры (давление, температура и т.д.) изучаются в термодинамике, а статистическая механика хотя и не рассматривает каждую молекулу в отдельности, что отмечается в тексте, но оперирует усредненными характеристиками по группе молекул, меньшей, чем рассматриваемая система, но значительно больше, чем одна молекула. – Прим. перев.

Применительно к ГА рассматривается проблема поиска такого вектора  $\vec{S}$ , при котором энергия данного одномерного спинового стекла минимальна для известных значений весов  $J_i$  (веса  $J_i$  выбираются заранее в интервале от  $[-1; +1]$ ). В этом случае хромосома просто является строкой из  $N+1$  спина (равного «-1» или «+1»). Приспособленность хромосомы равна энергии спинового стекла, взятой с противоположным знаком. Начальная популяция строк генерируется случайным образом. В каждом поколении новая популяция формируется в результате отбора родительских особей и их скрещивания с использованием одноточечного кроссовера для создания потомков. Для упрощения модели мутация не используется. При этом применяется интересная разновидность отбора. Вероятность  $p^\alpha$ , что особь  $\alpha$  будет выбрана в качестве родительской равна:

$$p^\alpha = \frac{e^{-\beta E^\alpha}}{Z},$$

$$Z = \sum_{\alpha=1}^P e^{-\beta E^\alpha},$$

где  $E^\alpha$  – энергия особи  $\alpha$ ,  $P$  – размер популяции и  $\beta$  – параметр, контролирующий давление селекции. Данный вариант селекции аналогичен «Больцмановской селекции», где  $\beta$  играет роль температуры<sup>1</sup>. Такая селекция имеет для ГА ряд полезных свойств (описываемых в следующем разделе), а также важна для анализа Пругеля-Беннета и Шапиро.

Рассматриваемая проблема весьма проста, т.к. в алгоритме отсутствует мутация, но она хорошо подходит для описания подхода Пругеля-Беннета и Шапиро. Основной целью является прогнозирование изменений в распределении значений энергии (противоположно приспособленности) в популяции в ходе эволюции. На рис. 4.4 показаны наблюдаемые распределения в поколениях 0, 10, 20, 30 и 40 (слева направо), усредненные по 1000 запускам, для  $P = 50$ ,  $N+1 = 64$  и  $\beta = 0.05$ . Чтобы предсказать эти изменения, Пругелем-Беннетом и Шапиро разработана соответствующая модель. Зная распределение энергий  $\rho_t(E)$  в момент времени  $t$ , они сначала определяют, как это распределение изменяется под действием механизма селекции  $\rho_t^S(E)$  (распределение после селекции), а затем как оператор кроссовер преобразует  $\rho_t^S(E)$  в  $\rho_t^{SC}(E)$  (распределение энергий после селекции и кроссовера). Данная идея, изображенная схематично, заключается в моделировании итерационного процесса по схеме

$$\rho_t(E) \xrightarrow{\text{селекция}} \rho_t^S(E) \xrightarrow{\text{кроссовер}} \rho_t^{SC}(E) = \rho_{t+1}(E) \quad (4.11)$$

начиная с исходного распределения  $\rho_0(E)$ .

<sup>1</sup> В принципе, если определять приспособленность особи  $\alpha$  как  $f_\alpha = e^{-\beta E^\alpha}$ , либо рассматривать случай малого значения  $\beta$ , то описанная стратегия селекции соответствует рулеточному отбору. На последнее обстоятельство указывают и Пругель-Беннет и Шапиро (Shapiro J., Prügel-Bennett A., Rattray M. A Statistical Mechanical Formulation of the Dynamics of Genetic Algorithms, 1994). (см. также Редько В.Г. Эволюционная кибернетика. М. – Наука, 2001, а также материалы лекций на сайте: <http://www.keldysh.ru/Pages/BioCyber/>). – Прим. перев.

Пругель-Беннет и Шапиро начали анализ с замечания, что распределения, подобные приведенным на рис. 4.4, могут быть описаны с помощью «кумулянтов»<sup>1</sup>, представляющих статистические меры распределений, выводимые из статистических моментов. Первый кумулянт,  $\kappa_1$ , равен среднему по распределению, второй кумулянт,  $\kappa_2$ , – среднеквадратичное отклонение, а кумулянты более высоких порядков описывают другие характеристики (например, скос).

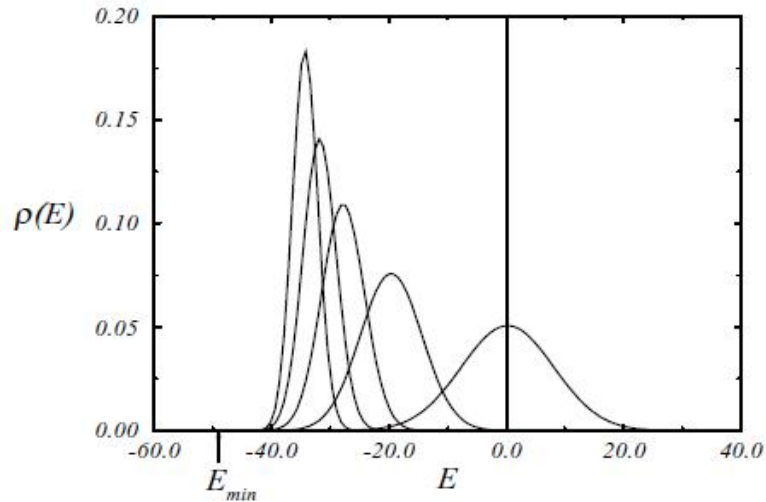


Рис. 4.4. Распределение энергий для популяции ГА в поколениях 0, 10, 20, 30 и 40.

Значения энергии  $E$  откладываются по оси  $x$ ; доля особей в популяции с данным значением энергии  $\rho(E)$  откладывается по оси  $y$ . Данные усреднены по 1000 запускам для  $P = 50$ ,  $N+1 = 64$  и  $\beta = 0.05$ . На рисунке отмечено минимальное значение энергии спинового стекла. (Воспроизведено по [Prügel-Bennett, Shapiro, 1994] с разрешения издателя. © 1994 American Physical Society)

Для описания влияния селекции и кроссовера на кумулянты Пругель-Беннет и Шапиро использовали некоторые методы из статистической механики, и детали их работы требуют знания соответствующих приемов и техник. Рассмотрим их кратко. Пусть  $\kappa_n$  – кумулянт  $n$ -го порядка для текущего распределения приспособленностей в популяции,  $\kappa_n^S$  – кумулянт  $n$ -го порядка для нового распределения, полученного из текущего в результате применения только селекции, а  $\kappa_n^C$  – кумулянт  $n$ -го порядка для распределения, полученного из текущего в результате применения только кроссовера. Уравнение для  $\kappa_n^S$  Пругель-Беннет и Шапиро получили, используя определение кумулянта и недавний результат из статистической механики: модель случайной энергии (Random Energy Model) [Derrida, 1984]. В частности, они показали, что  $\kappa_1^S = \kappa_1 - \beta\kappa_2$  и  $\kappa_2^S = (1 - 1/P)\kappa_2 - \beta\kappa_3$ . Очевидно, что селекция уменьшает среднее и дисперсию в распределении (т.е. селекция создает популяцию с меньшей средней энергией и более однородную), и полученные

<sup>1</sup> Подробнее о кумулянтах см., например, Маланин В.В., Полосков И.Е. Методы и практика анализа случайных процессов в динамических системах. – М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005, или Малахов А.Н. Кумулянтный анализ случайных негауссовых процессов и их преобразования. – М.: Сов. Радио, 1978. – Прим. перев.

уравнения точно<sup>1</sup> предсказывают величину этих изменений как функцию от  $P$  и  $\beta$ . Аналогично они вывели уравнения и для  $\kappa_n^C$ :

$$\begin{aligned}\kappa_1^C &= \kappa_1 - \kappa_1 \kappa_2 / (2N^2), \\ \kappa_2^C &= \kappa_2, \\ \kappa_n^C &= 2\kappa_n / (n+1), \text{ при } n > 2.\end{aligned}$$

Данные уравнения существенно зависят от рассматриваемой проблемы: одномерное спиновое стекло – и, в частности, от того, как распределяются приспособленности потомков относительно приспособленности их родителей<sup>2</sup>.

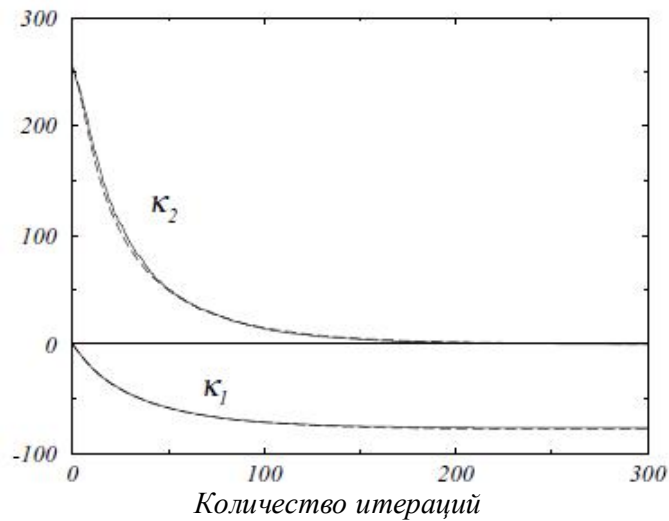


Рис. 4.5. Предсказанное и наблюдаемое изменение  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$  для первых 300 поколений, усредненное по результатам 500 запусков ГА при  $P = 50$ ,  $N+1 = 256$  и  $\beta = 0.01$ . Жирными линиями показаны результаты моделирования, а пунктирными (в основном скрытыми за жирными линиями) – результаты предсказаний. (Воспроизведено по [Prügel-Bennett, Shapiro, 1994] с разрешения издателя. © 1994 American Physical Society)

Уравнения для  $\kappa_n^S$  и  $\kappa_n^C$  можно скомбинировать согласно схеме (4.11), чтобы предсказать эволюцию распределения энергии в результате работы ГА. Прогнозируемое изменение  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$ , а также наблюдаемые результаты экспериментов показаны на рис. 4.5. Видно, что предсказания прекрасно соответствуют экспериментальным данным. Графики достаточно интуитивны: комбинация кроссовера и селекции вызывает снижение средней энергии  $\kappa_1$  в популяции (т.е. повышается средняя приспособленности), при этом дисперсия распределения энергии в популяции также уменьшается (т.е. популяция сходится). Впечатляет точность, с которой Прүгель-Беннет и Шапиро предсказали ход этих

<sup>1</sup> На самом деле приведенные формулы не являются точными, хотя погрешность и невелика, т.к. в рассматриваемой работе Прүгеля-Беннета и Шапиро [Prügel-Bennett, Shapiro, 1994] уравнения получены разложением в ряд и отбрасыванием старших членов. В частности, в [Shapiro, Prügel-Bennett, Rattray, 1994] (см. сноску на стр.2) уравнения для  $\kappa_1^S$  и  $\kappa_2^S$  выглядят следующим образом:  $\kappa_1^S = \kappa_1 - \beta\kappa_2 + \dots$  и  $\kappa_2^S = (1 - 1/P)\kappa_2 - \beta\kappa_3 + \dots$ . Аналогичное замечание, по всей видимости, может быть сделано и для уравнений для  $\kappa_1^C$  и  $\kappa_2^C$ . – Прим. перев.

<sup>2</sup> Т.е. от выбранных операторов селекции и скрещивания. – Прим. перев.

процессов. Более того, поскольку полученные уравнения явно выражают зависимость  $\kappa_n$  от таких параметров, как  $P$ ,  $N$  и  $\beta$ , они могут быть использованы для определения значений параметров, необходимых для обеспечения требуемой скорости эволюции и сходимости.

Подход Пругеля-Беннета и Шапиро еще не является общепринятым для предсказания поведения ГА. Значительная часть их анализа зависит от свойств выбранной проблемы, в данном случае одномерного спинового стекла, и оператора селекции. Однако, он может быть первым шагом к разработке более общего метода, использующего аппарат статистической механики для предсказания макроскопических (вместо микроскопических) свойств динамики ГА и открытия общих законов, обуславливающих эти свойства.

## СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

**[Derrida, 1984]** Derrida B. Random energy model: An exactly solvable model of disordered systems // Physical Review B, no. 24, pp. 2613.

**[Prügel–Bennett, Shapiro, 1994]** Prügel–Bennett A., Shapiro J. L. 1994. An analysis of genetic algorithms using statistical mechanics // Physical Review Letters, vol. 72, no. 9, pp. 1305–1309.