

УДК 32.81

ОЦЕНКА СКОРОСТИ И ЭФФЕКТИВНОСТИ ЭВОЛЮЦИИ ДЛЯ ПРОСТЫХ ВАРИАНТОВ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА*

В.Г. Редько¹, Ю.Р. Цой²

Подводятся итоги работ авторов по оценке эффективности простых вариантов генетического алгоритма (ГА). Для случая поиска экстремума унимодальной функции N бинарных переменных ГА без скрещивания обеспечивает нахождение оптимума при анализе порядка N^2 вариантов. Аналогичные оценки справедливы также для а) эволюционной модели узкого канала и б) модели эволюционного поиска минимума энергии спинового стекла.

Введение

При работе с алгоритмами эволюционной оптимизации полезны оценки скорости сходимости и эффективности алгоритмов. Такие оценки интересны и с естественнонаучной точки зрения: важно понимать, насколько быстро могут быть найдены «оптимальные» геномы биологических организмов эволюционным путем. Анализ целесообразно провести для четких опорных примеров. В данной работе рассматривается генетический алгоритм (ГА) [Holland, 1975] без скрещивания, который совпадает с моделью «квазивидов», введенной М. Эйгеном при изучении процессов предбиологической эволюции [Эйген, 1973].

Данная статья подводит итог цикла работ [Редько, 1986], [Редько, 1990], [Редько, 2005], [Редько, Цой, 2005], посвященных исследованию скорости сходимости простых моделей эволюции. Сделаны оценки для рулеточного метода отбора, что позволяет их использовать при интерпретации биологических эволюционных процессов. При рулеточном отборе важно учитывать роль нейтрального отбора, т.е. возможность случайной фиксации «особей», независимой от их приспособленностей. В

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 07-01-00180).

¹ НИИ Системных исследований РАН, 117218, Москва, vgredko@gmail.com

² Томский политехнический университет, 634050, Томск, qai@mail.ru

основной рассматриваемой модели эволюции предполагается, что имеется единственный максимум приспособленности. Также анализируется модель узкого канала, для которой скорость эволюции постоянна, и модель спиновых стекол, для которой число локальных максимумов приспособленности экспоненциально растет с ростом длины генома.

1. Схема ГА

Рассматриваем дарвиновскую эволюцию популяции информационных последовательностей $\{\mathbf{S}_k\}$, символы которых S_{ki} принимают два значения: $S_{ki} = +1$ либо -1 ; $i = 1, 2, \dots, N$; $k = 1, 2, \dots, n$; N – длина последовательностей; n – численность популяции. Эволюция включает отбор особей \mathbf{S} в соответствии с их приспособленностями $f(\mathbf{S})$ и мутации – равновероятные замены символов. N и n в процессе отдельного эволюционного процесса не меняются и велики: $N, n \gg 1$. Считаем, что $f(\mathbf{S})$ – унимодальная функция: имеется \mathbf{S}_m , имеющая максимальную приспособленность, а приспособленность произвольной особи \mathbf{S} экспоненциально уменьшается с ростом расстояния по Хеммингу $r(\mathbf{S}, \mathbf{S}_m)$ между \mathbf{S} и \mathbf{S}_m :

$$f(\mathbf{S}) = \exp[-br(\mathbf{S}, \mathbf{S}_m)],$$

(1)

где b – интенсивность отбора. Эволюция приводит к формированию *квазивида* – популяции, в которую входит как оптимальная последовательность, так и отличающиеся от нее мутационными заменами.

Схема ГА представлена в Таблице 1.

Таблица 1. Схема рассматриваемого ГА

Шаг 0. <i>Формирование начальной популяции</i> $\{\mathbf{S}_k(0)\}$. Для всех $k = 1, \dots, n$, $i = 1, \dots, N$ выбираем символ S_{ki} случайно, полагая $S_{ki} = +1$, либо $S_{ki} = -1$.
Шаг 1. <i>Отбор</i>
Подшаг 1.1. <i>Расчет приспособленностей</i> . Для каждого $k = 1, \dots, n$ вычисляем величину $f(\mathbf{S}_k)$.
Подшаг 1.2. <i>Формирование новой популяции</i> $\{\mathbf{S}_k(t+1)\}$. Отбираем n особей в новую популяцию $\{\mathbf{S}_k(t+1)\}$ с вероятностями, пропорциональными $f(\mathbf{S}_k)$.
Шаг 2. <i>Мутации</i> . Для $k = 1, \dots, n$; $i = 1, \dots, N$ меняем знак $S_{ki}(t+1)$ на противоположный с вероятностью P ; P – интенсивность мутаций.
<i>Организация последовательности поколений</i> . Повторяем шаги 1,2 для $t = 1, 2, \dots$; t – номер поколения.

Поясним подшаг 1.2. Представим, что имеется рулетка, площадь k -го сектора рулетки равна $q_k = f_k / [\sum f_j]^{-1}$, $f_k = f(\mathbf{S}_k)$. Проводим n испытаний. Для каждого испытания крутим рулетку и отбираем в новую популяцию ту особь, которая соответствует сектору, на котором остановилась стрелка рулетки. В результате формируется популяция, содержащая n особей.

2. Роль нейтрального отбора

Нейтральный отбор играет важную роль в эволюции популяций конечной численности n . Продемонстрируем особенности нейтрального отбора, рассматривая следующую эволюционную игру.

1. Имеется популяция черных и белых шаров, общее количество шаров в популяции равно n .

2. Эволюция состоит из последовательности поколений. Каждое поколение состоит из двух шагов. На первом шаге дублируются все шары с сохранением их цвета: черный шар имеет два черных потомка, белый шар имеет два белых потомка. На втором шаге случайным образом удаляется из популяции ровно половина шаров, независимо от их цвета.

Получим марковский процесс, анализ которого показывает, что [Редько, 2005]:

1) рассматриваемый процесс всегда сходится к одному из поглощающих состояний, в котором все шары белые, либо все шары черные;

2) при больших n характерное число поколений T_n , требуемое для сходимости к какому-либо из поглощающих состояний, равно $2n$, $T_n = 2n$.

Таким образом, хотя данный эволюционный процесс чисто нейтральный (черные и белые шары имеют равные шансы выжить), в результате эволюции отбирается только один вид шаров. Величина T_n характеризует скорость нейтрального отбора.

3. Качественная картина эволюции

В [Редько, 1986], [Редько, Цой, 2005] был проведен цикл компьютерных расчетов в рамках рассматриваемой схемы ГА. Результаты расчетов демонстрируют, что при достаточно естественно выбранных параметрах ($N, n \gg 1$, $b \geq PN$, $PN \leq 1$) эволюцию можно охарактеризовать следующим образом:

- начальное распределение по r в популяции близко к нормальному распределению со средним $\langle r \rangle = N/2$ и дисперсией $N/4$;
- процесс эволюции можно характеризовать двумя стадиями: первой – быстрой и второй – медленной;

- на первой стадии происходит отбор особей, расположенных «на левом крыле» исходного распределения, и распределение сжимается;
- на второй стадии появление новых особей в популяции ограничено мутациями, из-за этого ограничения скорость уменьшения $\langle r \rangle$ значительно меньше, чем на первой стадии;
- окончательное распределение характеризует квазивид – распределение в окрестности оптимальной последовательности S_m ;
- при малых интенсивностях отбора и мутаций ($1 \gg b \geq PN$) распределение в квазивиде близко к распределению Пуассона со средним $\langle r \rangle = PN/b$.

4. Оценка скорости и эффективности эволюционного процесса

Оценим скорость и эффективность рассматриваемого ГА, предполагая, что численность популяции n достаточно велика:

$$T_n \geq T, \quad [1 - (1 - P)^N]^n \ll 1, \quad (2)$$

где T_n – характерное время нейтрального отбора, T – характерное время сходимости всего эволюционного процесса. Первое неравенство в (2) означает, что мы считаем не слишком сильным влияние нейтрального отбора. Второе неравенство соответствует пренебрежению мутационными потерями уже найденных удачных особей в популяции.

При больших N величина T определяется второй стадией эволюции, на которой эволюционный поиск происходит следующим образом. Для того чтобы появились новые особи с меньшими значениями r , должно произойти достаточное количество мутаций, а затем должна произойти фиксация этих новых особей в результате отбора. Оценим характерное время t_{-1} , за которое $\langle r \rangle$ уменьшается на 1. Оно составляет: $t_{-1} \sim t_m + t_{от}$, где $t_m \sim (NP)^{-1}$ – характерное время, за которое особи популяции промутируют, $t_{от} \sim b^{-1}$ – характерное время, за которое особи, для которых $r = \langle r \rangle - 1$, в результате отбора вытеснят из популяции особей, для которых $r = \langle r \rangle$. Полагая $T \sim t_{-1} N$, имеем:

$$T \sim P^{-1} + Nb^{-1}. \quad (3)$$

Общее число особей, участвующих в эволюции, составляет $n_{общ} = nT$. Оценим величину $n_{общ}$ для заданного N при некоторых «оптимально» выбранных остальных параметрах b , P , n . Интенсивность отбора считаем достаточно большой: $b \geq PN$, тогда можно пренебречь вторым слагаемым в (3). Полагаем, что интенсивность мутаций P соответствует примерно одной мутации в каждой последовательности в каждом поколении, $P \sim N^{-1}$,

при такой частоте мутаций, с одной стороны, появление новых особей в популяции в результате мутаций происходит достаточно быстро и, с другой стороны, можно пренебречь мутационными потерями (выполняется второе неравенство в (2)). Тогда имеем $T \sim N$. Также полагаем, что первое из неравенств (2) выполняется «на пределе»: $n \sim T_n \sim T \sim N$, т.е. предполагаем минимальную допустимую численность популяции, при которой еще не очень существенны потери особей в результате нейтрального отбора. С учетом сделанных предположений имеем:

$$T \sim N, n_{\text{общ}} \sim N^2. \quad (4)$$

В [Редько, Цой, 2005] была исследована зависимость характера эволюции от параметров N, n, b, P . Для соотношений между параметрами: $n = N, P = N^{-1}, b = 1$, которые соответствуют условиям получения оценок (4), были сделаны численные оценки скорости сходимости эволюционных процессов. Оценки делались следующим образом. Были получены зависимости среднего по популяции расстояния до оптимума от времени $\langle I \rangle(t)$ для разных значений N , и по этим зависимостям оценивалось характерное время сходимости эволюции T двумя способами: 1) оценивалось характерное время релаксации T_R в зависимостях $\langle I \rangle(t)$ по начальному наклону этих кривых, 2) оценивалось время выхода T_S на стационарное значение $\langle I \rangle$, которое получается при больших t . Зависимости $T_R(N)$ и $T_S(N)$ представлены на рис. 1.

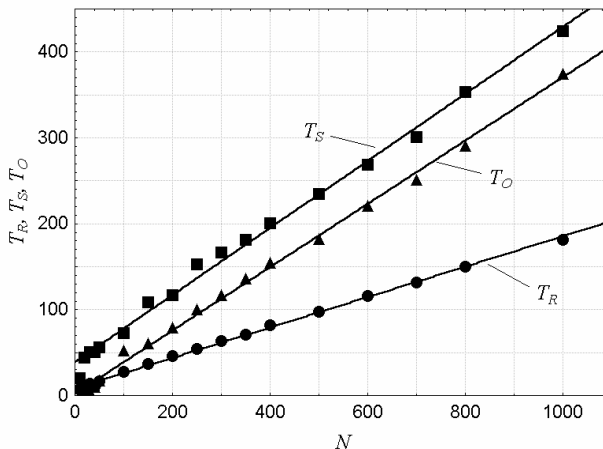


Рис. 1. Зависимости времени релаксации T_R , времени выхода на стационар T_S и времени нахождения оптимального решения T_O от длины последовательностей N . Данные усреднены по 50 расчетам.

Кроме того, определялись значения времени T_O первого появления оптимальной последовательности S_m в популяции. Соответствующая зависимость $T_O(N)$ также представлена на рис. 1. Видно, что при достаточно больших N все три зависимости линейны:

$$T_R(N) = k_R N + T_{R0}, \quad T_S(N) = k_S N + T_{S0}, \quad T_O(N) = k_O N + T_{O0},$$

где $k_R = 0,1772$, $k_S = 0,3903$, $k_O = 0,3685$, $T_{R0} = 8,2709$, $T_{S0} = 38,7356$, $T_{O0} = 2,1288$, что вполне согласуется с оценками (4).

5. Эволюционная модель узкого канала

Помимо основной модели была проанализирована модель узкого канала, в которой скорость приближения к оптимальной последовательности постоянна во время почти всего эволюционного процесса. Предполагаем, что имеется $N+1$ типов особей: S_k , $k = 0, 1, \dots, N$. Особь k -го типа может в результате мутации перейти в особь $k-1$ -го типа либо в особь $k+1$ -го типа. Вероятность любой из этих мутаций равна P_1 . Приспособленность особей k -го типа равна $f_k = \exp(-\beta k)$. Численность популяции равна n . Организуем эволюционный процесс точно так же, как в основной модели (модели квазивидов). Были проведены компьютерные расчеты по данной модели. На рис. 2 приведены зависимости $\langle r \rangle(t)$ (для основной модели) и $\langle k \rangle(t)$ (для модели узкого канала) при $n = N = 1000$, $P = P_1 = N^{-1}$, $b = 1$.

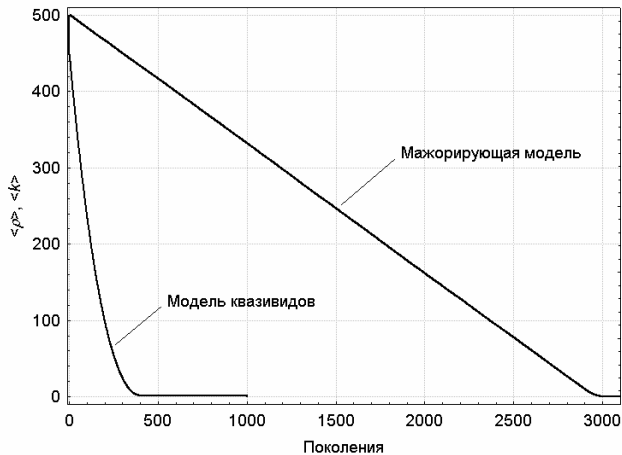


Рис. 2. Зависимости $\langle r \rangle(t)$ и $\langle k \rangle(t)$ при $N = n = 1000$, $P = P_1 = 0,001$, $b = 1$. Данные усреднены по 50 расчетам.

Видно, что в модели узкого канала скорость уменьшения $\langle k \rangle$ практически постоянна и число поколений по порядку величины близко к N , хотя и превышает это значение. Так как эволюционный процесс в данной модели, как и для основной модели, определяется мутациями и отбором, то для модели узкого канала приближенно справедливы оценки скорости и эффективности эволюционного процесса (4).

Тем не менее, обе рассмотренные модели соответствуют случаю единственного максимума приспособленности, что является их ограничением. Нетрудно представить последовательный поиск, в котором оптимальная последовательность находится путем оценки приспособленности N особей. Последовательный поиск организуем следующим образом. Исходим из произвольной последовательности \mathbf{S} , ($S_i = 1$ либо -1). Далее для каждого i ($i = 1, 2, \dots, N$) меняем знак символа ($S_i \rightarrow -S_i$) и при увеличении приспособленности $f(\mathbf{S})$ принимаем новое значение символа, при уменьшении $f(\mathbf{S})$ – возвращаемся к старому. В результате после N испытаний мы найдем оптимальную последовательность \mathbf{S}_m . Итак, для последовательного поиска имеем: $n_{\text{общ}} = N$. Т.е. эволюционный поиск в рассмотренных моделях в определенном смысле «субоптимален»: он не обеспечивает максимальную скорость поиска, хотя он значительно более эффективен случайного поиска, при котором необходимо испытать порядка 2^N последовательностей: $n_{\text{общ}} \sim 2^N$. Отметим, что ограниченность данных моделей можно преодолеть, рассматривая спин-стекольную модель эволюции [Редько, 1990], [Редько, 2005].

6. Модель эволюционного поиска минимумов энергии спинового стекла

Рассмотрим модель эволюционного поиска минимумов энергии спинового стекла (см. [Редько, 2005]). Считаем, что имеется система \mathbf{S} , состоящая из N спинов: $\mathbf{S} = S_1, S_2, \dots, S_N$; $S_i = 1, -1$; $N \gg 1$. Взаимодействия между спинами случайны. Энергия спиновой системы есть:

$$E(\mathbf{S}) = - \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad (5)$$

где J_{ij} – элементы матрицы взаимодействий между спинами. Величины J_{ij} нормально распределены, плотность распределения $P(J_{ij})$ есть:

$$P(J_{ij}) = (2\pi)^{-1/2} (N-1)^{1/2} \exp[-J_{ij}^2 (N-1)2^{-1}] \quad (6)$$

Число локальных минимумов энергии M экспоненциально растет с увеличением N :

$$M \approx \exp(aN), \quad a \approx 0,2 \quad (7)$$

Глобальный минимум энергии E_0 приближенно составляет величину $-0,8N$. Из формул (5), (6) следует, что среднее вариации энергии ΔE при перевороте одного спина ($S_i \rightarrow -S_i$) равно 2.

Рассмотрим эволюцию популяции, в которой геномы модельных особей \mathbf{S} представляют собой информационные последовательности N символов $\mathbf{S} = S_1, S_2, \dots, S_N$. Приспособленность особи \mathbf{S}_k определяем как:

$$f(\mathbf{S}_k) = \exp[-b E(\mathbf{S}_k)], \quad (8)$$

Эволюционный процесс строим так же, как и в основной модели. Подчеркнем, что удаление средней энергии от глобального минимума порядка N , а вариация энергии при мутации $S_i \rightarrow -S_i$ порядка 1, следовательно, можно использовать приведенные оценки (4) и для спинстекольной модели. Единственное отличие от рассмотренных выше моделей состоит в том, что эволюция сходится к одному из достаточно глубоких локальных минимумов энергии E_L , который может быть разным для различных реализаций эволюционного процесса.

Заключение

Итак, получены количественные оценки эффективности эволюционных алгоритмов. Оценки демонстрируют, что эволюционный процесс, как алгоритм оптимизации в определенном смысле "субоптимален": он не обеспечивает максимальную скорость поиска (для конкретной задачи возможны более эффективные алгоритмы, такие как последовательный перебор), тем не менее, он намного эффективнее случайного перебора.

Список литературы

- [Редько, 1986] Редько В.Г. Оценка скорости эволюции в моделях Эйгена и Куна // Биофизика. 1986. Т. 31. N.3. С. 511-516.
- [Редько, 1990] Редько В.Г. Спиновые стекла и эволюция // Биофизика. 1990. Т.35. Вып.5. С.831-834.
- [Редько, 2005] Редько В.Г. Эволюция, нейронные сети, интеллект. Модели и концепции эволюционной кибернетики. М.: КомКнига. (Изд-во УРСС, серия «Синергетика: от прошлого к будущему»), 2005. 224 с.
- [Редько, Цой, 2005] Редько В.Г., Цой Ю.Р. Оценка эффективности эволюционных алгоритмов // Доклады АН, 2005. Т. 404. N. 3. С. 312-315.
- [Эйген, 1973] Эйген М. Самоорганизация материи и эволюция биологических макромолекул. М.: Мир, 1973, 216 с.

[Holland, 1975] Holland J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. Ann Arbor, MI: The University of Michigan Press, 1975 (1st edition). Boston, MA: MIT Press., 1992 (2nd edition).