

Редько В.Г., Цой Ю.Р. Оценка скорости и эффективности эволюционных алгоритмов // Бионические информационные системы и их практические применения. (под ред. Зинченко Л.А., Курейчика В.М., Редько В.Г.). М.: ФИЗМАТЛИТ, 2011 (288 с., ISBN: 978-5-9221-1302-1). С. 109-126.

**В.Г. Редько<sup>1</sup>, Ю.Р. Цой<sup>2</sup>**

## **Оценка скорости и эффективности эволюционных алгоритмов<sup>\*</sup>**

Подводятся итоги работ авторов по оценке скорости эволюции и эффективности для нескольких эволюционных алгоритмов, которые могут рассматриваться как простые варианты генетического алгоритма. В качестве основной модели изучается модель квазивидов, в которой предполагается существование оптимальной особи, геном особи представляет собой последовательность бинарных символов. Эволюция популяции особей в этой модели приводит к отбору квазивида – такого распределения последовательностей, в которое входит как оптимальная последовательность, так и близкие к ней, отличающиеся от оптимальной мутационными заменами. Полученные оценки показывают, что при эволюционном поиске оптимальная последовательность длины  $N$  может быть найдена в течение  $N$  поколений, при этом в эволюционном процессе участвуют порядка  $N^2$  особей. Близкие оценки справедливы и для других рассмотренных моделей: эволюционной модели узкого канала, мажорирующей модели и модели эволюционного поиска минимумов энергии спинового стекла.

### **Введение**

При работе с алгоритмами эволюционной оптимизации полезны количественные 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 мы отталкиваемся от простейшей версии генетического алгоритма (ГА) [15] без скрещивания, который совпадает с моделью квазивидов, введенной М. Эйгеном при изучении процессов предбиологической эволюции [8].

Подчеркнем, что многие исследователи занимались анализом эволюционных алгоритмов [10-16, 18, 19, 21]. Однако многие аспекты эволюционных алгоритмов остаются неясными. В частности, полезно получить количественные оценки скорости сходимости и эффективности

---

<sup>1</sup> НИИ Системных исследований РАН, 117218, Москва, vgreedko@gmail.com

<sup>2</sup> Томский политехнический университет, 634050, Томск, qai@mail.ru

\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 07-01-00180 и № 09-08-00309-а).

алгоритмов для ряда опорных примеров. В настоящей работе в качестве основной модели рассматривается модель квазивидов, для которой сделаны аналитические оценки скорости эволюции и приводятся результаты проверки этих оценок численными расчетами.

Данная глава подводит итог цикла работ [3, 4, 6, 7, 20], посвященных исследованию скорости сходимости простых моделей эволюции. Оценки сделаны для метода рулеточного 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 основной рассматриваемой модели предполагается, что имеется единственный максимум приспособленности. Также анализируется модель узкого канала и мажорирующая модель, для которых скорость эволюции постоянна, и модель спиновых стекол, для которой число локальных максимумов приспособленности экспоненциально растет с ростом длины генома.

Глава организована следующим образом. В разделе 1 изложена модель квазивидов. Раздел 2 характеризует качественную картину эволюции в этой модели. Роль нейтрального отбора в популяциях конечной численности представлена в разделе 3. Аналитические оценки скорости и эффективности эволюции в модели квазивидов сделаны в разделе 4. Результаты численных расчетов в рамках этой модели приведены в разделе 5. Модель узкого канала и близкая к ней мажорирующая модель излагаются в разделе 6. Модель эволюционного поиска минимумов энергии спинового стекла характеризуется в разделе 7.

### **3. 1. Модель квазивидов**

Модель квазивидов была введена М. Эйгеном при изучении процессов предбиологической эволюции [8, 9]. Содержательно эта модель описывает возможный процесс того, как могли бы эволюционно возникнуть простейшие макромолекулы, кодирующие наследственную информацию. В модели рассматривается эволюция популяции цепочек РНК. При наличии притока энергии в виде богатых энергией молекул типа АТФ цепочки РНК могут реплицироваться, т.е. размножаться путем саморепликации или репликации с помощью простейших ферментных систем. При размножении происходит копирование наследуемой информации. Ошибки в процессе копирования приводят к мутациям РНК. Эволюция популяции приводит к отбору квазивида – такого распределения цепочек РНК, в которое входит как «наилучшая РНК» (размножающаяся с максимальной скоростью), так и близкие к ней цепочки, отличающиеся от этой наилучшей мутационными заменами.

С формальной точки зрения рассматриваем дарвиновскую эволюцию популяции модельных «особей». Геномы особей представляют собой информационные последовательности  $\{S_k\}$ , для основного варианта модели будем считать, что символы последовательностей  $S_{ki}$  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  $S_{ki}$ .  $N$  и  $n$  в процессе отдельного эволюционного процесса не меняются и велики:  $N, n \gg 1$ . Для основного варианта модели считаем, что  $f(\mathbf{S})$  – унимодальная функция: имеется оптимальная особь  $\mathbf{S}_m$ , имеющая максимальную приспособленность, а приспособленность произвольной особи  $\mathbf{S}$  экспоненциально уменьшается с ростом расстояния по Хеммингу (числа несовпадающих символов в соответствующих позициях последовательностей)  $\rho(\mathbf{S}, \mathbf{S}_m)$  между  $\mathbf{S}$  и  $\mathbf{S}_m$ :

$$f(\mathbf{S}) = \exp[-\beta\rho(\mathbf{S}, \mathbf{S}_m)], \quad (3.1)$$

где  $\beta$  – параметр интенсивности отбора. Эволюция приводит к формированию *квазивида* – популяции, в которую входит как оптимальная последовательность, так и отличающиеся от нее мутационными заменами.

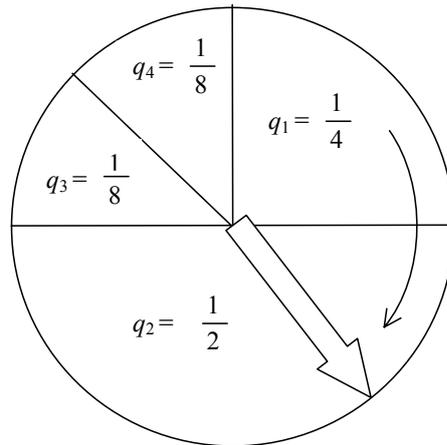
Формальная схема модели квазивидов представлена в табл. 1.

**Табл. 3. 1. Схема модели квазивидов**

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 $P$ ; $P$ – параметр интенсивности мутаций.
<i>Организация последовательности поколений</i> . Повторяем шаги 1,2 для $t = 1, 2, \dots; t$ – номер поколения.

Подшаг 1.2 требует пояснения. Формирование новой популяции происходит следующим образом. Представим, что имеется рулетка. Для каждого поколения размечаем рулетку на  $n$  секторов, долю  $k$ -го сектора (отнесенную ко всей площади круга) полагаем равной  $q_k = f_k / [\sum_l f_l]^{-1}$  (рис. 3. 1);  $f_k = f(\mathbf{S}_k)$ . Далее  $n$  раз крутится рулетка, каждый раз определяется номер сектора, на котором останавливается стрелка рулетки, и соответствующая этому номеру особь выбирается в популяцию следующего поколения. Таким образом, в следующее поколение будут отобраны ровно  $n$  особей. При этом для каждого вращения рулетки вероятность  $k$ -й особи попасть в следующее поколение пропорциональна ее приспособленности

$f_k$ . Некоторые особи могут быть отобраны в новое поколение несколько раз, – это означает, что в новой популяции будет несколько потомков данной особи.



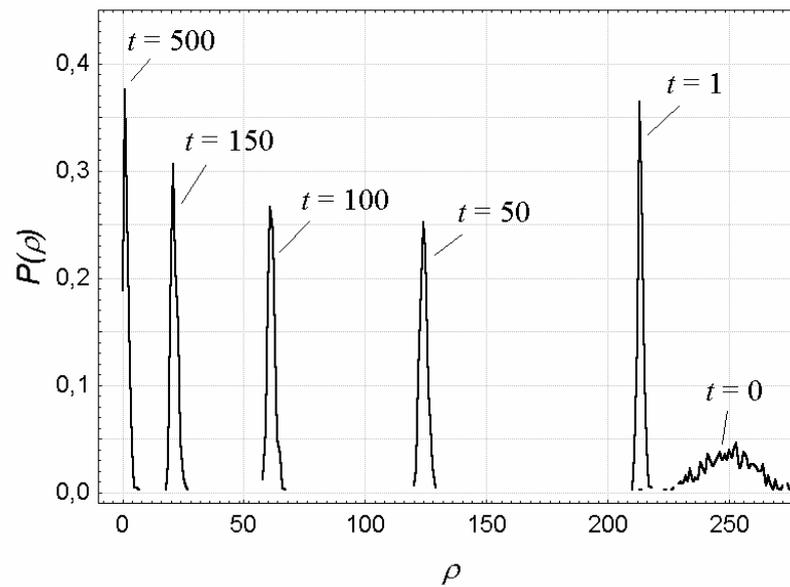
**Рис. 3. 1. Схема рулеточного отбора, при которой особи выбираются в популяцию нового поколения с вероятностями  $q_k$ , пропорциональными их приспособленностям  $f_k$ . Показан пример, для которого  $n = 4$ ,  $f_1 = 2$ ,  $f_2 = 4$ ,  $f_3 = 1$ ,  $f_4 = 1$ .**

### 3. 2. Качественная картина эволюции

В [3, 7] был проведен цикл компьютерных расчетов в рамках рассматриваемой модели квазивидов с хемминговой мерой близости между последовательностями. Результаты расчетов демонстрируют, что при достаточно естественно выбранных параметрах ( $N$ ,  $n \gg 1$ ,  $\beta \geq PN$ ,  $PN \leq 1$ ) эволюцию можно охарактеризовать следующим образом (пример расчета представлен на рис. 3. 2):

- начальное распределение по  $\rho$  в популяции близко к нормальному распределению со средним  $\langle \rho \rangle = N/2$  и дисперсией  $N/4$  ( $\langle \rho \rangle$  – среднее по популяции расстояние по Хеммингу до оптимальной последовательности  $S_m$ );
- 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  $\langle \rho \rangle$  значительно меньше, чем на первой стадии;
- окончательное распределение характеризует квазивид – распределение в окрестности оптимальной последовательности  $S_m$ ;

- при малых интенсивностях отбора и мутаций ( $1 \gg \beta \geq PN$ ) распределение в квазивиде близко к распределению Пуассона со средним  $\langle \rho \rangle = PN/\beta$ .



**Рис. 3. 2. Эволюция распределения особей,  $N = 500$ ,  $n = N$ ,  $\beta = 1$ ,  $P = 0.002$ . По оси ординат отложена доля особей  $P(\rho)$ , имеющих рассматриваемое значение  $\rho$ .  $t$  – номер поколения.**

Отметим, что для представленного на рис. 3. 2 расчета первая стадия за счет достаточно интенсивного отбора действительно проходит быстро, она длится всего лишь один такт эволюции. Основное время эволюции занимает вторая стадия, на которой скорость эволюции существенно ограничена появлением новых особей в результате мутаций. Уменьшение величины  $\langle \rho \rangle$  со временем происходит неравномерно: в начале второй стадии скорость уменьшения  $\langle \rho \rangle$  выше, чем в дальнейшем, так как число благоприятных мутаций, приводящих к понижению  $\rho$ , постепенно уменьшается. Окончательное распределение (близкое к показанному при  $t = 500$ ) формируется в окрестности оптимальной последовательности  $S_m$ , для которой  $\rho = 0$ .

### **3. 3. Стохастический характер эволюционного процесса. Роль нейтрального отбора**

Далее предполагается, что  $2^N \gg n$ , т.е. предполагается, что длина  $N$  последовательностей  $S$  (модельных ДНК) достаточно велика. При этом число последовательностей отдельных видов в популяции будет невелико, а многие виды вообще будут отсутствовать в популяции. В силу этого существенны флуктуации числа видов, и рассматриваемые эволюционные процессы имеют стохастический характер. В частности, необходимо учитывать нейтральный отбор, т.е. фиксацию особей, независимую от их приспособленностей [2; 6].

Для того чтобы продемонстрировать особенности нейтрального отбора явно, рассмотрим «чисто нейтральную» эволюционную игру, которую определим следующим образом:

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

Считаем, что популяция находится в  $l$ -состоянии, если число черных и белых шаров для рассматриваемого поколения равны  $l$  и  $n - l$ , соответственно. Будем характеризовать эволюцию вероятностями  $P_{lm}$  переходов из  $l$ -состояния в  $m$ -состояние в течение одного поколения. Используя простой комбинаторный расчет, можно определить значения  $P_{lm}$ :

$$P_{lm} = \begin{cases} \binom{2l}{m} \times \binom{2n-2l}{n-m} \Big/ \binom{2n}{n}, & \text{если } 2l - n \leq m \leq 2l \\ 0, & \text{если } m > 2l \text{ или } m < 2l - n \end{cases}, \quad (3.2)$$

где  $\binom{a}{b} = \frac{a!}{(a-b)!b!}$ .

Матрица  $P_{lm}$  задает случайный марковский процесс, который может рассматриваться как пример простого стохастического эволюционного процесса [1]. Используя общие методы анализа таких процессов, можно показать, что:

- 1) рассматриваемый процесс всегда сходится к одному из поглощающих состояний, а именно, к 0-состоянию (все шары белые), либо к  $n$ -состоянию (все шары черные);
- 2) при больших  $n$  характерное число поколений  $T_n$ , требуемое для сходимости к какому-либо из поглощающих состояний, равно  $2n$ :

$$T_n = 2n. \quad (3.3)$$

Таким образом, хотя данный эволюционный процесс чисто нейтральный (черные и белые шары имеют равные шансы «выжить»), однако в результате эволюции отбирается только один вид. Величина  $T_n$  представляет собой оценку характерного времени (числа поколений) нейтрального отбора.

### 3. 4. Оценка скорости и эффективности эволюционного процесса

Теперь, учитывая качественный характер эволюции и роль нейтрального отбора, оценим скорость и эффективность рассматриваемого эволюционного процесса в модели квазивидов с хемминговой мерой близости.

Предполагаем, что численность популяции  $n$  достаточно велика:

$$T_n \geq T, \quad [1 - (1 - P)^N]^n \ll 1, \quad (3. 4)$$

где  $T_n$  – характерное время нейтрального отбора,  $T$  – характерное время сходимости всего эволюционного процесса. Первое неравенство в (3. 4) означает, что мы считаем не слишком сильным влияние нейтрального отбора, так как характерное время всей эволюции меньше или порядка  $T_n$ . Второе неравенство соответствует пренебрежению мутационными потерями уже найденных удачных особей в популяции.

При больших  $N$  величина  $T$  определяется второй (медленной) стадией эволюции, на которой эволюционный поиск происходит следующим образом. Для того чтобы появились новые особи с меньшими значениями  $\rho$ , должно произойти достаточное количество мутаций, а затем должна произойти фиксация этих новых особей в результате отбора. Оценим характерное время  $t_{-1}$ , за которое  $\langle \rho \rangle$  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,  $t_{от} \sim \beta^{-1}$  – характерное время, за которое особи, для которых  $\rho = \langle \rho \rangle - 1$ , в результате отбора вытеснят из популяции особи, для которых  $\rho = \langle \rho \rangle$ . Учитывая, что за время всего эволюционного процесса  $\langle \rho \rangle$  должно уменьшиться на величину, приближенно равную  $N/2$ , полагаем  $T \sim t_{-1} N$  и имеем:

$$T \sim P^{-1} + N\beta^{-1}. \quad (3. 5)$$

Общее число особей, участвующих в эволюции, составляет  $n_{общ} = nT$ . Оценим величину  $n_{общ}$  для заданного  $N$  при некоторых достаточно разумно выбранных остальных параметрах  $\beta$ ,  $P$ ,  $n$ . Эти параметры выбираем таким образом, чтобы, по возможности, уменьшить величины  $T$  и  $n_{общ}$ . Интенсивность отбора считаем достаточно большой:  $\beta \geq PN$ , тогда можно пренебречь вторым слагаемым в (3. 5). 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 (3. 4)). Тогда имеем  $T \sim N$ . Также полагаем, что

первое из неравенств (3. 4) выполняется «на пределе» ( $T_n \sim T$ ), т.е. для численности популяции имеем оценку:

$$n \sim T_n \sim T \sim N, \quad (3. 6)$$

Оценки (3. 6) предполагают минимальную допустимую численность популяции, при которой еще не очень существенны потери особей в результате нейтрального отбора. С учетом сделанных предположений получаем оценки характерного времени эволюции  $T$  и общего числа особей, участвующих в эволюции  $n_{\text{общ}}$ :

$$T \sim N, \quad n_{\text{общ}} \sim N^2. \quad (3. 7)$$

Выражение (3. 7) определяет оценки скорости сходимости всего эволюционного процесса (значение  $T$ ) и эффективности эволюционного поиска оптимальной последовательности  $S_m$  (значение  $n_{\text{общ}}$ ).

### 3. 5. Результаты численного моделирования

Оценки (3. 7) были получены при использовании ряда допущений. Поэтому эти оценки были проверены путем численного компьютерного расчета [7]. Расчет проводился для соотношений между параметрами, которые соответствуют условиям получения оценок (3. 7):  $n = N, P = N^{-1}, \beta = 1$ .

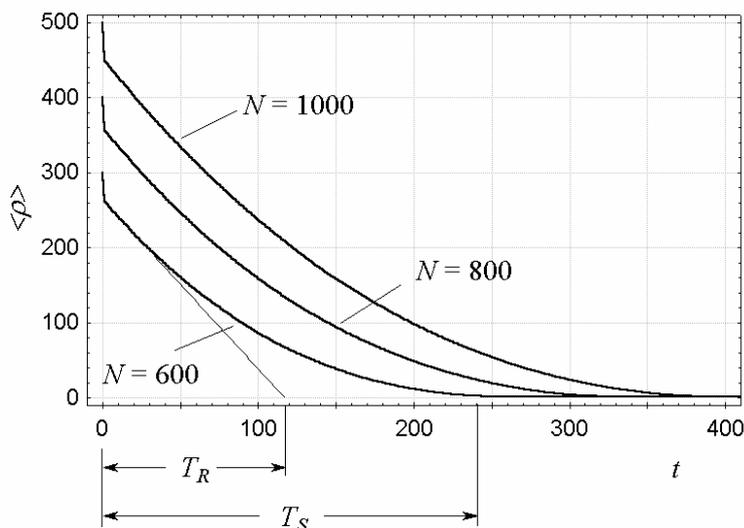
Расчет выполнялся следующим образом. Были получены зависимости среднего по популяции расстояния до оптимума от времени  $\langle \rho \rangle(t)$  для разных значений  $N$  (рис. 3. 3), и по этим зависимостям оценивалось характерное время сходимости эволюции  $T$  двумя способами: 1) рассчитывалось характерное время релаксации  $T_R$  в зависимостях  $\langle \rho \rangle(t)$  по начальному наклону этих кривых, 2) определялось время выхода  $T_S$  на стационарное значение  $\langle \rho \rangle$ , которое получается при больших  $t$  (см. рис. 3. 3).

Полученные в результате зависимости  $T_R(N)$  и  $T_S(N)$  представлены на рис. 3. 4. Кроме того, определялись значения времени  $T_O$  первого появления оптимальной последовательности  $S_m$  в популяции. Соответствующая зависимость  $T_O(N)$  также представлена на рис. 3. 4. 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 (3. 7). Значения  $k_R, k_S, k_O$  показывают, что оценки скорости сходимости

эволюционных процессов были получены с некоторым «запасом», что неудивительно, так как при получении оценок был сделан ряд предположений. Кроме того, в рассматриваемой модели перемещение к оптимальной последовательности  $S_m$  возможно разными способами за счет большого количества благоприятных мутаций, приводящих к уменьшению  $\rho$ ; эта возможность приводит к увеличению скорости уменьшения  $\langle \rho \rangle$  по сравнению с сделанными оценками. Отметим, что продемонстрированная компьютерными расчетами линейность зависимостей  $T_R(N)$ ,  $T_S(N)$ ,  $T_O(N)$  неочевидна и примечательна.

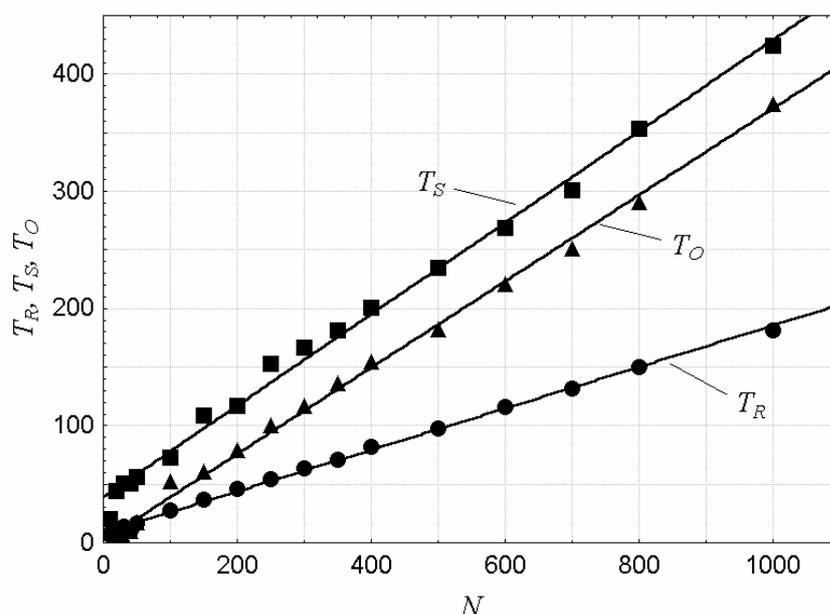


**Рис. 3. 3. Зависимости  $\langle \rho \rangle(t)$  для разных значений  $N$ . Показана схема оценки значений  $T_R$  и  $T_S$  для случая  $N = 600$ . Зависимости усреднены по 50 расчетам.**

Подчеркнем, что оценки (3. 7) учитывают важный фактор возможности нейтрального отбора и соответствующего ограничения на численность популяции.

Итак, получены и проверены путем численного моделирования аналитические оценки скорости сходимости и эффективности эволюционных процессов для модели квазивидов в случае, когда геномы модельных особей определяются последовательностями бинарных символов. Существенно, что длина генома особи  $N$  предполагается большой,  $N \gg 1$ , так что в популяции в течение одного поколения присутствует только лишь очень малая доля всех возможных особей. Основные предположения, при которых делаются оценки, состоят в том, что численность популяции особей  $n$  должна быть порядка длины последовательностей  $n \sim N$ , а вероятность мутации  $P$  отдельного символа должна быть такой, что при мутациях в среднем в течение каждого поколения в каждой последовательности модифицируется ровно один символ  $P \sim N^{-1}$ . При этих предположениях роль нейтрального отбора сравнительно невелика; движение к  $S_m$  происходит за счет мутаций и отбора: за счет мутаций в распределении последовательностей появляются новые особи, а за счет отбора это распределение  $P(\rho)$

постепенно смещается к оптимальной последовательности. Качественная картина этого процесса представлена на рис. 3. 2.



**Рис. 3. 4. Зависимости времени релаксации  $T_R$ , времени выхода на стационар  $T_S$  и времени нахождения оптимального решения  $T_O$  от длины последовательностей  $N$ . Приведенные результаты усреднены по 50 расчетам.**

Сравним эволюционный метод оптимизации рассматриваемой функции приспособленности (3. 1) с двумя простейшими методами: последовательный поиск и случайный перебор.

Последовательный поиск организуем следующим образом. Исходим из произвольной последовательности  $S$ , символы которой равны  $S_i = 1$  либо  $-1$ . Далее последовательно для каждого  $i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) меняем знак символа ( $S_i \rightarrow -S_i$ ) и при увеличении приспособленности  $f(S)$  со сменой знака принимаем новое значение символа, а при уменьшении  $f(S)$  – возвращаемся к старому. В результате после  $N$  испытаний найдем оптимальную последовательность  $S_m$ . Итак, для последовательного поиска имеем:  $n_{\text{общ}} = N$ .

При случайном переборе для нахождения оптимальной последовательности необходимо испытать порядка  $2^N$  последовательностей:  $n_{\text{общ}} \sim 2^N$ .

Полученные оценки приведены в табл. 3. 2.

Приведенные оценки показывают, что эволюционный процесс, как алгоритм оптимизации, в рассмотренной модели в определенном смысле «субоптимален»: он не обеспечивает максимальную скорость поиска, (например, для рассматриваемой задачи возможен более эффективный последовательный перебор), тем не менее, он значительно более эффективен случайного поиска, при котором необходимо испытать порядка  $2^N$  последовательностей:  $n_{\text{общ}} \sim 2^N$ .

**Табл. 3. 2. Оценки эффективности методов поиска**

Метод поиска	$n_{\text{общ}}$	$n_{\text{общ}}$ при $N = 1000$
Последовательный	$N$	1000
Эволюционный	$\sim N^2$	$\sim 10^6$
Случайный	$\sim 2^N$	$\sim 10^{300}$

Хотя оценки (3. 7) характерного времени эволюции и общего числа особей, участвующих в эволюции, получены для модели квазивидов, в которой символы последовательностей бинарны, эта же методика получения оценок скорости и эффективности эволюции применима к нескольким близким эволюционным моделям.

Например, в работе [20] аналогичная методика была применена к модели квазивидов, в которой символы последовательностей принимали  $\lambda$  различных значений ( $\lambda$  – небольшое целое число, например,  $\lambda = 4$ ). Как и в изложенной выше модели предполагается существование оптимальной последовательности  $S_m$  и то, что приспособленность произвольной последовательности  $S$  экспоненциально уменьшается с ростом расстояния по Хеммингу  $\rho(S, S_m)$  между  $S$  и  $S_m$  (см. выражение (3. 1)).

Поскольку для этого случая методика получения оценок и проверки их численным расчетом совершенно аналогична вышеизложенной, приведем соответствующий результат без вывода. При небольших целых  $\lambda$  вместо оценок (3. 7) имеем, что характерное время эволюции  $T$  и общее число особей, участвующих в эволюции  $n_{\text{общ}}$ , определяются выражением:

$$T \sim (\lambda-1)N, \quad n_{\text{общ}} \sim [(\lambda-1)N]^2. \quad (3. 8)$$

Отметим, что (3. 8) обобщает выражение (3. 7): при  $\lambda = 2$  (3. 8) переходит в (3. 7).

Далее рассмотрим эволюционные модели, близкие к изложенной модели квазивидов с хемминговой мерой близости.

### **3. 6. Модель узкого канала и мажорирующая модель**

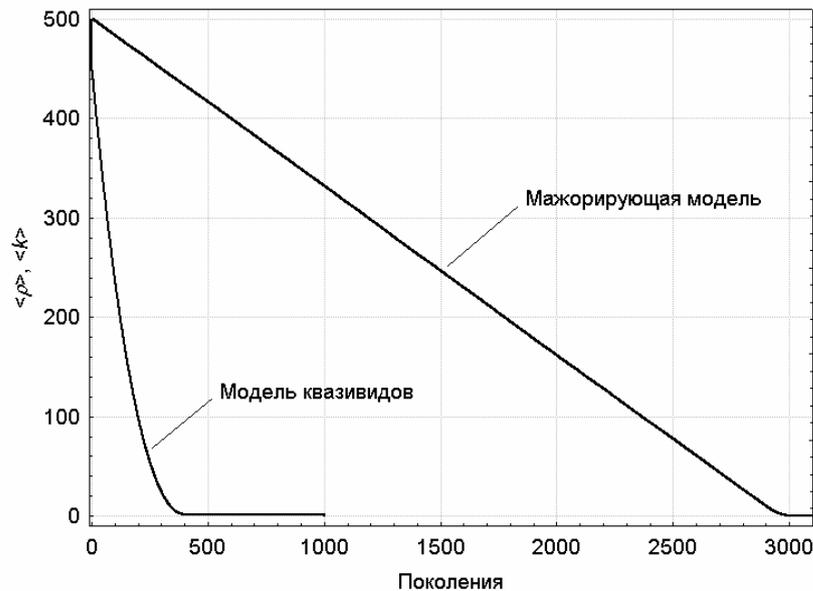
В настоящем разделе рассмотрим эволюционную модель узкого канала и близкую к ней мажорирующую модель.

В модели узкого канала предполагается эволюция популяции последовательностей  $S_k$ . Как и в модели с хемминговой мерой близости, символы последовательностей  $S_{ki}$  принимают два значения:  $S_{ki} = +1$  либо  $-1$ ;  $i = 1, 2, \dots, N$ ;  $k = 1, 2, \dots, n$ ;  $N$  – длина последовательностей;  $n$  – численность популяции. Также имеется оптимальная последовательность  $S_m$ , приспособленность которой максимальна. Однако число последовательностей  $S_k$ ,

приспособленность которых отлична нуля, ограничено. Имеется только  $N+1$  такая последовательность  $S_k$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, N$ , причем  $S_0 = S_m$ , число несовпадающих символов в  $S_k$  и  $S_m$  равно  $k$ , а приспособленность последовательности  $S_k$  равна  $f(S_k) = \exp(-\beta k)$ . При этом для того, чтобы перейти от последовательности  $S_k$  к  $S_{k-1}$  нужно изменить знак только одного определенного символа. Следовательно, чтобы перейти от последовательности  $S_N$  к  $S_0$  нужно поочередно изменить  $N$  символов в строго заданном порядке, т.е. пройти по «узкому каналу». И в процессе эволюции мутации должны произойти именно в этом порядке. При «неправильных» мутациях будут появляться нежизнеспособные последовательности-особи с нулевой приспособленностью. Для наглядности приведем простой пример таких особей ( $N = 4$ ):  $S_4 = -1, -1, -1, -1$ ;  $S_3 = -1, -1, -1, 1$ ;  $S_2 = -1, -1, 1, 1$ ;  $S_1 = -1, 1, 1, 1$ ;  $S_0 = 1, 1, 1, 1$ . Все остальные последовательности имеют нулевую приспособленность. Видно, что для того, чтобы пройти от  $S_4$  к  $S_0$ , нужно идти по «узкому каналу», поочередно меняя символы в нужном порядке.

Было проведено компьютерное моделирование [5] в рамках модели узкого канала. При компьютерных расчетах скорость сходимости эволюционного процесса была меньше, чем для модели с хемминговой мерой близости, а величина скорости уменьшения среднего по популяции значения  $k$  была практически постоянна в течение всего эволюционного процесса. В определенной степени, скорость сходимости эволюции в модели узкого канала мажорирует скорость эволюции в квазивидов (см. рис. 2 в лекции 4 в [5]). Этот факт привел к построению более простой мажорирующей модели, скорость эволюции в которой мажорирует таковую в модели квазивидов, и в которой можно не учитывать информационную структуру последовательностей-особей.

В мажорирующей модели предполагаем, что имеется всего  $N+1$  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  $P_1$ . Другие мутации отсутствуют. Приспособленность особей  $k$ -го типа равна  $f_k = \exp(-\beta k)$ . Численность популяции равна  $n$ . Эволюционный процесс организуется так же, как и в модели квазивидов с хемминговой мерой близости. Были проведены компьютерные расчеты по данной модели. На рис. 3. 5 приведены зависимости средних по популяции значений от времени  $\langle \rho \rangle(t)$  (для модели квазивидов с хемминговой мерой близости) и  $\langle k \rangle(t)$  (для мажорирующей модели) при  $n = N = 1000$ ,  $P = P_1 = N^{-1}$ ,  $\beta = 1$ .



**Рис. 3. 5.** Зависимости  $\langle \rho \rangle(t)$  и  $\langle k \rangle(t)$  при  $N = n = 1000, P = P_1 = 0,001, \beta = 1$ . Результаты усреднены по 50 расчетам.

Видно, что в мажорирующей модели 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 мажорирующей модели приближенно справедливы оценки скорости и эффективности эволюционного процесса (3. 7).

Рассмотренные эволюционные модели соответствуют случаю единственного максимума приспособленности, что является их ограничением. В следующем разделе излагается «спин-стекольная» модель эволюции [4, 6], в которой число максимумов приспособленности экспоненциально растет с ростом длины последовательности-особи.

### 3. 7. Модель эволюционного поиска минимумов энергии спинового стекла

Построим модель для многоэкстремальной функции приспособленности  $f(\mathbf{S})$ , используя известную модель спиновых стекол Шеррингтона-Киркпатрика. Эта модель [17, 22] описывает систему попарно взаимодействующих спинов. Взаимодействия между спинами предполагаются случайными. Формально модель сводится к следующему.

1. Имеется система  $\mathbf{S}$ , состоящая из  $N$  спинов:  $\mathbf{S} = S_1, S_2, \dots, S_N$ ; число спинов предполагается большим,  $N \gg 1$ . Спины принимают значения 1 либо -1:  $S_i = 1, -1$ .
2. Взаимодействия между спинами случайны. Энергия спиновой системы есть:

$$E(\mathbf{S}) = - \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad (3. 9)$$

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

$$P(J_{ij}) = (2\pi)^{-1/2} (N-1)^{1/2} \exp[-J_{ij}^2 (N-1)2^{-1}]. \quad (3. 10)$$

Для модели (3. 9), (3. 10) известно, что число локальных минимумов энергии  $M$  экспоненциально растет с увеличением  $N$  [23]:

$$M \sim \exp(\alpha N), \quad \alpha \approx 0,2. \quad (3. 11)$$

Локальный минимум есть такое состояние системы спинов  $S_L$ , для которого переворот любого одного спина ( $S_i \rightarrow -S_i$ ) приводит к повышению энергии.

Глобальный минимум энергии  $E_0$  приближенно составляет величину  $-0,8N$  [24]:

$$E_0 \approx -0,8N \quad (3. 12)$$

Из формул (3. 9), (3. 10) следует, что среднее вариации энергии  $\Delta E$  при перевороте одного спина ( $S_i \rightarrow -S_i$ ) равно 2:

$$\langle \Delta E \rangle = 2. \quad (3. 13)$$

Среднее значение энергии при случайной ориентации спинов согласно (3. 9), (3. 10) равно 0:

$$\langle E \rangle = 0. \quad (3. 14)$$

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:

$$f(\mathbf{S}_k) = \exp[-\beta E(\mathbf{S}_k)], \quad (3.15)$$

где  $E(\mathbf{S}_k)$  – энергия спинового стекла.

Эволюционный процесс строим так же, как и в модели квазивидов с хемминговой мерой близости. Подчеркнем, что удаление средней энергии в момент времени  $t = 0$  от глобального минимума согласно (3. 12), (3. 14) порядка  $N$ . Вариация энергии при мутации  $S_i \rightarrow -S_i$  согласно

(3. 13) порядка 1. Таким образом, эти параметры, определяющие скорость эволюции, близки к таковым для модели квазивидов с хемминговой мерой близости. Эволюция в рассматриваемой спин-стекольной модели по характеру также близка к эволюции в модели квазивидов с хемминговой мерой близости, в частности, можно условно выделить две стадии: медленную и быструю. Получим оценку времени эволюции в спин-стекольной модели.

При больших  $N$  длительность  $T$  эволюции определяется второй стадией, на которой, для появления новых особей с меньшей энергией, должно произойти достаточное количество мутаций, а затем должна произойти фиксация этих новых особей в результате отбора. Оценим характерное время  $t_{-1}$ , за которое среднее значение энергии в популяции  $\langle E \rangle_p$  уменьшается на 1. Оно составляет:

$$t_{-1} \sim (\Delta E)^{-1} (t_M + t_{от}), \quad (3.16)$$

где  $\Delta E$  – характерное значение вариации энергии спинового стекла при перевороте одного спина,  $t_M \sim (NP)^{-1}$  – характерное время однократной мутации,  $t_{от} \sim (\beta \Delta E)^{-1}$  – характерное время, за которое «особи» с энергией  $\langle E \rangle_p - \Delta E$  вытесняют из популяции особей с энергией  $\langle E \rangle_p$ ,  $P$  – вероятность переворота одного спина при мутациях. Согласно (3. 13)  $\Delta E \sim 2$ .

Из приведенных соотношений для спин-стекольной модели имеем:

$$t_{-1} \sim (\Delta E)^{-1} [(NP)^{-1} + (\beta \Delta E)^{-1}], \quad \Delta E \sim 2 \quad (3.17)$$

Общее изменение средней энергии в популяции в процессе эволюции согласно (3. 12), (3. 14) порядка  $N$ , следовательно, характерное время всего эволюционного процесса  $T$  для рассматриваемой модели составляет  $T \sim t_{-1} N$ . С учетом сказанного из (3. 16) имеем:

$$T \sim P^{-1} + N\beta^{-1}. \quad (3.18)$$

Общее число особей, участвующих в эволюции, составляет  $n_{общ} = nT$ . Оценим величину  $n_{общ}$  при достаточно большой интенсивности отбора (когда можно пренебречь вторым слагаемым в (3. 17)), как и в модели с хемминговой мерой близости полагая  $n \sim N$ ,  $P \sim N^{-1}$ . С учетом сделанных предположений имеем:

$$T \sim N, \quad n_{общ} \sim N^2. \quad (3.19)$$

Оценки (3.19) совпадают с таковыми в модели с хемминговой мерой близости. Отметим, что оценки (3.19) согласуются с результатами ранних численных расчетов [4-6]. Эти расчеты показали, что оценки скорости эволюции в спин-стекольной модели ближе к реальным значениям, чем в модели с хемминговой мерой близости; по-видимому, это связано с меньшим числом благоприятных мутаций, приводящих к уменьшению энергии спинового стекла. Кроме того, в спин – стекольной модели эволюции находится не единственный, а один из локальных (близкий по величине  $E$  к глобальному) минимумов энергии спинового стекла.

## Заключение

Итак, получены количественные оценки скорости сходимости и эффективности нескольких сходных эволюционных алгоритмов. Эти оценки важны как с научной, так и с инженерной точки зрения. Наиболее полный анализ проведен для модели квазивидов с хемминговой мерой близости. Для этой основной модели формулы (3. 7) оценивают характерное время эволюционного поиска оптимума и общее число особей, участвующих в эволюции. Эти же оценки приближенно применимы и к остальным рассмотренным моделям, хотя для модели узкого канала, мажорирующей модели и спин-стекольной модели эволюции целесообразен более детальный анализ.

Оценки демонстрируют, что эволюционный процесс, как алгоритм оптимизации в определенном смысле «субоптимален»: он не обеспечивает максимальную скорость поиска оптимума (например, для основной модели показано, что возможен более эффективный алгоритм, такой как последовательный перебор), тем не менее, он намного эффективнее случайного перебора. А так как эволюционный метод поиска прост и универсален, то он может рассматриваться как хороший эвристический метод оптимизации для широкого класса задач.

## Список литературы

1. Карлин С. Основы теории случайных процессов. М.: Мир, 1975.
2. Кимура М. Молекулярная эволюция: теория нейтральности. М.: Мир, 1985. 400 с.
3. Редько В.Г. Оценка скорости эволюции в моделях Эйгена и Куна // Биофизика. 1986. Т. 31. № 3. С. 511-516.
4. Редько В.Г. Спиновые стекла и эволюция // Биофизика, 1990. Т.35. Вып.5. С. 831-834.
5. Редько В.Г. Эволюционная кибернетика. Интернет-лекции:  
<http://www.keldysh.ru/pages/BioCyber/Lectures.html>  
<http://www.keldysh.ru/pages/BioCyber/Lecture4.html>
6. 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.

7. Редько В.Г., Цой Ю.Р. Оценка эффективности эволюционных алгоритмов // Доклады АН, 2005. Т. 404. № 3. С. 312-315.
8. Эйген М. Самоорганизация материи и эволюция биологических макромолекул. М.: Мир, 1973. 216 с.
9. Эйген М., Шустер П. Гиперцикл. Принципы самоорганизации макромолекул. М.: Мир, 1982. 270 с.
10. Deb K., Agrawal S. Understanding interactions among genetic algorithm parameters // In Foundations of Genetic Algorithms 5. – San Francisco, CA: Morgan Kauffman, 1999. – P. 265-286.
11. De Jong K. An analysis of the behavior of a class of genetic adaptive systems. Doctoral dissertation, University of Michigan, Ann Arbor, 1975. (University Microfilms No. 76-9381).
12. Fogel D.B. Evolutionary programming: an introduction and some current directions // Statistics and Computing, 1994, vol. 4, pp. 113-130.
13. Goldberg D.E. Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning. – Addison-Wesley, 1989.
14. Goldberg D.E., Deb K., Clark J.H. Genetic algorithms, noise and the sizing of populations // Complex Systems, 1992, vol. 6, pp. 333-362.
15. 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).
16. Jansen T., Wegener I. On the analysis of evolutionary algorithms – A proof that crossover can really help. Technical Report CI-51/98, University of Dortmund, Dortmund, Germany, 1998.
17. Kirkpatrick S., Sherrington D. Infinite range model of spin-glass // Physical Review B. 1978. V. 17. N. 11. P.4384-4403.
18. Koza J.R. Genetic Programming: On the Programming of Computers by Means of Natural Selection, – Boston, MA: The MIT Press, 1992.
19. Muhlenbein H. (1992). How genetic algorithms really work I: Mutation and hill-climbing // In Parallel Problem Solving from Nature 2. – Amsterdam: Elsevier Science Publishing, 1992. – P. 15-25,
20. Red'ko V.G., Tsoy Yu.R. Estimation of the evolution speed for the quasispecies model: arbitrary alphabet case // L. Rutkowski, R. Tadeusiewicz, L. Zadeh, J. Zurada (Eds.) Artificial Intelligence and Soft Computing – ICAISC 2006. 8<sup>th</sup> International Conference, Zakopane, Poland, June 2006, Proceedings, Springer. P. 460-469.
21. Schwefel H.-P. Evolution and Optimum Seeking. – New York: Wiley Inc., 1995.

22. Sherrington D., Kirkpatrick S. Solvable model of spin-glass // Physical Review Letters. 1975. V. 35. N. 26. P. 1792-1796.
23. Tanaka F., Edwards S. F. Analytic theory of the ground state of a spin glass: 1. Ising spin glass // Journ. Phys. F. 1980. V. 10. N. 12. P. 2769-2778.
24. Young A.P., Kirkpatrick S. Low-temperature behavior of the infinite-range Ising spin-glass: Exact statistical mechanics for small samples // Physical Review B. 1982. V.25. N.1. PP.440-451.