

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОСТЕЙШЕЙ ВЕРСИИ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА

*Редько Владимир Георгиевич, д.ф.-м.н.
Институт оптико-нейронных технологий РАН
Телефон: (095) 1356331; Факс: (095) 1351351;
E-mail: redko@iont.ru*

*Цой Юрий Робертович
Томский политехнический университет
Телефон: (3822) 418912; Факс: (3822) 419149;
E-mail: gai@mail.ru*

Несмотря на активные исследования эволюционных алгоритмов [1-3], до сих пор не был получен ответ на вопрос: насколько эффективна эволюция, как процесс оптимизации? Не было сделано четкой количественной оценки: сколько вариантов эволюционирующих «особей» необходимо проанализировать, чтобы найти «оптимальную особь» при заданной размерности задачи N ? Эти вопросы интересны и с естественнонаучной точки зрения: важно понимать, насколько быстро могут быть найдены «оптимальные» геномы биологических организмов эволюционным путем. В настоящей работе мы попытаемся ответить на эти вопросы, сделав аналитическую оценку эффективности простых эволюционных алгоритмов и проверив эту оценку путем компьютерного моделирования. Рассматриваемая схема эволюции соответствует модели квазивидов, предложенной в 1970-х годах лауреатом Нобелевской премии М. Эйгеном [4,5] и простейшей схеме генетического алгоритма (без скрещивания) [1].

МОДЕЛЬ КВАЗИВИДОВ

В модели квазивидов [4,5] рассматривается дарвиновская эволюция популяции информационных последовательностей $\{S_k\}$, символы которых S_{ki} принимают небольшое число дискретных значений, $i = 1, 2, \dots, N$; $k = 1, 2, \dots, n$; N – длина последовательностей; n – численность популяции. Эволюция включает отбор «особей» S в соответствии с их приспособленностями $f(S)$ и мутации – равновероятные замены символов. Эволюция популяции приводит к отбору *квазивида* – такого

распределения последовательностей, в которое входит как "наилучшая особь", так и близкие к ней, отличающиеся от этой наилучшей мутационными заменами.

В настоящей работе предполагаем, что N и n в процессе отдельного эволюционного процесса не меняются и велики: $N, n \gg 1$. Символы S_{ki} последовательностей принимают два значения: $S_{ki} = +1$ либо -1 . Также считаем, что $f(\mathbf{S})$ – унимодальная функция, а именно, что имеется оптимальная последовательность \mathbf{S}_m , имеющая максимальную приспособленность, а приспособленность произвольной особи \mathbf{S} экспоненциально уменьшается с ростом расстояния по Хеммингу $\rho(\mathbf{S}, \mathbf{S}_m)$ между \mathbf{S} и \mathbf{S}_m (числа несовпадающих символов в соответствующих позициях этих последовательностей):

$$f(\mathbf{S}) = \exp[-\beta\rho(\mathbf{S}, \mathbf{S}_m)], \quad (1)$$

где β – параметр интенсивности отбора.

Схема эволюции в модели квазивидов представлена в Таблице 1.

Таблица 1. Схема эволюции в модели квазивидов

Шаг 0. <i>Формирование начальной популяции</i> $\{\mathbf{S}_k(0)\}$. Для каждого $k = 1, \dots, n$ и каждого $i = 1, \dots, N$ выбираем случайно символ S_{ki} , полагая его равным $+1$ либо -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 каждого $k = 1, \dots, n$ и каждого $i = 1, \dots, N$ 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.

Отметим, что подшаг 1.2 соответствует схеме пропорционально-вероятностного отбора в генетическом алгоритме (подробнее см. [3]).

КАЧЕСТВЕННАЯ КАРТИНА ЭВОЛЮЦИИ

В [6,7] и в настоящей работе был проведен цикл компьютерных расчетов в рамках рассматриваемой модели. Результаты расчетов демонстрируют, что при достаточно естественно выбранных параметрах ($N, n \gg 1, \beta \geq PN, PN \leq 1$) эволюцию можно охарактеризовать следующим образом (подробнее см. [3], глава 2):

- начальное распределение по ρ в популяции близко к нормальному распределению со средним $\langle \rho \rangle = N/2$ и дисперсией $N/4$ [6];
- 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 $\langle \rho \rangle = PN/\beta$ [6].

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ЭВОЛЮЦИИ

Оценим эффективность рассматриваемого эволюционного алгоритма, 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" [8], составляющее величину порядка n , T – характерное время сходимости всего эволюционного процесса. Первое неравенство в (2) означает, что мы считаем не слишком сильным влияние нейтрального отбора, который приводит к случайной фиксации особей (независящей от приспособленностей особей) в популяции конечной численности. О роли нейтрального отбора см. также [3]. Второе неравенство

соответствует пренебрежению мутационными потерями уже найденных «хороших особей» в популяции.

Получим оценку характерного времени T сходимости эволюционного процесса. 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 ρ , должно произойти достаточное количество мутаций, а затем должна произойти фиксация этих новых особей в результате отбора. Оценим характерное время t_{\perp} , за которое $\langle \rho \rangle$ уменьшается на 1. Оно составляет: $t_{\perp} \sim t_m + t_{от}$, 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 $\rho = \langle \rho \rangle$. Полагая $T \sim t_{\perp} N$, имеем:

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

Общее число особей, участвующих в эволюции, составляет $n_{общ} = nT$. Оценим величину $n_{общ}$ для заданного N при некоторых «оптимально» выбранных остальных параметрах β , P , n . Интенсивность отбора считаем достаточно большой: $\beta \geq PN$, 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:

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

РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Мы провели широкий цикл компьютерных экспериментов и исследовали зависимость характера эволюции от размера «генома» N , численности популяции n , интенсивности отбора β и мутаций P . Для соотношений между параметрами: $n = N$, $P = N^{-1}$, $\beta = 1$, которые соответствуют условиям получения аналитических оценок (4), мы сделали численные оценки характерного времени сходимости эволюционных процессов. Оценки делались тремя способами: 1) оценивалось характерное время релаксации T_R в зависимостях $\langle \rho \rangle(t)$ по начальному наклону этих кривых; 2) оценивалось время выхода T_S на стационарное значение $\langle \rho \rangle$, которое получается при больших t ; 3) определялись значения времени T_O первого появления оптимальной последовательности \mathbf{S}_m в популяции. Полученные в результате зависимости $T_R(N)$, $T_S(N)$ и $T_O(N)$ представлены 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).

ОБСУЖДЕНИЕ

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

Последовательный поиск организуем следующим образом. Исходим из произвольной последовательности \mathbf{S} , символы которой равны $S_i = 1$ 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: $n_{\text{общ}} = N$.

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

Полученные оценки приведены в таблице 2.

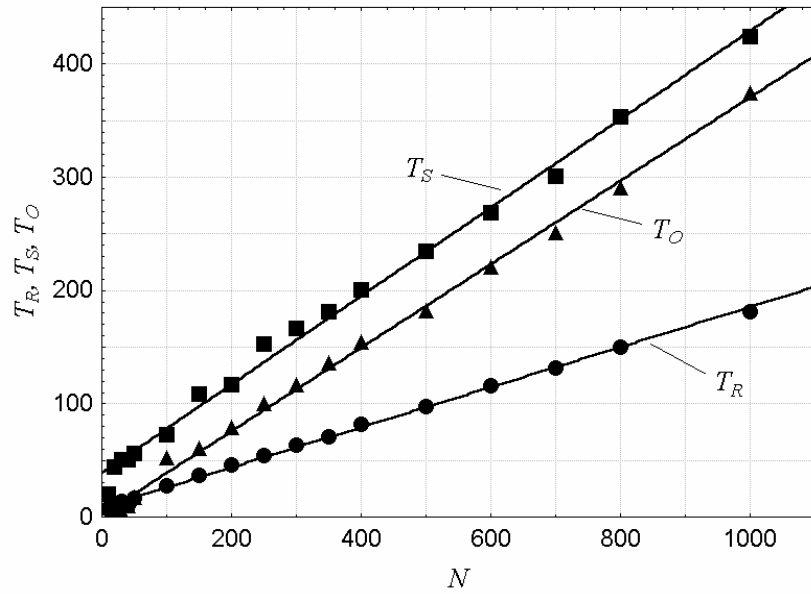


Рис. 1. Зависимости времени релаксации T_R , времени выхода на стационар T_S и времени нахождения оптимального решения T_O от длины последовательностей N . Кружками, треугольниками и квадратами показаны расчетные значения. Данные усреднены по 50 расчетам. Подробности в тексте.

Таблица 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	$\sim 2^N$	$\sim 10^{300}$

Отметим, что хотя здесь оценки получены для случая унимодальной функции приспособленности (1), аналогичные оценки могут быть сделаны и для спин-стекольной модели эволюции, когда число локальных максимумов приспособленности экспоненциально растет с размерностью задачи N [3,7].

Итак, получены и проверены путем численных расчетов количественные оценки эффективности эволюционных алгоритмов в максимально простой постановке. Полученные 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 для рассматриваемого случая), 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.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 04-01-00179) и РАН (Программа "Интеллектуальные компьютерные системы", проект 2-45).

Список литературы

1. Holland J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems* – Boston, MA: MIT Press, 1992, 211 pp.
2. Koza J.R. *Genetic Programming: On the Programming of Computers by Means of Natural Selection*. – Cambridge, MA: MIT Press, 1992, 840 pp.
3. Редько В.Г. *Эволюционная кибернетика*. – М.: Наука, 2001, 156 с.
4. Эйген М. *Самоорганизация материи и эволюция биологических макромолекул*. – М.: Мир, 1973, 216 с.
5. Эйген М., Шустер П. *Гиперцикл. Принципы самоорганизации макромолекул*. – М.: Мир, 1982, 270 с.
6. Редько В.Г. Оценка скорости эволюции в моделях Эйгена и Куна // *Биофизика*. 1986. Т. 31. N.3. С. 511-516.
7. Редько В.Г. Спиновые стекла и эволюция // *Биофизика*. 1990. Т.35. Вып.5. С.831-834.
8. Кимура М. *Молекулярная эволюция: теория нейтральности*. – М.: Мир, 1985, 400 с.