

УДК 519.816

Снитюк В.Е.

*Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, г. Киев, Украина,
snytyuk@gmail.com*

АСПЕКТЫ ЭВОЛЮЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ЗАДАЧАХ ОПТИМИЗАЦИИ

Границы познания процессов современного мира являются размытыми и все стремительнее расширяются. Возникновение новых предметных областей, новых проблем становится еще одним подтверждением принципа «новых задач» академика В.М. Глушкова. В статье выполнен анализ методов решения таких задач, базирующихся на принципах дарвиновской эволюции. Показаны их преимущества и недостатки при решении задач оптимизации в сравнении с классическими методами. Рассмотрены аспекты научных исследований эволюционных методов в известных мировых школах. Обсуждаются проблемы сходимости и границ применимости.

Введение

Выполняя анализ научной активности в мире, невозможно не заметить лавинообразный рост публикаций и конференций в области, названной Л. Заде “мягкими вычислениями (soft computing)”. Благодаря глобальной сети Internet, сегодня появилась возможность изучать работы сотрудников ведущих научных центров. Во многих из них существует практика электронных публикаций своих работ на сайтах организаций, кроме того, защиту диссертации в обязательном порядке предваряет ее размещение в Internet с уведомлением заинтересованных лиц через специализированные дайджесты.

Искусственные нейронные сети, эволюционное моделирование, теория нечетких множеств являются разделами soft computing, каждый из них имеет приоритетное использование для решения задач определенной предметной области. Так, нейронные сети целесообразно использовать при решении задач идентификации и кластеризации, эволюционное моделирование – задач оптимизации и машинного обучения, нечеткие множества – для исчисления субъективных суждений. Последние годы отмечены отсутствием новых фундаментальных открытий и разработок, какими являются вышеуказанные, в связи с чем, научная деятельность была сосредоточена на усовершенствовании известных методик, а также взаимопроникновением методов одной теории в методы другой. Примерами является использование нечеткой логики при проектировании нейронных сетей и их оптимизация с помощью эволюционных алгоритмов.

Проблемы решения задач классическими методами и перспективы использования эволюционного моделирования

Существует несколько вариантов классификации классических методов, используемых при принятии решений. Значительную их часть составляют методы оптимизации, которые используются при решении задач линейного, нелинейного, целочисленного, выпуклого, динамического стохастического, геометрического программирования и др., а есть еще теория игр и т.п. До сегодняшнего дня не разработаны методы, которые были бы инвариантными к размерности и содержанию

области данных, структуре и параметрам целевой функции. Двигаясь в этом направлении, независимо разными учеными были предложены парадигмы, базирующиеся на идеях и принципах природной эволюции по Ч. Дарвину. К ним относят методы эволюционного моделирования, называемые еще эволюционными алгоритмами (ЭА):

- Эволюционное программирование (ЭП);
- Эволюционные стратегии (ЭС);
- Генетические алгоритмы (ГА);
- Генетическое программирование (ГП).

Особенности каждого из указанных ЭА: ГА предназначен для оптимизации функций дискретных переменных, в нем акцентируется внимание на рекомбинациях геномов; ЭП ориентировано на оптимизацию непрерывных функций без использования рекомбинаций; ЭС ориентированы на оптимизацию непрерывных функций с использованием рекомбинаций; ГП использует эволюционный метод для оптимизации компьютерных программ. Предметные области в таком изложении предложены проф. В.Г. Редько. Однако сегодняшние реалии указывают на то, что каждый из ЭА применяется для решения и других задач. Кроме того, появились другие методы, которые также можно отнести к ЭА. Это муравьиные и меметические алгоритмы, программирование генетических выражений.

Поскольку каждый ЭА является итерационным методом, то необходимо применять вычислительную технику. Неизбежно возникают вопросы сходимости каждого из ЭА, скорости сходимости (для ЭА по-прежнему актуально), проведения препроцессинга данных. Эффективный выбор и использование ЭА зависят от правильного соотнесения формализованной задачи, сущности метода ее решения и ожидаемых результатов. Для двух, наиболее часто применяемых методов – ГА и ЭС, рассмотрим эти задачи в дальнейшем изложении.

Исторический ракурс эволюционного моделирования

В далекие 60-е годы Инго Рехенберг (I. Rechenberg [1]) воодушевленный методом “органической эволюции” выдвинул идею решения оптимизационных проблем в аэродинамике, применяя мутации к вектору вещественнозначных параметров. Эта процедура стала известна под названием эволюционной стратегии (Evolution Strategies). В 1981 году Швэфель (H. Schwefel [2]) при исследовании гидродинамических задач ввел рекомбинации в ЭС, выполнил сравнительный анализ с классическими методами оптимизации. Примерно в то же время в США независимо выполнялись исследования Лоуренсом Фогелем (Lawrence Fogel [3], в переводе на русский - [4]) эволюции искусственного интеллектуального автомата с конечным числом состояний, используя метод, названный эволюционным программированием (Evolutionary Programming). Джон Холланд (John Holland [5]) анализировал класс репродуктивных систем методом, который нам известен как генетический алгоритм (Genetic Algorithms). Такая классификация эволюционных алгоритмов была бы не полной без работ Lynn Cramer (1985) [6], Jas Hicklin (1986) [7], Gory Fujiki (1987) [8], результаты которых обобщил и расширил Джон Коца (John Koza [9, 10]). Предложенный метод назвали генетическим программированием (Genetic Programming).

ЭА отличаются один от другого. Но все они базируются на принципах эволюции:

1. Особи имеют конечное время жизни; размножение необходимо для продолжения рода.
2. В некоторой степени потомки отличаются от родителей.
3. Особи существуют в среде, в которой выживание является борьбой за существование, и их изменения способствуют лучшей адаптации к условиям внешней среды.
4. Посредством природной селекции лучше адаптированные особи имеют тенденцию к более долгой жизни и производству большего количества потомков.
5. Потомкам свойственно наследовать полезные характеристики своих родителей, что влечет увеличение приспособленности особей во времени.

Генетические алгоритмы

Из биологии известно [11], что генетический код организма называется его генотипом, а его физическая реализация – фенотипом. Эти и другие определения являются базовыми в терминологии ГА, что не означает точного наследования биологических процессов, а, лишь в некотором приближении, ГА можно считать моделью биологических процессов. В биологической хромосоме информация закодирована в цепочке ДНК, состоящей из длинной последовательности четырех составляющих: аденина, цитозина, гуанина и тимина. Исходный генетический код организма записывают, используя четыре буквы (A, C, G, T) алфавита. В ГА хромосома представлена строкой, записанной в двухэлементном алфавите, состоящем из нуля и единицы.

К базовым операторам ГА относят кроссовер (рекомбинации, кроссинговер), мутации и инверсии. С их помощью осуществляется преимущественное размножение лучше адаптированных к внешней среде индивидов, а также производство индивидов с характеристиками, которые отсутствовали у индивидов предыдущих поколений. В оптимизационных задачах, таким образом, реализуется приближение к оптимальному решению и выбивание целевой функции из локальных экстремумов.

Классический ГА реализуется таким образом:

Шаг 1. $t = 0$.

Шаг 2. Инициализировать популяцию P_t случайно выбранными индивидами из $\{0,1\}^l$.

Шаг 3. Вычислить значения функции приспособленности (fitness-function в дальнейшем изложении) всех индивидов из P_t .

Шаг 4. Пока условие останова не верно выполнить:

Шаг 4.1. Выбрать индивидов для репродукции из P_t , исходя из значений их fitness-function.

Шаг 4.2. Применить генетические операторы для репродукционного пула для производства потомков.

Шаг 4.3. Вычислить fitness-function потомков.

Шаг 4.4. Заменить индивидов из P_t потомками и создать P_{t+1} .

Шаг 4.5. $t = t + 1$.

Шаг 5. Конец.

Как и для других ЭА, для ГА остро стоит вопрос сходимости. При выполнении специальных условий сходимость имеет место.

Теорема [12]. Пусть выполняются следующие условия:

1. Последовательность популяций P_0, P_1, \dots , генерируемая алгоритмом - монотонна, то есть:

$$\forall i \in \mathbb{N} : \min\{f(a) | a \in P_{t+1}\} \leq \min\{f(a) | a \in P_t\}.$$

2. $\forall a, a'$ элемент a' достижим из a посредством мутации и кроссинговера, т. е. через последовательность переходов в ряде структур.

Тогда глобальный оптимум a^* функции f отыскивается с вероятностью 1:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p\{a^* \in P_t\} = 1.$$

Очевидно, что в реальных ГА второе условие теоремы выполняется всегда. Монотонность минимального значения fitness-function – достаточно строгое условие, поскольку в существующих ГА реализуются многочисленные операторы выбора родителей и формирования новой популяции [13]. Теоретическое обоснование монотонности для различных комбинаций генетических операторов представляет собой современную актуальную научную задачу.

Эволюционные стратегии

В то время как ГА моделирует эволюцию на уровне геномов, ЭС и другие ЭА направлены на эволюцию фенотипов. Поскольку ЭС развивались специально для числовой оптимизации, в них фенотипы представлены вещественнозначными векторами.

Оригинальная (в первоначальном варианте) ЭС являлась двухэлементной схемой, составленной из родителя и потомка. [1]. В базовом алгоритме родитель, мутируя, создает потомка и одна из двух особей с лучшим значением fitness-function переходит в популяцию следующего поколения. Этот алгоритм был обобщен позже на двухэлементную схему - так называемые $(\mu + \lambda)$ и (μ, λ) ЭС. Параметры μ и λ обозначают число родителей и потомков, соответственно. В форме $(\mu + \lambda)$ родители и потомки участвуют в общем селекционном пуле, μ лучших особей переходят в следующую популяцию. В ЭС (μ, λ) в следующую популяцию переходят μ особей из множества потомков. Как следствие, родители не переходят из популяции в популяцию.

Коэффициент $\eta = \frac{\lambda}{\mu}$ обычно равен больше или равен семи. Чем он больше, тем больше шансов, что каждый родитель произведет, по меньшей мере, одного потомка, лучшего, чем он сам. Однако различия между $(\mu + \lambda)$ и (μ, λ) ЭС становятся меньше, если η достаточно большое.

Каноническая ЭС представлена таким алгоритмом:

Шаг 1. $t = 0$.

Шаг 2. Инициализировать популяцию P_t μ случайными индивидами из R^n .

Шаг 3. Пока условие останова алгоритма не верно выполнить

Шаг 3.1. Получить особей из P_t с равными вероятностями для производства λ потомков.

Шаг 3.2. Выполнить мутации над потомками.

Шаг 3.3. Вычислить fitness-function потомков.

Шаг 3.4. Выбрать лучшие μ потомков, базируясь на значениях fitness-function и создать P_{t+1} .

Шаг 3.5. $t = t + 1$.

Шаг 4. Конец.

Сравнительный анализ ЭС и ГА показывает, что главное отличие заключается в том, что в то время как в ГА выбираются особи для рекомбинации пропорционально их fitness-function и заменяются особи из предыдущей популяции, в ЭС действуют наоборот. В этом случае особи для репродукции выбираются с равными вероятностями, а формирование следующей популяции базируется на значениях fitness-function. В действительности и ЭС, и ГА являются “двумя сторонами одной и той же монеты”, и, как показывают эксперименты, их результаты эквивалентны [11].

Мутация, которая часто является единственным эволюционным оператором, заключается в изменении каждого элемента вектора весов-связей на величину, имеющую нормальное распределение, дисперсия которого адаптируется во времени. В стратегии (1+1) так называемое правило “20% удачи” используется для адаптации дисперсии. Швифель [2] так сформулировал это правило: “Периодически во время поиска получают частоту успеха, т.е. отношение количества успехов ко всему числу попыток (мутаций). Если он больше $\frac{1}{5}$, то дисперсия возрастает, иначе - убывает”.

Правило “20% удачи” было развито Рехенбергом [14] в результате теоретических исследований (1+1) стратегии, применяемой к двум целевым функциям – моделям сферы и коридора. С помощью правила было показано, как получить высокую скорость сходимости для этих и других целевых функций.

Если используют многоэлементную стратегию для эволюции популяции из μ родителей и λ потомков, каждая особь состоит из 2-х вещественнозначных векторов. Первый вектор содержит переменные значения, а второй – соответствующие среднеквадратические отклонения (СКО), используемые для оператора мутации. Предпочтительнее правила “20% удачи” при осуществлении мутации в многоэлементных стратегиях является изменение СКО с использованием логнормального распределения:

$$\vec{\sigma}_{t+1} = \vec{\sigma}_t \cdot e^{\text{Gauss}(0, \sigma')},$$

где t - дискретность времени генерации. Коэффициент сходимости ЭС чувствителен к выбору σ' и начальным установкам вектора СКО. К сожалению, метода их получения независимо от целевой функции пока не существует. Швифель [2] рекомендует принимать

$$\sigma' = \frac{C}{\sqrt{|\vec{\sigma}|}},$$

где C зависит от μ и λ . Он рекомендует считать, что $C = 1.0$ для ЭС (10,100).

Для инициализации $\vec{\sigma}$ используется равенство

$$\sigma_k = \frac{R_k}{\sqrt{|\vec{\sigma}|}} \text{ для } k = 1, 2, \dots, |\vec{\sigma}|,$$

где константа R_k - максимальный ранг неопределенности соответствующей переменной.

Для $(\mu + \lambda)$ ЭС доказана сходимость по вероятности, для ЭС (μ, λ) вопрос сходимости остается открытым [11, 14].

Сравнительный анализ эволюционных алгоритмов

Одно из главных отличий между ГА и другими ЭА, используемых сегодня, есть то, что ГА моделирует эволюцию на уровне геномов, в других методах эволюционируют фенотипы. Как исходные данные и результаты, многие модификации ЭА используют различные представления для особей популяции эволюционирующих индивидов. Пока ГА используют, в общем случае, бинарные строки для представления особей, ЭС используют более общие вещественнозначные представления. В ГП [9, 10] используют представления в виде деревьев, ЭП изначально базировалось на графовых представлениях, а ныне используют представления фенотипов, адекватных проблеме, которая решается.

Другие особенности различных ЭА заключаются в использовании генетических операторов. В отличие от инверсии битов в ГА, в большинстве ЭС гены мутируют посредством сложения гауссовского шума. ЭП применяется для автоматов с конечным числом состояний, мутируют особи при сложении и удалении состояний, изменении переходов из состояния в состояние и т.п. В дополнение, ГА и ГП во главу угла ставят оператор кроссовера, ЭС и ЭП – мутации.

Наконец, существуют различия в базовых процессах ЭА. В ГА и ГП выбираются особи для репродукции пропорционально значению fitness-function и заменяются элементы предыдущей популяции одинаково (равновероятно). ЭА и ЭП предполагают противоположную стратегию, которая заключается в том, что с равными вероятностями выбираются особи для репродукции и выживание базируется на значении fitness-function. Как раньше замечено, вариации порядка указанных операций имеют малое влияние на процесс эволюции.

Ключевой точкой является то, что все ЭА базируются на фундаментальных Дарвиновских принципах природной селекции. Преимущества одного ЭА над другим являются предметом дискуссии.

Мировые научные школы эволюционного моделирования

Известной мировой школой, представляющей новое направление в эволюционном моделировании, является школа Dr. Candida Ferreira в Великобритании (www.gene-expression-programming.com). Основное направление исследований сосредоточено в программировании генетических выражений. Новые алгоритмы, разрабатываемые представителями школы, используют специфичные операторы комбинаторного поиска, включающими в себя инверсию, вставку и удаление генов и их последовательностей, ограничение и обобщение перестановок, которые увеличивают их эффективность. Сами авторы определяют программирование генетических выражений (GEP) как мультигенное генотип/фенотип кодирование деревьев выражений, связанных частным взаимодействием. Известно, что в простейшем случае при единичной длине хромосомы, GEP эквивалентно ГА.

Наиболее известной школой, в которой исследуют генетические алгоритмы, эволюционные стратегии, генетическое программирование и эволюционное программирование является лаборатория эволюционных вычислений Департамента компьютерных наук в университете Джорджа Мейсона В США (<http://www>).

cs.gmu.edu). руководство школой осуществляет ученик Джона Холланда Dr. K. De Jong. Лаборатория работает над проектами и приложениями моделей эволюции (в дарвиновском смысле) [16, 17]. Такие модели необходимы для лучшего понимания эволюционных систем, они используются для обеспечения робастности, гибкости и адаптивности вычислительных систем. Главное внимание специалисты лаборатории уделяют решению сложных научных и технических проблем, таких как инновационное проектирование, оптимизация и машинное обучение.

В аналогичном направлении, но с акцентом на ГА, работает научная школа Dr. David E. Goldberg (<http://www.illgal.ge.uiuc.edu>). Лаборатория генетических алгоритмов находится в Иллинойском университете США.

Заключение

В отличие от классических методов оптимизации, парадигма заключенная в эволюционном моделировании, позволяет с новой стороны посмотреть на оптимизационные задачи и процессы принятия решений, но не дает ответов на многочисленные вопросы. Какие необходимые и достаточные условия сходимости каждого из методов? Насколько инвариантными являются ЭА по отношению к виду fitness-function и структуре, и виду начальных данных? Какие ЭА более эффективно использовать для решения известных задач оптимизации?

Ответы на эти вопросы являются необходимыми для построения теории эволюционного моделирования. Современные исследования, к сожалению, ориентированы на решение конкретных задач и содержат исключительно экспериментальные подтверждения эффективного использования того или иного ЭА.

Литература

1. Rechenberg, I. Cybernetic solution path of an experimental problem. Library Translation 1122, August 1965. Farnborough Hants: Royal Aircraft Establishment. English translation of lecture given at the Annual Conference of the WGLR at Berlin in September. – 1964.
2. Schwefel, H.P. Numerical Optimization of Computer Models. John Wiley&Sons. – 1981.
3. Fogel, L.J., Owens, A.J., Walsh, M.J. Artificial Intelligence Through Simulated Evolution. – John Wiley&Sons.
4. Фогель Л., Оуэнс А., Уолш М. Искусственный интеллект и эволюционное моделирование. – М.: Мир, 1969. – 230 с.
5. Holland, J. Adaptation in natural and artificial systems. – University of Michigan Press.
6. Cramer, N.L. A representation for the adaptive generation of simple sequential programs. In J.J. Grefenstette (Ed.). – Proceedings of an International Conference on Genetic Algorithms and Their Applications: Lawrence Erlbaum Associates. – 1985.- Pp. 105-118.
7. Hicklin, J.F. Application of the genetic algorithm to automatic program generation. Masters thesis. – University of Idaho: Department of Computer Science. – 1986.
8. Fujiki, C., Dickinson, J. Using the genetic algorithm to generate lisp source code to solve the prisoner's dilemma. In J.J. Grefenstette (Ed.), Proceedings of the Second International Conference on Genetic Algorithms. – Lawrence Erlbaum Associates. – 1987. – Pp. 236-240.

9. Koza, J.R. Hierarchical genetic algorithms operating on populations of computer programs. In N.S. Sridharan (Ed.), Eleventh International Joint Conference on Artificial Intelligence. – Morgan Kaufmann. – 1989. – Pp. 768-774.
10. Koza, J.R. Genetic Programming: On the Programming of Computers by means of Natural Selection. – Cambridge MA, MIT Press. - 1992.
11. Potter, M. A. The design and analysis of a computational model of cooperative coevolution. PhD Thesis. - George Mason University: Fairfax, Virginia. – 1997. – 153 p.
12. Harti, R.E. A global convergence proof for class of genetic algorithms. - Technische Universitat Wien. - 1990.
13. Исаев С.А. Разработка и исследование генетических алгоритмов для принятия решений на основе многокритериальных нелинейных моделей / Автореф. дисс. к.т.н. – Н. Новгород: НГУ, 2000. – 18с.
14. Rechenberg, I. Evolutionsstrategie – Optimierung technischer Systeme nach Prinzipien der biologischen Evolution. – Stuttgart-Bad Cannstatt: Frommann-Holzboog. – 1973.
15. Ferreira, C. Combinatorial Optimization by Gene Expression Programming: Inversion Revisited. In J.M. Santos and A. Zapico edc. – Proceedings of the Argentine Symposium an Artificial Intelligence. – Santa Fe, Argentina. – 2002. – Pp. 160-174.
16. De Jong, K.A. Analysis of behavior of a class of genetic adaptive systems. PhD Thesis. – University of Michigan: Ann Arbor, MI. – 1975. – 256 p.
17. Spears, W.M. The Role of Mutation and Recombination in Evolutionary Algorithms. PhD Thesis. – George Mason University: Fairfax, Virginia. – 1998. – 240 p.

The boundaries of processes knowledge of modern world are diffusion and all extend prompter. The origin of new data domains and new problems becomes one more confirmation of a principle “ the new tasks ” of Dr. V.M. Glushkov. In a paper the analysis of methods of a such tasks solution based principles Darwin’s evolution is carried out. Their advantages and shortages are shown at problem solving of optimization tasks in a comparison with classical methods. The aspects of scientific researches of evolutionary methods at known world schools are considered. The problems of convergence and boundaries of applicability are suggested.