

Конспект лекций по курсу «Эволюционные алгоритмы»

Еремеев А.В.

Abstract. This manuscript contains an outline of lectures on "Evolutionary Algorithms" course read by the author in Omsk State University n.a. F.M.Dostoevsky. The course covers Canonic Genetic Algorithm and various other genetic algorithms as well as evolutionary algorithms in general. Some facts, such as the Rotation Property of crossover, the Schemata Theorem, GA performance as a local search and "almost surely" convergence of evolutionary algorithms are given with complete proofs. The text is in Russian.

Введение

Эволюционные алгоритмы (ЭА), к которым можно отнести эволюционные стратегии, генетические алгоритмы, эволюционное программирование, берут свое начало в работах А.Г. Ивахненко [13], Л.А. Растиригина [20], Дж.Холланда [59], И.Реченберга [71], Л. Фогеля, А. Оуэнса, М. Уолша [24], и других авторов, вышедших в 60-70-х годах двадцатого века. Основная идея ЭА состоит в компьютерном моделировании процесса эволюции. При этом моделирование предназначено не для исследования биологических популяций, а для решения практических задач прикладной математики, в частности, задач оптимизации.

Области применения ЭА: Экономика, управление, инженерные задачи, переработка информации, космос, медицина и т.д. Область эволюционных вычислений возникла на стыке биологии и прикладной математики (искусственный интеллект, методы оптимизации, теория вероятностей). В настоящее время эволюционные алгоритмы зачастую относятся к методам искусственного интеллекта. С одной стороны, эти алгоритмы позволяют решать задачи машинного обучения, такие как задачи символьной регрессии, оптимизация структуры нейронной сети, выбор модели машинного обучения и др. С другой стороны, в процессе работы этих алгоритмов используются эвристики, традиционно применяемые человеком для принятия решений, такие как метод проб и ошибок (эволюционная стратегия (1+1) ES), жадная эвристика (декодирование решений), комбинация нескольких известных идей в одном изобретении (оператор рекомбинации), адаптация к среде (локальная оптимизация). Наконец, во многих системах искусственного интеллекта требуется решать задачи оптимизации большой размерности, которые не уда-

ется решить классическими методами математического программирования, однако эволюционные алгоритмы позволяют находить для них приемлемые решения.

Один из типичных представителей эволюционных алгоритмов в оптимизации – генетический алгоритм (ГА). При запуске ГА создается «виртуальная» популяция особей (как правило достаточно хранить только их генотипы), каждая из которых представляет элемент пространства решений оптимизационной задачи. Здесь и далее используются некоторые термины, заимствованные из биологии [21].

Приспособленность особей к условиям окружающей среды выражается некоторой монотонной функцией от значения целевой функции задачи. Чем лучше решение - тем выше приспособленность особей с соответствующим генотипом. Популяция развивается за счет отбора более пригодных особей и применения к ним случайных операторов, имитирующих мутацию генов и рекомбинацию родительских генотипов (кроссинговер).

Отбор может осуществляться по-разному. Особенно распространеными являются операторы пропорциональной селекции (вероятность выбора пропорциональна пригодности), срезающей селекции (задается равномерным распределением на множество из $T\%$ лучших генотипов популяции) и турнирной селекции (s особей извлекаются с помощью равномерного распределения, затем берется лучшая из них).

ГА представляет собой универсальную схему решения широкого круга задач задач. Достаточно определить представление решений в виде генотипа, выбрать операторы селекции и кроссинговера, и алгоритм можно применять. Более того, при достаточно общих предположениях можно доказать, что с вероятностью единица алгоритм находит оптимальное решение, если время его работы не ограничено.

В области эволюционных алгоритмов находит себе применение бионический подход, состоящий в заимствовании принципов организации систем из живой природы. В данном случае имеет место использование принципа постепенных адаптивных преобразований в пределах популяции или вида в ходе, так называемой, микроэволюции. Как показывают исследования акад. Ю.П. Алтухова и других авторов (см., [1], § 6.4), более «масштабная» межвидовая изменчивость (макроэволюция) требует скачкообразных перестроек генотипа и не может быть выведена непосредственно из постепенной внутривидовой изменчивости. Чрезвычайно малые вероятности реализации элементарных сценариев эволюционного развития¹ не позволяют использо-

¹ Для примера оценим вероятность возникновения нового белка с требуемой функцией в результате случайных мутаций. Пусть для адаптации некоторой бактерии к условиям окружающей среды требуется появление нового белка, выполняющего некоторую конкретную функцию. В небольших молекулах белка содержится около 150 аминокислот. Будем считать, что искомый белок именно такой длины. Одна аминокислота кодируется триплетом нуклеотидов, т.е. для ее кодировки необходимо 450 нуклеотидных позиций в молекуле ДНК. Было бы серьезным упрощением считать, что заданным требованиям удовлетворяет

вать аналогии с макроэволюцией и процессами видеообразования для обоснования работоспособности эволюционных алгоритмов. Вместо этого в теории эволюционных алгоритмов проводятся непосредственные исследования ЭА с использованием теории сложности и теории вероятностей (см. [78], § 1.3). В частности, такие результаты рассматриваются далее в п. 2.5 и гл. 3.

Генетические алгоритмы (ГА) наряду с алгоритмами имитации отжига, поиска с запретами и муравьиной колонии и др. относятся к классу *метаэвристик*. Вообще, эвристикой (от греч. εύρισκο - обнаруживаю) называют метод решения, основанный на неформальных, интуитивных соображениях, не гарантирующий получения наилучшего решения. Метаэвристика является эвристикой с универсальной схемой, применимой для поиска приближенных решений различных оптимизационных задач и представляющая собой итерационный процесс, в котором многократно используются подчиненные эвристики, учитывающие особенности задачи. В метаэвристике могут использоваться различные принципы исследования пространства решений и стратегии адаптации для учета полученной информации. На каждой итерации метаэвристики могут выполняться операции с единственным текущим решением (или частичным решением), либо с набором (популяцией) решений. Подчиненные эвристики могут быть процедурами высокого или низкого уровня, простым локальным поиском, градиентным методом построения решения или классическими оптимизационными процедурами.

только *одна* последовательность аминокислот (как, например, в [41]). Однако можно считать что примерно половина из нуклеотидных позиций (в нашем случае 225 шт.) имеют не больше двух «подходящих» нуклеотидов (ср., например, [36]), а значит вероятность случайного получения требуемого нуклеотида в такой позиции – не больше 0.5. Тогда вероятность получения подходящего белка целиком при однократном испытании (случайном выстраивании 450 нуклеотидов) оценивается сверху величиной $2^{-225} \approx 10^{-67}$.

Найдем грубую оценку для числа попыток построить подходящий белок за историю существования нашей планеты. Число бактерий на земле оценивается величиной $2 \cdot 10^{30}$, см. [52]. Число нуклеотидов в геноме одной бактерии - до 12.2 млн. [70]. За один год популяция одной из наиболее быстро размножающихся бактерий *e. coli* проходит около 2000 поколений. Возраст земли оценивается как $4 \cdot 10^9$ лет. Тогда число испытаний в истории развития всех бактерий не превышает величины порядка $2 \cdot 10^{30} \cdot \frac{12.2 \cdot 10^6}{450} \cdot 8 \cdot 10^{12} \approx 10^{47}$.

Отсюда получаем оценку сверху для вероятности хотя бы однократного получения подходящего белка за всю историю существования земли: 10^{-20} . И это только для одного эпизода эволюционного развития, где требуется возникновение одного нового белка.

1. Классический генетический алгоритм

Рассмотрим задачу безусловной оптимизации в общем виде:

$$\max\{f(x) : x \in X\}, \quad (1.1)$$

где X - пространство решений (мощности континуума, счетное или конечное).

Генетический алгоритм (ГА) представляет собой эвристический алгоритм оптимизации, в основу которого положены биологические принципы естественного отбора и изменчивости. Процесс работы алгоритма представляет собой последовательную смену поколений, состоящих из фиксированного числа особей-точек пространства решений, причем особи с бо́льшим значением целевой функции (более приспособленные) получают больше потомков в каждом следующем поколении. Кроме того, при формировании следующего поколения часть потомков полностью идентична родителям, а часть изменяется некоторым случайным образом в результате мутации и кроссинговера (скрещивания).

При использовании генетического алгоритма для поиска в дискретном пространстве X , каждой строке из l символов некоторого алфавита A должен быть сопоставлен элемент пространства X , т.е. определена функция $x : B \rightarrow X$, (называемая также *схемой представления*), где $B = A^l$. Строки $\xi \in B$ принято называть генотипами, а их образы $x(\xi) \in X$ – фенотипами.

В классическом генетическом алгоритме (КГА) используется двоичный алфавит $A = \{0, 1\}$. Вообще, по умолчанию будем предполагать, что алфавит A конечный.

Популяцией $\Pi = (\xi^1, \xi^2, \dots, \xi^\lambda)$ численности λ является вектор пространства B^λ , координаты которого называются генотипами особей (индивидуов) данной популяции. Как правило, нумерация особей популяции не имеет значения. Численность популяции λ фиксирована от начала работы алгоритма до конца. Предполагается, что λ – четное.

Целевая функция $f : X \rightarrow R$ исходной задачи заменяется в ГА на функцию приспособленности генотипа¹ $\Phi(\xi) = \phi(f(x(\xi)))$, где $\xi \in B$. Здесь $\phi : R \rightarrow R_{\geq 0}$ – некоторая монотонно возрастающая функция. В биологической интерпретации функция приспособленности отражает степень приспособленности индивида с генотипом ξ к условиям «окружающей среды», заданным функцией $\Phi(\xi)$. При этом максимумы целевой функции соответствуют наиболее приспособленным генотипам для данной «окружающей среды». Простейшим примером функции приспособленности является сама целевая функция при условии, что она неотрицательна.

¹ В англоязычной литературе используется термин *fitness function*.

Один из лучших найденных генотипов к поколению t будем обозначать через $\tilde{\xi}$:

$$\tilde{\xi} \in \arg \max \{\Phi(\xi^{i,\tau}), i = 1, \dots, \lambda, \tau = 0, \dots, t\}.$$

Приведем общую схему *генетического алгоритма с полной заменой популяции*. Этой схеме соответствует, в частности, КГА. Используемые здесь вероятностные операторы $\text{Sel} : B^\lambda \rightarrow \{1, \dots, \lambda\}$, $\text{Cross} : B \times B \rightarrow B \times B$ и $\text{Mut} : B \rightarrow B$ будут описаны ниже.

Генетический алгоритм с полной заменой популяции

0. Положить $t := 0$.
1. Для k от 1 до λ выполнять:
 - 1.1. Построить случайным образом генотип $\xi^{k,0}$.
 2. Для k от 1 до $\lambda/2$ выполнять шаги 2.1-2.3:
 - 2.1. Селекция: выбрать генотипы $\xi := \xi^{\text{Sel}(\Pi^t),t}$, $\eta := \xi^{\text{Sel}(\Pi^t),t}$.
 - 2.2. Скрещивание: построить $(\xi', \eta') := \text{Cross}(\xi, \eta)$.
 - 2.3. Мутация: положить $\xi^{2k-1,t+1} := \text{Mut}(\xi')$, $\xi^{2k,t+1} := \text{Mut}(\eta')$.
 3. Положить $t := t + 1$.
 4. Если выполнен критерий остановки, то идти на шаг 5, иначе – на шаг 2.
 5. Результатом работы КГА является лучшее из найденных решений $x(\tilde{\xi})$.

Поясним приведенную схему. На этапе инициализации (шаги 0 и 1) формируется начальная популяция Π^0 , элементы которой генерируются в соответствии с равномерным распределением на множестве генотипов B , т.е. $P\{\xi_k^{i,0} = 0\} = P\{\xi_k^{i,0} = 1\} = 1/2$, $i = 1, \dots, \lambda$, $k = 1, \dots, l$.

Вероятностный оператор селекции особей на пространстве популяций $\text{Sel}(\Pi)$ имеет то же значение, что и естественный отбор в природе. Действие этого оператора состоит в выборе номера родительской особи для построения очередного потомка. Генотип $\xi^{i,t}$ с номером i , $i = 1, \dots, \lambda$ из популяции Π^t оказывается родительской особью при формировании очередного генотипа $\xi^{k,t+1}$ популяции Π^{t+1} с вероятностью

$$P_s(i, \Pi^t) = \frac{\Phi(\xi^{i,t})}{\sum_{j=1}^{\lambda} \Phi(\xi^{j,t})}. \quad (1.2)$$

Если окажется, что $\sum_{j=1}^{\lambda} \Phi(\xi^{j,t}) = 0$, то есть все генотипы имеют нулевую приспособленность, условимся выбирать номер особи с равномерным распределением из $1, \dots, \lambda$.

В алгоритме не исключается выбор $\xi^{i,t}$ одновременно в качестве ξ и η на шаге 2.1. Описанный оператор Sel иногда также называют селекцией методом рулетки [22, 54]. Предположим, что колесо рулетки разбито на λ секторов, причем сектор i соответствует особи i и имеет радианную меру $2\pi P_s(i, \Pi^t)$.

Тогда селекцию особи $\xi^{i,t}$ можно представлять, как выбор i -го сектора на колесе рулетки.

Описанный оператор селекции также называется *пропорциональным* в связи с тем, что при фиксированном составе популяции вероятность выбора особи в качестве родителя пропорциональна ее приспособленности.

Упражнение 1.0.1. Показать, что при известных значениях приспособленности особей текущей популяции Π^t селекция всех родительских особей для построения новой популяции Π^{t+1} может быть выполнена в КГА за время $O(\lambda \log_2(\lambda))$.

1.1. Процедуры кроссинговера и мутации

Опишем двуместный оператор кроссинговера (скрещивания) $\text{Cross}(\xi, \eta)$ и одноместный оператор мутации $\text{Mut}(\xi)$, действие которых носит случайный характер.

Результат кроссинговера $(\xi', \eta') = \text{Cross}(\xi, \eta)$ с вероятностью P_c формируется в виде

$$\begin{aligned}\xi' &= (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_\chi, \eta_{\chi+1}, \dots, \eta_l), \\ \eta' &= (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_\chi, \xi_{\chi+1}, \dots, \xi_l),\end{aligned}$$

где случайная координата скрещивания χ выбрана с равномерным распределением от 1 до $l - 1$. С вероятностью $1 - P_c$ оба генотипа сохраняются без изменений, т.е. $\xi' = \xi$, $\eta' = \eta$. Влияние оператора кроссинговера регулируется параметром P_c . Данный оператор принято называть *одноточечным кроссинговером*.²

Оператор мутации в каждой позиции генотипа с заданной вероятностью P_m изменяет ее содержимое. В противном случае ген остается без изменений. Таким образом, мутация элементов генотипа происходит по схеме Бернулли с вероятностью успеха P_m .

Изменение вероятностей мутации и кроссинговера позволяет регулировать работу КГА и настраивать его на конкретные задачи. Увеличение вероятности мутации до 0.5 превращает КГА в простой случайный перебор, имеющий весьма ограниченное применение (см. [20], § 6.1). Уменьшение же P_m до нуля приводит к малому разнообразию генотипов в популяции и может вызвать «зацикливание» КГА, когда на каждой итерации генерируются лишь ранее встречавшиеся генотипы. Величины P_c и λ также могут существенно влиять на скорость сходимости популяции к решениям приемлемого качества (см., например, [9, 22]). Настраиваемые параметры КГА выбирают, как правило, в следующих диапазонах: $0 \leq P_c \leq 1$, $10^{-3} \leq P_m \leq 0.3$, $30 \leq \lambda \leq 10000$.

В отличие от большинства представителей животного мира, особи генетических алгоритмов имеют не двойной хромосомный набор (диплоидный), а

²В англоязычной литературе используется термин *one-point crossover*.

одинарный (гаплоидный), т.к. хранение дублирующих друг друга генотипов, полученных потомком от обеих родительских особей при решении оптимизационных задач не целесообразно. Особи ГА сходны с такими организмами, как мхи-гаметофиты или некоторые виды водорослей, которые имеют одинарный набор хромосом в течение длительного этапа жизни.

1.2. Примеры использования классического генетического алгоритма

Рассмотрим задачу оптимизации с ограничениями:

$$\max\{F(x) : x \in D \subseteq X\}, \quad (1.3)$$

где D – область допустимых решений.

1.2.1. Максимизация функции $f : \{a, a+1, \dots, b\} \rightarrow \mathbf{N}$.

Здесь $X = \mathbf{Z}$, т.е. множество целых чисел, $D = \{a, a+1, \dots, b\}$. Воспользуемся бинарной кодировкой решений: $l = \lceil \log_2(b-a) \rceil$,

$$x(\xi) = a + \sum_{j=0}^{l-1} \xi_{l-j} 2^j. \quad (1.4)$$

При $x(\xi) \in \{a, a+1, \dots, b\}$ полагаем $\Phi(\xi) = f(x(\xi))$, иначе: $\Phi(\xi) = 0$.

1.2.2. Задача о разрезе максимального веса.

Дан граф $G = (V, E)$, $V = \{v_1, \dots, v_n\}$, каждому ребру приписан вес $w : E \rightarrow \mathbb{R}^+$, где \mathbb{R}^+ – множество положительных вещественных чисел. Найти разрез $\{U, U'\} : U \subseteq V, U' = V \setminus U$, максимального веса

$$W(\{U, U'\}) = \sum_{e=(u,v) \in E: u \in U, v \in U'} w(e).$$

Задача NP -трудна [8].

Здесь $D = X = \{\{U, U'\} : U \subseteq V, U' = V \setminus U\}$, $x = \{U, U'\}$, $f(x) = W(x)$. Кодировка определяется так: $U(\xi) = \{v_j \in V : \xi_j = 1, j = 1, \dots, n\}$, $l = n$, $x(\xi) = \{U(\xi), V \setminus U(\xi)\}$, $\Phi(\xi) = f(x(\xi))$.

Очевидно, операторы Mut и Cross сохраняют допустимость решений, поэтому они могут быть использованы непосредственно без каких-либо усовершенствований.

Есть, однако, проблема, связанная с вырожденностью кодировки (иногда называют «конкуренцией конвенций»), т.к. один и тот же разрез $\{U, U'\}$

может быть представлен двумя способами (либо 1 кодирует вершину, лежащую в U , либо в U'). Такая неоднозначность может привести к снижению эффективности работы ГА и бессмыслицы скрещивания особей, закодированных в разных «конвенциях».

Упражнение 1.2.1. Предложите взаимно-однозначное представление решений задачи о максимальном разрезе в графе при $l = n - 1$.

1.2.3. Применение КГА в непрерывной оптимизации и геометрический смысл кроссинговера

Рассмотрим случай, когда D – евклидово пространство размерности n . Можно было бы в данном случае предположить, что алфавит $A = \mathbb{R}$ – множество вещественных чисел, например, как в [63] и строить ГА в таком предположении. Однако мы будем работать в рамках сделанного выше предположения о том, что $A = \{0, 1\}$.

Если $D \subset X = \mathbb{R}^n$ ограничено, его можно дискретизовать, например, путем введения достаточно мелкой регулярной сетки. При этом задача сводится к поиску оптимума на дискретной решетке в некотором n -мерном параллелепипеде $\Omega \subset X$. Пусть область D погружена в n -мерный параллелепипед Ω :

$$D \subseteq \Omega = \{x \in \mathbb{R}^n : a_1 \leq x_1 \leq b_1, \dots, a_n \leq x_n \leq b_n\}.$$

Обозначим $d_i = b_i - a_i$, $i = 1, \dots, n$. Одним из наиболее «естественных» способов кодировки представляется стандартная двоичная кодировка координат векторов в строке генотипа.

Пример: $(001 \ 010 \ 011 \ 100) \xrightarrow{x(\xi)} (1, 2, 3, 4)$.

В общем виде:

$$x(\xi)_i = a_i + \frac{d_i}{2^k - 1} \sum_{j=0}^{k-1} \xi_{ki-j} 2^j, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.5)$$

Здесь предполагается, что на кодирование каждой координаты используется k бит, и подстрока $g^i = (\xi_{k(i-1)+1}, \dots, \xi_{ki})$ кодирует i -ю координату, $l = kn$.

Утверждение 1.2.1. (О геометрическом смысле кроссинговера (Р.Т. Файзуллин [51]))

Пусть i_2, i_3, \dots, i_n – номера генов, с которых начинается кодировка $2, 3, \dots, n$ -й координат вектора фенотипа из \mathbb{R}^n . Тогда если найдется такой r , что $\chi + 1 = i_{r+1}$, $1 \leq r < n$, то результат скрещивания $(\xi', \eta') = \text{Cross}(\xi, \eta)$ может быть получен некоторым вращением $R_{\chi, \xi, \eta}$ родительских фенотипов $x(\xi), x(\eta) \in \mathbb{R}^n$, оставляющим неподвижной точку $x^0 = \frac{x(\xi) + x(\eta)}{2}$. Т.е.

$x(\xi') = R_{\chi,\xi,\eta}(x(\xi))$, $x(\eta') = R_{\chi,\xi,\eta}(x(\eta))$. При этом середина отрезка, соединяющего родительские фенотипы, $x^0 = \frac{x(\xi)+x(\eta)}{2}$ остается неподвижной, т.е. $R_{\chi,\xi,\eta}(x^0) = x^0$.

Доказательство. Будем искать оператор $R_{\chi,\xi,\eta}(x)$ в виде следующего аффинного преобразования:

$$R_{\chi,\xi,\eta}(x) = A(x - x^0) + x^0. \quad (1.6)$$

Случай 1. При $n - r$ четном предположим, что A - диагональная матрица с r единицами в начале диагонали, далее заполненная четным числом элементов, равных -1 . С помощью непосредственной проверки легко убедиться, что отображение $A(x - x^0) + x^0$ с матрицей указанного вида дает тот же результат, что и действие оператора кроссинговера на фенотипы особей. Действительно, для всех координат $j \leq r$ имеем

$$(A(x(\xi) - x^0) + x^0)_j = \frac{x(\xi)_j - x(\eta)_j}{2} + \frac{x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} = x(\xi)_j,$$

$$(A(x(\eta) - x^0) + x^0)_j = \frac{-x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} + \frac{x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} = x(\eta)_j,$$

а для всех j , таких что $r < j \leq n$, имеем

$$(A(x(\xi) - x^0) + x^0)_j = -\frac{x(\xi)_j - x(\eta)_j}{2} + \frac{x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} = x(\eta)_j,$$

$$(A(x(\eta) - x^0) + x^0)_j = -\frac{-x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} + \frac{x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} = x(\xi)_j.$$

То есть, представление (1.6) корректно.

Рассмотрим 3-мерное подпространство, образованное координатами x_1, x_j, x_{j+1} , при любом $j = r + 1, r + 3, \dots, n - 1$. В этом подпространстве действие кроссинговера описывается диагональной подматрицей матрицы A с диагональю $(1, -1, -1)$, задающей поворот вокруг оси x_1 на угол π . Преобразование матрицы A есть композиция таких поворотов, следовательно, $A(x - x^0) + x^0$ является вращением в R^n .

Случай 2. При $n - r$ нечетном рассмотрим матрицу A вида

$$\begin{vmatrix} E' & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \cos(-2\alpha) & -\sin(-2\alpha) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \sin(-2\alpha) & \cos(-2\alpha) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -E'' & & \end{vmatrix}, \text{ где } \alpha = \operatorname{arctg} \frac{x(\eta)_{r+1} - x(\xi)_{r+1}}{x(\eta)_r - x(\xi)_r}, \text{ а}$$

единичные матрицы E' и E'' имеют размерности $r-1$ и $n-r-1$, соответственно. Непосредственная проверка, подобная сделанной в случае 1, показывает что отображение $A(x - x^0) + x^0$ с матрицей указанного вида дает тот же результат, что и оператор кроссинговера.

Рассмотрим 2-мерное подпространство, образованное координатами x_r, x_{r+1} : здесь матрица A задает поворот на угол 2α вокруг начала координат. Во всех 3-мерных подпространствах, образованных координатами x_1, x_j, x_{j+1} , при $j = r + 2, r + 4, \dots, n - 1$ преобразование A является поворотом вокруг оси x_1 на угол π , как и в случае 1. Следовательно, $A(x - x^0) + x^0$ является вращением в R^n . \square

1.2.4. Учет ограничений задачи

Существует несколько подходов к обработке точек из $X \setminus D$.

a) Использование штрафной функции. Существует следующий простейший способ, который всегда применим: $f(x) = F(x)$ при $x \in D$, иначе $f(x) = -M$, где M – достаточно большая константа. Недостаток: все точки вне допустимой области одинаково плохи и ГА не имеет информации о близости недопустимой точки к D . Во многих задачах оптимизации поиск допустимого решения сам по себе представляет достаточно сложную задачу (например, задача ЛП сводится к поиску допустимой точки некоторой системы линейных неравенств) и без такой дополнительной информации ГА может не обнаружить ни одного допустимого решения.

Другие более эффективные способы использования штрафов (см., например, [14, 80]) состоят в «градации недопустимости» решений. Например, если область D задана системой неравенств $D = \{x \in X = R^n : f_1(x) \leq 0, \dots, f_m(x) \leq 0\}$, в качестве штрафной функции может быть использована $P(x) = r \sum_{i=1}^m \max\{f_i(x), 0\}$, где r достаточно велико. Далее полагают $f(x) = F(x) - P(x)$. Желательно, чтобы выполнялось условие $F(x(\xi)) - P(x(\xi)) < F(x^*) - P(x^*) = F(x^*)$ для любого ξ такого, что $x(\xi) \notin D$.

Можно воспользоваться и классическим способом сведения задач математического программирования к задачам безусловной оптимизации. Для этого рассматривается возрастающая последовательность (теоретически возрастающая до бесконечности) r_1, r_2, \dots . Для каждого $r_\theta, \theta = 1, 2, \dots, \Theta$ решается задача (1) где $f(x) = F(x) - P(x)$ и $P(x)$ найдена при $r = r_\theta$. Величина Θ задает число «больших» итераций алгоритма и выбирается исходя из значимости выполнения ограничений. Естественно при этом каждый новый запуск ГА осуществлять не со случайной начальной популяции, а с последней популяции предыдущего запуска (тогда каждое обновление r_θ можно понимать как изменение «окружающей среды» с точки зрения эволюции популяции).

b) Корректировка недопустимых решений может выполняться с помощью методов непрерывной оптимизации или каких-либо эвристик, которые, стартуя с недопустимого решения $x(\xi) \notin D$, находят некоторое «подходящее» допустимое решение $x' \in D$. Например, если D – множество точек шара, то недопустимые решения могут проецироваться на границу шара и после это-

го кодироваться как особи новой популяции. Аналогично устроена процедура масштабирования решений в [?]. В случае дискретных задач подобный подход использован в ГА для задачи о покрытии множества, где жадная эвристика В. Хватала применяется для достройки недопустимого решения до покрытия [31].

с) Выбор подходящей кодировки, при которой $x(B) \subseteq D$. Примером служит рассмотренная выше задача о разрезе максимального веса.

1.2.5. Задача целочисленного линейного программирования

Рассматривается задача целочисленного линейного программирования (ЦЛП) следующего вида: найти

$$F(x) = (c, x) \rightarrow \max \quad (1.7)$$

при условиях

$$Ax \leq b, x \geq 0, \quad (1.8)$$

$$x \in \mathbf{Z}^n. \quad (1.9)$$

Здесь $A - (m \times n)$ - матрица, $c = (c_1, \dots, c_n)$, $b = (b_1, \dots, b_m)^T$, $x = (x_1, \dots, x_n)$. Далее предполагается, что множество \mathcal{M} , определяемое системой неравенств (1.8), ограничено. Будем называть вектор целочисленным, если все его компоненты целочисленны.

Общая схема ГА может быть легко адаптирована для задач целочисленного линейного и нелинейного программирования. Ограничимся рассмотрением ГА для задачи ЦЛП.

Многогранник допустимых решений погружается в n -мерный параллелепипед $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n | 0 \leq x_j \leq d_j, j = 1, \dots, n\}$ с минимальным объемом. Границы параллелепипеда d_j могут быть найдены решением n соответствующих задач ЛП.

Минимальная длина битовой строки для кодировки координаты j целочисленной точки из Ω имеет вид $k_j = \lceil \log_2(d_j + 1) \rceil$. При кодировке допустимым целочисленным точкам в Ω сопоставляются элементы B , состоящие из n последовательно записанных двоичных представлений координат:

$$x(\xi)_j = \sum_{i=0}^{k_j-1} 2^i \xi_{k_1+\dots+k_j-i}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (1.10)$$

Таким образом, пространство генотипов B есть $\{0, 1\}^{k_1+\dots+k_n}$.

Оператор мутации вводится стандартным образом, а схема кроссинговера может быть адаптирована для данной задачи с помощью дополнительного условия: $\chi \in \{k_1, k_1 + k_2, \dots, k_1 + \dots + k_{n-1}\}$. (Строго говоря, при такой модификации алгоритм уже не является КГА.)

Функция приспособленности $\Phi(\xi)$ может быть определена по-разному. Определим вспомогательную функцию

$$f(x) = \begin{cases} F(x) & \text{при } s(x) = 0 \\ -rs(x) & \text{при } s(x) > 0, \end{cases}$$

где $s(x)$ – сумма нарушений системы ограничений (1.8) для точки x и r – некоторая положительная константа, величина которой достаточна, чтобы выполнялось $f(x') < f(x)$ для всех $x, x' \in \Omega \cap \mathbf{Z}$, таких что $x \in \mathcal{M}, x' \notin \mathcal{M}$.

Функция приспособленности может быть выбрана следующим образом [54]:

$$\Phi(\xi) = \frac{f(x(\xi)) - f_{min}^t}{f_{avg}^t - f_{min}^t},$$

где f_{avg}^t, f_{min}^t – среднее и минимальное значения функции $f(x(\xi))$ на текущей популяции Π^t . Легко видеть, что определенная таким образом функция $\Phi(\xi)$ неотрицательна и неубывает с ростом $f(x)$. Отметим, что такой вариант функции приспособленности позволяет решать с помощью ГА задачи без ограничения на знак целевой функции.

Решение задачи линейного программирования (1.7)-(1.8) назовем непрерывным оптимумом.

Модификация КГА: индивиды первого поколения порождаются с помощью n -мерного нормального распределения с математическим ожиданием в точке непрерывного оптимума и с последующим округлением дробных координат.

Эксперимент показал, что если вероятность мутации достаточно велика, дисперсия начального распределения может быть установлена равной нулю. Кроме того, выяснилось, что как правило ГА относительно быстро (по сравнению с точными алгоритмами, например, Гомори) обнаруживает допустимые решения, близкие к оптимальному по целевой функции, однако часто имеют место случаи преждевременной сходимости³ ГА к некоторому приближенному решению, в результате процесс поиска оптимума замедляется. Для преодоления этого затруднения разработан точный гибридный алгоритм [48], сочетающий ГА с перебором L -классов.

1.2.6. Простейшая задача размещения производства

Рассматривается следующая задача оптимального размещения производства, известная также как задача стандартизации [2]. Пусть имеется возможность построить m предприятий, каждое из которых может обслуживать

³В англоязычной литературе используется термин *premature convergence*.

любого из n клиентов. При этом открытие i -го предприятия ($i = 1, \dots, m$) стоит $c_i \geq 0$ единиц, а обслуживание j -го клиента ($j = 1, \dots, n$) на предприятии i обходится в $C_{ij} \geq 0$ единиц стоимости. Задача состоит в минимизации функционала

$$F(z) = \sum_{i=1}^m c_i z_i + \sum_{j=1}^n \min_{i:z_i=1} C_{ij},$$

при условии, что

$$\sum_{i=1}^m z_i \geq 1,$$

где $z_i \in \{0, 1\}$. Решение z^* представляет собой оптимальный вектор - набор предприятий при поставленных условиях, причем по вектору z^* легко могут быть назначены и оптимальные прикрепления клиентов к открытым предприятиям. Очевидно, что единственным недопустимым решением является нулевой вектор $z = \mathbf{0}$.

Не теряя общности, можно предположить, что все $c_i > 0$, т.к. при $c_i = 0$ предприятие i можно включить в вектор z решения задачи в обязательном порядке – полученный после этого план обслуживания будет оптимален. При этом, если предприятие i не оказалось назначенным ни для одного клиента, его можно исключить из вектора решения.

Опишем схему КГА в применении к простейшей задаче размещения. В качестве генотипа удобно взять вектор предприятий z . В таком случае пространство генотипов совпадает с пространством фенотипов и отображение $x(\xi)$ – тождественное. Для определения функции приспособленности необходимо исходную задачу минимизации с ограничениями свести к задаче максимизации без ограничений: положим что при некотором достаточно малом $\varepsilon > 0$

$$\Phi(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{F(\xi)} & \text{при } \xi \neq 0 \\ \varepsilon & \text{при } \xi = 0. \end{cases}$$

Очевидно, что тогда любой допустимый вектор пространства решений имеет большую приспособленность $\Phi(\xi) = 1/f(x(\xi)) = 1/f(\xi)$, чем нулевой недопустимый вектор. Операторы мутации и кроссинговера полностью соответствует КГА.

Другой возможный подход: ГА с недвоичным представлением, где $l = n$. $\xi_j \in \{1, \dots, m\}$, $j = 1, \dots, n$. Кодировка: предприятие i обслуживает клиента j тогда и только тогда, когда $\xi_j = i$, и если хотя-бы один клиент обслуживается предприятием i , то полагаем $z_i = 1$. Данная модификация генетического алгоритма уже не укладывается в схему КГА.

1.3. Теорема о схемах

Схемой H с K фиксированными позициями будем называть множество генотипов

$$H = \{\xi \in B | \xi_{j_1} = h_1, \xi_{j_2} = h_2, \dots, \xi_{j_K} = h_K\},$$

где $j_1 < j_2, j_2 < j_3, \dots, j_{K-1} < j_K$. Число K принято называть порядком схемы. Длиной $\delta(H)$ схемы H будем считать расстояние между крайними фиксированными позициями, т.е. $\delta(H) = j_K - j_1$. По определению полагаем $\delta(B) = 0$. Очевидно, что при заданной кодировке любая точка пространства состояний является частным случаем схемы порядка l .

Ввиду того, что одним генотипом могут обладать несколько особей популяции, далее удобно ввести обозначение $N(H, \Pi^t)$ для числа представителей схемы H в поколении t , аналогично $N(\xi, \Pi^t)$ – число представителей генотипа ξ в поколении Π^t . Введем специальное обозначение для среднего значения функции приспособленности на особях схемы H в поколении t :

$$\Phi(H, \Pi^t) = \frac{\sum_{i: \xi^{i,t} \in H} \Phi(\xi^{i,t})}{N(H, \Pi^t)}.$$

Рассмотрим оценку среднего числа представителей схем среди особей нового поколения, иногда называемую теоремой о схемах или фундаментальной теоремой генетических алгоритмов [54, 59].

Теорема 1.3.1. *Пусть H – схема порядка K и величина c такова, что $\Phi(H, \Pi^t) \geq c\Phi(B, \Pi^t)$. Тогда в классическом генетическом алгоритме*

$$E[N(H, \Pi^{t+1})] \geq c \cdot \left(1 - \frac{\delta(H)P_c}{l-1}\right) \cdot (1 - P_m)^K N(H, \Pi^t). \quad (1.11)$$

Доказательство. Будем рассматривать очередную итерацию КГА с номером $t + 1$ в вероятностном пространстве, определенном описанной выше схемой КГА, его параметрами и совокупностью особей популяции t . Для начала рассмотрим вероятность того, что выбранный при селекции генотип принадлежит H . Она имеет вид

$$P\{\xi^{Sel(\Pi^t)} \in H\} = \sum_{i: \xi^{i,t} \in H} \frac{\Phi(\xi^{i,t})}{\sum_{j=1}^{\lambda} \Phi(\xi^{j,t})} = \frac{\Phi(H, \Pi^t)N(H, \Pi^t)}{\Phi(B, \Pi^t)\lambda} \geq c \frac{N(H, \Pi^t)}{\lambda}. \quad (1.12)$$

Кроме оператора селекции необходимо учитывать также действие мутации и кроссинговера, которые могут разрушать, а могут и создавать особи схемы H . Для получения искомой нижней оценки будем рассматривать только возможность разрушения элементов схемы H . Рассмотрим случайную величину $\zeta_i \in \{0, 1\}$, равную 1, если $\xi^{i,t+1} \in H$, и 0 иначе. Если мы

оценим снизу математическое ожидание для всех ζ_i , то это даст возможность получить оценку снизу и на величину $E[N(H, \Pi^{t+1})]$, т.к.

$$E[N(H, \Pi^{t+1})] = \sum_{i=1}^{\lambda} E[\zeta_i] = \sum_{i=1}^{\lambda} P\{\zeta_i = 1\}. \quad (1.13)$$

Построим нижнюю оценку для вероятности $P\{\zeta_i = 1\}$, рассматривая следующий сценарий возникновения этого события:

- родительский генотип, откуда при кроссинговере была скопирована позиция j_1 , принадлежал H ;
- при построении $\xi^{i,t+1}$ на этапе кроссинговера все гены с номерами j_1, j_2, \dots, j_K были скопированы из одной родительской особи;
- при мутации ни один бит, отвечающий за принадлежность к схеме H , не изменит свое значение.

Во-первых, неравенство (1.12) дает оценку вероятности того, что родительский генотип, откуда при кроссинговере была скопирована позиция j_1 , принадлежал H . Во-вторых, из определения кроссинговера вытекает, что все гены с номерами j_1, j_2, \dots, j_K копируются из одной родительской особи с вероятностью $1 - \frac{\delta(H)P_c}{l-1}$. В-третьих, вероятность того, что при мутации ни один бит, отвечающий за принадлежность к схеме H , не изменит свое значение, равна $(1 - P_m)^K$, т.к. генные мутации происходят побитно и независимо.

Таким образом, виду независимости операторов кроссинговера и мутации от всех других событий в ГА, получаем

$$P\{\zeta_j = 1\} \geq c \frac{N(H, \Pi^t)}{\lambda} (1 - P_m)^K \left(1 - \frac{\delta(H)P_c}{l-1}\right). \quad (1.14)$$

Далее, с учетом (1.13) получаем (1.11). \square

Таким образом, при выборе кодировки решений разработчик ГА должен стремиться к тому, чтобы перспективные свойства решений были бы представлены в генотипе в виде как можно более коротких участков хромосм. В таком случае эти свойства будут проще обнаруживаться в процессе работы ГА и решения с такими свойствами будут активно исследоваться.

Пример 1. Рассмотрим случай, когда число представителей схемы H , состоящей из близких к оптимуму генотипов, увеличивается. Пусть используется стандартная двоичная кодировка решений $x \in \{0, 1, \dots, 2^l\}$ для функции $f(x) \equiv x$ и $\Phi(\xi) = \sum_{j=1}^l \xi_j 2^{l-j}$, $l \geq 2$. Очевидно, $x^* = 2^l - 1$, $\xi^* = (1, 1, \dots, 1)$.

Если фиксировать k первых единиц, $0 < k < l$, то в случае, когда начальная популяция содержит всевозможные генотипы по одному экземпляру, имеем

$$\Phi(H, \Pi^0) = \frac{\min_{\xi \in H} \Phi(\xi) + \max_{\xi \in H} \Phi(\xi)}{2} = \frac{\sum_{j=1}^k 2^{l-j} + 2^l - 1}{2} =$$

$$\frac{2^l \sum_{j=0}^k 2^{-j} - 1}{2} = \frac{2^l \cdot \frac{1 - (\frac{1}{2})^{k+1}}{1 - \frac{1}{2}} - 1}{2}.$$

С другой стороны, $\Phi(B, \Pi^0) = \frac{2^l - 1}{2}$. Поэтому получаем оценку снизу:

$$\frac{\Phi(H, \Pi^0)}{\Phi(B, \Pi^0)} = \frac{2^{l+1} \left(1 - \frac{1}{2^{k+1}}\right) - 1}{2^l - 1} \geq 2 \left(1 - \frac{1}{2^{k+1}}\right) = 2 - \frac{1}{2^k},$$

т.к. $2\left(1 - \frac{1}{2^{k+1}}\right) \geq 1$ и $(xa - 1)/(a - 1) \geq x$ при $a > 1, x \geq 1$.

Таким образом, пусть $c = 2 - 2^{-k}$ и $P_c = 1, k = l/4$. Тогда теорема о схемах дает:

$$E[N(H, \Pi^1)] \geq c \left(1 - \frac{l/4}{l-1}\right) (1 - P_m)^{l/4} N(H, \Pi^0),$$

и при больших l правая часть приближается к $2 \cdot \frac{3}{4}(1 - P_m)^{l/4}$, что при $P_m < 1 - \sqrt[4]{2/3}$ превышает 1, т.е. при достаточно малой вероятности мутации имеет место рост числа представителей схемы H в среднем. Например, при $l = 100$ получаем $P_m < 0.00003$.

Пример 2. Если же фиксировать k последних единиц (обозначим такую схему H'), то

$$\Phi(H', \Pi^0) = \frac{\min_{\xi \in H'} \Phi(\xi) + \max_{\xi \in H'} \Phi(\xi)}{2} = \frac{2^k - 1 + 2^l - 1}{2} = \frac{2^k(1 + 2^{l-k}) - 2}{2},$$

и, следовательно,

$$\frac{\Phi(H', \Pi^0)}{\Phi(B, \Pi^0)} < \frac{1 + 2^{l-k}}{2^{l-k} - 2^{-k}}.$$

при $l - k \rightarrow \infty$ правая часть стремится к 1, т.е., при больших длинах l и существенно меньших k теорема о схемах не будет гарантировать рост числа представителей H' . Например, при $k = 0.4 \cdot l$ и $l = 100$ получаем

$$\frac{\Phi(H', \Pi^0)}{\Phi(B, \Pi^0)} < \frac{1 + 2^{60}}{2^{60} - 1} < 1.000000000000000000000000000018.$$

В произведении со множителями, отвечающими за мутацию и кроссинговер, результат, скорее всего, уже будет меньше 1.

1.4. Анализ разнообразия популяции

Пусть $q \in \{1, \dots, l\}$ – некоторая позиция в генотипе. Обозначим $H_q = \{\xi : \xi_q = 0\}$ и рассмотрим величину

$$a_q = \frac{\Phi(H_q, \Pi^t)N(H_q, \Pi^t)}{\Phi(B, \Pi^t)\lambda} = \frac{\sum_{i:\xi^i \in H_q} \Phi(\xi^{it})}{\sum_{k=1}^\lambda \Phi(\xi^{kt})},$$

как характеристику «качества» нулевого значения гена в позиции q и его распространения в популяции Π^t .

Получим формулы, определяющие зависимость между вероятностью вырождения гена в позиции q от параметров генетического алгоритма. Заметим, что a_q есть вероятность выбора особи, принадлежащей H_q из популяции Π^t при пропорциональной селекции.

Теорема 1.4.1. [18] Для любого значения $q \in \{1, \dots, l\}$ в КГА:

$$P\{N(H_q, \Pi^{t+1}) = \lambda\} = (a_q + (1 - 2a_q)P_m)^\lambda, \quad (1.15)$$

$$P\{N(H_q, \Pi^{t+1}) = 0\} = (1 - a_q + (2a_q - 1)P_m)^\lambda. \quad (1.16)$$

Доказательство. Рассмотрим подробно только равенство (1.15), так как доказательство (1.16) проводится аналогично. Рассчитаем вероятность того, что для каждого $i = 1, \dots, \lambda/2$, имеет место $\xi^{2i,t+1} \in H_q$ и $\xi^{2i-1,t+1} \in H_q$, т.е. пара передаваемых в популяцию Π^{t+1} особей будет иметь нулевое значение в позиции q . Обозначим, соответственно, η^{2i} и η^{2i-1} генотипы этих особей перед применением к ним оператора мутации. Тогда

$$P\{\xi_q^{2i,t+1} = 0, \xi_q^{2i-1,t+1} = 0\} = P\{\eta_q^{2i} = \eta_q^{2i-1} = 0\}(1 - P_m)^2 + \quad (1.17)$$

$$+ 2P\{\eta_q^{2i} = 1, \eta_q^{2i-1} = 0\}(1 - P_m)P_m + P\{\eta_q^{2i} = \eta_q^{2i-1} = 1\}P_m^2.$$

Рассчитаем вероятность $P\{\eta_q^{2i} = 0, \eta_q^{2i-1} = 0\}$. В результате скрещивания могут получиться две особи, у которых в позиции q находится значение 0, только в том случае, если у обеих родительских особей в позиции q находилось значение 0. Вероятность выбора таких особей, с учетом вероятностного смысла величин a_q и независимости селекции каждой особи, равна $(a_q)^2$.

Аналогично находим вероятность того, что у одной из полученных в результате скрещивания особей в позиции q находится значение 1, а у второй – значение 0. $P\{\eta_q^{2i} = 1, \eta_q^{2i-1} = 0\} = a_q(1 - a_q)$.

Далее, $P\{\eta_q^{2i} = \eta_q^{2i-1} = 1\} = (1 - a_q)^2$, так как в результате скрещивания могут получиться две особи, у которых в позиции q находится значение 1, только в том случае, если это значение находилось в позиции q у обеих родительских особей.

Подставив найденные выражения в формулу (1.17), для каждого i , $i = 1, \dots, \lambda/2$ получим:

$$\begin{aligned} P\{\xi_q^{2i,t+1} = 0, \xi_q^{2i-1,t+1} = 0\} &= \\ (a_q)^2(1 - P_m)^2 + 2a_q(1 - a_q)P_m(1 - P_m) + (1 - a_q)^2P_m^2 &= \\ = (a_q(1 - P_m) + (1 - a_q)P_m)^2 &= (a_q + (1 - 2a_q)P_m)^2. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Так как $\lambda/2$ пар особей в Π^{t+1} генерируются независимо одним и тем же способом, то $P\{N(H_q, \Pi^t) = \lambda\}$ равна

$$P\{\xi_q^{2i,t+1} = 0, \xi_q^{2i-1,t+1} = 0 \ \forall i = 1, \dots, \lambda/2\} = (a_q + (1 - 2a_q)P_m)^\lambda.$$

□

Данная теорема позволяет сделать вывод о том, что вероятность вырождения гена и, следовательно, степень разнообразия популяции зависят только от вероятности мутации и размера популяции, но не зависят от вероятности кроссинговера. Таким образом проявляется важное свойство оператора одноточечного кроссинговера, который порождает новые комбинации из уже имеющихся «блоков», но при этом никакие элементарные «блоки» не теряются. Более детальное обсуждение взаимодействия кроссинговера с модульными структурами в ЭА и в живой природе можно найти в [23].

Из теоремы следует, что вероятность вырождения значения 0 или 1 в гене q равна

$$p(q, P_m, \lambda) = (a_q + (1 - 2a_q)P_m)^\lambda + (1 - a_q + (2a_q - 1)P_m)^\lambda.$$

Таким образом, при $0 < a_q < 1$ вероятность вырождения гена в любой позиции уменьшается с увеличением размера популяции λ , а также с приближением P_m к $1/2$, ибо условие $\frac{\partial p(q, P_m, \lambda)}{\partial P_m} = 0$ эквивалентно

$$(a_q + (1 - 2a_q)P_m)^{\lambda-1} = (1 - a_q + (2a_q - 1)P_m)^{\lambda-1},$$

что означает $P_m = 1/2$, т.к. на концах интервала $p(q, 0, \lambda) = p(q, 1, \lambda) \geq p(q, 1/2, \lambda)$. Таким образом, наибольшее разнообразие достигается при $P_m = 1/2$, как и следовало ожидать.

На практике использование $P_m = 1/2$ не целесообразно, т.к. это эквивалентно случайной инициализации популяции на каждом поколении ГА. Вместо этого в современных ЭА используются процедуры автоматической настройки параметров алгоритма [44], эмпирический подбор этих параметров на основании вычислительных экспериментов или теоретически обоснованный выбор параметров, исходя из свойств функции приспособленности и операторов ЭА, например, как в п. 1.5 ниже.

1.5. Время первого достижения оптимума

В теории ЭА, как правило, рассматриваются вопросы трудоемкости отыскания наилучшего возможного генотипа в процессе работы некоторого ЭА на выбранном классе задач. При этом в первую очередь интересуются средним числом пробных решений до первого получения оптимального генотипа, в зависимости от размерности задачи. Исследуемые классы задач могут содержать примеры сколь угодно большой размерности, как это принято в теории вычислительной сложности [8]. Для анализа времени первого достижения оптимального генотипа, как правило, используются такие методы теории вероятностей, как цепи Маркова, мартингалы, случайные процессы со сносом, стохастическое доминирование и др.

Рассмотрим КГА при $p_c = 0$, $p_m = \chi/n$ с постоянным значением параметра $\chi > \ln 2$. Как выясняется, этот алгоритм неэффективен даже на классе линейных функций приспособленности.

Теорема 1.5.1. [38] *Если $f(x) \equiv \sum_{i=1}^n a_i x_i$, то КГА при численности популяции $\lambda \geq n^{2+\delta}$, и вероятности мутации χ/n при константных $\delta > 0$, $\chi > \ln(2)$, получает оптимум функции f с вероятностью не более λe^{-dn^δ} за e^{cn} поколений, где c, d – положительные константы.*

Аналогичный вывод был получен из анализа КГА при $p_c = 1$ в случае функции OneMax [66, 67]. По определению, $ONEMAX(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n x_i$ на всем множестве $Sol = X = \{0, 1\}^n$.

Если же вероятность мутации снизить на порядок, то алгоритм будет за полиномиальное время находить оптимум, как показано в следующей теореме.

Теорема 1.5.2. [38] *Если $f(x) = \sum_{i=1}^n a_i x_i$, то КГА при $p_c = 0$, $p_m = \chi/n$, где $\chi = (1 - c)/(na_{\max})$, $a_{\max} := \max_{i=1}^n a_i$, для любой положительной константы $c < 1$, и размере популяции $\lambda \geq dn^2 a_{\max}^2 \ln(na_{\max})$ при достаточно большой константе $d > 0$, имеет среднее время достижения оптимума $O(n^2 + n\lambda \ln \lambda)$.*

Аналогичный результат получен в [38] для КГА с вероятностью мутации χ/n , где χ -константа, но при условии, что приспособленность имеет вид $f(x) = s \sum_{i=1}^n a_i x_i$, и $s > e^\chi$. Эти оценки имеют, в основном, теоретическую ценность, т.к. на практике применение ЭА для поиска экстремума в задачах с линейной функцией приспособленности нецелесообразно.

2. Модификации генетических алгоритмов

2.1. Операторы селекции

Для сравнения различных операторов селекции, которые будут описаны далее, необходимо выбрать некоторую характеристику, которая имеет одинаковый смысл для всех из них. Возьмем в качестве такой характеристики число, показывающее сколько раз фиксированная особь отбирается в качестве родительской из популяции Π^t в процессе построения очередного поколения.

2.1.1. Стохастическая универсальная селекция Бэкера

Упрощенно действие стохастической универсальной селекции Бэкера [28]¹ может быть описано по аналогии с селекцией методом рулетки. Селекция Бэкера осуществляется путем определения размера секторов рулетки также как в селекции из КГА. Представим себе, что λ маркеров размещено на равном расстоянии вдоль внешней стороны колеса рулетки и вращение рулетки осуществляется один раз на случайный угол. Количество потомков, которое получает особь, рассчитывается как число маркеров, попавших в соответствующий сектор. Для снижения вероятности попадания двух идентичных генотипов на вход кроссинговера выбранные генотипы родителей перемешиваются случайным образом.

Для формального описания данного алгоритма рассмотрим всю последовательность генотипов, выбранных оператором селекции в процессе построения очередной популяции (далее – выходная последовательность): $\xi^{i_1,t}, \dots, \xi^{i_\lambda,t}$. Индексы i_1, \dots, i_λ – случайные величины. Оператор кроссинговера на итерации t применяется в следующем порядке: $\text{Cross}(\xi^{i_1,t}, \xi^{i_2,t}); \text{Cross}(\xi^{i_3,t}, \xi^{i_4,t}); \dots \text{Cross}(\xi^{i_{\lambda-1},t}, \xi^{i_\lambda,t})$.

Алгоритм стохастической универсальной селекции Бэкера

1. Сгенерировать случайную величину x с равномерным распределением на $[0, 1]$.
2. Положить $i_k, k = 1, \dots, \lambda$:

$$i_k = \min \left\{ i : \sum_{j=1}^i \frac{\Phi(\xi^{j,t})}{\sum_{s=1}^\lambda \Phi(\xi^{s,t})} \geq \left\{ \frac{k}{\lambda} + x \right\} \right\}.$$

¹Baker's stochastic universal selection

Здесь и далее фигурные скобки $\{\cdot\}$, заключающие вещественное число, обозначают дробную часть данного числа.

3. Применить случайную перестановку к последовательности i_1, \dots, i_λ .

Пусть $Z_B(i, \Pi^t)$ – сколько раз особь с номером i отбирается в качестве родительской из популяции Π^t при селекции Бэкера.

Утверждение 2.1.1.

$$Z_B(i, \Pi^t) = \lfloor \lambda P_{sel}(i, \Pi^t) \rfloor + u_{it},$$

где $P_{sel}(i, \Pi^t)$ определена как в стандартной рулеточной селекции, а случайная величина $u_{it} \in \{0, 1\}$ такова, что $P\{u_{it} = 1\} = \{\lambda P_{sel}(i, \Pi^t)\}$.

Следующее утверждение показывает, что для повышения стабильности результатов в ГА предпочтительнее использовать селекцию Бэкера. Введем случайную величину $Z_R(i, \Pi^t)$ для стандартной рулеточной селекции по аналогии со случайной величиной $Z_B(i, \Pi^t)$.

Утверждение 2.1.2. *Оператор селекции Бэкера осуществляет пропорциональную селекцию, и при этом $D[Z_B(i, \Pi^t)] \leq 1/4$, в то время как $D[Z_R(i, \Pi^t)]$ может расти неограниченно с ростом λ .*

Доказательство. По формулам, характеризующим схему Бернулли для стандартной рулеточной селекции имеем: $D[Z_R(i, \Pi^t)] = \lambda p(1 - p)$, где $p = P_{sel}(i, \Pi^t)$.

С другой стороны, для селекции Бэкера

$$E[Z_B(i, \Pi^t)] = \lfloor \lambda p \rfloor + \{\lambda p\} = \lambda p = E[Z_R(i, \Pi^t)];$$

$$D[Z_B(i, \Pi^t)] = (1 - \{\lambda p\})\{\lambda p\}^2 + \{\lambda p\}(1 - \{\lambda p\})^2 = \{\lambda p\}(1 - \{\lambda p\}) \leq 1/4.$$

Q.E.D.

2.1.2. Ранжирование особей в операторах селекции

В процессе работы ГА, как правило, происходит сближение приспособленности особей в популяции. В результате операторы пропорциональной селекции все меньше «отличают» (в смысле вероятности селекции) наиболее приспособленных особей от отстающих. Способ решения этой проблемы, предложенный Д.Голдбергом, состоит в масштабировании приспособленности в процессе работы ГА [54] (см. приведенный выше пример применения ГА к задаче ЦЛП). Альтернативный подход состоит в использовании *ранжирования особей*.

Для фиксированной популяции Π биекция $r_\Pi : \{1, \dots, \lambda\} \rightarrow \{1, \dots, \lambda\}$ называется ранжированием, если для всех $i, j \in \{1, 2, \dots, \lambda\}$ выполняется:

$$\Phi(\xi^i) > \Phi(\xi^j) \Rightarrow r_\Pi(i) > r_\Pi(j).$$

Значение $r_\Pi(i)$ называется рангом особи ξ^i в популяции Π .

2.1.3. Ранговая селекция

Ранговая селекция (ranking selection) предложена в работе [56]. Здесь \mathbb{R}_+ обозначает множество неотрицательных вещественных чисел и пусть функция $\alpha : \{1, \dots, \lambda\} \rightarrow \mathbb{R}_+$, такая что $\sum_{r=1}^{\lambda} \alpha(r) = 1$. Тогда α называется ранжирующей функцией.

При заданной ранжирующей функции оператор селекции с распределением вероятностей

$$P\{\text{выбрать особь с рангом } r\} = \alpha(r), \quad r = 1, \dots, \lambda,$$

называется ранжирующей селекцией. Такая селекция не теряет «чувствительности» при сколь угодно малых различиях приспособленности особей.

Частный случай, где

$$\alpha(r) = \frac{\eta - 1}{\lambda} \left(\frac{2(r - \lambda)}{\lambda - 1} + \frac{\eta}{\eta - 1} \right),$$

при $\eta \in (1, 2]$ называется линейным ранжированием. Легко видеть, что условия ранжирующей функции выполняются.

Особь с рангом λ имеет вероятность селекции, равную η/λ , а особь с рангом 1 – вероятность $(2 - \eta)/\lambda$. Если положить $\eta = 2$, то особь с рангом 1 имеет нулевую вероятность селекции (наибольшая дифференциация селективности по рангу). Если же $\eta \rightarrow 1$, то распределение вероятностей селекции стремится к равномерному.

Ранговая селекция при $\eta = 2 - 2/(\lambda + 1)$ состоит в применении оператора селекции КГА с подстановкой рангов особей $r_{\Pi}(i)$ вместо значений их приспособленности.

Упражнение 2.1.1. Найти функцию $\alpha(r)$ для пропорциональной селекции, где в качестве приспособленности используется ранг особи.

2.1.4. Турнирная селекция

Оператор турнирной селекции (tournament selection) с размером турнира s (или оператор s -турнирной селекции) при построении очередного решения из текущей популяции извлекает s особей с равномерным распределением и выбирает лучшую из них (точнее, особь с наибольшим рангом).

Сравним среднее число повторений фиксированной особи ξ^{it} при 2-турнирной селекции (обозначаем далее через $Z_T(i, \Pi^t)$) и при пропорциональной селекции КГА с подстановкой рангов особей вместо значений их приспособленности (обозначаем через $Z_{RR}(i, \Pi^t)$). Заметим, что в турнирной селекции вероятность выбора особи i с рангом $r = r_{\Pi^t}(i)$ есть

$$p(r) = C_s^1 \frac{1}{\lambda} \left(\frac{r - 1}{\lambda} \right)^{s-1} + C_s^2 \left(\frac{1}{\lambda} \right)^2 \left(\frac{r - 1}{\lambda} \right)^{s-2} + \dots + C_s^s \left(\frac{1}{\lambda} \right)^s =$$

$$= \left(\frac{1}{\lambda} + \frac{r-1}{\lambda} \right)^s - \left(\frac{r-1}{\lambda} \right)^s = \left(\frac{r}{\lambda} \right)^s - \left(\frac{r-1}{\lambda} \right)^s.$$

В частности, при $s = 2$ имеем:

$$E[Z_T(i, \Pi^t)] = \lambda p(r) = \frac{r^2 - r^2 + 2r - 1}{\lambda} = \frac{2r - 1}{\lambda}.$$

Сравним эту величину с $E[Z_{RR}(i, \Pi^t)]$. Легко видеть, что при использовании ранжирования в пропорциональной селекции

$$P_{sel}(i, \Pi^t) = \frac{2r}{\lambda(\lambda+1)}, \quad E[Z_{RR}(i, \Pi^t)] = \frac{2r}{\lambda+1},$$

что приближается к $E[Z_T(i, \Pi^t)]$ при больших r, λ .

По формуле дисперсии для схемы Бернулли нетрудно показать, что

$$D[Z_{RR}(i, \Pi^t)] = \frac{2r(\lambda^2 - 2r + \lambda)}{\lambda^3 + 2\lambda^2 + \lambda},$$

$$D[Z_T(i, \Pi^t)] = \frac{(2r-1)(\lambda^2 - 2r + 1)}{\lambda^3},$$

и при $\lambda \rightarrow \infty$ имеем $\frac{D[Z_{RR}(i, \Pi^t)]}{D[Z_T(i, \Pi^t)]} \rightarrow \frac{2r}{2r-1}$, следовательно, при больших значениях λ и r , также и по дисперсии оператор 2-турнирной приближается к пропорциональной селекции с рангами вместо приспособленности.²

Упражнение 2.1.2. Найти функцию $\alpha(r)$ для турнирной селекции.

2.1.5. (μ, λ) -селекция

(μ, λ) -селекция – один из наиболее простых операторов селекции в ЭА, аналогичен массовому отбору в растениеводстве и животноводстве: из популяции численностью λ отбираются μ особей с наибольшими значениями функции приспособленности и родительские генотипы равновероятно выбираются из них для скрещивания и получения потомства.

2.2. Стратегии управления популяцией

Обновление всей популяции на каждой итерации КГА соответствует подходу, применяемому при имитационном моделировании в популяционной генетике (см., например, [1]), однако, для ускорения поиска генотипов с высокой приспособленностью, общая схема ГА зачастую модифицируется. Основная мотивация при этом состоит в том, что в КГА даже генотип, существенно

²Заметим, что именно особи с большим рангом r оказывают наибольший эффект при построении очередной популяции.

превышающий по пригодности все прочие особи популяции, с большой вероятностью будет исключен из рассмотрения уже на следующей итерации после его появления. Однако, в успешных приложениях ГА приспособленность потомков, как правило, имеет положительную корреляцию с приспособленностью родительских генотипов. В таких случаях целесообразно сохранять наиболее пригодные особи в течение ряда итераций ГА и генерировать с помощью кроссинговера и мутации оставшуюся часть популяции. Рассмотрим некоторые известные схемы управления популяцией, реализующие этот принцип.

Элитарная стратегия. На каждой итерации ГА, во-первых, строится очередная популяция Π^{t+1} по правилам КГА. Во-вторых, если по приспособленности все генотипы новой популяции уступают максимально приспособленной (элитной) особи ξ_e^t из предыдущей популяции, то один из наименее приспособленных генотипов в Π^{t+1} заменяется на ξ_e^t .

Таким образом, если ГА применяется для решения задачи безусловной оптимизации (1.1), то последовательность значений целевой функции элитных фенотипов $f(x(\xi_e^1)), f(x(\xi_e^2)), \dots$ будет неубывающей. Более того, как показал Г. Рудольф [79], при $x(B) = X$ и $0 < P_m < 1$, дополнение КГА элитарной стратегией обеспечивает сходимость последовательности $f(x(\xi_e^1)), f(x(\xi_e^2)), \dots$ к оптимальному значению целевой функции задачи (1.1) почти наверное.

Вместо одной элитной особи в ГА может сохраняться некоторое подмножество генотипов текущей популяции, имеющих высокую приспособленность (см., например, [48]). Такие стратегии называются *частичной заменой популяции*. Следующая стратегия может рассматриваться как предельный случай расширения множества элитных особей.

Стационарная стратегия управления популяцией. При этой стратегии на каждой итерации ГА в популяцию добавляются два генотипа, полученных применением операторов кроссинговера и мутации. Каждая новая особь замещает некоторый «неперспективный» генотип. При этом в качестве «неперспективного» может быть взят генотип с наименьшей приспособленностью, или генотип, выбранный с равномерным распределением среди имеющихся приспособленность ниже средней в текущей популяции. В некоторых вариантах ГА на выходе кроссинговера имеется только один генотип – тогда изменяется только одна особь популяции.

Особенностью стационарной стратегии управления популяцией является значительно более быстрое «сужение» области поиска, по сравнению с КГА. В связи с этим, во многих реализациях стационарной стратегии управления популяцией при совпадении новой особи с одной из имеющихся в популяции, новая особь в популяцию не добавляется (см., например, [31, 45]).

Элитная рекомбинация (elitist recombination) [55] (не путать с популяцией с элитой): особи текущей популяции случайным образом переставляются и последовательно выбираются пары родительских особей

$(\xi^{1t}, \xi^{2t}), (\xi^{3t}, \xi^{4t}), \dots$ для скрещивания. Каждая пара потомков сравнивается с соответствующими родительскими особями, и лучшие две из четырех особей помещаются в новую популяцию.

2.3. Операторы скрещивания и мутации

Наряду с оператором одноточечного кроссинговера КГА, в генетических алгоритмах используются и другие операторы рекомбинации родительских генотипов. Общей чертой для всех из них является, так называемое, свойство *передачи генов*: значение для каждого гена потомка выбирается из значений соответствующих генов одного или другого родителей.³

В некоторых вариантах кроссинговера результатом является один генотип (см., например, [9]), однако, наиболее распространены операторы с двумя выходными генотипами. Во втором случае, с целью сохранения разнообразия популяции, стремятся построить как можно более удаленные один от другого генотипы потомков.

Пусть даны родительские генотипы ξ и η , для которых порождается пара генотипов потомков ξ' , η' . Если в задаче отсутствуют ограничения, или схема представления решений такова, что $x(B) \subseteq D$, тогда уместно использовать, так называемую, *маску кроссинговера*. Под этим термином понимают вспомогательную последовательность $\mathbf{m} = (m_1, \dots, m_l) \in B$, по которой строятся генотипы потомков:

$$\xi'_i = \begin{cases} \xi_i, & \text{если } m_i = 1 \\ \eta_i, & \text{иначе,} \end{cases} ; \quad \eta'_i = \begin{cases} \eta_i, & \text{если } m_i = 1 \\ \xi_i, & \text{иначе,} \end{cases}$$

для $i = 1, \dots, l$. Рассмотрим два примера использования маски кроссинговера.

Равномерный кроссинговер. Данный оператор определяется выбором маски кроссинговера с равномерным распределением на множестве B . При действии этого оператора i -ый ген, $i = 1, \dots, l$, копируется в генотип потомка из i -той позиции генотипа одного или другого родителя с равными вероятностями, независимо от выбора других генов.

k -точечный кроссинговер. Данный оператор представляет собой обобщение одноточечного кроссинговера. В строке генотипа выбирается k различных координат скрещивания $0 < \chi_1 < \chi_2 < \dots < \chi_k < l$ с равномерным распределением среди всевозможных таких наборов. Обозначим $\chi_0 = 0$,

³Данное свойство в работах N. Radcliffe назавно *свойством передачи генов* (gene transmission) [72].

тогда маска кроссинговера определяется следующим образом:

$$m_i = \begin{cases} 1, & \text{если } \max\{j : \chi_j < i\} - \text{четное число} \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

для $i = 1, \dots, l$. Данный оператор имеет то свойство, что при задании четного числа точек скрещивания k , первая и последняя координаты одного родителя всегда переходят одному потомку. Наоборот, при нечетном k эти координаты копируются в каждый из генотипов потомков от разных родителей.

Каждый из описанных операторов кроссинговера может быть реализован и в варианте с одним генотипом потомка (для этого достаточно отбросить второй генотип).

2.3.1. Кроссинговер с частичным отображением для задач на перестановках

Рассмотрим некоторые операторы, применяемые в задаче коммивояжера и других задачах, где допустимыми решениями являются перестановки. При описании этих операторов под случайным выбором понимается выбор с равномерным распределением среди всех возможных вариантов.

Оператор кроссинговера с частичным отображением был предложен в работе Д. Голдберга и Р. Лингле [53] и кратко обозначается PMX.⁴

Пусть пара перестановок ξ' и η' вычисляется по заданным родительским перестановкам ξ и η . Два индекса χ_1 и χ_2 , где $\chi_1 < \chi_2$, выбираются с равномерным распределением. Наша цель состоит в том, чтобы выполнить обмен участками генотипов от χ_1 до χ_2 , а все прочие гены достроить допустимым образом. Рассмотрим первый генотип-потомок ξ' . Положим сначала $\xi' := \xi$. Для получения последовательности генов $\xi'_j = \eta_j$ для всех $j = \chi_1, \dots, \chi_2$ достаточно пройти по этим позициям и поместить на них требуемые значения генов с помощью не более чем $\chi_2 - \chi_1$ транспозиций. Это всегда возможно, т.к. η — тоже перестановка. Аналогично строится η' на основе η и участка первого генотипа от χ_1 до χ_2 .

Рассмотрим действие кроссинговера PMX на иллюстративном примере. Пусть даны следующие родительские генотипы с координатами скрещивания $\chi_1 = 3, \chi_2 = 7$:

$$\begin{array}{l} \xi = (1 \ 2 \ 3 \mid 4 \ 5 \ 6 \ 7 \mid 8 \ 9) \\ \eta = (4 \ 5 \ 2 \mid 1 \ 8 \ 7 \ 6 \mid 9 \ 3). \end{array}$$

Результат PMX-кроссинговера имеет вид:

⁴От английского *partially mapped crossover*.

$$\begin{array}{l} \xi' = (4 \ 2 \ 3 \mid 1 \ 8 \ 7 \ 6 \mid 5 \ 9) \\ \eta' = (1 \ 8 \ 2 \mid 4 \ 5 \ 6 \ 7 \mid 9 \ 3). \end{array}$$

Заметим, что некоторые сочетания родительских генотипов при определенных χ_1, χ_2 могут давать различные результаты скрещивания, зависящие от последовательности выполнения перестановок между позициями χ_1 и χ_2 . В связи с этим для увеличения разнообразия популяции перестановки имеет смысл выполнять в случайном порядке.

2.3.2. Порядковый кроссинговер для задач на перестановках

Порядковый кроссинговер [40] сохраняет абсолютные позиции элементов, заимствованных от одного родителя, и относительные позиции элементов, заимствованных у другого. Проиллюстрируем на примере:

$$\begin{array}{cc} \begin{array}{c|ccccccc} 2 & 1 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 4 & 3 & 6 & 2 & 7 & 1 & 5 \\ \hline \chi & & & & & & \end{array} & \longrightarrow & \begin{array}{c|ccccccc} 2 & 1 & 4 & 3 & 6 & 7 & 5 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 5 & 6 & 7 \\ \hline \chi & & & & & & \end{array} \end{array}$$

Данный оператор сохраняет абсолютные позиции элементов, заимствованных от одного родителя, и относительные позиции элементов, заимствованных у другого.

Как показали эксперименты, порядковый кроссинговер, также как кроссинговер PMX, дает хорошие результаты в задачах составления расписаний, где большое значение имеет то, какие работы выполняются раньше, а какие – позже. В то же время, для задачи коммивояжера и задач составления расписаний, где важно учитывать длительность переналадки с одной работы на другую, лучшие результаты дают операторы рекомбинации, основанные на наследовании свойства смежности вершин (см., например, [34, 49]).

2.3.3. Мутация в задачах на перестановках

Мутация обмена⁵ состоит в обмене пары генов из случайно выбранных позиций в данной на вход перестановке. С точки зрения локального поиска для задачи коммивояжера, при действии этого оператора выполняется шаг в случайно выбранную точку из окрестности *2-city swap* [17].

Мутация сдвига⁶ состоит в перемещении гена из случайно выбранной позиции на случайное число позиций влево или вправо. Содержимое всех промежуточных генов при этом сдвигается на одну позицию.

⁵ В англоязычной литературе принят термин *exchange mutation*.

⁶ В англоязычной литературе принят термин *shift mutation*.

Мутация «2-замена» определяется наиболее просто в случае задачи коммивояжера в терминах фенотипов, то есть обходов графа G . В обходе, заданном входным генотипом случайным образом выбираются два несмежных ребра и заменяются двумя новыми ребрами, которые в данном случае определяются однозначно. С точки зрения локального поиска, действие данного оператора представляет собой шаг в случайно выбранную точку из окрестности, определенной относительно 2-замены [19].

Упражнение 2.3.1. Описать алгоритм, осуществляющий мутацию «2-замена» в кодировке решений задачи коммивояжера с помощью перестановок.

2.4. Задача оптимальной рекомбинации

Пусть решается задача условной максимизации в пространстве двоичных строк длины $\ell = n$. Рассмотрим вычислительную сложность задачи отыскания «наилучшего» генотипа, как результата кроссинговера для заданной пары родительских генотипов при условии выполнения свойства передачи генов.

С учетом свойства передачи генов сформулируем *задачу оптимальной рекомбинации*: для произвольных заданных родительских генотипов p^1, p^2 , представляющих допустимые решения, требуется найти представляющий допустимое решение генотип ξ , такой что:

- 1) для каждого $j = 1, \dots, n$ выполняется $\xi_j = p_j^1$ или $\xi_j = p_j^2$;
- 2) ξ имеет максимальное значение приспособленности среди всех генотипов, удовлетворяющих условию 1) и кодирующих при этом допустимые решения.

Далее множество номеров координат, в которых родительские генотипы различны, будем обозначать через $D(p^1, p^2)$.

В качестве примера эффективно разрешимой задачи оптимальной рекомбинации рассмотрим следующую известную задачу из теории графов. Пусть имеется граф $G = (V, E)$ с множеством вершин $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ и множеством ребер E . Задача о наибольшем независимом множестве состоит в отыскании такого подмножества $S \subseteq V$, что ни одно ребро $e \in E$ не инцидентно сразу двум вершинам из S (т.е. S – независимое множество) и мощность этого множества максимальна.

Естественным будет представление решений с помощью вектора-индикатора из $\{0, 1\}^n$, где $\xi_j = 1$ тогда и только тогда, когда вершина v_j принадлежит искомому подмножеству. Пусть $\Phi(\xi) = |x(\xi)|$ для любого допустимого решения $x(\xi)$. Как замечено в работе Э.Балаша и В.Нихауса [29], при использовании данного представления решений задача оптимальной рекомбинации разрешима за полиномиальное время.

Для того чтобы в этом убедиться, рассмотрим произвольные родительские независимые множества S_1 и S_2 и соответствующие им генотипы p_1 и p_2 . Исходя из свойства передачи генов, решение-потомок S должно содержать все множество вершин $L = S_1 \cap S_2$, кроме того, в S не должно быть элементов множества $V \setminus (S_1 \cup S_2)$, а вершины с номерами из множества $D(p^1, p^2)$ необходимо выбрать оптимальным образом. Последнее требование формулируется, как задача о наибольшем независимом множестве в подграфе, порожденном множеством вершин с номерами из $D(p^1, p^2)$. Легко видеть, что данный подграф является двудольным.

Для отыскания наибольшего независимого множества в двудольном графе $H = (V', E')$ можно воспользоваться тем фактом, что наибольшее независимое множество всегда является дополнением наименьшего вершинного покрытия C' , то есть такого наименьшего по мощности множества вершин, что каждое ребро инцидентно хотя бы одной из них.

Задача о наименьшем вершинном покрытии двудольного графа $H = (V', E')$ эффективно разрешима с помощью алгоритма построения минимального разреза во вспомогательном графе, состоящем из графа H и дополнительных вершины-источника v_0 и вершины-стока v_{n+1} . Источник v_0 соединяется со всеми вершинами одной доли, а сток v_{n+1} – со всеми вершинами другой доли. Ребрам из множества E' приписываются бесконечные пропускные способности, а ребрам, инцидентным дополнительным вершинам – единичные пропускные способности. Наименьшее вершинное покрытие C' формируется из вершин, инцидентных ребрам минимального разреза.

Генотип ξ , являющийся вектором-индикатором множества $L \cup (V' \setminus C')$ представляет собой решение задачи оптимальной рекомбинации для задачи о наибольшем независимом множестве.

Приведенный результат Балаша и Нихауса может быть сформулирован как

Теорема 2.4.1. (*Балаш, Нихаус [29]*) Задача оптимальной рекомбинации для задачи о независимом множестве разрешима за полиномиальное время.

Упражнение 2.4.1. Показать, что для задачи о наименьшем вершинном покрытии при тех же предположениях о способе представления решений (т.е. $v_j \in C \Leftrightarrow \xi_j = 1$) задача оптимальной рекомбинации эффективно разрешима.

Рассмотренная здесь постановка задачи оптимальной рекомбинации может быть модифицирована – см., например, [3, 9]. Выбор наиболее подходящей формулировки этой подзадачи и методов ее решения делается на основе вычислительного эксперимента.

2.5. Генетический алгоритм как метод локального поиска

2.5.1. Задачи комбинаторной оптимизации

Пусть $\{0, 1\}^*$ обозначает множество всевозможных строк из нулей и единиц произвольной длины, а \mathbb{N} – множество натуральных чисел. Для $S \in \{0, 1\}^*$ символом $|S|$ обозначается длина строки S .

Определение 2.5.1. Задача комбинаторной оптимизации – это тройка $\Pi = (\text{Inst}, \text{Sol}, f_I)$, где

- 1) $\text{Inst} \subseteq \{0, 1\}^*$ – множество индивидуальных задач из Π ;
- 2) $\text{Sol}(I) \subseteq \{0, 1\}^{n(I)}$ – множество допустимых решений индивидуальной задачи $I \in \text{Inst}$, $n(I)$ – размерность пространства решений;
- 3) для каждой $I \in \text{Inst}$ определена функция $f_I : \text{Sol}(I) \rightarrow \mathbb{R}$, которую требуется максимизировать (если Π – задача максимизации) или минимизировать (если Π – задача минимизации).

Далее через f_I^* обозначается оптимальное решение индивидуальной задачи I , т. е. $f_I^* = \max\{f_I(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \text{Sol}(I)\}$, если Π – задача максимизации, либо $f_I^* = \min\{f_I(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \text{Sol}(I)\}$, если Π – задача минимизации.

Величина $a > 0$ называется полиномиально ограниченной относительно величины $b > 0$, если существует полином с положительными коэффициентами относительно b , ограничивающий сверху значения a . В тех случаях, когда ясно, о какой индивидуальной задаче I идет речь, по умолчанию под *полиномиально ограниченной* величиной будем подразумевать величину, полиномиально ограниченную относительно $|I|$. Функции и алгоритмы будем называть эффективно вычислимыми, если время их вычисления полиномиально ограничено.

Наибольший теоретический интерес представляют задачи комбинаторной оптимизации из класса NPO [33], также известные как *задачи NP оптимизации*, в которых вводятся следующие «технические» предположения.

Определение 2.5.2. Задача комбинаторной оптимизации принадлежит классу NPO, если отношения $I \in \text{Inst}$ и $\mathbf{x} \in \text{Sol}(I)$ могут быть проверены за полиномиально ограниченное время, размерность $n(I)$ полиномиально ограничена, а функция $f_I : \text{Sol}(I) \rightarrow \mathbb{N}$ полиномиально вычислима для любой $I \in \text{Inst}$.

Класс NPO является аналогом класса NP для задач комбинаторной оптимизации (подробнее см., например, [33]). Функция $n(I)$ представляет собой размерность пространства решений индивидуальной задачи I , записанных в алфавите $\{0, 1\}$.

Если различные решения имеют разную длину записи, то $n(I)$ – наибольшая длина допустимого решения задачи. Далее через f_I^* обозначается

оптимальное решение индивидуальной задачи I , т. е. $f_I^* = \max\{f_I(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \text{Sol}(I)\}$, если \mathcal{P} – задача максимизации, либо $f_I^* = \min\{f_I(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \text{Sol}(I)\}$, если \mathcal{P} – задача минимизации.

Далее ГА рассматривается в предположении $B = \{0, 1\}^{n(I)}$ и представление решений совпадает с кодировкой решений задачи Π , а задача комбинаторной оптимизации имеет критерий «на максимум».

Кроме того, будем предполагать, что при $\mathbf{x} \in \text{Sol}(I)$, функция приспособленности имеет вид $\Phi(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$. Если же $\mathbf{x} \notin \text{Sol}(I)$, то функции приспособленности можно придать значение меньше, чем на любом допустимом решении, что будет соответствовать штрафу за выход из допустимой области.

2.5.2. Задача поиска локального оптимума

Пусть для всякого элемента $\mathbf{y} \in \text{Sol}(I)$ определена некоторая его окрестность $\mathcal{N}_I(\mathbf{y}) \subseteq \text{Sol}(I)$. Совокупность $\{\mathcal{N}_I(\mathbf{y}) : \mathbf{y} \in \text{Sol}(I)\}$ называется *системой окрестностей*.

Определение 2.5.3. Если для $\mathbf{x} \in \text{Sol}(I)$ при всяком $\mathbf{y} \in \mathcal{N}_I(\mathbf{x})$ выполняется неравенство $f_I(\mathbf{y}) \leq f_I(\mathbf{x})$ в случае задачи максимизации или $f_I(\mathbf{y}) \geq f_I(\mathbf{x})$ в случае задачи минимизации, то решение \mathbf{x} называется локальным оптимумом в системе окрестностей \mathcal{N}_I .

Глобальный оптимум, т.е. оптимальное решение задачи комбинаторной оптимизации является частным случаем локального оптимума.

Если $\mathcal{D}(\cdot, \cdot)$ – метрика, заданная для всех элементов $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \text{Sol}(I)$, то $\mathcal{N}_I(\mathbf{x}) = \{\mathbf{y} : \mathcal{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq k\}$, $\mathbf{x} \in \text{Sol}(I)$ называется *системой окрестностей радиуса k , порожденной метрикой $\mathcal{D}(\cdot, \cdot)$* .

Алгоритм локального поиска начинает свою работу с некоторого допустимого решения. Далее, на каждой итерации алгоритма происходит переход от текущего решения к новому допустимому решению в его окрестности, имеющему лучшее значение целевой функции, чем текущее решение. Процесс продолжается, пока не будет достигнут локальный оптимум. Способ выбора нового решения в окрестности текущего решения зависит от специфики конкретного алгоритма локального поиска.

2.5.3. Достижение локальных оптимумов генетическим алгоритмом

Настоящий раздел посвящен изучению достаточных условий, при которых генетический алгоритм с полной заменой популяции и турнирной селекцией впервые посещает локальный оптимум в среднем за время, близкое к трудоемкости локального поиска (точнее, превышающее ее не более, чем в $\log(n)$ раз). Ограничим рассмотрение задачами безусловной оптимизации вида (1.1).

Мотивацией исследования служит тот факт, что ГА зачастую относят к классу методов локального поиска (см., например, [17]), поэтому представляет интерес детальное изучение случаев, когда работоспособность ГА объясняется сходством его поведения с локальным поиском.

Для простоты обозначений здесь предполагается двоичное представление решений, совпадающее с кодировкой решений задачи комбинаторной оптимизации, а «генотип» – то же, что элемент пространства решений $\{0, 1\}^{n(I)}$.

Исследуется ГА с полной заменой популяции и турнирной селекцией. Для удобства анализа будем считать, что условие остановки ГА никогда не выполняется. Далее этот вариант ГА будем обозначать как ГА.

Пусть имеется задача комбинаторной оптимизации $\mathcal{P} = (\text{Inst}, \text{Sol}, f_I)$ на максимум, причем $\text{Sol}(I) = \{0, 1\}^{n(I)}$. Последнему условию удовлетворяют многие задачи комбинаторной оптимизации, например, задача максимальной выполнимости логической формулы [8], разрез наибольшего веса [8], спиновое стекло в модели Изинга [30] и др.

Пусть выбрана некоторая система окрестностей $\{\mathcal{N}(\xi) \mid \xi \in \text{Sol}(I)\}$. Обозначим через h число всех неоптимальных значений целевой функции f , т. е. $h = |\{f(\xi) : \xi \in \text{Sol}(I)\}| - 1$. Тогда, начиная с любого допустимого решения, локальный поиск достигает локального оптимума не более чем за h улучшающих целевую функцию итераций. Пусть L обозначает минимальную вероятность достижения решения в пределах окрестности в результате однократной мутации:

$$L = \min_{\xi \in \text{Sol}(I), \xi' \in \mathcal{N}(\xi)} \mathbf{P}\{\text{Mut}(\xi) = \xi'\}.$$

Чем выше величина L , тем больше согласованность оператора мутации с системой окрестностей. Будем считать, что численность популяции λ , размер турнира s и величину L могут быть выбраны с учетом исходных данных задачи, т.е. являются функциями от I . Для простоты обозначений индивидуальную задачу I здесь и далее, как правило, не будем указывать.

Будем предполагать, что в результате кроссинговера с вероятностью не менее некоторой константы ε , $0 < \varepsilon \leq 1$, образуются особи $(\xi', \eta') = \text{Cross}(\xi, \eta)$, хотя бы одна из которых не уступает по приспособленности родительским особям $\xi, \eta \in B$, т. е.

$$\mathbf{P}\{\max\{\Phi(\xi'), \Phi(\eta')\} \geq \max\{\Phi(\xi), \Phi(\eta)\}\} \geq \varepsilon \quad (2.1)$$

при любых $\xi, \eta \in B$. Под «констаной» в настоящем разделе понимается величина, не зависящая от индивидуальной задачи.

Для одноточечного кроссинговера условие (2.2) выполняется с $\varepsilon = 1 - P_c$, если $P_c < 1$ – константа, не зависящая от задачи. Условие (2.2) выполняется с $\varepsilon = 1$, если один из двух потомков – решение задачи оптимальной рекомбинации родительских решений.

Будем предполагать, что в результате кроссинговера с вероятностью не менее некоторой константы ε , $0 < \varepsilon \leq 1$, образуются особи $(\xi', \eta') = \text{Cross}(\xi, \eta)$, хотя бы одна из которых не уступает по приспособленности родительским особям $\xi, \eta \in B$, т. е.

$$P\{\max\{\Phi(\xi'), \Phi(\eta')\} \geq \max\{\Phi(\xi), \Phi(\eta)\}\} \geq \varepsilon \quad (2.2)$$

при любых $\xi, \eta \in B$. Под «константой» в настоящем разделе понимается величина, не зависящая от индивидуальной задачи.

Для одноточечного кроссинговера условие (2.2) выполняется с $\varepsilon = 1 - P_c$, если $P_c < 1$ – константа, не зависящая от задачи. Условие (2.2) выполняется с $\varepsilon = 1$, если один из двух потомков – решение задачи оптимальной рекомбинации родительских решений.

Пусть e – число Эйлера, т.е. $e \approx 2,718$.

Лемма 2.5.1. $e^{-x} \geq 1 - x$ для любого $x \in \mathbb{R}$.

Действительно,

$$e^{-x} = 1 - x + x^2/2! - \dots \geq 1 - x.$$

Лемма 2.5.2. $e^{-x} \leq 1 - x/e$ при $x \in [0, 1]$.

Заметим, что $2(1 - 1/e) > 1$, а поэтому при $x \in [0, 1]$ имеем $x \leq 2(1 - 1/e)$, т.е. $1 - x/2 \geq 1/e$ и $x - x^2/2 \geq x/e$. Далее,

$$e^{-x} = 1 - x + x^2/2! - \dots \leq 1 - x + x^2/2 \leq 1 - x/e.$$

Лемма 2.5.3. Для любых событий A_0, A_1, \dots, A_n

$$P\{A_0 \& A_1 \& \dots \& A_n\} = P\{A_0\} \prod_{i=0}^{n-1} P\{A_{i+1} | A_0 \& A_1 \& \dots \& A_i\}.$$

Действительно, по определению условной вероятности,

$$\begin{aligned} P\{A_0 \& A_1 \& \dots \& A_n\} &= P\{A_n | A_0 \& A_1 \& \dots \& A_{n-1}\} \cdot P\{A_0 \& A_1 \& \dots \& A_{n-1}\} = \dots \\ &= P\{A_0\} \prod_{i=0}^{n-1} P\{A_{i+1} | A_0 \& A_1 \& \dots \& A_i\}. \end{aligned}$$

Теорема 2.5.1. [?] Если $\text{Sol}(I) = \{0, 1\}^{n(I)}$, размер турнира $s \geq r\lambda$, и

$$\lambda \geq \frac{2(1 + \ln h)}{L\varepsilon(1 - 1/e^{2r})}, \quad (2.3)$$

где $r > 0$, $h > 1$, $L > 0$, то

1. GA посещает локальный оптимум к итерации h с вероятностью не менее $1/e$, и
2. локальный оптимум достигается не позднее, чем за eh итераций GA в среднем.

Доказательство. Пусть популяция Π^t еще не содержит локального оптимума и событие E_k^{t+1} , $k = 1, \dots, \lambda/2$, состоит в выполнении следующих трех условий:

1. из популяции Π^t при построении k -той пары потомков для следующего поколения выбирается решение ξ_*^t наибольшей приспособленности;
2. при построении k -той пары потомков посредством кроссинговера, один из них имеет приспособленность не менее $\Phi(\xi_*^t)$ (пусть для определенности это ξ');
3. оператор мутации, примененный к ξ' , осуществляет переход в наилучшее по приспособленности решение в окрестности $\mathcal{N}(\xi')$, т. е. $\Phi(\text{Mut}(\xi')) = \max_{\eta \in \mathcal{N}(\xi')} \Phi(\eta)$.

Обозначим через p вероятность наступления хотя бы одного из событий E_k^{t+1} , $k = 1, \dots, \lambda/2$, при известной популяции Π^t . Найдем оценку $p_{LB} \leq p$, не зависящую от выбора Π^t . Согласно схеме GA, $\mathbf{P}\{E_1^{t+1}\} = \dots = \mathbf{P}\{E_{\lambda/2}^{t+1}\}$.

Обозначим эту вероятность через q . Ввиду независимости событий E_k^{t+1} , $k = 1, \dots, \lambda/2$ при фиксированной Π^t , имеем $p \geq 1 - (1 - q)^{\lambda/2} \geq 1 - e^{-q\lambda/2}$, где последнее неравенство следует из леммы 2.5.1. Оценим снизу вероятность q :

$$q \geq L\varepsilon \left(1 - \left(1 - \frac{1}{\lambda} \right)^{2s} \right).$$

Однако, $(1 - 1/\lambda)^{2s} \leq (1 - 1/\lambda)^{2r\lambda} \leq 1/e^{2r}$ снова по лемме 2.5.1, поэтому

$$q \geq L\varepsilon \left(1 - \frac{1}{e^{2r}} \right) = Lc, \quad (2.4)$$

где $c := \varepsilon \left(1 - \frac{1}{e^{2r}} \right)$ для краткости. В дальнейшем мы воспользуемся тем, что из (2.3) и (2.4) вытекает

$$\lambda \geq \frac{2}{L\varepsilon(1 - 1/e^{2r})} \geq 2/q. \quad (2.5)$$

Для оценки снизу вероятности p применим лемму 2.5.2, из которой следует что при любом $z \in [0, 1]$

$$1 - \frac{z}{e} \geq e^{-z}. \quad (2.6)$$

Положим $z = e^{-q\lambda/2+1}$. Тогда ввиду неравенства (2.5), $z \leq 1$, и следовательно,

$$p \geq 1 - e^{-q\lambda/2} \geq \exp \left\{ -e^{1-q\lambda/2} \right\} \geq \exp \left\{ -e^{1-Lc\lambda/2} \right\}. \quad (2.7)$$

От анализа потомков фиксированной популяции Π^t перейдем к случайной последовательности популяций Π^0, Π^1, \dots . Заметим, что p_{LB}^h является оценкой снизу для вероятности достичь локальный оптимум за серию из не более h итераций, улучшающих значение рекорда целевой функции. Действительно, пусть $A_t = E_1^{t+1} + \dots + E_{\lambda/2}^{t+1}$, $t = 0, 1, \dots$. Тогда по лемме 2.5.3,

$$\mathbf{P}\{A_0 \& \dots \& A_{h-1}\} = \mathbf{P}\{A_0\} \prod_{t=1}^{h-2} \mathbf{P}\{A_t | A_0 \& \dots \& A_{t-1}\} \geq p_{LB}^h. \quad (2.8)$$

Итак, положим $p_{LB} = \exp \left\{ -e^{1-Lc\lambda/2} \right\}$. Снова воспользовавшись условием (2.3), получаем оценку снизу для вероятности либо реализовать серию из h улучшающих рекорд итераций (и значит получить глобальный оптимум), либо получить локальный оптимум еще раньше:

$$p_{LB}^h = \exp \left\{ -he^{1-Lc\lambda/2} \right\} \geq \exp \left\{ -he^{-\ln h} \right\} = 1/e.$$

Первая часть утверждения теоремы доказана.

Для оценки среднего времени получения локального оптимума рассмотрим последовательность серий по h итераций в каждой. Пусть событием D_i , $i = 1, 2, \dots$, является отсутствие локального оптимума в популяции GA в i -той серии. При выполнении условий леммы вероятность каждого события D_i , $i = 1, 2, \dots$, не превышает $\mu = 1 - 1/e$ при любой предыстории работы алгоритма. По аналогии с (2.8) заключаем: $\mathbf{P}\{D_1 \& \dots \& D_k\} \leq \mu^k$. Таким образом, если через Y обозначить случайную величину, равную номеру первой серии, на которой локальный оптимум будет получен, то, пользуясь свойствами математического ожидания (см., например, [6]), получаем

$$E[Y] = \sum_{i=0}^{\infty} \mathbf{P}\{Y > i\} = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \mathbf{P}\{D_1 \& \dots \& D_i\} \leq 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \mu^i.$$

Следовательно, $E[Y] = e$ и локальный оптимум достигается не позднее, чем за eh поколений GA в среднем. \square

Пусть $\lceil \cdot \rceil$ обозначает округление вверх. Тогда в условиях теоремы, при

$$\lambda = 2 \left\lceil \frac{1 + \ln h}{L\varepsilon(1 - 1/e^{2r})} \right\rceil, \quad s = \lceil r\lambda \rceil, \quad (2.9)$$

обеспечено получение локального оптимума в ГА за $O(h)$ поколений в среднем.

Упражнение 2.5.1. Доказать с использованием леммы 2.5.2, что если расстояние Хэмминга между n -битовыми строками \mathbf{x} и \mathbf{y} равно 1, то при использовании оператора мутации из КГА, где $P_m = 1/n$, вероятность того, что $Mut^*(\mathbf{x}) = \mathbf{y}$, оценивается снизу величиной $1/(e^en)$.

2.5.4. Задача ONEMAX

В качестве примера применения теоремы 2.5.1 рассмотрим одноточечную задачу безусловной оптимизации с целевой функцией $ONEMAX(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n x_i$ на множестве $Sol = X = \{0, 1\}^n$. В качестве функции приспособленности естественно выбрать $\Phi(\mathbf{x}) \equiv ONEMAX(\mathbf{x})$. В системе окрестностей, порожденной метрикой Хэмминга радиуса 1, точка $(1, 1, \dots, 1)$ является единственным локальным оптимумом, а значит и глобальным.

Пусть в ГА с турнирной селекцией используются операторы мутации и скрещивания из КГА при $P_m = 1/n$ и при константной вероятности $P_c < 1$. Как следует из упражнения 2.5.1, для любого $\mathbf{x} \in Sol$ и любого $\mathbf{y} \in \mathcal{N}(\mathbf{x})$ выполнено $\mathbf{P}\{\text{Mut}^*(\mathbf{x}) = \mathbf{y}\} \geq 1/(e^en) =: L$. По теореме 2.5.1 заключаем, что при $s \geq r\lambda$, константном $r > 0$, и

$$\lambda = \left\lceil \frac{2e^en(1 + \ln n)}{\varepsilon(1 - 1/e^{2r})} \right\rceil,$$

ГА впервые посещает оптимум в среднем не позднее, чем за en поколений. Обозначим через T число обращений к функции приспособленности за время работы ГА до первого получения оптимального решения. Величину $E[T]$ в англоязычной литературе принято называть runtime.

Следствие 2.5.1. Пусть в ГА с турнирной селекцией используется операторы мутации и скрещивания из КГА при $P_m = 1/n$ и при константной вероятности $P_c < 1$, тогда при $s \geq r\lambda$, константном $r > 0$, и $\lambda = \left\lceil \frac{2e^en(1 + \ln n)}{\varepsilon(1 - 1/e^{2r})} \right\rceil$, для функции приспособленности $ONEMAX(\mathbf{x})$ имеем $E[T] = O(n^2 \ln n)$.

Для сравнения: локальный поиск с окрестностью единичного радиуса Хэмминга получает оптимум в этой задаче после просмотра $O(n^2)$ пробных решений.

Упражнение 2.5.2. Доказать, что при использовании равномерного кроссинговера с $P_c = 1$ в случае задачи ONEMAX корректно полагать $\varepsilon = 0.5$.

Полиномиально ограниченные задачи из класса NPO. Задача комбинаторной оптимизации из класса NPO называется *полиномиально ограниченной*, если существует полином от $|I|$, ограничивающий значения $f_I(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \text{Sol}(I)$. Заметим, что процедура турнирной селекции требует времени $O(s) = O(\lambda)$. Следовательно, имеет место

Теорема 2.5.2. *Если $\text{Sol}(I) = \{0, 1\}^{n(I)}$ и полиномиально ограничены:*

1. *задача комбинаторной оптимизации $\Pi = (\text{Inst}, \text{Sol}, f_I)$,*
2. *трудоемкости операторов Mut и $Cross$,*
3. *а также функция $1/L(I)$,*

то при подходящем выборе параметров GA и функции приспособленности локальный оптимум впервые достигается в среднем за полиномиально ограниченное время.

Если семейство окрестностей $\mathcal{N}(\xi)$ порождено метрикой Хэмминга с константным радиусом окрестности, то существует оператор мутации $\text{Mut}(\xi)$, вычислимый за полиномиально ограниченное время и осуществляющий равновероятный выбор особей-потомков из множества $\mathcal{N}(\xi)$ при заданном ξ . Тогда $1/L$ также ограничена сверху некоторым полиномом от $|I|$. Таким образом, теорема 2.5.2 применима ко многим известным системам окрестностей для задач комбинаторной оптимизации.

В настоящем разделе не учитывался тот факт, что в результате действия кроссинговера приспособленность потомков может оказаться выше приспособленности родителей. Улучшение известных теоретических оценок для ГА за счет такой возможности является более сложной задачей, которую пока удалось решить только для нескольких небольших классов задач дискретной оптимизации. Примеры результатов в этом направлении могут быть найдены в [39, 43].

3. Эволюционные алгоритмы

3.1. Общий вид операторов

В дальнейшем нам потребуется символ, обозначающий множество всех генотипов популяции Π , т.е. *генофонд* популяции. Запишем его как $\widehat{\Pi} = \cup_{i=1}^{\lambda} \{\xi^i\}$. В общем случае работа ЭА может быть описана с помощью операторов, представляющих собой следующие рандомизированные процедуры, т.е. программы для вероятностной машины Тьюринга – см., например, [16], гл. 3.

- Начальная популяция $\Pi^0 = Init$ строится случайным образом с помощью рандомизированной процедуры *Init*.
- Оператором селекции $Select : B^\lambda \rightarrow B^{\lambda'}$ извлекается λ' копий генотипов родителей из текущей популяции, которые помещаются в промежуточную популяцию $\Pi' = Select(\Pi^t)$, причем $\widehat{\Pi}' \subseteq \widehat{\Pi}^t$.
- Действием оператора вариации $Variate : B^{\lambda'} \rightarrow B^{\lambda''}$ вносятся некоторые случайные изменения в генотипы, полученные от родительских особей. Таким образом создаются λ'' генотипов-потомков, составляющих популяцию Π'' . (В частности, в случае КГА $\lambda'' = \lambda' = \lambda$, и действие данного оператора состоит в последовательном применении скрещивания и мутации.)
- С помощью оператора выживания $Survive : B^\lambda \times B^{\lambda''} \rightarrow B^\lambda$ определяются генотипы из популяции Π^t и их потомки из Π'' , которые будут добавляться в очередную популяцию Π^{t+1} , т.е. $\widehat{Survive}(\Pi^t, \Pi'') \subseteq \widehat{\Pi}^t \cup \widehat{\Pi}''$.

Работа ЭА начинается со случайной начальной популяции $\Pi^0 = Init$ и продолжается итерациями случайного отображения

$$\Pi^{t+1} = Survive(\Pi^t, Variate(Select(\Pi^t))),$$

пока не будет выполнено некоторое условие остановки. Работа заканчивается выводом в качестве ответа лучшего найденного решения $x(\tilde{\xi})$, где

$$\tilde{\xi} = \arg \max \{f(x(\xi^{i,\tau})) : \tau = 0, \dots t, i = 1, \dots, \lambda\}.$$

Условие остановки может быть ограничением по общему числу итераций, либо по числу итераций без улучшения рекорда целевой функции

$f(x(\tilde{\xi}))$. В некоторых задачах можно заранее определить требуемое значение целевой функции, по достижению которого алгоритм останавливается. Как правило, в дальнейшем при теоретическом исследовании алгоритмов для удобства будем полагать, что условие остановки никогда не выполняется.¹ Очевидно, всякий представитель класса эволюционных алгоритмов может быть реализован на вероятностной машине Тьюринга.

Распределение вероятностей на выходе процедур *Select*, *Variate*, *Survive* должно полностью определяться входными данными решаемой задачи (которую будем считать фиксированной) и одной или двумя популяциями-аргументами, поданными на вход процедуры. Таким образом, имеют место *марковские свойства* указанных операторов, которые могут быть formalизованы следующим образом.

Пусть \mathbf{M} – вероятностная машина Тьюринга, реализующая данный ЭА, и Θ обозначает последовательность состояний, которые проходит машина \mathbf{M} до применения рассматриваемого оператора *Select*, *Variate* или *Survive*.

Условимся обозначать детерминированные популяции или реализации случайных популяций буквой π , а популяции, являющиеся случайными величинами – как и прежде, заглавными буквами Π (например, для реализации Π^t будем использовать π^t). Аналогично поступим с другими случайными величинами и их реализациями ($\xi, \Xi; \Theta, \theta$ и т.д.). Тогда марковские свойства операторов ЭА формулируются следующим образом.

- Для любых $\pi' \in B^{\lambda'}$, $\pi \in B^\lambda$, $t \geq 0$ и любой последовательности состояний θ выполнено равенство

$$P\{\pi' = \text{Select}(\pi)\} = P\{\pi' = \text{Select}(\pi) | \Theta = \theta\}. \quad (3.1)$$

- Для любых $\pi'' \in B^{\lambda''}$, $\pi' \in B^{\lambda'}$, $\pi \in B^\lambda$, $t \geq 0$ и последовательности θ , на шаге t выполнено равенство

$$P\{\pi'' = \text{Variate}(\pi')\} = \quad (3.2)$$

$$P\{\pi'' = \text{Variate}(\pi') | \Pi^t = \pi \& \Theta = \theta\}.$$

- Для любых $\pi \in B^\lambda$, $\pi'' \in B^{\lambda''}$, $\pi' \in B^{\lambda'}$, $\pi^{t+1} \in B^\lambda$, $t \geq 0$ и последовательности θ на шаге t , выполнено равенство

$$P\{\pi^{t+1} = \text{Survive}(\pi, \pi'')\} = \quad (3.3)$$

$$P\{\pi^{t+1} = \text{Survive}(\pi, \pi'') | \Pi^t = \pi \& \Pi'' = \pi'' \& \Pi' = \pi' \& \Theta = \theta\}.$$

Очевидно, КГА и все рассмотренные ранее его модификации соответствуют приведенной общей схеме ЭА, а соответствующие им операторы обладают марковскими свойствами.

¹Однако, практика показывает, что многократный независимый перезапуск алгоритма зачастую позволяет значительно улучшить результаты при том же общем времени вычислений.

3.2. Эволюционные стратегии (μ, λ) -ES и $(\mu + \lambda)$ -ES

Один из первых вариантов эволюционной стратегии $(1+1)$ -ES был предложен Л.А. Растигиным [20], гл. 2, где этот алгоритм был назван *локальным поиском с пересчетом при неудачном шаге*. И. Реченберг [71] сформулировал более общие вычислительные схемы эволюционных стратегий, которые и приводятся ниже.

Прежде, чем дать описание алгоритмов, определим один вспомогательный оператор. Пусть оператор s_μ из данной на вход популяции генотипов (численностью не менее μ) выбирает без повторений μ особей с наибольшей приспособленностью и возвращает популяцию из них в качестве результата. Заметим, что если численность входной популяции равна λ , то данный оператор реализует уже рассмотренную ранее (μ, λ) -селекцию.

Общая схема алгоритмов (μ, λ) -ES и $(\mu + \lambda)$ -ES

1. Построить $\Pi^{(0)} := (\xi^{1,0}, \dots, \xi^{\mu,0})$, положить $t := 0$.
2. Пока не выполнен критерий остановки, выполнять:
 - 2.1 Для $i := 1$ до λ выполнять 2.1.1, 2.1.2:
 - 2.1.1 Выбрать u_i с равномерным распределением из $\{1, 2, \dots, \mu\}$.
 - 2.1.2 Положить $\eta^i := \text{Mut}(\xi^{u_i,t})$.
 - 2.2 Положить $\Pi^{t+1} := \begin{cases} s_\mu(\eta^1, \dots, \eta^\lambda) & \text{в алгоритме } (\mu, \lambda)\text{-ES} \\ s_\mu(\xi^{1,t}, \dots, \xi^{\mu,t}, \eta^1, \dots, \eta^\lambda) & \text{в алгоритме } (\mu + \lambda)\text{-ES.} \end{cases}$
 - 2.3 $t := t + 1$.
3. Результат – наиболее приспособленный из найденных генотипов $\tilde{\xi}$.

Эволюционные стратегии изначально были предложены для задач непрерывной оптимизации, где $X \subseteq \mathbb{R}^n$ имеет мощность континуума. В таких задачах часто используются операторы мутации Mut_σ с нормально распределенным случайным шагом:

$$\text{Mut}_\sigma(\xi) = x^{-1}(x(\xi) + Z),$$

где $Z = (Z_1, \dots, Z_n)$ и Z_i , $i = 1, \dots, n$ – независимые нормально распределенные случайные величины со стандартным отклонением σ (это настраиваемый параметр алгоритма) и нулевым математическим ожиданием.

При решении задач дискретной оптимизации, как правило, используется оператор мутации из КГА. В таком случае алгоритмы обозначаются как (μ, λ) -EA, $(\mu + \lambda)$ -EA, соответственно.

3.3. Сходимость эволюционных алгоритмов

Введем обозначение для целевой функции от фенотипа лучшей особи на поколении t :

$$F_t = \max\{f(x(\Xi^{1,t})), f(x(\Xi^{2,t})), \dots, f(x(\Xi^{\lambda,t}))\}.$$

Определение 3.3.1. Будем говорить, что популяция ЭА сходится к оптимуму в задаче (1) почти наверное, если $F_t \rightarrow f^*$ почти наверное (п.н.) при $t \rightarrow \infty$.

Для задачи (1.3) сходимость популяции ЭА к оптимуму п.н. определяется аналогично.

Пусть B^* обозначает множество оптимальных генотипов. По аналогии с [79], сформулируем несколько предположений относительно операторов ЭА, которые позволяют в дальнейшем доказать сходимость к оптимуму для популяции ЭА.

Определение 3.3.2.

\mathcal{A}_1 . Для оператора *Select* существует такое $\epsilon_1 > 0$, что при любых $\pi^t \in B^\lambda, \xi \in \widehat{\pi^t}, t \geq 0$

$$P\{\xi \in \widehat{\text{Select}}(\pi^t)\} \geq \epsilon_1.$$

\mathcal{A}_2 . Для оператора вариации *Variate* существует $\epsilon_2 > 0$, такое что для любых $\xi \in B, t \geq 0$ найдется последовательность генотипов $\eta^0, \eta^1, \dots, \eta^{k(\xi)}$, где $\eta^0 = \xi$, $\eta^{k(\xi)} \in B^*$ и при всех $i = 0, \dots, k - 1$ имеем

$$P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\text{Variate}}(\pi')\} \geq \epsilon_2 \quad \forall \pi' : \eta^i \in \widehat{\pi'}.$$

\mathcal{A}_3 . Для оператора выживания *Survive* существует $\epsilon_3 > 0$, такое что при любом $t \geq 0$

$$P\{\xi \in \widehat{\text{Survive}}(\pi^t, \pi'')\} \geq \epsilon_3 \quad \forall \pi^t \in B^\lambda, \pi'' \in B^{\lambda''} : \xi \in \widehat{\pi''}.$$

\mathcal{A}_4 . Для оператора выживания *Survive* при любых $\pi^t, \pi'', t \geq 0$ выполняется

$$\max\{f(x(\xi)) : \xi \in \widehat{\text{Survive}}(\pi^t, \pi'')\} \geq \max\{f(x(\xi)) : \xi \in \widehat{\pi^t \cup \pi''}\}.$$

Заметим, что ввиду марковских свойств операторов ЭА данное определение корректно, т.к. используемые в нем вероятности не зависят от предыстории работы алгоритма до вызова указанного оператора, если известны все аргументы на входе оператора.

Утверждение 3.3.1. (об условных вероятностях) Для любых событий A, A', A''

$$P\{A \& A'|A''\} = P\{A|A'\ & A''\}P\{A'|A''\},$$

если эти условные вероятности определены.

Доказывается трехкратным применением формулы из определения условной вероятности.

Утверждение 3.3.2. (формула полной условной вероятности) Для любых событий A, A' и альтернатив A_1, \dots, A_k таких, что $A_i \cap A_j = \emptyset, i \neq j$ и $A' = \bigcup_{i=1}^k A_i$, выполнено равенство

$$P\{A|A'\} = \sum_{i=1}^k P\{A|A_i\}P\{A_i|A'\},$$

если эти условные вероятности определены.

Доказательство. Условная вероятность $P\{A|A'\}$ = $P\{A \& A'\}/P\{A'\}$ по формуле полной вероятности представима в виде

$$P\{A|A'\} = \frac{P\{A \& A'\}}{P\{A'\}} = \sum_{i=1}^k \frac{P\{A \& A' \& A_i\}}{P\{A'\}} = \sum_{i=1}^k \frac{P\{A|A' \& A_i\}P\{A' \& A_i\}}{P\{A'\}}.$$

Пользуясь определением условной вероятности и тем, что $A' \& A_i = A_i$ для всех $i = 1, \dots, k$, приходим к требуемому равенству. \square

Следующая теорема о непрерывности вероятностной меры известна из курса теории вероятностей (см., например, [5], гл. 2, §1).

Теорема 3.3.1. Пусть $\{A_n\}$ – последовательность множеств из сигма-алгебры событий, $A_{n+1} \subset A_n \forall n$, тогда

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(A_n) = P(\bigcap_{n=1}^{\infty} A_n).$$

При кодировке решений задачи (1.1) оптимум может не быть представлен в пространстве генотипов. В следующей теореме такая ситуация исключается предположением о том, что $B^* \neq \emptyset$.

Теорема 3.3.2. О сходимости ЭА (Айбен, Аартс, ван Хи, 1989) [46, 79]. Пусть $B^* \neq \emptyset$ и условие остановки никогда не выполняется. Тогда

1. В случае выполнения условий $\mathcal{A}_1 - \mathcal{A}_3$ имеем

$$P\{\exists t : \widehat{\Pi}^t \cap B^* \neq \emptyset\} = 1, \quad (3.4)$$

т.е. в ЭА оптимальный генотип порождается с вероятностью единица за конечное число итераций.

2. В случае выполнения условий $\mathcal{A}_1 - \mathcal{A}_4$ популяция ЭА сходится к оптимуму почти наверное.

Доказательство.

1. Рассмотрим популяцию Π^0 как случайную величину. Как будет видно в дальнейшем, вместо Π^0 можно было бы взять популяцию Π^t на любой другой итерации – это только усложнило бы обозначения. Пусть π^0 – некоторая вспомогательная (не случайная) популяция и ξ^1 – первый ее генотип.

Пусть $k(\xi^1)$ – число элементов в пути $\eta^0 = \xi^1, \eta^1, \dots, \eta^{k(\xi^1)}$ от генотипа ξ^1 до B^* из условия \mathcal{A}_2 для оператора вариации, и пусть $k^* = \max\{k(\xi) : \xi \in B\}$. Очевидно, k^* конечно, т.к. B конечно.

Обозначим через $U(\xi^1, i)$ событие $\{\eta^0 \in \widehat{\Pi}^0, \eta^1 \in \widehat{\Pi}^1, \dots, \eta^i \in \widehat{\Pi}^i\}$. Рассмотрим условную вероятность $p(i) = P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}^{i+1} | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}$ при наличии генотипов $\eta^j \in \widehat{\Pi}^j$ на всех итерациях j от 0 до i – той включительно, получить в новой популяции $\widehat{\Pi}^{i+1}$ следующий генотип η^{i+1} . Здесь i принимает значения от 0 до $k(\xi^1) - 1$. Покажем, что $p(i) > 0$.

С учетом Утверждения 3.3.1, $p(i)$ оценивается снизу

$$\begin{aligned} p(i) &\geq P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}^{i+1} \& \eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}'' \& \eta^i \in \widehat{\Pi}' | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\} = \\ &= p_{\text{surv}} \cdot p_{\text{sel \& var}}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

где p_{surv} обозначает условную вероятность

$$P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}^{i+1} | \eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}'' \& \eta^i \in \widehat{\Pi}' \& U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\},$$

а $p_{\text{sel \& var}}$ обозначает условную вероятность

$$P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}'' \& \eta^i \in \widehat{\Pi}' | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}.$$

По Утверждению 3.3.1,

$$\begin{aligned} p_{\text{sel \& var}} &= P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}'' | \eta^i \in \widehat{\Pi}' \& U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\} \cdot \\ &\cdot P\{\eta^i \in \widehat{\Pi}' | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Покажем, что последний сомножитель положителен. Заметим, что по утверждению 3.3.2

$$P\{\eta^i \in \widehat{\Pi}' | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\} =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\pi: \eta^i \in \widehat{\pi}} P\{\eta^i \in \widehat{\text{Select}(\Pi^i)} | \Pi^i = \pi\} P\{\Pi^i = \pi | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\} \geq \\
&\geq \epsilon_1 \cdot \sum_{\pi: \eta^i \in \widehat{\pi}} P\{\Pi^i = \pi | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\} = \\
&= \epsilon_1 \cdot \sum_{\pi: \eta^i \in \widehat{\pi}} \frac{P\{\Pi^i = \pi \& U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}}{P\{U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}} = \epsilon_1.
\end{aligned}$$

Здесь суммирование ведется только по тем π , которые содержат η^i ввиду того, что оператор селекции может построить популяцию с η^i только если особь η^i имела во входной популяции. Итак, положительность последнего сомножителя в (3.6) доказана.

Аналогичным способом, используя утверждение 3.3.2 и условие \mathcal{A}_2 для вариации, получаем $P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}' | \eta^i \in \widehat{\Pi}' \& U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\} \geq \epsilon_2$. Следовательно, $p_{\text{sel \& var}} \geq \epsilon_2 \epsilon_1$.

Из условия \mathcal{A}_3 и утверждения 3.3.2 также вытекает, что $p_{\text{surv}} \geq \epsilon_3$. Таким образом, существует достаточно малая положительная величина $\delta = \epsilon_1 \epsilon_2 \epsilon_3$, такая что $0 < \delta < p(i)$.

Далее, пусть $p^*(\pi^0)$ будет условной вероятностью при $\Pi^0 = \pi^0$ попасть в B^* на итерации $k(\xi^1)$, следуя за цепочкой генотипов из условия \mathcal{A}_2 для вариации: $\eta^0 = \xi^1, \eta^1 \in \widehat{\Pi}^1, \eta^2 \in \widehat{\Pi}^2, \dots, \eta^{k(\xi^1)} \in \widehat{\Pi}^{k(\xi^1)} \cap B^*$.

Заметим, что по лемме 2.5.3 для любых событий A_0, A_1, \dots, A_n ,

$$P\{A_0 \& A_1 \& \dots \& A_n\} = P\{A_0\} \prod_{i=0}^{n-1} P\{A_{i+1} | A_0 \& A_1 \& \dots \& A_i\}.$$

Таким образом,

$$p^*(\pi^0) = \prod_{i=0}^{k(\xi^1)-1} P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}^{i+1} | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}. \quad (3.7)$$

Оценивая $p^*(\pi^0)$ с помощью δ , имеем: $p^*(\pi^0) \geq \delta^{k(\xi^1)}$. Пусть $\Delta = \delta^{k^*}$. Тогда $\min_{\pi^0 \in B^\lambda} p^*(\pi^0) \geq \Delta$, и

$$\max_{\pi^0 \in B^\lambda} P\{F_t < f^*, t = 0, \dots, k(\xi^1) | \Pi^0 = \pi^0\} \leq \max_{\pi^0 \in B^\lambda} (1 - p^*(\pi^0)) \leq 1 - \Delta < 1. \quad (3.8)$$

Обозначим через $A(\vartheta)$ событие, состоящее в отсутствии оптимальных генотипов до итерации ϑ включительно. С учетом леммы 2.5.3, марковости операторов ЭА и формулы (3.8), для любого s имеем $P\{A(s \cdot (k^* + 1))\} \leq P\{A((s - 1)(k^* + 1))\}(1 - \Delta)$, откуда по индукции заключаем, что

$$P\{A(\vartheta)\} \leq (1 - \Delta)^{\lfloor \vartheta / (k^* + 1) \rfloor}.$$

Тогда с использованием теоремы 3.3.1 о непрерывности вероятностной меры получаем:

$$\begin{aligned} P\{\widehat{\Pi^t} \cap B^* = \emptyset \ \forall t\} &= P\left\{\bigcap_{\vartheta=0}^{\infty} A(\vartheta)\right\} = \\ &= \lim_{\vartheta \rightarrow \infty} P\{A(\vartheta)\} \leq \lim_{\vartheta \rightarrow \infty} (1 - \Delta)^{\lfloor \vartheta/(k^*+1) \rfloor} = 0. \end{aligned}$$

2. В случае, если для любых π, π''

$$\max\{f(x(\xi)) : \xi \in \widehat{\text{Survive}}(\pi, \pi'')\} \geq \max\{f(x(\xi)) : \xi \in \widehat{\pi} \cup \widehat{\pi''}\},$$

после обнаружения оптимального генотипа, в каждой популяции Π^t будет присутствовать такой генотип, и значит, порождение оптимума за конечное число итераций обеспечивает сходимость популяции ЭА к оптимуму п.н. \square

Определение 3.3.3. Оператор вариации $\text{Variate}(\Pi')$ удовлетворяет условию \mathcal{A}'_2 , если существует такое $\epsilon > 0$, что для любых $\Pi' \in B^{\lambda'}, \eta \in B$ и $t \geq 0$

$$P\{\eta \in \widehat{\text{Variate}}(\Pi')\} \geq \epsilon.$$

Замечание 3.3.1. Пусть $B^* \neq \emptyset$ и критерий остановки никогда не выполняется. Тогда при условиях \mathcal{A}'_2 и \mathcal{A}_4 имеет место сходимость популяции ЭА к оптимуму почти наверное.

Доказательство аналогично п.1 теоремы 3.3.2, т.к., полагая $k(\xi^1) = 1$, ввиду \mathcal{A}'_2 имеем $\delta > 0$ для любой $\pi^0 \in B^\lambda$.

Примеры. Предположение $B^* \neq \emptyset$ будем считать выполненным.

1. КГА при $0 < p_m < 1$ обладает оператором вариации со свойством \mathcal{A}'_2 , т.к. при мутации из любого генотипа с ненулевой вероятностью может быть получен любой генотип.

2. Если в КГА $p_m = 0$ или $p_m = 1$, то оператор вариации КГА не удовлетворяет условию \mathcal{A}_2 , и можно привести примеры начальных популяций, начиная с которых КГА не сможет никогда найти некоторые решения.

3. Если в КГА оператор мутации заменить на одноточечную мутацию в случайно выбранном гене (с равномерным распределением), то оператор вариации будет удовлетворять условию \mathcal{A}_2 и будет применим п.1 теоремы о сходимости ЭА.

4. К КГА неприменим п.2 теоремы о сходимости ЭА, т.к. оператор выживания не удовлетворяет условию \mathcal{A}_4 и однажды найденное

оптимальное решение может быть потеряно. Однако, это свойство может быть достаточно легко обеспечено, например, как это делается в ГА с элитой.

5. Популяция $(\mu + \lambda)$ -ES или $(\mu + \lambda)$ -EA с оператором мутации, который выдает генотип из B^* с ненулевой вероятностью (например, при мутации с нормально распределенным шагом), сходится к оптимуму почти наверное, ввиду замечания 3.3.1.

Замечание 3.3.2. Свойства сходимости, полученные в последней теореме (хотя бы в смысле п.1, как в КГА), являются желательными для всякого ЭА. Однако, даже наличие такой сходимости не дает гарантии «надежной работы» алгоритма, т.к. на практике число выполняемых итераций за реальное время может оказаться слишком мало, чтобы вероятность получения оптимума приблизилась к 1.

Как видно из примера 5, даже самый примитивный алгоритм $(1+1)$ -EA с оператором мутации, имеющим равномерное распределение на множестве генотипов, обладает всеми свойствами сходимости в смысле теоремы 3.3.2. Наконец, детерминированный полный перебор генотипов всегда за конечное время находит лучший генотип, а значит, является сходящимся методом (как детерминированный алгоритм).

Из замечания 3.3.2 вытекает необходимость более детального исследования скорости сходимости ЭА к оптимуму или времени первого достижения оптимума с учетом других свойств задачи, например, как в следствии 2.5.1.

3.4. Алгоритмы генетического программирования

Алгоритмы генетического программирования (ГП) были предложены Н.Л.Крамером [35] и развиты далее в работах Дж. Козы [60] и других авторов. Идея ГП заключается в том, что в отличие от ГА, здесь все операции производятся не над строками, а над деревьями. При этом используются операторы, аналогичные селекции, скрещиванию и мутации ГА. С помощью деревьев предлагается кодировать программы для ЭВМ и математические формулы - таким образом можно организовать эволюцию программного кода для решения программистской задачи или поиск подходящей функции в аналитическом виде.

Можно считать, что в ГП фенотипом является программа, представленная как дерево с терминальными (листья дерева) и функциональными элементами (все прочие вершины). Терминальные элементы соответствуют константам, действиям и функциям без аргументов, а функциональные - функциям, использующим аргументы. Например, рассмотрим функцию $x^*3/5-1$. Терминальные элементы здесь: $\{x, 3, 5, 1\}$, функциональные: $\{+, *, /\}$.

Схема ГП аналогична схеме ГА, однако операторы скрещивания и мутации имеют отличия. В операторе скрещивания выбираются случайные поддеревья родительских генотипов и происходит обмен.

При построении начальной популяции и в операторах вариации уделяется внимание глубине, ширине и структуре формируемых деревьев [60, 68]. Например для предотвращения чрезмерного разрастания дерева в высоту вводится ограничение на максимальное количество функциональных элементов в дереве или максимальную его глубину. Если при скрещивании двух деревьев один из потомков не удовлетворяет такому ограничению, вместо него копируется родительское дерево.

При действии оператора мутации случайно удаляется часть дерева и вместо нее генерируется новое поддерево случайным образом. В некоторых случаях мутация сводится к случайному изменению терминальных элементов (тогда для каждого типа элементов должно быть задано распределение вероятностей, определяющее случайные изменения).

ГП может рассматриваться как частный случай ГА с изменяющейся длиной кодировки и специфическими операторами кроссинговера и мутации, поэтому для них можно применять теорему о сходимости и доказывать аналоги теоремы о схемах.

Алгоритмы ГП используются для решения задач построения нелинейных моделей (математических выражений, функций, алгоритмов, программ) на основе заданных экспериментальных данных, множества переменных, базовых функций и операций (например для предсказания уровня воды в водохранилище). Также алгоритмы ГП применяются в синтезе решающих деревьев и в некоторых других методах машинного обучения.

Работоспособность алгоритма ГП существенно зависит от выбора оператора кроссинговера, где родительские решения (деревья) обмениваются своими признаками. Наиболее распространеными вариантами оператора кроссинговера являются одноточечный кроссинговер [42] и равномерный кроссинговер [68]. При одноточечном кроссинговере в родительских решениях выбираются узлы и осуществляется обмен поддеревьями с корневыми вершинами в выбранных узлах. Равномерный кроссинговер характеризуется тем, что значение каждого из узлов потомка наследуется из соответствующих значений в родительских деревьях с заданной вероятностью. Известны различные вариации указанных операторов кроссинговера, где учитываются координаты и значения вершин поддеревьев, их размеры и другие свойства (см., например, [62, 64]).

Литература

1. Алтухов Ю. П. Генетические процессы в популяциях. – М.: Академкнига, 2003. – 431 с.
2. Береснев В.Л., Гимади Э.Х., Деменьтьев В.Т. Экстремальные задачи стандартизации. - Новосибирск: Наука, 1978. - 385 с.
3. Борисовский П.А., Еремеев А.В. Генетический алгоритм для задачи о вершинном покрытии графа // Межвузовский сборник научных трудов «Математика и информатика: наука и образование», Вып. 7. Омск: ОмГПУ, 2008. - С.49-54.
4. П. А. Борисовский, А. В. Еремеев, “О сравнении некоторых эволюционных алгоритмов”, Автомат. и телемех., 2004, № 3, с. 3–9.
5. Боровков А.А. Курс теории вероятностей. - М.: Наука, 1972.
6. Гнеденко Б. В. Курс теории вероятностей. – М.: Наука, 1988. – 451 с.
7. Гончаров Е.Н., Кочетов Ю.А. Вероятностный поиск с запретами для дискретных задач безусловной оптимизации. // Дискретный анализ и исследование операций. Серия 2, 2002, Т. 9, № 2 с. 13-30. <http://math.nsc.ru/LBRT/k5/Kochetov/koch-gon.ps>
8. Гэри М., Джонсон Д. Вычислительные машины и труднорешаемые задачи. -М.: Мир, 1982. - 416 с.
9. Еремеев А.В. Генетический алгоритм для задачи о покрытии. Дискретный анализ и исследование операций. Сер. 2. 2000. Т. 7, N 1. С.47-60.
10. Еремеев А.В. Генетические алгоритмы и оптимизация. Учебное пособие. Омск, ОмГУ, 2008.
11. Еремеев А. В. Исследование эволюционных методов решения задач комбинаторной оптимизации. Диссертация на соискание уч. ст. д.ф.-м.н. по специальности 05.13.17 - «Теоретические основы информатики», 2013, Омск, 300 с. <http://iitam.omsk.net.ru/eremeev/PAPERS.MAT/eremeev.pdf>
12. А. М. Зубков, Н. Н. Попов. Отношение частичного порядка, порожденное распределениями числа занятых ячеек Матем. заметки, 1982, том 32, выпуск 1, с. 97-102.

13. Ивахненко А. Г. Системы эвристической самоорганизации в технической кибернетике. – Киев: Техника, 1971. – 371 с.
14. Карманов В.Г. Математическое программирование. - М.: Наука, 1986.
15. Кемени Дж., Снелл Дж. Конечные цепи Маркова. – М.: Наука, 1970. – 272 с.
16. Китаев А., Шень А., Вялый М. Классические и квантовые вычисления. - М.: МЦНМО, ЧеРо, 1999. - 192 с.
17. Кочетов Ю.А. Вероятностные методы локального поиска для задач дискретной оптимизации // Дискретная математика и ее приложения: Сборник лекций молодежных научных школ по дискретной математике и ее приложениям. – М.: Изд-во центра прикладных исследований при механико-математическом факультете МГУ, 2001. – С 84-117.// <http://math.nsc.ru/LBRT/k5/Kochetov/publ-rus.html>
18. Малютина Э.Э. Разработка и применение генетических алгоритмов для анализа поведения сложных динамических систем. Дис. канд. физ.-мат. наук. - М., 2001. - 120 с.
19. *Пападимитриу Х., Стайглиц К.* Комбинаторная оптимизация. Алгоритмы и сложность. – М.: Мир, 1985.
20. Растрогин Л.А. Статистические методы поиска. - М.: Наука, 1968. - 376 с.
21. Реймерс Н.Ф. Популярный биологический словарь. - М.: Наука, 1990.
22. Рутковская Д., Пилиньский М., Рутковский Л. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы. – М.: Горячая линия – Телеком, 2006.
23. А.В. Спиров, А.В. Еремеев. Модульность в биологической эволюции и эволюционных вычислениях. Успехи современной биологии. 139 (6), 2019, с. 523-539.
24. Фогель Л., Оуэнс А., Уолш М. Искусственный интеллект и эволюционное моделирование. – М.: Мир, 1969. – 230 с.
25. Aarts E. H. L., Korst J. H. M., Laarhoven van P. J. M. Simulated annealing // Local search in combinatorial optimization / ed. by E. Aarts, J.K.Lenstra. Chichester: Wiley, 1997. P. 91–120.
26. Aggarwal C.C., Orlin J.B., Tai R.P. An Optimized Crossover for Maximum Independent Set // Operations Research. - 1997. - Vol.45. - P.225-234.

27. Altenberg, L. (1995). The schema theorem and Price's theorem. In D. Whitley and M. D. Vose (Eds.), *Foundations of Genetic Algorithms 3*, pp. 23–49. San Mateo, CA: Morgan Kaufmann.
28. Baker, J. E. (1987). Reducing bias and inefficiency in the selection algorithm. Proceedings of the Second International Conference on Genetic Algorithms, 14-21.
29. Balas E., Niehaus W. Optimized Crossover-Based Genetic Algorithms for the Maximum Cardinality and Maximum Weight Clique Problems // Journ. of Heuristics. - 1998. - Vol. 4, N 4, - P.107-122.
30. Barahona F.: On the computational complexity of Ising spin glass models. Journ. of Physics A, Mathematical and General. – 1982. – Vol. 15. pp. 3241–3253
31. Beasley J.E., Chu P.C. A Genetic Algorithm for the Set Covering Problem // European J. Oper. Res. – 1996. – Vol. 94, N 2. - P.394-404.
32. Borisovsky P. A., Eremeev A. V. Comparing Evolutionary Algorithms to the (1+1)-EA. Theoretical Computer Science, 2008. V. 403, N 1, – PP. 33-41.
33. Bovet D.P., Crescenzi P. Introduction to the theory of complexity. – New York: Prentice-Hall, 1993. – 290 p.
34. Cotta, C., Troya, J.M.: Genetic Forma Recombination in Permutation Flowshop Problems. Evolutionary Computation **6** (1), 25–44 (1998)
35. Cramer N.L. A representation for the adaptive generation of simple sequential programs // Proc. of Intern. Conf. on Genetic Algorithms and Their Applications (July 24-26, 1985, Pittsburgh, PA). 1985. pp 183-187.
36. Crooks G.E., Hon G., Chandonia J.-M., and Brenner S.E. WebLogo: A sequence logo generator // Genome Res. – 2004. – Vol. 14. pp. 1188-1190.
37. Eiben A.E., Aarts E.H.L. and van Hee K. M. Global convergence of genetic algorithms: A Markov chain analysis // In H.P. Schwefel and R. Manner (editors) Parallel Problem Solving from Nature. – 1991. Springer. – Berlin and Heidelberg. – P. 4-12.
38. D.-C. Dang, A.V. Eremeev, P.K. Lehre. Runtime Analysis of Fitness-Proportionate Selection on Linear Functions. arXiv:1908.08686v1 [cs.NE] <https://arxiv.org/abs/1908.08686>
39. D. -C. Dang et al., Escaping local optima using crossover with emergent diversity. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, vol. 22, no. 3, pp. 484-497, June 2018.

40. Davis L. Job Shop Scheduling with Genetic Algorithms. In: Proceedings of International Conference on Genetic Algorithms and Their Applications, J.J. Grefenstette (ed.), Lawrence Erlbaum Associates, Hillsdale, NJ, 1985. pp. 136-140.
41. Dembski W.A. The chance of the gaps. In: Neil Manson, ed., God and Design: The Teleological Argument and Modern Science (London: Routledge, 2002), 251-274.
42. Dhaeseleer P. Context preserving crossover in genetic programming // Proceedings of the First IEEE Conference on Evolutionary Computation. IEEE World Congress on Computational Intelligence. – 1994. – Vol. 1. – P. 256-261.
43. Benjamin Doerr, Daniel Johannsen, Timo Kötzing, Frank Neumann, Madeleine Theile. More effective crossover operators for the all-pairs shortest path problem. *Theoretical Computer Science*. 2013. Vol. 471. pp. 12-26.
44. Doerr, B., Doerr, C. (2020). Theory of Parameter Control for Discrete Black-Box Optimization: Provable Performance Gains Through Dynamic Parameter Choices. In: Doerr, B., Neumann, F. (eds) *Theory of Evolutionary Computation*. Natural Computing Series. Springer, Cham. pp 271–321.
45. Dolgui A., Eremeev A., Kolokolov A., Sigaev V. A Genetic Algorithm for the Allocation of Buffer Storage Capacities in a Production Line with Unreliable Machines. *Journal of Mathematical Modelling and Algorithms*. 1 (2), 2002, pp. 89-104.
46. A.E. Eiben, E.H.L. Aarts, and K.M. van Hee. Global convergence of genetic algorithms: A Markov chain analysis. In H.-P. Schwefel and R. Männer, editors, *Parallel problem Solving from Nature*, pp. 4-12. Springer, Berlin and Heidelberg, 1991.
47. A.V. Eremeev, “On proportions of fit individuals in population of mutation-based evolutionary algorithm with tournament selection”, *Evolutionary Computation*, vol. 26(2), pp. 269-297, 2018.
48. Eremeev A. V., Kolokolov A. A. On some genetic and L-class enumeration algorithms in integer programming // Proc. of the First International Conference on Evolutionary Computation and its Applications. – Moscow: Russian Academy of Sciences, 1996. – P. 297–303.
49. Eremeev, A.V., Kovalenko, J.V.: Experimental evaluation of two approaches to optimal recombination for permutation problems. In: *Evolutionary Computation in Combinatorial Optimization*, LNCS, vol. 9595, pp. 138–153. Springer International Publishing, Cham (2016)

50. Eremeev A.V., Reeves C.R. Evolutionary algorithms in discrete optimisation. Book of abstracts of Discrete Optimization and Operations Research Conference (DAOR-2002). Novosibirsk. pp.40-45.
51. Faizullin R.T. An approximations for genetic algorithms and star's pattern. In Proc. of The First Online Workshop on Soft Computing, Nagoya, 1996. – P. 77-79.
52. Flemming H.C., Wuertz S. Bacteria and archaea on Earth and their abundance in biofilms. *Nature Reviews. Microbiology*. 17 (4). pp. 247–260.
53. Goldberg D.E., Lingle R. Alleles, Loci and the Traveling Salesman Problem. In: Proceedings of International Conference on Genetic Algorithms and Their Applications, J.J. Grefenstette (ed.), Lawrence Erlbaum Associates, Hillsdale, NJ, 1985. pp. 154-159.
54. Goldberg D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. - Reading: Addison Wesley, 1989. - 412 p.
55. Goldberg D., Thierens D. Elitist recombination: an integrated selection recombination GA // Proc. first IEEE World Congress on Computational Intelligence. – Piscataway, New Jersey: IEEE Service Center, 1994. Vol. 1. P. 508 – 512.
56. Goldberg D. E. and Deb K. A comparative analysis of selection schemes used in genetic algorithms. In *Foundations of Genetic Algorithms*, pages 69–93. Morgan Kaufmann, 1991.
57. E.Goncharov and Yu.Kochetov, Behavior of a Probabilistic Tabu Search Algorithm for the Multi Stage Uncapacitated Facility Location Problem // Proceedings INFORMS-KORMS, Seoul 2000. <http://math.nsc.ru/LBRT/k5/Kochetov/seoul.doc>
58. Halliday D. and Resnick R. *Fundamentals of Physics*, 3rd ed. extended. New York: Wiley, 1988, 544.
59. Holland J.H. 1975. *Adaptation in Natural and Artificial systems*, University of Michigan Press, Ann Arbor, MI.
60. Koza J.R. *Genetic programming*. MIT Press, 1992.
61. Lehre P.K., Witt C. Black-Box Search by Unbiased Variation. *Algorithmica* (2012) Vol. 64, pp. 623–642.
62. Langdon W.B. Size fair and homologous tree crossovers for tree genetic programming // *Genetic Programming and Evolvable Machines*. – 2000. – Vol. 1. P. 95-119.

63. Maulik U., Bandyopadhyay S. Genetic Algorithm-Based Clustering Technique // Pattern Recognition. 2000. Vol. 33, No. 9. P. 1455–1465.
64. Moraglio A., Krawiec K., Johnson C.G. Geometric semantic genetic programming // Proceedings of International Conference on Parallel Problem Solving from Nature – PPSN XII. – 2012. – LNCS, vol. 7491. – P. 21-31.
65. Nix A., Vose M. D. Modeling genetic algorithms with Markov chains // Annals of Math. and Artificial Intelligence. – 1992. – Vol. 5. – P. 79–88.
66. P. S. Oliveto and C. Witt, On the runtime analysis of the simple genetic algorithm, *Theor. Comput. Sci.*, vol. 545, pp. 2–19, 2014.
67. P. S. Oliveto and C. Witt, “Improved time complexity analysis of the simple genetic algorithm,” *Theor. Comput. Sci.*, vol. 605, pp. 21–41, 2015.
68. Poli R., Page J. Solving high-order Boolean parity problems with smooth uniform crossover, sub-machine code GP and demes // Genetic Programming and Evolvable Machines. – 2000. Vol. 1. P. 37-56.
69. Pirlot M. General local search methods. *EJOR*, v. 92, 1996, pp. 493-511.
70. Pradella S., Hans A., Sproer C., Reichenbach H., Gerth K., Beyer S. Characterisation, genome size and genetic manipulation of the myxobacterium Sorangium cellulosum So ce56. *Archives of Microbiology*. 178 (6). pp. 484–492.
71. Rechenberg I. 1973. *Evolutionsstrategie:Optimerung Technischer Systeme nach Prinzipen der Biologischen Evolution*, Formann-Holzboog Verlag, Stuttgart.
72. Radcliffe N. J. Forma analysis and random respectful recombination // Proc. of the Fourth International Conference on Genetic Algorithms. – San Francisco, CA: Morgan Kaufmann, 1991. – P. 31–38.
73. Radcliffe, N. J., The Algebra of Genetic Algorithms, *Annals of Maths and Artificial Intelligence*, 10, 1994.
74. Radcliffe, N.J., Surry, P.D., Fitness Variance of Formae and Performance Prediction, in “Foundations of Genetic Algorithms III”, (Ed: L.D. Whitley and M.D. Vose, Morgan Kaufmann), 1994.
75. Rastrigin L.A. 1996. Random Search in Evolutionary Computations. In Proceedings of the First International Conference on Evolutionary Computation and Its Applications, Moscow, 135-142.

76. Reeves C.R. Genetic Algorithms for the Operations Researcher// INFORMS Journal on Computing. - 1997. - Vol. 9, N 3. - P.231-250.
77. Reeves C.R. Genetic Algorithms: No panacea, but a Valuable Tool for the Operations Researcher. INFORMS Journal on Computing. Vol. 9, N.3, 263-265.
78. Reeves C. R., Rowe J. E. Genetic algorithms: principles and perspectives. – Norwell, MA: Kluwer Acad. Pbs., 2002. – 333 p.
79. Rudolph, G. "Finite Markov Chain Results in Evolutionary Computation: A Tour d'Horizon"// Fundamenta Informaticae. Vol. 35. N 1-4. 1998. -pp. 67-89.
80. Smith A. E. and Tate D. M. Genetic optimization using a penalty function. In Forrest S. (ed.) Proceedings of the 5th International Conference on Genetic Algorithms. Morgan Kaufmann Publishers, San Mateo, CA, 1993., pages 499-505.
81. Vose M. D. Modeling simple genetic algorithms // Evolutionary Comput. – 1995. – Vol. 3. – N 4. – P. 453–472.
82. Vose M. D., Wright A. H. Stability of vertex fixed points and applications // Foundations of Genetic Algorithms 3 / Ed. by Whitley D., Vose M. – San Mateo, CA: Morgan Kaufmann, 1995. – P. 103–114.