

ТЕОРЕТИЧНИЙ ПІДХІД ДО РОЗРОБКИ ТА АНАЛІЗУ ГЕНЕТИЧНИХ АЛГОРИТМІВ

У статті детально проаналізовано основні теоретичні методи розробки та аналізу генетичних алгоритмів, зокрема використання теореми схем, гіпотези будівельних блоків, розсіяного пошуку (scatter search). Охарактеризовано використання різних методів відбору, марківських ланцюгів та інших статистичних методів. Дано оцінку іншим цікавим роботам, присвяченим аналізу збіжності генетичних алгоритмів, зокрема за аналогією з методом відпалу.

Ключові слова: генетичний алгоритм, схема, корисна схема, будівельний блок.

Вступ

Робота генетичного алгоритму (ГА) скеровується багатьма параметрами, і залежно від уточнення значень цих параметрів можна будувати різні моделі ГА. Традиційно виділяють два основних підходи до розробки та аналізу ГА: теоретичний та експериментальний [2]. *Теоретичний підхід* полягає в розробці точних математичних моделей ГА. Зауважимо, що точні математичні моделі ГА часто виявляються складнішими, ніж самі ГА; до того ж, розробка таких моделей у багатьох випадках не призводить до розробки ефективніших моделей ГА. Цим пояснюється те, що теоретичний підхід використовується головним чином для аналізу роботи ГА. За *експериментального підходу* нові моделі ГА розробляються ітеративно, шляхом поступового налаштування параметрів ГА, тестування та реконструкції. Можна ще виділити *проміжний варіант* між цими двома крайніми випадками; цей варіант передбачає комбінування інтуїції, грубого аналізу та вдумливого експериментування [1].

У цій статті проаналізуємо основи теоретичного підходу.

Теорема схем

Для пояснення високої ефективності пошукового процесу, що здійснюється ГА, Дж. Голланд запропонував теорему схем та концепцію неявної вибірки ГА гіперплощин у пошуковому просторі [17; 28]. Наголосимо, що ідеї Дж. Голланда слід розглядати в розрізі простого ГА. *Схемою (schema)*, найчастіше позначається H , називається шаблон, що описує підмножину хромосом популяції з однаковими значеннями відповідних генів. Конкретніше, за бінарного кодування схемою називається рядок, що складається зі знаків

алфавіту $\{0,1,*\}$, де $*$ – універсальний символ (*wild-card*, “*don't care*”); довжина рядка дорівнює довжині хромосом популяції.

Кажуть, що *хромосома належить до даної схеми (хромосома відповідає схемі, хромосома представляє схему, хромосома є прикладом схеми, схема містить хромосому, схема представляє хромосому)*, якщо для кожної позиції $j=1,2,\dots,l$, де l – довжина хромосоми, символ, що знаходиться в j -ій позиції хромосоми, відповідає символу, що знаходиться в j -ій позиції схеми. Вважається, що символу 0 відповідає символ 0, символу 1 відповідає символ 1, а символу $*$ відповідає як 0, так і 1.

Очевидно, що схема, яка містить хоча б один універсальний символ, представляє не одну хромосому, а множину хромосом. Конкретніше, кожна схема представляє 2^m хромосом, де m – кількість універсальних символів (символів $*$) у схемі. Наприклад, схема $10**1$ представляє множину з чотирьох ($2^2=4$) хромосом: $\{10001; 10011; 10101; 10111\}$.

Поняття схеми дає компактний та потужний спосіб вираження подібності між рядками-хромосомами. Можна сказати, що неявно схеми містять інформацію про різноманітність особин популяції. Оскільки схеми представляють підмножини рядків, що збігаються за визначеними (0 або 1) бітами, іноді їх називають *підмножинами подібності (similarity subsets)*.

Кожна хромосома належить до 2^l схем, де l – довжина хромосоми. Дійсно, в кожній позиції схеми може стояти або справжнє значення, що знаходиться в хромосомі у цій позиції (0 чи 1), або $*$. Тому популяція з N особин представляє від 2^l до $N \cdot 2^l$ схем (точне значення залежить від ступеня схожості індивідів популяції). Неважко побачити, що навіть у невеличкій популяції може бути представлена значна кількість схем. Можна припустити, що

явна обробка незначної кількості хромосом-рядків викликає неявну обробку значної кількості схем, представлених у популяції, та, отже, обробку значної кількості інформації про важливі подібності хромосом популяції.

Порядком (order) схеми, позначається o , називається кількість визначених бітів (0 або 1) у схемі. Очевидно, $o(H) \in [0, l]$, $o(H)$ – ціле. Легко побачити, що $o(H) = l - m$, де l – довжина схеми, m – кількість символів * в схемі. Наприклад, $o(10**1) = 5 - 2 = 3$, $o(**01**11) = 8 - 4 = 4$, $o(****) = 4 - 4 = 0$, $o(1010) = 4 - 0 = 4$.

Визначальною довжиною (defining length) схеми, позначається δ (іноді d або σ), називається відстань між першим та останнім визначеними бітами в схемі. Очевидно, $\delta(H) \in [0, l - 1]$, $\delta(H)$ – ціле. Наприклад, $\delta(10**1) = 5 - 1 = 4$, $\delta(**01**11) = 8 - 3 = 5$, $\delta(***1*) = 3 - 3 = 0$. Можна сказати, що визначальна довжина схеми відображає концентрацію інформації в ній.

Коефіцієнтом пристосованості, або просто *пристосованістю (fitness)*, схеми називається середнє значення пристосованості хромосом популяції, що належать до цієї схеми. Нехай $M(H)$ – множина хромосом популяції, що належать до схеми H , а $m(H) = |M(H)|$ – кількість таких хромосом. Пристосованість схеми H визначається як

$$f(H) = \frac{\sum_{X \in M(H)} f(X)}{m(H)}.$$

Очевидно, значення пристосованості залежить від поточної популяції та змінюється з часом.

Геометричною інтерпретацією схеми є гіперплощина в просторі пошуку; тому схеми часто позначають літерою H – скорочення від англійського *Hyperplane* – гіперплощина. Всього існує 2^k схем порядку k з однаковими фіксованими позиціями. Наприклад, існує $2^1 = 2$ схеми порядку 1 з фіксованою першою позицією: схема $1*...*$ та схема $0*...*$. За допомогою схем порядку k з однаковими фіксованими позиціями можна задати розбиття простору пошуку на 2^k гіперплощини, або на 2^k класи, причому хромосоми, що є прикладами заданої схеми-гіперплощини, належать до відповідного цієї гіперплощини класу. Для представлення схемного розбиття часто користуються шаблонами – рядками, в яких фіксовані в схемах позиції зображено метасимволами F. Таким чином, під *схемним розбиттям (schema partition)* простору пошуку розуміють множину схем з визначеними бітами в заданій фіксованій множині позицій. Зауважимо, що шаблон із суцільних символів * відповідає усьому простору.

Розглянемо приклад проведення схемного розбиття. Нехай стоїть задача максимізації одновимірної функції $f(x)$ на інтервалі $[0, 255]$, x – ціле. Для кодування аргументу функції використовуються 8-бітові рядки (адже для кодування необхідних 256 значень функції достатньо 8 бітів: $2^8 = 256$). Проведемо схемне розбиття простору пошуку за допомогою шаблону F*****. З рис. 1 видно, що гіперплощина 0***** задає інтервал $[0, 127]$, а гіперплощина 1***** – інтервал $[128, 255]$. Аналогічно,

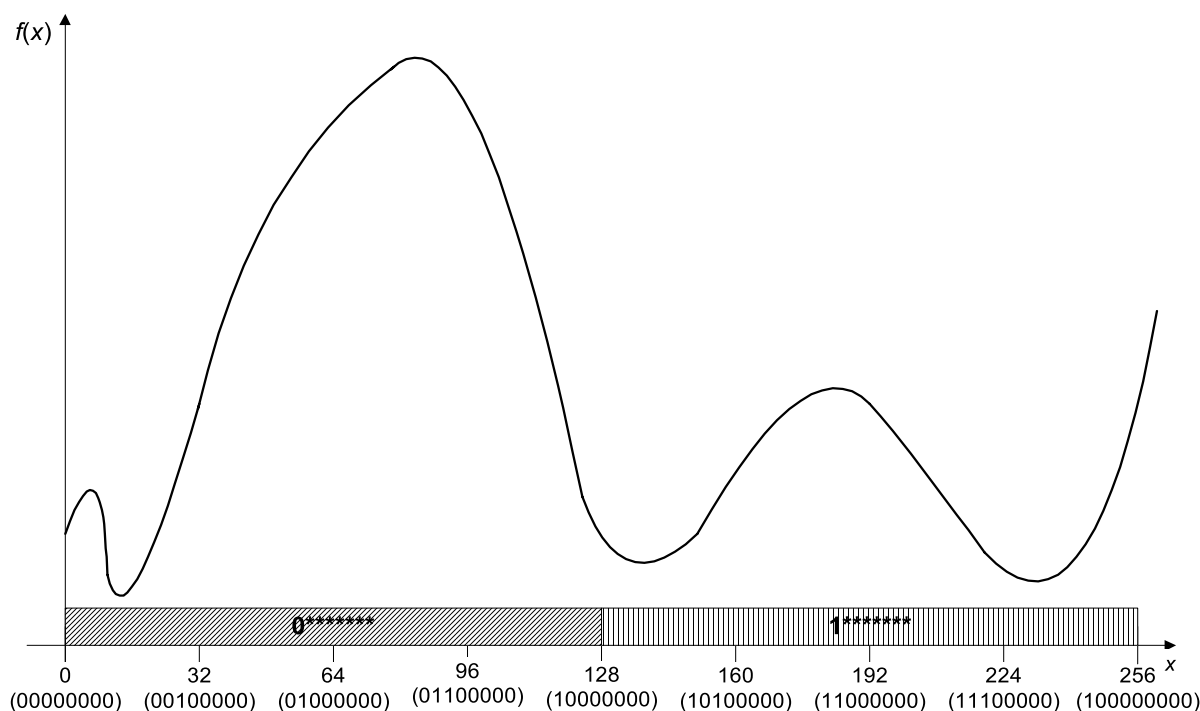


Рис. 1. Функція та схемне розбиття за шаблоном F*****

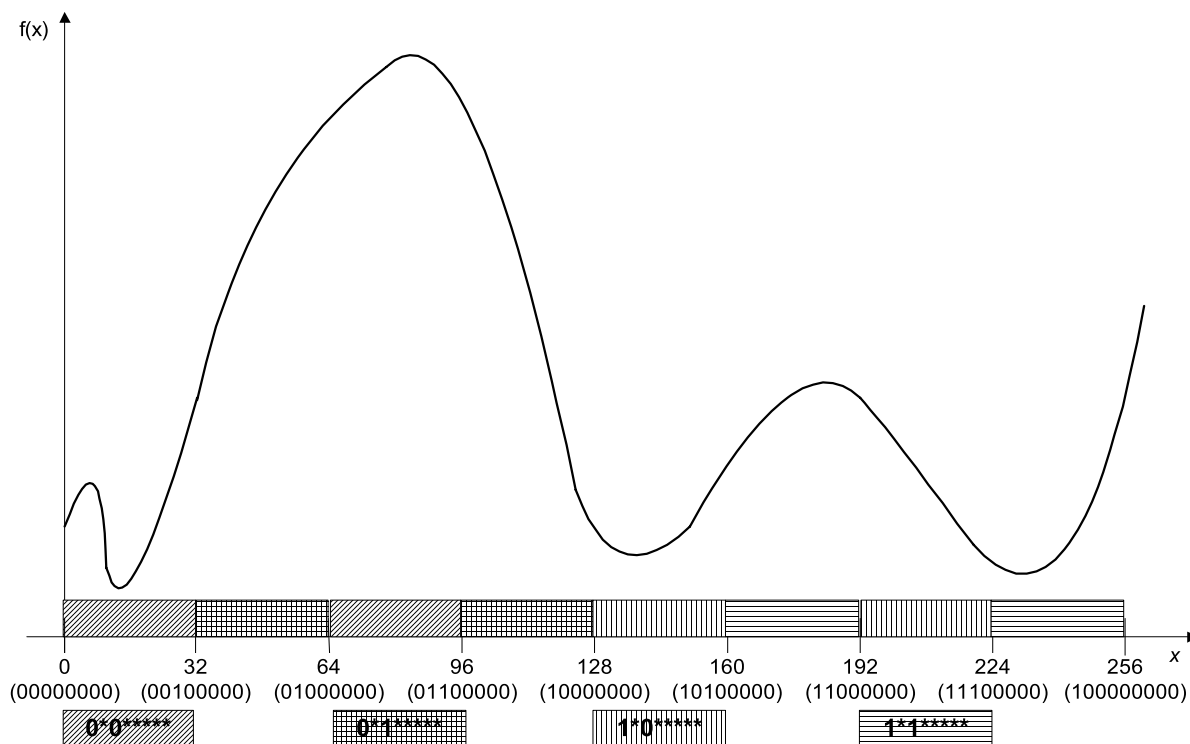


Рис. 2. Функція та схемне розбиття за шаблоном F*F*****

шаблон F*F***** дозволяє провести розбиття простору пошуку на 4 класи, що представлено гіперплощинами 0*0*****, 0*1*****, 1*0***** та 1*1***** (рис. 2).

Не всі схеми в заданому схемному розбитті мають однаковий коефіцієнт пристосованості. Наприклад, у прикладі з рис. 1 коефіцієнт пристосованості схеми 0*****, очевидно, є вищим за коефіцієнт пристосованості схеми 1*****. Тому бажано спрямувати пошуковий процес до відповідного інтервалу ([0, 127] в прикладі) простору параметрів.

Схеми з високим коефіцієнтом пристосованості, короткою визначальною довжиною та низьким порядком називаються *корисними схемами* (useful schemata) [27], або *будівельними блоками* (building blocks, BBs) [17]. У прикладі, що ілюструється на рис. 1, схема 0*****, очевидно, є корисною. Фактично корисні схеми представляють подібності між рядками, які є суттєвими з точки зору ГА для розв'язування конкретної задачі.

Теорема схем (основна теорема ГА, *schemata theorem, fundamental theorem of genetic algorithms*). Простий ГА збільшує кількість корисних схем експоненційно. Схеми з нижчою за середню пристосованістю розпадаються з тією ж швидкістю.

Зазначимо, що існують варіанти теореми схем для інших класів ГА.

Гіпотеза будівельних блоків

Сама по собі теорема схем не пояснює високої ефективності пошукового процесу, що здійснюється ГА. Для пояснення пошукових здібностей останніх висунуто гіпотезу будівельних блоків [15; 17].

У доведенні теореми схем показано, що до батьківського пулу частіше обираються схеми з високим коефіцієнтом пристосованості, кросинг-овер рідше руйнує схеми з короткою визначальною довжиною, а мутація рідше руйнує схеми низького порядку. Тому схеми з високою пристосованістю, короткою визначальною довжиною та низьким порядком (будівельні блоки) мають більше шансів переходити з покоління в покоління та їхня кількість в популяції поступово зростає. Гіпотеза будівельних блоків ґрунтується на теоремі схем, акцентуючи увагу на тому, що ГА досліджують простір пошуку за допомогою будівельних блоків, які в подальшому беруть участь в обміні інформацією при схрещуванні.

Гіпотеза будівельних блоків (building block hypothesis, BBH). ГА намагається досягти близького до оптимального результату за рахунок комбінування будівельних блоків.

Ця гіпотеза досі не доведена, але вона в принципі пояснює пошуковий механізм ГА. В процесі роботи ГА збільшується кількість будівельних блоків, що містяться в популяції. Комбінування

хромосом, що є прикладами схем з високим коефіцієнтом пристосованості (будівельних блоків), призводить до появи нових хромосом, що є прикладами схем вищого порядку з іще вищим коефіцієнтом пристосованості. Отже, рекомбінація та експоненційне зростання кількості будівельних блоків призводить до формування будівельних блоків вищого порядку з дедалі вищим коефіцієнтом пристосованості. Таким чином, ГА спрямовує пошуковий процес до ділянок простору з високим коефіцієнтом пристосованості.

Для ілюстрації сказаного розглянемо задачу максимізації одновимірної функції $f(x)$, графік якої подано на рис. 3; на цьому рисунку показано також схемне розбиття простору пошуку за допомогою шаблону FFF*****. Нескладно бачити, що всі локальні максимуми наведеної функції є прикладами схеми **0*****, а локальні мінімуми – схеми **1*****. Отже, після відбору до батьківського пулу більшість особин представлятиме схему **0*****. Ліва половина графіка функції в середньому є нижчою за праву половину, отже, після відбору до батьківського пулу більшість особин представлятиме схему 1*****, а не схему 0*****. Таким чином, більшість представників батьківського пулу будуть представниками схеми **0***** та/або схеми 1*****. Комбінування схем **0***** та 1***** породжує представників схеми 1*0*****. Далі вибір між блоками 100***** та 110*****, очевидно, відбудеться на користь другого. Отже, будівельні блоки з'єдналися в будівельні блоки вищого порядку, спрямовуючи пошуковий процес до області глобального максимуму.

Теорема схем та гіпотеза будівельних блоків описують низку важливих аспектів теорії ГА. Зокрема, в припущенні істинності гіпотези першочергового значення набуває проблема кодування, оскільки кодування має реалізувати концепцію будівельних блоків. Зрозумілішим також стає вплив параметра розміру популяції N на ефективність роботи алгоритму: за малих значень N кількість схем, що містяться в популяції, може виявитися недостатньою. Відзначимо, що зі збільшенням порядку схем очікувана кількість прикладів різних схем відповідного порядку в популяції фіксованого розміру суттєво зменшується.

Зрозуміло, що при налаштуванні параметрів ГА необхідно віднайти баланс між контролем над збіжністю та перевагами від різноманітності популяції. Теорема схем описує зростання кількості корисних схем та втрати схем менш корисних. Легко бачити, що збільшення значень коефіцієнтів застосування операторів кросингверу та мутації (p_c, p_m), а також зменшення тиску відбору призводить до уповільнення поширення представників пристосованих схем, але при цьому відбувається інтенсивний пошук нових схем. Водночас зменшення значень p_c, p_m , а також збільшення тиску відбору призводить до інтенсивного використання знайдених алгоритмом корисних схем, але при цьому менше уваги приділяється пошуку нових схем. ГА має підтримувати тонку рівновагу між необхідністю використання знайдених корисних схем та необхідністю пошуку нових схем. Ця проблема відома як проблема балансу між дослідженням та використанням (*balance between exploration and exploitation*): алгоритм

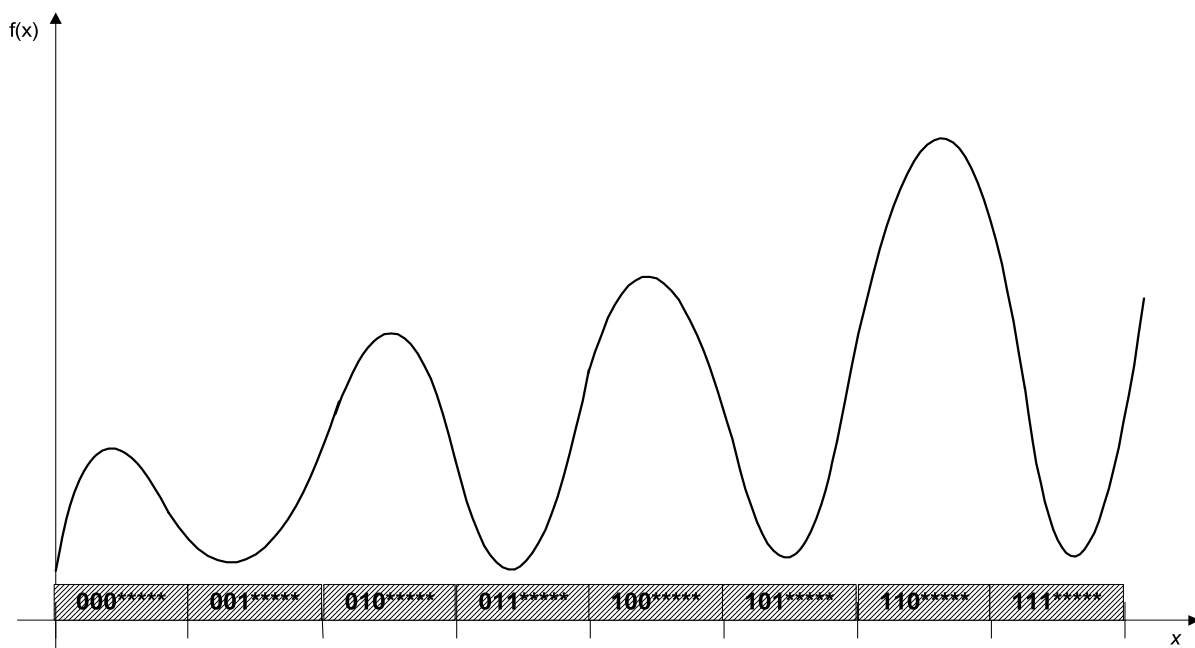


Рис. 3. Функція та схемне розбиття за шаблоном FFF*****

повинен досліджувати нові можливості (інакше може відбутися передчасна збіжність до неоптимального розв'язку), але водночас використовувати минулий досвід як провідник в майбутній поведінці.

Висока ефективність пошукового процесу ГА пояснюється тим, що він обробляє значну кількість різних схем – значно більшу, ніж кількість особин у популяції; кожна така схема, в свою чергу, представляє множину з $2^{o(H)}$ подібних хромосом. Можна сказати, що явно ГА обробляє рядки-хромосоми, а неявно – схеми-гіперплощини, які представляють подібності між рядками. ГА не здійснює повного перебору всіх точок простору пошуку, натомість він проводить вибірку значної кількості гіперплощин в ділянках з високою пристосованістю. Дійсно, оскільки один рядок водночас є прикладом багатьох схем (зокрема, прикладом 2^l схем, l – довжина хромосоми), то при відборі одного рядка насправді обирається множина схем. Дж. Голланд оцінив, що під час явної обробки n рядків у кожному поколінні ГА паралельно обробляє $O(n^3)$ корисних схем. Це явище він назвав *неявним паралелізмом* (*implicit parallelism*) [27]. Наявність неявного паралелізму пояснює, чому великі популяції, як правило, локалізують розв'язок за поліноміально швидший час порівнянню з маленькими популяціями. Зауважимо, що алгоритм не працює зі схемами явно; схеми використовуються розробниками для теоретичного аналізу та побудови нових, ефективніших класів ГА. Мусимо пам'ятати, що корисні схеми не завжди приводять ГА до збіжності в околі глобального оптимуму. Зокрема, при оптимізації оманливих функцій (функцій з привабливими локальними оптимумами [18; 19]) популяція з високою ймовірністю може адаптуватися в околі оманливого оптимуму. В припущенні, що оманливі функції є складними для ГА, в багатьох теоретичних роботах розглядається гіпотеза статичних будівельних блоків – сильніша версія гіпотези будівельних блоків.

Надалі пристосованість схеми у розумінні, описаному вище, будемо також називати спостережною пристосованістю схеми (*observed fitness*) називатимемо середнє здоров'я всіх її представників у поточній популяції. *Статичною пристосованістю схеми* (*static fitness*) називатимемо середнє здоров'я всіх представників схеми в усьому просторі пошуку, тобто коефіцієнт пристосованості схеми, обчислений з урахуванням усіх можливих прикладів цієї схеми.

Гіпотеза статичних будівельних блоків (*static building block hypothesis, SBBH*). Нехай дано групу схем низького порядку та короткої

визначальної довжини. Очікується, що ГА збігатиметься до тієї схеми з цієї групи, яка має найкращий статичний коефіцієнт пристосованості («очікуваний переможець»).

Насправді оманливість не є ані необхідною, ані достатньою умовою для того, щоб викликати труднощі в ГА. Існують як приклади оманливих функцій, які є складними для ГА, так і приклади оманливих функцій, для яких ГА легко знаходить розв'язок. Гіпотеза статичних будівельних блоків пояснює, чому оманливі функції є складними для ГА, але вона не дає пояснень, чому і за яких умов ГА може знайти правильну відповідь у випадку оманливої функції. Головною причиною, через яку гіпотеза статичних будівельних блоків може хибити, є залежність між схемами та, як наслідок, неможливість адекватно оцінити статичну пристосованість схем. Аналізуючи проблему глибше, Дж. Грефенстіт (J. Grefenstette) виділяє такі дві причини [21].

1) *Паралельна збіжність* (*collateral convergence*). У процесі роботи ГА приклади схем перестають бути рівномірно розподіленими по простору пошуку. Збіжність популяції до однієї схеми може суттєво вплинути на оцінку іншої схеми, яка не має з даною схемою спільних фіксованих позицій. Наприклад, нехай приклади схеми $111*...*$ є високопристосованими; з часом в популяції міститиметься переважна кількість особин – прикладів цієї схеми. Тоді більшість прикладів, зокрема, схеми $***000*...*$, фактично будуть прикладами схеми $111000*...*$; це заважатиме ГА отримати точну оцінку схеми $***000***$.

2) *Висока розпорошеність значень коефіцієнта пристосованості* (*high fitness variance*). У випадку, коли приклади схеми мають високу розпорошеність значень коефіцієнта пристосованості, при збіжності популяції до прикладів схеми, які водночас є прикладами схеми більш високого порядку, ГА може не мати можливості обчислити точну оцінку здоров'я цієї схеми. Проілюструємо наведене.

Нехай функцією пристосованості є функція

$$f(x) = \begin{cases} 2, & \text{якщо } x \text{ є прикладом схеми } 111*...* \\ 1, & \text{якщо } x \text{ є прикладом схеми } 0*...* \\ 0, & \text{інакше} \end{cases}$$

Розпорошеність здоров'я схеми $1*...*$ є досить суттєвою. Легко бачити, що статична пристосованість схем $1*...*$ та $0*...*$ буде такою: $f_s(1*...*) = \frac{1}{2}$,

$f_s(0*...*) = 1$, тобто $f_s(1*...*) < f_s(0*...*)$. В той же час, згідно з теоремою схем, ГА збігатиметься

до найпристосованішої схеми, отже, в популяції ГА з часом домінуватимуть приклади схеми $1^* \dots^*$ у формі прикладів схеми $111^* \dots^*$. Це означає, що для ГА досить складно отримати точну оцінку статичного здоров'я схеми $1^* \dots^*$. Крім того, з часом схема $1^* \dots^*$ отримає більше прикладів, ніж схема $0^* \dots^*$, а її спостережна пристосованість буде вищою за спостережну пристосованість схеми $0^* \dots^*$: $f_o(1^* \dots^*) > f_o(0^* \dots^*)$.

Теорема схем та задача про «дворукого бандита»

Дж. Голланд провів аналогію між вибором схеми в процесі роботи ГА та задачею про «дворукого бандита», добре відомою в теорії прийняття рішень. Зокрема, цю задачу представлено як математичну модель розподілу прикладів схем ГА [27].

«Однорукий бандитом», як відомо, називають гральний автомат, що заводиться однією ручкою («рукою»). «Дворукий бандит» – гральний автомат з двома ручками, причому для різних ручок ймовірність виграшу є різною. Необхідно максимізувати суму виграшу.

Розглянемо задачу про «дворукого бандита» в такій постановці. «Дворукий бандит» – гральний автомат з двома ручками, сконструйований так, що його ручки видають різні суми виграшів. Сума кожного виграшу є випадковою, але середнє значення суми дорівнює m_1 для першої ручки та m_2 для другої ручки з можливими відхиленнями σ_1 та σ_2 , відповідно. Виплата виграшу кожною з ручок не залежить одна від одної, отже, середня сума виграшів не змінюється з часом. Гравець має N монет і не знає, чому дорівнюють m_1 та m_2 . Метою гравця є максимізувати загальну суму свого виграшу. Необхідно знайти відповідь на питання: яку стратегію зрушення ручок слід обрати, щоб максимізувати загальну суму виграшу? Стратегія обирається на основі зібраної в процесі гри інформації. Взагалі, задачу про «дворукого бандита» можна розглядати як приклад проблеми визначення балансу між дослідженням простору можливих розв'язків та використанням вже зібраної інформації.

Одна зі стратегій полягає ось у чому: необхідно зрушити кожну з ручок по n разів, де $2n < N$, а потім $(N-2n)$ разів весь час обирати найкращу ручку. Очікувана втрата за такої стратегії складає

$$L_{\text{min}} = \frac{1}{2} |m_1 - m_2| (N - n p n + n - p n),$$

де $p(n)$ – ймовірність того, що гірша ручка була визначена як краща після проведення гравцем $2n$ спроб.

Було показано [28; 31], що оптимальна кількість зрушень кращої ручки оцінюється величиною $N - n^* \approx e^{cn^*}$, де N – загальна кількість зрушень обох ручок, n^* – оптимальна з точки зору мінімізації втрат кількість зрушень гіршої ручки, $n^* \approx c_1 \ln \left(\frac{c_2 N^2}{\ln(c_3 N^2)} \right)$, c, c_1, c_2, c_3 – додатні кон-

станти. Тому оптимальна кількість зрушень кращої згідно зі спостереженнями ручки $(N - n^*)$ повинна зростати експоненційно пропорційно відносно кількості зрушень гіршої ручки n^* .

Задачу про «дворукого бандита» можна узагальнити на задачу про « k -рукого бандита»; в цьому випадку ресурси поділяються між k ручками. Узагальнюючи описаний вище результат, можна зробити висновок, що при розв'язуванні задачі про « k -рукого бандита» оптимальною є стратегія, за якої кількість зрушень кращих ручок зростає експоненційно пропорційно відносно кількості зрушень гірших ручок з урахуванням їхньої очікуваної переваги.

Проведемо аналогію між задачею про «багаторукого бандита» та ГА:

- 3^l схем у просторі хромосом довжини l можна розглядати як 3^l «рук» «багаторукого бандита»;
- кількість прикладів конкретної схеми – як кількість зрушень ручки, що відповідає цій схемі;
- пристосованість схеми – як виграш, що отримується при зрушенні відповідної ручки.

Враховуючи теорему схем, можна сказати, що ГА адаптує описану вище оптимальну стратегію зрушення ручок. Справді, кількість прикладів кожної схеми в популяції пов'язана з пристосованістю цієї схеми, причому кількість прикладів корисних схем (зрушень кращих ручок) зростає експоненційно з врахуванням значення їхньої пристосованості (виграшу). Можна також розглядати аналогію між задачею про «дворукого бандита» та проблемою вибору одного з двох будівельних блоків, а ГА – як кластер взаємопов'язаних «дворуких бандитів».

Утім, у [22] зазначається, що правильна інтерпретація аналогії між задачею про «дворукого (багаторукого) бандита» та теоремою схем не є такою простою. Справа в тому, що у «дворукого (багаторукого) бандита» кожна ручка представляє незалежну випадкову змінну фіксованого розподілу, отже, ймовірність конкретного виграшу не змінюється з часом. А в ГА різні ручки (схеми) взаємодіють: виграш (пристосованість) однієї схеми може суттєво впливати на виграш

(пристосованість) іншої. Інакше кажучи, в процесі роботи алгоритму відбувається зсув прикладів схем у бік більш пристосованих схем, що може суттєво вплинути на оцінку пристосованості схем ГА. Тобто у ГА приклади схем не є незалежними, що заважає об'єктивній оцінці їхньої статичної пристосованості або реального виграшу.

Вище наведено приклади, коли виграш (пристосованість) схеми $111^* \dots^*$ суттєво впливає на виграш (пристосованість) схеми $1^* \dots^*$ та схеми $***000^* \dots^*$. Ці приклади наочно демонструють той факт, що в ГА приклади схем не є незалежними. А в наведеній аналогії між «багаторуки бандитом» та теоремою схем фактично припускається, що приклади схем є незалежними, тобто статична та спостережна пристосованості схем збігаються.

Таким чином, ГА не грає в « 3^l -рукого бандита» з 3^l можливими схемами-руками. Правильніша інтерпретація полягає в тому, що ГА грає в « 2^k -рукого бандита» в кожному схемному розбитті порядку k . Схеми з одного розбиття відповідають одному шаблону, змагаються між собою та справді є незалежними; найкраща схема зі схемного розбиття отримає експоненційно більшу кількість прикладів порівняно з іншими схемами з того ж розбиття. Слід пам'ятати, що ГА адаптуватиме оптимальну стратегію « 2^k -рукого бандита» тільки в тому випадку, коли здоров'я схем у даному схемному розбитті є рівномірно розподіленим у кожній популяції. З зазначеного вище випливає, що змагання схем розбиття за шаблоном $F^* \dots^*$ у вже наведеному прикладі не відповідає стратегії «багаторукого бандита».

Критика теореми схем

Ефективність пошукового процесу, який здійснюється за рахунок комбінування будівельних блоків, є спірним питанням. У роботі [37] показано, що статична пристосованість схем будь-якого порядку може бути обчислена за поліноміальний час для низки NP-повних задач. Теоретичним наслідком з цього є таке твердження [25; 26].

Твердження. Якщо $P \neq NP$, то точні значення статичної пристосованості схем до певного фіксованого порядку не можуть надати інформації, яку можна було б використати для знаходження розташування глобального оптимуму за поліноміальний час.

Із зазначеного можна зробити висновок, що загалом навіть правильне обчислення пристосованості всіх схем до заданого порядку не

гарантує успіху в знаходженні глобального оптимуму.

З урахуванням теореми схем було проведено спроби визначення типів задач, які можуть створювати проблеми для ГА; прикладом таких задач є оманливі функції. Згодом з'ясувалося, що оманливість не є ані необхідною, ані достатньою умовою для того, щоб викликати труднощі в ГА. Сьогодні більшість дослідників погоджується, що використання будівельних блоків для спрямування пошукового процесу в зону глобального оптимуму є суто евристичним підходом.

На теорему схем часто посилаються в роботах, присвячених теоретичним аспектам ГА. Однак слід визнати, що теорема схем надто спрощено описує поведінку ГА, в зв'язку з чим вона широко критикувалася багатьма дослідниками. Розглянемо деякі аргументи цієї критики.

Пристосованість схеми $f(H)$ та середня пристосованість хромосом популяції \bar{f} не залишаються постійними від покоління до покоління, а змінюються з часом. Більше того, часто ці значення суттєво змінюються вже за кілька перших поколінь. Тому насправді нерівність, яку покладено в основу доведення теореми схем,

$$m(H, t+1) \geq m(H, t) * \underbrace{\frac{f(H)}{\bar{f}}}_1 * \underbrace{(1-p_c * \frac{\delta(H)}{l-1})}_2 * \underbrace{(1-p_m)^{o(H)}}_3 \quad (1)$$

дає адекватну оцінку кількості прикладів схем лише для наступного покоління. Таким чином, оцінка кількості прикладів схеми в популяції через k ітерацій роботи алгоритму, $k > 1$, є хибною.

Теорема схем розглядає різні схеми незалежно одна від одної; такий підхід є виправданим у випадку оцінювання кількості прикладів схем на одне покоління вперед. Утім, зі збільшенням кількості ітерацій залежності, що існують між схемами, стають вкрай важливими. Розглянемо приклад. Нехай у поточній популяції схеми $11^* \dots^*$ та $^*00^* \dots^*$ є корисними схемами. Згідно з теоремою схем, кількість прикладів цих схем збільшиться в наступному поколінні. Але ці схеми конфліктують у 2-му біті. Кажуть, що такі схеми є *несумісними* (*inconsistent*) за другою позицією. Через обмежену кількість особин у популяції збільшення кількості прикладів обох схем тривалий час неможливе. Зазначимо, що задачі з різним ступенем сумісності вивчалися у [24; 44]. Логічно

припустити, що задачі з меншим ступенем несумісності є легшими для розв'язування ГА. У теоремі схем неявно припускається, що рівномірний розподіл схем по популяції дозволяє об'єктивно оцінити їхню статичну пристосованість на основі обчислення коефіцієнтів пристосованості тільки частини прикладів цієї схеми.

У випадку, коли приклади схеми є рівномірно розподіленими по простору пошуку, ймовірність того, що спостережна пристосованість буде близькою до статичної, є високою. Насправді в процесі роботи алгоритму оператор відбору призводить до зсуву прикладів схем у бік прикладів більш пристосованих схем. За деякий час приклади схем перестають бути рівномірно розподіленими по простору пошуку. В результаті статична та спостережна пристосованості схеми можуть не збігатись, а теорема схем неявно спирається на протилежне припущення.

У теоремі схем не враховано розпорошеність значень коефіцієнта пристосованості прикладів схеми, хоча в багатьох задачах ця розпорошеність може бути доволі великою, внаслідок чого процес визначення будівельних блоків, які згодом можуть сприяти знаходженню глобального оптимуму, суттєво ускладнюється [16; 38]. Суттєва відмінність у коефіцієнтах пристосованості різних прикладів схеми може призвести до передчасної збіжності.

Теорема схем враховує тільки руйнування схем, тобто ймовірність втрати знайдених корисних схем. Водночас теорема не враховує виникнення нових схем; останні часто створюються кросингвером та мутацією.

Теорема схем не враховує того факту, що в процесі еволюції члени популяції стають дедалі більше схожими один на одного, отже, зі зростанням кількості ітерацій зруйновані схеми з великою ймовірністю будуть одразу ж відновлені.

Перший множник у нерівності (1) описує вплив селекції. Важливо відзначити, що вплив селекції не обмежується $3'$ гіперплощинами, які розглядаються в теоремі схем, а поширюється на будь-яку підмножину пошукового простору, тобто на $2^{2'}$ елементів множини підмножин усіх рядків.

Гіпотеза будівельних блоків, яка пояснює покращення здоров'я популяції вдалим комбінуванням корисних схем низького порядку та отриманням схем більш високого порядку з іще вищим коефіцієнтом пристосованості, має місце лише для сепарабельних (але не для довільних) функцій [29].

Висновок

Ідея схемного розбиття тривалий час залишалась одним з основних методів аналізу ГА; теорема схем описує важливі аспекти їхньої поведінки. Водночас аналіз роботи ГА на основі статичної пристосованості схем є надто спрощеним підходом. Цим обґрунтовується необхідність пошуку інших підходів для пояснення роботи ГА, наприклад, підходів з урахуванням зсувів схем у бік більш пристосованих; такі зсуви відбуваються в кожному поколінні внаслідок селекції. У деяких роботах розглядається поняття *правильних будівельних блоків* (*correct BB*), які мають відповідати глобальному оптимуму та мати найкраще здоров'я серед усіх схем даного схемного розбиття [8]. Наприклад, на рис. 1 схема 0***** є правильним будівельним блоком, адже її коефіцієнт пристосованості є вищим за коефіцієнт пристосованості усіх інших схем відповідного схемного розбиття (зокрема, схеми 1*****), та хромосома, що відповідає глобальному оптимуму, є прикладом цієї схеми.

У [11; 33] пропонується таке пояснення пошукової стратегії ГА безвідносно поняття схеми. ГА може бути описаний як *розсіяний пошук* (*scatter search*) [12], де нові точки простору пошуку генеруються між випадково обраними батьківськими точками за допомогою оператора кросингверу. Оператор відбору гарантує, що в процесі роботи алгоритму батьківські точки стають ближчими одна до одної. В результаті множина точок, які можуть бути нащадками, звужується. Таким чином, відбір та кросингвер призводять до автоматичної концентрації особин у перспективних ділянках простору пошуку. Можна сказати, що вони реалізують адаптивне керування розміром кроку при переході від одного розв'язку до іншого.

Важливим компонентом аналізу ГА є вивчення швидкості збіжності методів відбору. Для цього було введено поняття часу поглинання [13] та інтенсивності відбору [32], які є дуже корисними при порівняльному аналізі різних методів відбору. Зокрема, інтенсивність відбору є характеристикою методу відбору та не залежить від функції пристосованості, номера покоління чи інших факторів; значення інтенсивності відбору може використовуватися в оцінці часу збіжності ГА. Інтенсивність відбору основних методів відбору була обчислена аналітично [5; 6; 30; 32]. Обчислення інтенсивності відбору для паралельного ГА (острівна модель) наводиться в [8].

Популярними є методи аналізу ГА з використанням марківських ланцюгів та інших статистичних методів. Моделі ГА на основі марківських

ланцюгів є доволі складними. В цих моделях кожна можлива популяція ГА формує один стан марківського ланцюга, та моделі містять складні вирази для визначення ймовірностей переходів між усіма можливими парами популяцій. Наведемо деякі цікаві результати, отримані на основі аналізу марківських ланцюгів.

У [34] обчислено кількість можливих популяцій простого ГА: $\frac{(N + 2^l - 1)!}{N!(2^l - 1)!}$, де N – кількість

особин у популяції, l – довжина хромосом. Неважко переконатися, що навіть за незначних розмірів популяції кількість можливих популяцій – станів у марківському ланцюгу – є надзвичайно великою. Наприклад, вже за $N=10$, $l=10$ отримаємо близько $3.65 \cdot 10^{23}$ можливих станів. Отже, обчислити всі можливі варіанти практично неможливо.

У припущенні необмеженого розміру популяції в [7] та [43] представлено рівняння для визначення втрат рядків та формувань нових рядків унаслідок застосування операторів відбору та кросинговеру, а в [13] та [14] – для оцінювання часу збіжності ГА. Вивчення часу по-

глинання різних методів відбору за допомогою марківських ланцюгів проводилося в роботах [9; 39; 41].

У [23] було доведено збіжність ГА за виконання спеціальних умов.

Широковідомим є результат, отриманий в роботі [3]: кількість ітерацій ГА може бути обме-

жена згори: $g(\zeta) \leq \left\lceil \frac{\ln(1 - \zeta)}{\ln(1 - \min\{(1 - p_m)^{Nl}, p_m^{Nl}\})} \right\rceil$,

де $g(\zeta)$ – кількість ітерацій, ζ – ймовірність збіжності, p_m – ймовірність мутації, N – розмір популяції, l – довжина хромосом.

Серед інших цікавих робіт, присвячених аналізу збіжності ГА на основі марківських ланцюгів, відзначимо роботи [4; 20; 42].

Цікавою є спроба розробити теорію збіжності ГА за аналогією з методом відпалу, що представлена в [10]. У цій роботі параметр алгоритму – ймовірність мутації – розглядається як аналог параметра температури в методі відпалу.

Відзначимо також роботи [35; 36; 40], в яких пропонується проводити аналіз ГА з використанням методів статистичної механіки.

Список літератури

1. Глибовець М. М. Еволюційні алгоритми : [підручник] / М. М. Глибовець, Н. М. Гуласва. – К. : НаУКМА, 2013. – 828 с.
2. Субботін С. О. Неітеративні, еволюційні та мультиагентні методи синтезу нечіткологічних і нейромережних моделей : монографія / С. О. Субботін, А. О. Олійник, О. О. Олійник ; [за заг. ред. С. О. Субботіна]. – Запоріжжя : ЗНТУ, 2009. – 375 с.
3. Aytug H. A Markov chain analysis of genetic algorithms with power of 2 cardinality alphabets / H. Aytug, S. Bhattacharyya, G. J. Koehler // *European Journal of Operational Research*. – 1996. – Vol. 96. – P. 195–201.
4. Aytug H. New stopping criterion for genetic algorithms / H. Aytug, G. J. Koehler // *European Journal of Operational Research*. – 2000. – Vol. 126. – P. 662–674.
5. Bäck T. Generalized convergence models for tournament- and (μ, λ)-selection / T. Bäck // *Proceedings of the 6th International Conference on Genetic Algorithms* / L. Eschelman (ed.). – San Francisco, CA : Morgan Kaufmann, 1995. – P. 2–8.
6. Blickle T. A comparison of selection schemes used in evolutionary algorithms / T. Blickle, L. Thiele // *Evolutionary Computation*. – 1996. – Vol. 4. – № 4. – P. 361–394.
7. Bridges C. L. An analysis of reproduction and crossover in a binary-coded genetic algorithm / C. L. Bridges, D. E. Goldberg // *Genetic algorithms and their applications: Proceedings of the Second International Conference on Genetic Algorithms*. – 1987. – P. 9–13.
8. Cantú-Paz E. Efficient and accurate parallel genetic algorithms / Cantú-Paz E. – Boston, MA : Kluwer Academic Publishers, 2001. – 162 p.
9. Chakraborty U. K. Analysis of selection algorithms: A Markov chain approach / U. K. Chakraborty, K. Deb, M. Chakraborty // *Evolutionary Computation*. – 1996. – Vol. 4. – № 2. – P. 133–167.
10. Davis T. E. A Markov chain framework for the simple genetic algorithm / T. E. Davis, J. C. Principe // *Evolutionary Computation*. – 1993. – Vol. 1. – № 3. – P. 269–288.
11. *Foundations of Genetic Algorithms* / G. J. E. Rawlins (ed.). – San Mateo, California, USA : Morgan Kaufmann Publishers, 1991. – 341 p.
12. Glover F. Heuristics for integer programming using surrogate constraints / F. Glover // *Decision Sciences*. – 1977. – Vol. 8. – P. 156–166.
13. Goldberg D. E. A comparative analysis of selection schemes used in genetic algorithms / D. E. Goldberg, K. Deb // *Proceedings of the First Workshop on Foundations of Genetic Algorithms (FOGA)* / G. J. E. Rawlins (ed.). – San Mateo, California : Morgan Kaufmann Publishers, 1991. – P. 69–93.
14. Goldberg D. E. An analysis of a reordering operator on a GA-hard problem / D. E. Goldberg, C. L. Bridges // *Biological Cybernetics*. – 1990. – Vol. 62. – P. 397–405.
15. Goldberg D. E. Computer-aided gas pipeline operation using genetic algorithms and rule learning / D. E. Goldberg // *Doctoral dissertation, University of Michigan*. – Ann Arbor, MI, 1983. – 227 p. – Також: University Microfilms № 8402282.
16. Goldberg D. E. Genetic algorithms and the variance of fitness / D. E. Goldberg, M. Rudnick // *Complex Systems*. – 1991. – Vol. 5. – № 3. – P. 265–278.
17. Goldberg D. E. *Genetic algorithms in search, optimization and machine learning* / D. E. Goldberg. – Massachusetts : Addison-Wesley, 1989. – 412 p.
18. Goldberg D. E. Massive multimodality, deception, and genetic algorithms / D. E. Goldberg, K. Deb, J. Horn // *Proceedings of Parallel Problem Solving From Nature (PPSN II)* : *Lecture Notes in Computer Science* / R. Männer, B. Manderick (eds.). – Amsterdam : North-Holland, 1992. – Vol. 2. – P. 37–46.
19. Goldberg D. E. Simple genetic algorithms and the minimal deceptive problem / D. E. Goldberg // *Genetic Algorithms and Simulated Annealing* / L. Davis (ed.). – London : Pitman, 1987. – P. 74–88.
20. Greenhalgh D. Convergence criteria for genetic algorithms / D. Greenhalgh, S. Marshall // *SIAM Journal on Computing*. – 2000. – Vol. 30. – № 1. – P. 269–282.

21. Grefenstette J. J. Deception considered harmful / J. J. Grefenstette // Proceedings of the Second Workshop on Foundations of Genetic Algorithms (FOGA 2) / L. D. Whitley (ed). – San Mateo, CA : Morgan Kaufmann, 1993. – Vol. 2. – P. 75–91.
22. Grefenstette J. J. How genetic algorithms work: A critical look at implicit parallelism / J. J. Grefenstette, J. E. Baker // Proceedings of the Third International Conference on Genetic Algorithms / J. D. Schaffer (ed.). – Morgan Kaufmann, 1989. – P. 20–27.
23. Hartl R. F. A global convergence proof for a class of genetic algorithms / R. F. Hartl // Technical Report, Technische Universität Wien. – Vienna, 1990. – 6 p.
24. Heckendorn R. B. Nonlinearity, hyperplane ranking and the simple genetic algorithms / R. B. Heckendorn, D. Whitley, S. Rana // Proceedings of the 4th Workshop on Foundations of Genetic Algorithms (FOGA-4) / R. B. Belew, M. D. Vose (eds.). – Morgan Kaufmann, 1997. – P. 181–202.
25. Heckendorn R. Polynomial time summary statistics for a generalization of MAXSAT / R. Heckendorn, S. Rana, D. Whitley // Proceedings of the 1999 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO-99) / W. Banzhaf, J. Daida, A. E. Eiben, M. H. Garzon, V. Honavar, M. Jakiela, R. E. Smith (eds.). – San Francisco, California : Morgan Kaufmann, 1999. – P. 281–288.
26. Heckendorn R. Test function generators as embedded landscapes / R. Heckendorn, S. B. Rana, L. D. Whitley // Proceedings of the 5th Workshop on Foundations of Genetic Algorithms (FOGA-5) / W. Banzhaf, C. R. Reeves (eds.). – Morgan Kaufmann, 1999. – P. 183–198.
27. Holland J. H. Adaptation in natural and artificial systems. An introductory analysis with application to biology, control, and artificial intelligence / J. H. Holland. – London : Bradford book edition, 1992. – 211 p.
28. Holland J. H. Adaptation in natural and artificial systems. An Introductory analysis with application to biology, control, and artificial intelligence / J. H. Holland. – University of Michigan, 1975. – 210 p.
29. Menke R. A revision of the schema theorem / R. Menke // CRC Technical Report № SRB-531-CI-14/97, University of Dortmund. – Dortmund, Germany, 1997. – 17 p.
30. Miller B. L. Genetic algorithms, tournament selection, and the effects of noise / B. L. Miller, D. E. Goldberg // Complex Systems. – 1995. – Vol. 9. – № 3. – P. 193–212.
31. Mitchell M. An introduction to genetic algorithms / M. Mitchell. – Cambridge, MA : MIT Press, 1998. – 162 p.
32. Mühlenbein H. Predictive models for the breeder genetic algorithm / H. Mühlenbein, D. Schlierkamp-Voosen // I. Continuous Parameter Optimization. Evolutionary Computation. – 1993. – Vol. 1. – № 1. – P. 25–49.
33. Mühlenbein H. Evolution in time and space – the parallel genetic algorithm / H. Mühlenbein // Foundations of Genetic Algorithms / G. J. E. Rawlins (ed.). – San Mateo : Morgan Kaufmann Publishers, 1991. – P. 316–337.
34. Nix A. E. Modeling genetic algorithms with Markov chains / A. E. Nix, M. D. Vose // Annals of Mathematics and Artificial Intelligence. – 1992. – Vol. 5. – № 1. – P. 79–88.
35. Prügel-Bennett A. An analysis of genetic algorithms using statistical mechanics / A. Prügel-Bennett, J. L. Shapiro // Physical Review Letters. – 1994. – Vol. 72. – № 9. – P. 1305–1309.
36. Prügel-Bennett A. The dynamics of a genetic algorithm for simple random ising systems / A. Prügel-Bennett, J. L. Shapiro // Physica D. – 1997. – Vol. 104. – Issue 1. – P. 75–114.
37. Rana S. A tractable Walsh analysis of SAT and its implications for genetic algorithms / S. Rana, R. B. Heckendorn, D. Whitley // Proceedings of the 15th National / 10th Conference on Artificial Intelligence / Innovative Applications of Artificial Intelligence (AAAI'98/IAAI'98). – MIT Press, 1998. – P. 392–397.
38. Rudnick M. Signal, noise, and genetic algorithms / M. Rudnick, D. E. Goldberg // IlliGAL Technical Report № 91005, University of Illinois at Urbana-Champaign. – Urbana, Illinois, USA, 1991. – 6 p.
39. Rudolph G. Takeover times and probabilities of non-generational selection rules / G. Rudolph // Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference / D. Whitley, D. E. Goldberg, E. Cantú-Paz, L. Spector, I. Parmee, H.-G. Beyer (eds.). – San Francisco, CA : Morgan Kaufmann. – 2000. – P. 903–910.
40. Shapiro J. L. A statistical mechanical formulation of the dynamics of genetic algorithms / J. L. Shapiro, A. Prügel-Bennett, M. Rattray // Lecture Notes in Computer Science / T. C. Fogarty (ed.). – Berlin : Springer-Verlag, 1994. – Vol. 865. – P. 17–27.
41. Smith J. Replacement strategies in steady state genetic algorithms: Static environments / J. Smith, F. Vavak // Foundations of Genetic Algorithms / W. Banzhaf, C. Reeves (eds.). – San Francisco, CA : Morgan Kaufmann. – 1999. – Vol. 5. – P. 219–234.
42. Studniarski M. Stopping criteria for a general model of genetic algorithm / M. Studniarski // 12th National Conference on Evolutionary Computation and Global Optimization, Zawoja, Poland. – 2009. – P. 173–181.
43. Whitley D. An executable model of a simple genetic algorithm / D. Whitley // Foundations of genetic algorithms / L. D. Whitley (ed.). – San Mateo : Morgan Kaufmann, 1993. – Vol. 2. – P. 45–62.
44. Whitley D. Hyperplane ranking in simple genetic algorithms / D. Whitley, K. Mathias, L. Pyeatt // Proceedings of the 6th International Conference on Genetic Algorithms / L. Eshelman (ed.). – Morgan Kaufmann, 1995. – P. 231–238.

M. Glybovets, N. Gulayeva

THEORETICAL APPROACH TO THE DESIGN AND ANALYSIS OF GENETIC ALGORITHMS

In this paper, major theoretical approaches to develop and analyze genetic algorithms, including the schemata theorem, building blocks hypothesis and scatter search, are analyzed in detail. The using of different selection methods, Markov chains and other statistical methods is characterized. The overview of other interesting papers devoted to the analysis of convergence of genetic algorithms, in particular, by analogy with the simulated annealing, is given.

Keywords: genetic algorithms, schemata, useful schemata, building blocks.

Матеріал надійшов 13.05.2014