

І. НЕКЛЮДОВ, В. КЛЕПІКОВ, В. КОРДА, А. ШЕПЕЛЄВ,  
О. НЕМАШКАЛО, Л. ЮРЧЕНКО, А. ТУТУБАЛІН, Л. КОРДА, М. ШЛЯХОВ

## ЕВОЛЮЦІЙНІ АЛГОРИТМИ У ПРИРОДНИЧИХ НАУКАХ

### Наукометричне дослідження

---

*Еволюційні алгоритми (ЕА) є основою сучасних евристичних комп'ютерних технологій оптимізації, навчання, моделювання, проектування й управління у найширшому значенні цих понять. ЕА ґрунтуються на глибокій аналогії між біологічним генетичним кодом і комп'ютерним двійковим кодом. Ця аналогія дає змогу формалізувати біологічний еволюційний процес і застосувати ідею про природний добір для розв'язання найскладніших проблем у галузі природничих і комп'ютерних наук, промисловості та бізнесу. В огляді підсумовуються результати дослідження сфер використання ЕА за допомогою аналізу трьох повних Міжнародних реферативних Баз даних: «Zentralblatt fur Mathematik», «International Nuclear Information System» і «Materials Science Citation Index». На підставі здійсненого аналізу автори роблять висновок про актуальність, перспективність і можливість розвитку еволюційних комп'ютерних технологій в Україні.*

Важливою об'єднуючою особливістю, властивою практично всім науковим і технічним проблемам, що стоять перед людством, є їхній оптимізаційний характер. Тією чи іншою мірою будь-яку задачу з будь-якої галузі діяльності можна сформулювати як проблему оптимізації. На сучасному етапі свого розвитку людство змушене ставити перед собою оптимізаційні за-

дачі, що є високорозмірними (велика кількість вільних параметрів), сильнонелінійними (параметри сильно зв'язані між собою), простори яких мають невідому і непередбачувану топографію, яка до того ж постійно змінюється з часом. Для розв'язання подібних задач створено безліч «інтелектуальних» оптимізаційних методів, більшість з яких є комбінаціями двох ос-

---

© НЕКЛЮДОВ Іван Матвійович. Академік-секретар Відділення ядерної фізики та енергетики НАН України. Генеральний директор Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» (ННЦ ХФТІ) НАН України.

КЛЕПІКОВ В'ячеслав Федорович. Член-кореспондент НАН України. Директор Інституту електрофізики і радіаційних технологій (ІЕРТ) НАН України.

КОРДА Володимир Юрійович. Доктор фізико-математичних наук. Завідувач відділу ІЕРТ НАН України.

ШЕПЕЛЄВ Анатолій Георгійович. Кандидат фізико-математичних наук. Провідний науковий співробітник ННЦ ХФТІ НАН України.

НЕМАШКАЛО Ольга Вікторівна. Інженер-дослідник тієї ж установи.

ЮРЧЕНКО Любов Дмитрівна. Інженер-програміст вказаної установи.

ТУТУБАЛІН Анатолій Іванович. Кандидат фізико-математичних наук. Старший науковий співробітник зазначеної установи.

КОРДА Лариса Павлівна. Кандидат фізико-математичних наук. Науковий співробітник тієї ж установи.

ШЛЯХОВ Микола Андрійович. Кандидат фізико-математичних наук. Старший науковий співробітник тієї ж установи (Харків). 2005.

новних оптимізаційних стратегій: детерміністичної та стохастичної. Детерміністична стратегія має на увазі найшвидший спуск до найближчого оптимуму, коли поліпшення оцінок величин, що оптимізують цільову функцію, досягається завдяки врахуванню попередніх оцінок і розрахунку їхніх градієнтів. Це означає, що похибки обчислень мають тенденцію до накопичення і, крім того, тут легко потрапити в локальний оптимум. Стохастична стратегія передбачає випадкові спроби і помилки. Такий метод позбавлений недоліків, властивих детерміністичним підходам, і дає змогу «перестрибувати» з одного оптимуму в інший, проте потребує багато машинного часу. Використання комп'ютерів із паралельною архітектурою теоретично дозволяє значно скоротити машинний час, але практично не дає великого виграшу у швидкості, оскільки існуючі методи оптимізації принципово послідовні (а не паралельні) і для них необхідне додаткове розпаралелювання. Тому останнім часом дедалі більша увага приділяється гібридним методам оптимізації, які, з одного боку, спрямовані на знаходження цілого набору досить оптимальних рішень замість одного дуже точного (популярність методу), а з другого — добре пристосовані для використання на комп'ютерах із високопаралельною архітектурою процесорів (паралельність методу).

Поширеність процесів оптимізації у науці, техніці та природі підказує ідею єдиного універсального методу розв'язання таких задач — досить зрозуміти, який метод оптимізації використовує природа [1]. Відповідь може бути знайдена у будь-якому підручнику з біології. Стратегію оптимізації, що ґрунтується на генетичній еволюції, звичайно називають еволюційним алгоритмом (ЕА) [2–5]. ЕА розглядає оптимізаційну задачу як добір найбільш відповідних наборів параметрів, що оптимізуються. Проте ЕА не просто використовує дарвінівську ідею про

біологічну еволюцію за допомогою природного добору, він навіть копіює деталі механізмів, завдяки яким ця еволюція здійснюється: мутація, рекомбінація і спадковість. Наслідуючи природу, ЕА містить у собі мутацію, рекомбінацію і спадковість у таких формах, які можна легко модифікувати для розв'язання практично будь-якої задачі, тобто є універсальним алгоритмом.

Традиційний ЕА полягає у тому, що спочатку за допомогою двійкових чисел (бітів) кодуються числові значення параметрів, які оптимізуються, наявність або відсутність деяких специфічних властивостей складної системи, частини комп'ютерних програм, котрі самостійно виконуються, і т. п. Набір бітових послідовностей (генів), що представляють параметри оптимізації, називають геномом (особиною), а селективну якість особини — пристосованістю. Популяція складається з фіксованого числа особин. Еволюція починається з початкової популяції, заповненої випадковими геномами. Далі для кожної особини обчислюється цільова функція. З популяції вибираються дві батьківські особини, які виробляють дві особини-нащадки. Чим вища пристосованість особини, тим вищою є для неї імовірність бути батьком. У процесі схрещування батьків використовуються два ключові оператори ЕА: мутація і кросовер. Мутація — це інверсія одного або кількох бітів гена, а кросовер — обмін відповідними зв'язними порціями бітів між нащадками. Після реплікації нащадки тестуються і набувають селективної якості (пристосованості). Якщо даний нащадок більш пристосований, ніж найменш пристосована особина у популяції, то остання замінюється даним нащадком, зберігаючи чисельність популяції. Потім вибирається нова пара батьків і т. д. Алгоритм зупиняється, коли, наприклад, усі особини у популяції стають однаково пристосованими, так що не можна чекати подальшого поліпшення. Зазначимо, що мутація є основним

оператором ЕА, який уможлиблює еволюційний процес. Як і в біологічному світі, мутація у кібернетичній сфері генерує нові гени. Кросовер — це механізм, за допомогою якого гени дрейфують у популяції, поліпшуючи збіжність еволюційного процесу. Алгоритм надзвичайно простий, паралельний за будовою (ідеально пристосований для використання на комп'ютерах із паралельною архітектурою процесорів), його можна легко застосувати.

Постійне розширення сфери використання ЕА свідчить про величезну різноманітність оптимізаційних проблем у галузі природничих і комп'ютерних наук, промисловості, проектування, управління і бізнесу, що чекають на своє розв'язання. ЕА були успішно застосовані для розв'язання таких різних і складних проблем, як, наприклад, управління повітряним рухом [6], розпізнавання образів [7], навчання нейронних мереж [8], прогнозування розвитку економіки [9], інтегрування диференціальних рівнянь [10], прогноз структури атомних і молекулярних кластерів [11], що відкриває принципи можливості у конструюванні нових фармацевтичних препаратів, оптимізація процесу фрактального стиснення графічної інформації [5], термодинамічного аналізу фазових перетворень [12], діагностики і лікування онкологічних захворювань [13–16], антибактеріальної терапії, моделювання екологічних систем [5] і т. д. Тому становить особливий інтерес проведення систематичного наукометричного дослідження сфер застосування ЕА.

У нашому дослідженні використані три повні Міжнародні реферативні Бази даних (БД): «Zentralblatt für Mathematik» (ZBMath), «International Nuclear Information System» (INIS) і «Materials Science Citation Index» (MSCI). Перша БД містить більш як 1,8 млн рефератів із 2000 журналів, серіальних видань і книг із питань математики, опублікованих від 1931 року

і дотепер. Друга БД містить понад 2,4 млн рефератів статей із часописів, звітів та інших інформаційних документів із проблем мирного використання атомної енергії, введених державами — членами МАГАТЕ — з 1970 р. Третя База даних охоплює більш як 2,5 млн рефератів статей із 500 журналів світу, книг та праць конференцій із проблем матеріалознавства, опублікованих упродовж 1991–2004 років. Для кожної БД ми провели автоматизований аналіз динаміки інформаційних потоків у деяких напрямках досліджуваної теми.

#### БАЗА ДАНИХ ZBMath

На рис. 1 показано графік кумулятивного зростання числа публікацій (загальної кількості інформаційних документів), присвячених генетичним і/або еволюційним алгоритмам (ключові слова: *genetic or evolutionary algorithms*). Бурхливе зростання числа публікацій спостерігається з початку 90-х років ХХ століття. Саме в цей час почалися процеси стрімкого підвищення продуктивності комп'ютерної техніки, з одного боку, і швидке її здешевлення — з другого, внаслідок чого ефективне використання генетичних й еволюційних програм стало можливим навіть на персональних комп'ютерах.

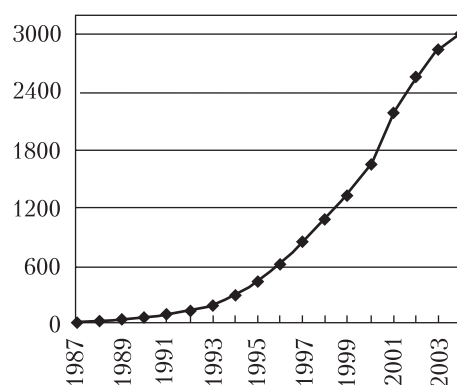


Рис. 1. Графік кумулятивного зростання числа публікацій, присвячених застосуванням еволюційних алгоритмів у БД ZBMath



Рис. 2. Графіки кумулятивного зростання кількості публікацій у ZVMath за найпопулярнішими, з погляду застосувань еволюційних алгоритмів, рубриками БД

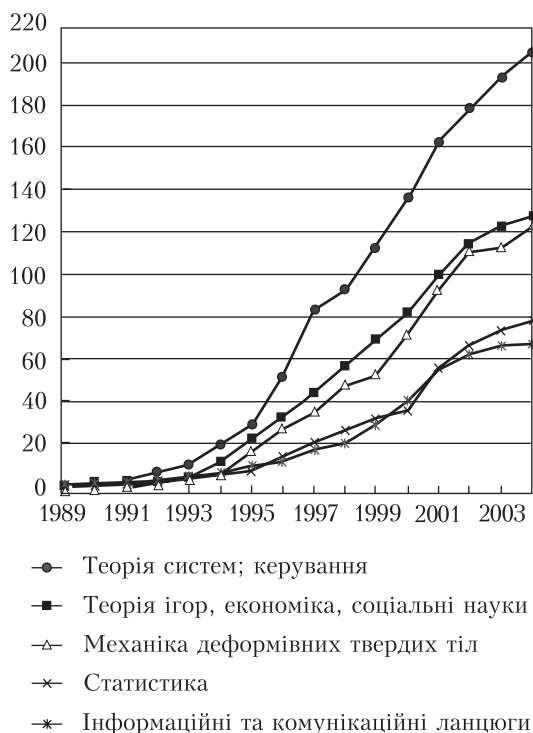


Рис. 3. Графіки кумулятивного зростання числа публікацій, присвячених застосуванням еволюційних алгоритмів, у БД ZVMath за рубриками

Особливий інтерес становить визначення основних сфер застосування ЕА, відзначених у БД, що досліджується. На рис. 2, 3 подані графіки кумулятивного зростання числа публікацій за найбільш популярними, з погляду застосувань ЕА, рубриками БД. Передусім це комп'ютерні науки і всі галузі, пов'язані з математичним програмуванням і дослідженням математичних операцій. Відтак — чисельний аналіз, теорія систем й управління. Актуальними сферами використання ЕА є також теорія ігор, економіка, соціальні науки та науки про поведінку.

Особливий розділ — механіка твердих тіл, що деформуються (надпластичність, аналіз і математичне моделювання умов надпластичної деформації). Підкреслимо також значну кількість застосувань ЕА у статистиці, інформаційних і комунікаційних ланцюгах.

#### БАЗА ДАНИХ INIS

Перші публікації із застосувань ЕА у досліджуваній БД з'явилися в 1990 році. Вони були присвячені проблемі оптимізації ядерного паливного циклу на атомних електростанціях (АЕС), моделюванню потоків теплоносія у трубопроводах контурів охолодження АЕС і керуванню технологічними процесами на АЕС. Від цього моменту і дотепер спостерігається швидке зростання кількості публікацій, проілюстроване на рис. 4.

Специфіка БД INIS підказала потенційно найактуальніші сфери застосування ЕА: реактори, паливо. Рис. 5 демонструє кумулятивне зростання числа публікацій за обраними темами.

Аналіз текстів рефератів публікацій довів, що найінтенсивніше ЕА застосовуються для розрахунків і проектування ядерних реакторів, вибору оптимальних режимів їхньої експлуатації, оптимізації ядерного паливного циклу, побудови універсальних контро-

лерів і регуляторів технологічних процесів на АЕС, оптимізації променевої та ізотопної терапії ракових захворювань.

Цікаво оцінити внесок фахівців різних країн у проведення робіт із використанням ЕА (рис. 6). Безперечним лідером є США (п'ята частина всіх публікацій). Далі йдуть Японія і Бразилія (разом – також п'ята частина всіх робіт). Більше третини всіх публікацій поділили між собою Китай, Південна Корея, Мексика, Велика Британія, Німеччина і Польща. Таким чином, у згаданих країнах виконано понад 70% усіх робіт. Зазначимо, що такі вельми залежні від ядерної енергетики держави, як Франція і Україна (з 6 робіт 4 виконані в Харкові), зробили незначний внесок (разом – 4%). Можливо, реферати робіт у галузі ядерної фізики й енергетики, які проводяться в цих країнах у даному напрямі досліджень, просто не внесені у БД.

#### БАЗА ДАНИХ MSCІ

Як і в попередніх двох БД, спостерігається бурхливе зростання кількості опублікованих матеріалів (рис. 7). Перші роботи з'явилися у досліджуваній БД у 1991 році і були присвячені аналізу можливостей застосування ЕА для керування процесами створення структур реальних матеріалів й автоматизованого структурного конструювання матеріалів із заданими властивостями.

На рис. 8 наведено дані про кумулятивне зростання публікацій у найбільш характерних, на наш погляд, напрямках матеріалознавства. Рис. 9 демонструє розподіл публікацій за країнами, де виконані роботи. Провідне місце традиційно посідають США – більше чверті всіх публікацій. Японії і Великій Британії належить друге місце із загальним внеском близько 25%. На третю позицію виходять Індія, Німеччина й Італія, маючи менш як 20% спільного внеску. Внесок України оцінюється в

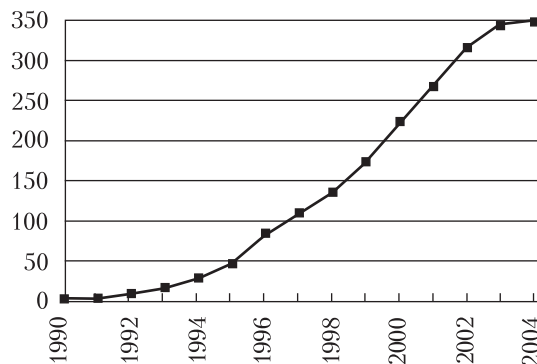


Рис. 4. Графік кумулятивного зростання кількості публікацій, присвячених застосуванню еволюційних алгоритмів у БД INIS

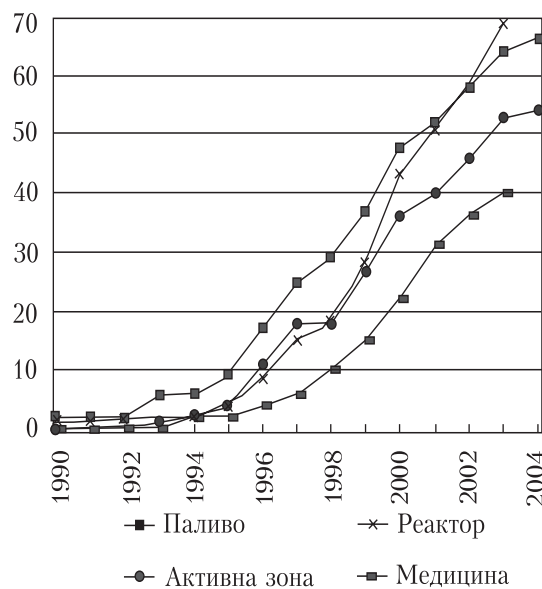


Рис. 5. Графік кумулятивного зростання числа публікацій в INIS за найбільш популярними, з погляду застосувань еволюційних алгоритмів, рубриками БД

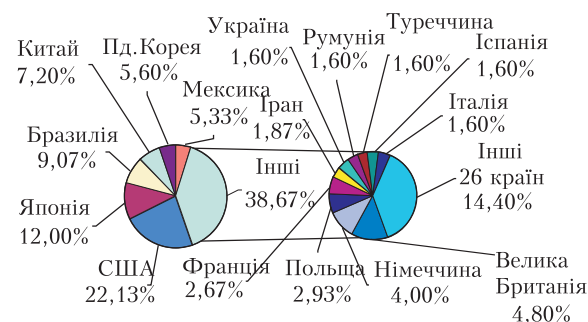


Рис. 6. Внески фахівців різних країн у проведення робіт з використанням еволюційних алгоритмів у БД INIS

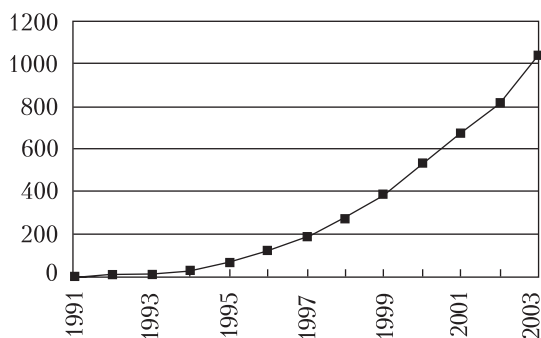


Рис.7. Графік кумулятивного зростання кількості публікацій, присвячених застосуванням еволюційних алгоритмів у БД MSCi

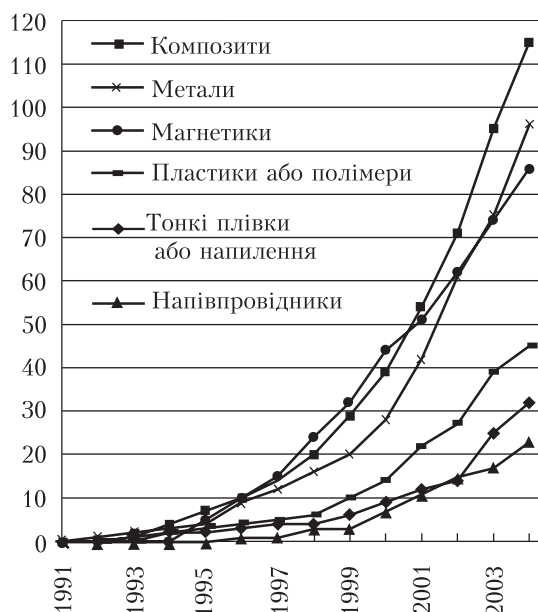


Рис.8. Графіки кумулятивного зростання числа публікацій у MSCi за найпопулярнішими, з погляду застосувань еволюційних алгоритмів, рубриками БД

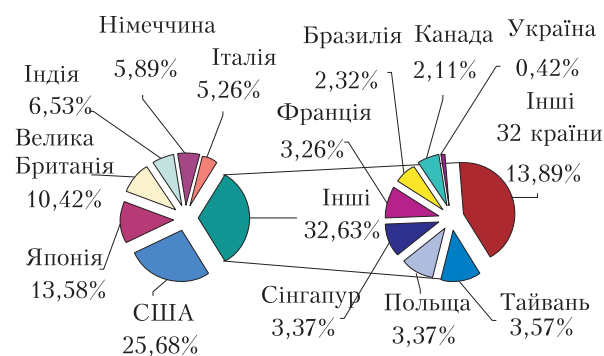


Рис.9. Внески фахівців різних країн у проведення робіт із використанням еволюційних алгоритмів у БД MSCi

0,4% (із чотирьох робіт три виконані в Харкові).

Здійснений аналіз показав бурхливе зростання кількості інформації про застосування еволюційних алгоритмів у різних галузях науки і техніки. Це свідчить, по-перше, про велику кількість актуальних задач, які не вдавалося розв'язати раніше відомими методами, по-друге, про дивну універсальність, потужність і простоту у використанні еволюційних алгоритмів, по-третє, про рівень продуктивності і доступності сучасної обчислювальної техніки. Еволюційні комп'ютерні технології, так само, як і еволюційні (генетичні) біологічні технології, є технологіями XXI століття. Результати їхнього впливу на сучасний світ і взаємного впливу цих технологій навіть важко передбачити. Разом з тим, як доводить наше дослідження, щоб посісти гідне місце на ринку еволюційних комп'ютерних технологій, не потрібні значні капітальні вкладення. Інакше кажучи, Україна може собі це дозволити.

Інформаційна підтримка роботи здійснювалася в рамках Проекту INTAS 00-02. Автори користуються можливістю подякувати за надану допомогу доктору Т.С. Чепурній та її співробітникам із Центральної технічної бібліотеки Німеччини, а також співробітникам Бази даних «Zentralblatt fur Mathematik».

1. *Darwin Ch.* The origin of species. — London: Murray, 1859. — 835 p.
2. *Holland J.H.* Adaptation in Natural and Artificial Systems. — Ann Arbor: The University of Michigan Press, 1975. — 764 p.
3. *Goldberg D.E.* Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning. — New York: Addison-Wesley, 1989. — 890 p.
4. *Michalewicz Z.* Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs. — Berlin: Springer-Verlag, 1994. — 453 p.
5. *Клепиков В.Ф., Корда В.Ю., Ямницький В.А., Шляхов Н.А., Трофимов Ю.И., Шершнева В.М.* Самоорганизация в программных средах. — Харьков: Акта, 1998. — 108 с.

6. *Matthews R.* How do you work out answers to questions that would take a desktop computer 15 million years to solve // *New Scientist*. — 1995. — 28 Oct. Issue. — P. 41–43.
7. *Ankenbrandt C.A., Buckles B.P., Petry F.E.* Scene recognition using genetic algorithms with semantic nets // *Genetic Algorithms*. — Buckles B. P. and Petry F. E. Eds. / IEEE Computer Society Press, Los Alamitos, CA, 1992. — P. 92.
8. *Harp S.A., Samad T., Guha A.* Towards the genetic synthesis of neural networks // The proceedings of the Third international conference on Genetic Algorithms. — Morgan Kaufmann Publishers. — San Mateo, California, 1989. — P. 104.
9. *Stender J., Addis T., Spenceley E.* Principle-based engineering and economic modelling // *Parallel Genetic Algorithms: Theory and Applications*. — Stender J. eds. / IOS Press, Amsterdam, 1993. — P. 117.
10. *Diver D.* Application of Genetic Algorithms to the Solution of Ordinary Differential Equations // *J. of Phys. A: Math. and Gen.* — 1993. — V. 26. — P. 3503–3513.
11. *Morris J.R., Deaven D.M., Ho K.M.* Genetic-algorithm energy minimization for point charges on a sphere // *Phys. Rev. B.* — 1996. — V. 53. No 4. — P. R1740–R1743.
12. *Berezovsky S.V., Korda V.Yu., Klepikov V.F.* Multi-level genetic-algorithm optimization of the thermodynamic analysis of incommensurate phase in ferroelectric // *Phys. Rev. B.* — 2001. — V. 64. — No 6. — P. 3.1–3.7.
13. *Sahiner B., Chan H.-P., Petrick N., Helvie M.A., Goodsitt M.M.* Design of a high-sensitivity classifier based on a genetic algorithm: application to computer-aided diagnosis // *Phys. Med. Biol.* — 1998. — V. 43, No 10. — P. 2853–2871.
14. *Haas O.C.L., Burnham K.J., Mills J.A.* Optimization of beam orientation in radiotherapy using planar geometry // *Phys. Med. Biol.* — 1998. — V. 43, No 8. — P. 2179–2193.
15. *Wu X., Zhu Y., Dai J., Wang Z.* Selection and determination of beam weights based on genetic

algorithms for conformal radiotherapy treatment planning // *Phys. Med. Biol.* — 2000. — V. 45, No 9. — P. 2547–2558.

16. *Lee E.K., Gallagher R.J., Silvern D., Wu C.-S., Zaider M.* Treatment planning for brachytherapy: an integer programming model, two computational approaches and experiments with permanent prostate implant planning // *Phys. Med. Biol.* — 1999. — V. 44, No 1. — P. 145–165.

*І. Неклюдов, В. Клепиков, В. Корда,  
А. Шепелев, О. Немашкало, Л. Юрченко,  
А. Тутубалін, Л. Корда, М. Шляхов*

#### ЕВОЛЮЦІЙНІ АЛГОРИТМИ У ПРИРОДНИЧИХ НАУКАХ

##### Резюме

Проведено систематичне наукометричне дослідження сфер використання еволюційних алгоритмів. Проаналізовано три повні Міжнародні реферативні Бази даних: «Zentralblatt für Mathematik», «International Nuclear Information System» і «Materials Science Citation Index». Відзначено бурхливе зростання кількості інформації, що публікується за темою дослідження, показано можливість розвитку еволюційних комп'ютерних технологій в Україні.

*I. Nekludov, V. Klepikov, V. Korda,  
A. Shepelev, O. Nemashkalo, L. Yurchenko,  
A. Tutubalin, L. Korda, M. Shlyakhov*

#### EVOLUTIONARY ALGORITHMS IN NATURAL SCIENCES

##### Summary

A systematic scientific and metric research of evolutionary algorithms is presented. Three complete International abstract data Bases «Zentralblatt für Mathematik», «International Nuclear Information System», and «Materials Science Citation Index» are analyzed. A rapid increase of published information quantity related to the research is noted and the opportunity of evolutionary computer technologies development in Ukraine is shown.