

Одна з перших моделей квантового комп'ютера була запропонована Річардом Фейнманом в 1981 році. Незабаром Пол Бениофф описав теоретичні основи побудови такого комп'ютера.

Також концепцію квантового комп'ютера в 1983 році пропонував Стівен Візнер в статті, яку він намагався опублікувати протягом більше десяти років до цього.

Необхідність в квантовому комп'ютері виникає тоді, коли ми намагаємося досліджувати методами фізики складні багаточастинкові системи, подібні біологічним. Простір квантових станів таких систем зростає як експонента від числа  $n$  складових їх реальних частинок, що унеможлиблює моделювання їх поведінки на класичних комп'ютерах вже для  $n = 10$ . Тому Візнер і Фейнман висловили ідею побудови квантового комп'ютера.

Як не дивно, глибоке вивчення фізики із застосуванням квантових комп'ютерів може привести ... до вивчення нової фізики. Моделі фізики елементарних частинок часто надзвичайно складні, вимагають розлогих рішень і задіють багато обчислювального часу для чисельного моделювання. Вони ідеально підійдуть для квантових комп'ютерів, і вчені вже поклали на них око.

## ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ ГЕНЕТИЧНОГО АЛГОРИТМУ

Носик Є.І., ст. гр. Е-12-20

Науковий керівник: доц. каф. ІІМ Фастовець В.І.

**Генетичний алгоритм** (англ. *genetic algorithm*) – це еволюційний елемент пошуку, що використовується для вирішення задач оптимізації і моделювання шляхом послідовного підбору, комбінування і варіації шуканих параметрів з використанням механізмів, що нагадують біологічну революцію.

Перші спроби симуляції еволюції були проведені у 1954 році Нільсом Баричелі на комп'ютері, встановленому в інституті перспективних досліджень Пристонського університету. Його робота, що була опублікована у тому ж році, привернула увагу громадськості. З 1957 року, австралійський генетик Алекс Фразер опублікував серію робіт з симуляції штучного відбору серед організмів з множинним контролем вимірюваних характеристик. Це дозволило комп'ютерній симуляції еволюційних процесів та методам, які були описані у книгах Фразера та Барнела(1970)<sup>1</sup> та Кросбі(1975), з 1960-х років стати більш розповсюдженим видом діяльності серед біологів. Симуляції Фразера містили усі найважливіші елементи сучасних генетичних алгоритмів. До того ж, Ганс-Іоахім Бремерман в 1960-х опублікував серію робіт, які також приймали підхід використання популяції рішень, що піддаються відбору, мутації та рекомбінації, в проблемах оптимізації. Дослідження Бремермана також містили елементи сучасних генетичних алгоритмів. Також варто відмітити Річарда Фрідберга, Джоржа Фрідмана та Майкла Конрада.

Хоча Баричеллі у своїй роботі 1963 р. займався симуляцією можливості машини грати у просту гру, штучна еволюція стала загальноновизнаним методом оптимізації після роботи Інго Рехенберга та Ханса-Пауля Швереля у 60-х та на початку 70-х років двадцятого століття – група Рехенсберга змогла вирішити складні інженерні проблеми згідно зі стратегіями революції.

Задача кодується таким чином, щоб її вирішення могло бути представлено в вигляді масиву подібного до інформації складу хромосоми. Цей масив часто називають саме так «хромосома». Випадковим чином в масиві створюється деяка кількість початкових елементів «осіб», або початкова популяція. Особи оцінюються з використанням функції допосованості, в результаті якої кожній особі присвоюється певне значення допасованості, яке визначає можливість виживання особи. Після цього з використанням отриманих значень допасованості вибираються особи, допущені до схрещення (*селекція*). До осіб застосовується «генетичні оператори» (в більшості випадків це оператор схрещення (crossover) і оператор мутації

(mutation)), створюючи таким чином наступне покоління осіб. Особи наступного покоління також оцінюються застосуванням генетичних операторів і виконується селекція і мутація. Так моделюється еволюційний процес, що продовжується декілька життєвих циклів (*покоління*), поки не буде виконано критерій зупинки алгоритму. Таким критерієм може бути:

- знаходження глобального, або надоптимального вирішення;
- вичерпання числа поколінь, що відпущені на еволюцію;
- вичерпання часу, відпущеного на еволюцію.

Генетичні алгоритми можуть використати для пошуку рішень в дуже великих і важких просторах пошуку.

### **Різновиди і особливості алгоритму в різних галузях хімії:**

- У **комбінаторній хімії** – метод дизайну бібліотеки шляхом оцінки відповідності певних бажаних властивостей (пр., рівня активності в біологічних пошуках, або розрахунково визначених властивостей набору речовин), передбачених за допомогою функції, встановленої статистичними методами при аналізі співвідношення структура – властивість. Ще більш оптимальний дизайн пов'язаний з евристичним процесом, який нагадує генетичну селекцію, де застосовується реплікація, мутація, вилучення.

- У **хеометриці** – механізм оптимізації, заснований на механізмі дарвінівської еволюції, де використовуються випадкові мутації, процедури схрещення та відбору для розробки кращої моделі чи розв'язку порівняно з тим, які було отримано, виходячи зі стартової сукупності чи вибірки.

- У **комп'ютерній хімії** – комп'ютерний метод генерування та тестування комбінацій можливих вхідних параметрів для знаходження оптимальних вихідних значень. Використовується для оптимізації у випадку систем з великою кількістю змінних параметрів, зокрема при конформаційному аналізі багатоатомних складних молекул. Включає методи, що базуються на поняттях природної еволюції, такі як генетична комбінація, мутація та природний відбір.

## **Етапи генетичного алгоритму:**

---

Можна виділити такі етапи генетичного алгоритму:

1. Створення початкової популяції:
2. Обчислення функції допасованості для осіб популяції (оцінювання)
3. Повторювання до виконання критерію зупинки алгоритму:
  1. Вибір індивідів із поточної популяції (селекція);
  2. Схрещення або/та мутація;
  3. Обчислення функції допасованості для всіх осіб;
  4. Формування нового покоління.

### **Створення початкової популяції:**

Перед першим кроком необхідно випадковим чином створити деяку початкову популяцію. Навіть якщо популяція виявиться абсолютно неконкурентоздатною, генетичний алгоритм все одно достатньо швидко переведе її в придатну для життя популяцію. Таким чином, на першому кроці можна не старатися зробити надто допасованих осіб, достатньо, щоб вони відповідали формату осіб популяції, і на них можна було порахувати функцію допасованості. Наслідком першого кроку є популяція  $N$ , що налічує  $N$  осіб.

### **Відбір:**

На етапі відбору необхідно із всієї популяції вибрати її певну долю, яка залишиться в «живих» на цьому етапі популяції. Є декілька способів провести відбір. Ймовірність виживання особи  $h$  повинна залежати від значення її допасованості  $Fitness(h)$ . Сама ж доля відібраних  $s$  зазвичай є параметром генетичного алгоритму, і її просто задають заздалегідь. Внаслідок відбору із  $N$  осіб популяції  $N$  повинні залишитись  $sN$  осіб, які ввійдуть в наступну популяцію  $N'$ . Решта осіб «загине».

### **Розмноження:**

Розмноження в генетичних алгоритмах зазвичай статеве – щоб «народити» нащадка, необхідно декілька батьків, зазвичай потрібна

участь двох. Розмноження в різних алгоритмах описується по різному – воно, звісно, залежить від формату осіб. Головна вимога до розмноження – щоб нащадок чи нащадки мали можливість успадкувати риси всіх батьків, «змішавши» їх якимось достатньо розумним чином.

Розмноження або оператор рекомбінації застосовують відразу ж після оператора відбору батьків для отримання нових особин-нащадків. Сенс рекомбінації полягає в тому, що створені нащадки повинні наслідувати генну інформацію від обох батьків. Розрізняють дискретну рекомбінацію і кросинговер.

Приклад операції розмноження: Вибрати  $(1-s)p/2$  пар гіпотез із  $N$  і провести з ними розмноження, отримавши по два нащадка від кожної пари (якщо розмноження описано так, щоб давати одного нащадка, необхідно вибрати  $(1-s)p$  пар), і додати цих нащадків в  $N'$ . В результаті  $N'$  буде складатися з  $N$  осіб.

Особи для розмноження зазвичай вибираються із всієї популяції  $N$ , а не із тих, що вижили на першому кроці (хоча останній варіант теж має право на існування). Справа в тому, що головна проблема генетичних алгоритмів – недостача різноманітності (diversity) в особах. Достатньо швидко виділяється єдиний генотип, який являє собою локальний максимум і згодом всі елементи популяції програють йому в відборі, і вся популяція «забивається» копіями цієї особи. Існують різні способи боротьби із таким небажаним ефектом; один з них – вибір для розмноження не з самих «допасованих», а взагалі зі всіх осіб.

### **Мутації:**

До мутацій відноситься все те ж, що і до розмноження: є деяка доля мутантів  $m$ , що є параметром генетичного алгоритму, і на кроці мутацій необхідно вибрати  $mN$  осіб, а згодом змінити їх згідно з заздалегідь заданими операціями мутації.