

МЕТОД ПОЛНОСТЬЮ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РАЗНОСТНОЙ ЭВОЛЮЦИИ ДЛЯ АДАПТАЦИИ МОДЕЛЕЙ В СИСТЕМНОЙ БИОЛОГИИ

© 2015 г. К.Н. Козлов*, А.М. Самсонов* **, М.Г. Самсонова*

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29;

**Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

E-mail: m.samsonova@spbstu.ru

Поступила в редакцию 25.09.15 г.

Разработан метод полностью параллельной разностной эволюции для определения неизвестных параметров математических моделей путем минимизации отклонения решений от экспериментальных данных. Метод реализован в свободно распространяемой программе с открытым исходным кодом, доступной в сети Интернет. Метод показал на тестовых примерах результаты, сравнимые по точности с тремя лучшими алгоритмами из CEC-2014, и был успешно использован в нескольких реальных задачах.

Ключевые слова: разностная эволюция, моделирование, определение параметров, минимизация.

В настоящее время активно развиваются стохастические, глобальные и локальные, включая основанные на природных явлениях, методы решения обратной задачи математического моделирования путем минимизации целевой функции. Разнообразие биомедицинских приложений и большие объемы гетерогенных данных зачастую делают эффективные алгоритмы зависимыми от конкретной задачи, что затрудняет их широкое использование. Разработанный метод полностью параллельной разностной эволюции (ППРЭ) [1] и реализующая его компьютерная программа позволяют использовать любое количество целевых функций, созданных в различных компьютерных системах.

АЛГОРИТМ МЕТОДА ПОЛНОСТЬЮ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РАЗНОСТНОЙ ЭВОЛЮЦИИ

Разностная эволюция была предложена в 1995 г. Р. Сторном и К. Прайсом [2] как эффективный стохастический метод минимизации функций, который оперирует с инициализированным случайным образом множеством наборов параметров. ППРЭ включает как предложенные в литературе модификации по учету значения целевой функции на этапе рекомбинации [3] и по контролю разнообразия в на-

борах [4], так и новую концепцию возраста параметров, равного числу отвергнутых обновлений. Различные типы априорной информации и экспериментальных данных могут быть использованы для проверки пригодности параметров благодаря новому правилу селекции, использующему заданные уровни достоверности.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Метод ППРЭ доступен по адресу <http://sourceforge.net/projects/deepmethod/>. Эффективность его была проверена на трех многоэкстремальных функциях размерности 30 из набора Competition on Real Parameter Single Objective Optimization 2014 (CEC-2014) [5] – функции Гриванка (Griewank), Растригина (Rastrigin) и Швевеля (Schwefel). Метод ППРЭ превзошел метод Covariance Matrix Learning and Searching Preference (CMLP) для функции Гриванка (лучшее отклонение от известного решения 0,00 против 0,07), CMLP и United Multi-Operator Evolutionary Algorithms (UMOEA) для функций Растригина (0,00 против 6,97 и 1,99) и Швевеля (0,23 против 59,02 и 11,45). Для функций Гриванка и Растригина результаты ППРЭ сходны, а для функции Швевеля проигрывают Success-History Based Parameter Adaptation for Differential Evolution (L-SHADE) (0,23 против 0,00). Таким образом, ППРЭ показал на тестовых примерах результаты, сравнимые или лучшие

Сокращение: ППРЭ – полностью параллельная разностная эволюция.

по точности с тремя лучшими алгоритмами из CEC-2014 [5].

Метод ППРЭ был успешно применен для выявления регуляторных механизмов в сети генов гар, управляющей образованием сегментов в раннем эмбрионе плодовой мушки, в том числе с учетом мутации по гену *Kruppel* и сайтов связывания транскрипционных факторов [6]. Недавно с помощью ППРЭ удалось создать метод geAdmix, позволяющий определять биогеографические корни сильно смешанных индивидов [7].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 14-14-00302).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. K. Kozlov and A. Samsonov, *J. Supercomp.* **57**, 172 (2011).
2. R. Storn and K. Price, *Tech. Rep. TR-95-012*, ICSI (1995).
3. H. Y. Fan and J. Lampinen, *J. Glob. Opt.* **27**, 105 (2003).
4. D. Zaharie, in *Proc. 4th Int. Workshop on Symbolic and Numeric Algorithms for Scientific Computing*, Ed. D. Petcu (Timisoara, Romania, 2002), pp. 385–397.
5. J. J. Liang, B. Y. Qu, and P. N. Suganthan, *Tech. Rep. 201311* (2014).
6. K. Kozlov, V. Gursky, I. Kulakovskiy and M. Samsonova, *BMC Genomics* **15** (Suppl. 112), S6 (2014).
7. K. Kozlov, D. Chebotarev, M. Hassan, et al., *BMC Genomics* **16** (Suppl. 8), S9 (2015).

Method of Entirely Parallel Differential Evolution for Model Adaptation in Systems Biology

K.N. Kozlov*, **A.M. Samsonov* ****, and **M.G. Samsonova***

**Peter the Great St.-Petersburg Polytechnic University, ul. Polytekhnicheskaya 29, St. Petersburg, 195251 Russia*

***Ioffe Institute, ul. Polytekhnicheskaya 26, St. Petersburg, 194021 Russia*

We developed a method of entirely parallel differential evolution for identification of unknown parameters of mathematical models by minimization of the objective function that describes the discrepancy of the model solution and the experimental data. The method is implemented in the free and open source software available on the Internet. The method demonstrated a good performance comparable to the top three methods from CEC-2014 and was successfully applied to several biological problems.

Key words: differential evolution, modeling, parameter identification, minimization