适用于高维优化问题的改进进化策略

王湘中^{1,2}, 喻寿益²

(1. 株洲工学院 电气工程系, 湖南 株洲 412008; 2. 中南大学 信息科学与工程学院, 湖南 长沙 410083)

摘要: 针对高维连续函数优化问题, 研究了 CES (classical evolution strategies) 的变异方式、繁殖方式, 提出了全基因变异与单基因变异的概念, 通过理论分析和仿真计算论证了单基因变异比全基因变异具有更好的局部搜索能力和少的计算开销; 针对 CES 策略参数 (变异幅度) 随机性过强, 不能很好地跟踪进化过程的问题, 提出了随着进化过程递减的策略参数. 最后, 建立了单基因 Gauss 变异与均匀变异相结合、使用精英繁殖、递减型策略参数、小种群规模的 $(\mu + \lambda + k)$ -ES, 给出了一组 100 维典型测试函数的仿真计算结果.

关键词: 进化策略; 变异; 繁殖; 策略参数; 优化**中图分类号:** TP13 **文献标识码:** A

Improved evolution strategies for high-dimensional optimization

WANG Xiang-zhong^{1,2}, YU Shou-yi²(1. Department of Electrical Engineering, Zhuzhou Institute of Technology, Zhuzhou Hunan 412008, China;
2. College of Information Science and Engineering, Central South University, Changsha Hunan 410083, China)

Abstract: For high-dimensional continuous function optimization, manners of mutation and reproduction of classical evolution strategies (CES) are investigated. Concepts of all-gene mutation and single-gene mutation are proposed and it is proofed through theoretical analysis and simulation that single-gene mutation significantly outperforms all-gene mutation in both local searching capability and computation costs. Since parameters of CES cannot properly track the process of evolution because of their strong randomness, a strategy parameter is introduced which descends in the process of evolution. Finally, a new ES, called $(\mu + \lambda + k)$ -ES, is established which is characterized with single-gene Gaussian plus uniform mutation, elitist-reproduction, descending strategy parameter and small population size. Simulation results on a set of 100-dimensional typical test functions are presented.

Key words: evolution strategies; mutation; reproduction; strategy parameter; optimization

1 引言 (Introduction)

科学与工程领域存在大量的优化计算问题, 进化算法由于不苛求问题的连续、可微, 具有很好的普适性, 已成为近年来迅速发展之全新优化算法. 进化策略 ES (Evolutionary Strategy) 与遗传算法、进化规划是进化计算的 3 大分支, ES 特别适用于求解连续函数优化问题. ES 从 $(1+1)$ -ES、 $(\lambda+1)$ -ES 演变为现在最常用的 $(\mu+\lambda)$ -ES 和 (μ,λ) -ES, 统称为 CES (Classical Evolution Strategies), 提高 ES 的收敛速度和全局搜索能力, 一直是 ES 研究的主要内容之一. CES 使用 Gauss 变异算子, XIN Yao^[1] 和 Kappler^[2] 引入了 Cauchy 变异算子, 利用其较强的分散性获得了较好的跳出局部极值点的能力, 但收敛速度有所降低, 林丹^[3], Rudolph G^[4] 通过理论分析表明 Gauss 变异算子具有较强的局部搜索能力, 而均匀变异算子和 Cauchy 变异算子具有较强的局部逃逸能力. MING Chang^[5] 对 ES 中使用组合算子

的效果进行了探索, 一组测试函数的计算结果表明组合算子对单模态函数的优化性能有改进, 而对多模态函数的效果并不显著. 提高收敛速度和全局搜索能力, 仍然是 ES 和其他进化算法的研究热点, 对于高维优化问题 (维数大于 10) 尤其重要.

本文针对高维连续函数优化问题, 提出了全基因变异与单基因变异、共同繁殖与精英繁殖的概念, 分析了 CES 的变异方式、策略参数、繁殖方式, 提出了使用单基因变异方式、递减变异幅度、精英繁殖方式、小种群规模、Gauss 变异与均匀变异相结合的进化策略, 称之为 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES.

2 CES 的描述 (Description of CES)

对于 n 维变量求最大值优化问题:

$$J = \max(f(\mathbf{x})),$$

$$\mathbf{x} \in S = \{(x_1, x_2, \dots, x_n) : x_i \in$$

$$[x_{i\min}, x_{i\max}], i = 1, 2, \dots, n\}.$$

$f(x)$ 为适应值函数. $(\mu + \lambda)$ -ES 的变异与繁殖算子描述^[6]如下:

对于每个父代个体 $(x_i, \sigma_i), i = 1, 2, \dots, \mu$, 产生 λ/μ 个子个体, 这样共产生 λ 个子个体

$$\sigma'_k(j) = \sigma_i(j) \exp(\tau'N(0,1) + \tau N_j(0,1)), \quad (1)$$

$$x'_k(j) = x_i(j) + \sigma'_k(j)N(0,1). \quad (2)$$

CES 的个体由 (x, σ) 对组成, 目标变量 $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ 和策略参数 $\sigma = [\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n]$ 的每个分量(基因)都是由父个体的基因变异产生(本文称之为全基因变异); 每一父个体都产生 λ/μ 个子个体(本文称之为共同繁殖).

3 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES

以下基于对 CES 的变异方式、策略参数、繁殖方式等方面的分析, 论述 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 的构建思想.

3.1 变异方式分析(Analysis of the mutation manner)

CES 使用全基因变异, 一般认为, 这样有利于从各个方向搜索, 事实上, 当问题规模比较大 ($n > 10$) 时, 由于变异方向的随机性, 往往使变异的效果互相抵消, 很难得到进化的后代个体, 导致 CES 在求解大规模问题时的收敛速度很低, 甚至停顿, 而且这种变异的计算开销也大. 在 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 中, 我们提出一种单基因变异方式, 即在产生后代时, 只随机选择其中的一个基因变异, 其他基因直接从父个体继承. 以下分析比较了全基因变异和单基因变异的进化概率.

考察 Gauss 变异算子, 设父个体 $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]$, 经变异产生的子个体 $x' = [x'_1, x'_2, \dots, x'_n] = [x_1 + z_1, x_2 + z_2, \dots, x_n + z_n]$, 变异向量 $z = [z_1, z_2, \dots, z_n]$ 是零均值且方差为 $C = \sigma^2 I$ 的 Gauss 正态分布.

单基因变异的进化概率 P_s : 设所有基因都是可进化的(即没有收敛到极值点), 不失一般性, 为了叙述方便, 对单基因变异, 设随机选择了 x_1 作为变异基因, 其他基因不变, 即 $z_2 = \dots = z_n = 0$, 考虑图 1(a), 单基因变异后, $f(x') > f(x)$ 的概率(称之为进化概率)为

$$P_s = P(f(x') > f(x)) = P(0 < z_1 < \delta_1). \quad (3)$$

由于 z 是零均值的正态分布随机变量, $P_s < 0.5$.

全基因变异的进化概率 P_a : 对于全基因变异, 把全变异产生的适应值函数变化分解为两部分, 即

$$f(x') = f(x_1 + z_1, x_2 + z_2, \dots, x_n + z_n) = f(x_1 + z_1, x_2, \dots, x_n) + \Delta f.$$

Δf 是由于 $x_2, \dots, x_n$ 变异产生的适应值变化, 考虑图 1(b) 和 (c), 全基因变异的进化概率 P_a 为

$$P_a = P(f(x') > f(x)) = P(\Delta f > 0) \cdot P(-\delta_{l+}(\Delta f) < z_1 < \delta_1 + \delta_{r+}(\Delta f)) +$$

$$P(\Delta f \leq 0) \cdot P(\delta_{l-}(\Delta f) < z_1 < \delta_1 - \delta_{r-}(\Delta f)) = P(\Delta f > 0) \cdot (P_s + \Delta P_+) + P(\Delta f \leq 0) \cdot (P_s - \Delta P_-). \quad (4)$$

上式中:

$$\Delta P_+ = P(-\delta_{l+}(\Delta f) < z_1 \leq 0 \parallel \delta_1 \leq z_1 < \delta_1 + \delta_{r+}(\Delta f)),$$

$$\Delta P_- = P(0 < z_1 \leq \delta_{l-}(\Delta f) \parallel \delta_1 - \delta_{r-}(\Delta f) \leq z_1 < \delta_1).$$

(a) 单基因变异的进化区间为 $(x_1, x_1 + \delta_1)$

(b) 全基因变异且 $\Delta f > 0$ 时, 进化区间为 $(x_1 - \delta_{l+}(\Delta f), x_1 + \delta_1 + \delta_{r+}(\Delta f))$

(c) 全基因变异且 $\Delta f < 0$ 时, 进化区间为 $(x_1 + \delta_{l-}(\Delta f), x_1 + \delta_1 - \delta_{r-}(\Delta f))$

图 1 不同变异方式的进化区间分析

Fig. 1 Analyses of evolution region in different type of mutation

显然, $\Delta P_- \leq P_s$. 对于变量数 n 较大时, $n - 1$ 个变量变异时的进化概率与 n 个变量变异时的进化概率相同, 即 $P(\Delta f > 0) = P(f(x') > f(x)) = P_a$, 所以, $P(\Delta f \leq 0) = 1 - P_a$, 代入式(4)整理可得

$$P_a = \frac{P_s - \Delta P_-}{1 - \Delta P_+ - \Delta P_-}. \quad (5)$$

为了直观起见, 可设 $\Delta P_+ = \Delta P_- = \Delta P$, 考察

$$dP = P_a - P_s = \frac{\Delta P(2P_s - 1)}{1 - 2\Delta P}.$$

由于 $P_a < 0.5$ 和 $\Delta P < 0.5$, 所以, $dP < 0$, 即单基因变异的进化概率大于全基因变异的进化概率。

另外, 从式(5)可见, 当 $\Delta P \rightarrow P_a$ 时, $P_a \rightarrow 0$, 全基因变异不能进化, 将发生进化停顿。

3.2 策略参数 (Strategy parameters)

CES 的策略参数指 σ , 它控制变异的幅度, CES 的每个个体、每个个体基因都有各自的策略参数, 按式(1)产生的策略参数随机性过大, 不能很好跟踪进化的进程^[7], 事实上, 随着不断进化, 优秀个体逐步接近极值点, 变异的幅度应该随之减小(代价是牺牲了全局搜索能力), 而且每个基因的变化在统计意义上是同步的。我们在 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 中, 一个种群的所有个体、所有基因共用一个相同的策略参数 σ , 使用确定性递减策略, 即如果若干代(如 30 代, 称为一个进化时段)没有进化, 则确定性地减小 σ , 如递减系数为 0.75。这样, 策略参数的计算开销远比式(1)小。

3.3 繁殖方式 (The manner of reproduction)

CES 采用共同繁殖方式产生子代, 进化的初始阶段, 共同繁殖方式使每个父个体都有相同的繁殖机会, 相当于多点同时搜索, 有利于扩大搜索范围, 但在进化后期, 父个体逐步向最优秀的个体附近聚集, 此时, 其他较差个体很难产生具有足够生存竞争力的优秀个体, 更优秀的后代主要由最优秀的精英个体产生, 进化实际是精英个体产生的后代完成, 其他个体产生的后代基本没有生存能力, 反而增加了计算开销。 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 使用精英繁殖方式, 即每个子个体都由父代中最优秀的精英个体产生, 以增加产生更优秀后代的机会, 提高收敛速度。就计算复杂性而言, 精英繁殖方式的附加计算开销略少于共同繁殖方式。

3.4 均匀变异算子的引入 (Addition of the uniform mutation)

Gauss 变异 ES 的局部搜索能力较强而全局搜索能力较弱, 另外由于递减型的策略参数降低了全局搜索能力, $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 引入了均匀变异算子以增强全局搜索能力, 即在繁殖后代时, 除了用 Gauss 变异产生 λ 个子个体外, 还用均匀变异产生 κ 个子个体, 这样, 构造了改进的 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES。

综合以上, $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 的变异与繁殖算子描述如下:

由当前最优父代个体 $x_0 = \max\{x_i, i = 1, \dots, \mu + \lambda + \kappa\}$, 产生 λ 个单基因 Gauss 变异子个体

$$\begin{cases} x'_k(j) = x_0(j) + \sigma_i N(0, 1), j = \text{random}(1, n), \\ x'_k(i) = x_0(i), k = 1, 2, \dots, \lambda, i = 1, 2, \dots, n, i \neq j. \end{cases} \quad (6)$$

再产生 κ 个单基因均匀变异子个体

$$\begin{cases} x'_i(j) = x_0(j) + \zeta_j, \\ j = \text{random}(1, n), \zeta_j = \text{random}(x_{j\min}, x_{j\max}), \\ x'_i(i) = x_0(i), k = 1, 2, \dots, \kappa, \\ i = 1, 2, \dots, n, i \neq j. \end{cases} \quad (7)$$

计算 $(\lambda + \kappa)$ 个新个体的适应值, 从 $(\mu + \lambda + \kappa)$ 个个体中选择 μ 个最优秀的个体作为下一代的父个体;

如果一个进化时段(如 30 代)的最优个体没有进化, 则 $\sigma_{i+1} = 75\% \sigma_i$, 否则 $\sigma_{i+1} = \sigma_i$ 。

σ 的初值常设为 2.0, 最小值根据精度要求确定, 如精度要求为 1.0×10^{-6} , 则其最小值可取 1.0×10^{-7} 。

4 仿真计算 (Simulation)

为了较全面地比较 CES 在不同变异方式时的性能和验证 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 的有效性, 选择了一组 100 维的典型测试函数进行仿真计算, 函数说明见附录 1。

全基因变异 CES, 单基因变异 CES 的计算参数为: $\mu = 30, \lambda = 200$ ^[6]; 停止条件: 与理论解之间的误差小于 1.0×10^{-6} , 或者进化代数大于 10000 代, 独立计算 10 次。 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 的计算参数为: $\mu = 1, \lambda = 8, \kappa = 2$, 停止条件为: 与理论解之间的误差小于 1.0×10^{-6} , 或者进化代数大于 50000 代, 独立计算 50 次。

计算结果如表 1 所示, 全基因变异 CES 基本没有求出最优解, 单基因变异 CES 求出的解质量比全基因变异 CES 提高了很多, 说明单基因变异明显优于全基因变异, $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 使用了很小的种群规模, 并全部求出了最优解。表 2 给出了在相同计算精度时, 适应值函数的调用次数与 OGA/Q^[8] 的比较结果, 除了函数 3, $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 函数的调用次数远小于 OGA/Q, 说明它具有良好的收敛速度和全局搜索能力。

表 1 全基因变异 CES, 单基因变异 CES, $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 平均适应值

Table 1 Average fitness of CES with all-gene mutation, single-gene mutation and $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES

函数	全基因变异 CES	单基因变异 CES	$(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES
1	16.792072	99.344969	99.333397
2	-359.1940	-0.0001960	-0.000000
3	-374.0636	-176.83794	-4.155318
4	24961.606	24522.003	41898.288
5	66.90986	73.582365	78.332331
6	-39.8739	-0.0350545	-0.000000

表 2 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 与 OGA/Q 适应值函数调用次数比较

Table 2 Number of function evaluation comparison between $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES and OGA/Q

函数	$(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES	OGA/Q
1	19657	302773
2	54294	112559
3	281454	167863
4	9635	302166
5	29044	245930
6	44361	112612

5 结论 (Conclusion)

理论分析和仿真计算结果表明,对于高维优化问题,单基因变异的搜索能力比全基因变异强得多,而且计算开销小. 其实,问题的维数较少时,单基因变异一般好于全基因变异的结论也是成立的,只是效果不很明显. 以单基因 Gauss 变异与均匀变异相结合、精英繁殖、变异幅度递减的策略参数为特征的 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES,即使使用小种群规模也能得到良好的计算效果,通过一组典型的测试函数计算验证了 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 的有效性.

一般认为,对于高维优化问题,CES 不能收敛到全局最优解是由于变异算子的全局搜索能力差,作者认为,CES 使用的全基因变异算子进化效果差,出现进化停顿是其中一个重要原因,而单基因变异可以显著地改善 CES 的性能.

在 $(\mu + \lambda + \kappa)$ -ES 中引入小生境技术求解多模态函数的多个最优解问题,在 ES 中引入学习技术以获得更快的收敛速度是今后的研究内容.

参考文献 (References):

[1] YAO Xin, LIU Yong. Fast evolution strategies [C]// *Proc of the 4th IEEE Conf in Evolutionary Programming*. ANGELINE P J, REYNOLDS R, MCDONN J, et al. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 1997: 151 - 161.

[2] KAPPLER C. Are evolutionary algorithms improved by large mutation [C]// *Lecture Notes in Computer Science: Parallel Problem Solving from Nature (PPSN) IV*. VOIGT H M, EBELING W, ROCHENBERG I, et al. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 1996, 1141: 346 - 355.

[3] 林丹, 李敏强, 寇纪淦. 进化规划和进化策略中变异算子的若干研究[J]. 天津大学学报, 2000, 33(5): 627 - 630.
(LIN Dan, LI Minqiang, KOU Jisong. On Research of mutation operation in evolutionary programming and evolutionary strategies [J]. *J of Tianjin University*, 2000, 33(5): 627 - 630.)

[4] GUNTER R. Local convergence rates of simple evolutionary

algorithms with Cauchy mutations [J]. *IEEE Trans on Evolutionary Computation*, 1997, 4(1): 249 - 258.

[5] CHANG Ming, KAZUHIRO O, KANJI U. Some experimental observations of (μ, μ, λ) -evolution strategies [C]// *Proceedings of the 2001 Congress on Evolutionary Computation*. Seoul: COEX Center, 2001, 1: 663 - 670.

[6] BACK T, SCHWEFEL H P. Evolution Computation: An Overview [C]// *Proc 3rd IEEE Conf on Evolution Computation 1996*. Piscataway, NJ: IEEE Press, 1996: 20 - 29.

[7] 彭宏, 杨立洪, 郑咸义等. 计算工程优化问题的进化策略[J]. 华南理工大学学报, 1997, 25(12): 17 - 21.
(PENG Hong, YANG Lihong, ZHENG Xianyi, et al. A new evolutionary strategy for solving engineering optimization problems [J]. *J of South China University of Technology*, 1997, 25(12): 17 - 21.)

[8] LEUNG Yiuwing, WANG Yuping. An orthogonal genetic algorithm with quantization for global numerical optimization [J]. *IEEE Trans on Evolutionary Computation*, 2001, 1(5): 41 - 53.

附录 1 测试函数说明 (Appendix 1 Description of the benchmark)

$$1) f_1 = \sum_{i=1}^N \sin x_i \sin^{20} \left(\frac{i \times x_i}{\pi} \right), \text{ 据}^{[8]} \text{ 介绍, 当 } N = 100 \text{ 时}$$

最大值为 99. 2784, 作者的计算结果为 99. 61630365;

$$2) f_3 = - \sum_{i=1}^N x_i^2;$$

$$3) f_5 = - \sum_{i=1}^{N-1} [100(x_i - x_{i+1})^2 + (x_i - 1)^2];$$

$$4) f_7 = \sum_{i=1}^N x_i \sin(\sqrt{|x_i|});$$

$$5) f_9 = \frac{-1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i^4 - 16x_i^2 + 5x_i);$$

$$6) f_{10} = - \left(\sum_{i=1}^N |x_i| + \prod_{i=1}^N |x_i| \right).$$

它们的基本特性如附表 1 所示.

附表 1 函数基本特性

Add Table 1 Basic characters of the test functions

函数	维数	变量范围	理论最大值
1	100	[0, 3. 14]	99. 61630365
2	100	[-20, 30]	0
3	100	[-5. 12, 5. 12]	0
4	100	[-512, 512]	41898. 288
5	100	[-5, 5]	78. 33236
6	100	[-10, 10]	0

作者简介:

王湘中 (1966—), 男, 博士研究生, 副教授, 主要研究方向为进化计算, 人工智能, E-mail: wangxzok@163. net;

喻寿益 (1940—), 男, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为自适应控制, 进化计算的理论与应用, 人工智能, E-mail: S-YuShouYi@sina. com.