

# 一个用于优化搜索的学习算法<sup>\*</sup>

金炳尧<sup>1</sup>, 蔚承建<sup>2</sup>, 何振亚<sup>2</sup>

<sup>1</sup>(浙江师范大学 计算机科学与工程学院, 浙江 金华 321004);

<sup>2</sup>(东南大学 无线电系, 江苏 南京 210096)

E-mail: byjin@mail.jhptt.zj.cn

http://www.zjnu.edu.cn

**摘要:** 在 PBIL (population based incremental learning) 算法和自私基因算法的基础上, 提出一个新的优化搜索算法——基因学习算法。该算法允许每个等位基因取多值(复等位基因), 并且用信息熵作为结束条件的判据。在学习过程中还与局部启发式搜索法相结合。最后用基因学习算法解决了 3 个典型的组合优化问题(最大截问题、调度问题和旅行商问题), 取得了比现有文献最优值还好的结果。

**关键词:** 进化计算; 遗传算法; 局部搜索; 概率模型; 基因学习算法

中图法分类号: TP301

文献标识码: A

在用传统优化技术解决一些复杂的、规模较大的组合优化问题时, 特别是 NP 难题出现困难时, 一些近似算法相继被推出。局部搜索法由于其具有快速灵活、通用性好的特点而成为最成功的算法之一。但是, 局部搜索法极易陷入局部最优而结束搜索, 使最终结果不能令人满意。模拟退火从固体退火机理中得到启示, 把局部搜索算法的只接受优化解的策略改为在一定的概率下接受部分劣化解, 从而使搜索能够继续进行, 并且获得了较好的结果。进化计算是从自然选择的生物模型中得到启发而发展起来的优化与搜索算法, 它把单个个体的搜索改为群体搜索, 用优胜劣汰的自然选择原则不断地更新群体, 使搜索群体逐步优化。近年来, 出现了一种概率学习的进化模型, 如 Baluja 的 PBIL (population based incremental learning) 算法<sup>[1]</sup>、Corno 的自私基因算法<sup>[2]</sup>。概率学习的进化模型源于群体遗传学, 通过不断地学习每一代的最优个体, 最终收敛于最优或较优的解的概率。其过程描述如下:

- (1) 初始化等位基因概率  $P^i$
- (2) While (进化计算的结束条件=false)
- (3) 通过基因重组(概率采样)产生一个评价群体
- (4) 计算并比较上述评价群体中每个个体的目标函数值, 从中选取一个最优个体
- (5) 用上述产生的最优个体, 通过概率修正算法修正等位基因概率  $P^i$
- (6) End

本文在此概率学习进化模型的基础上提出了一个新的算法——基因学习算法(gene learning algorithm)。该算法在原概率学习算法的基础上定义了适应范围更广的等位基因结构; 在最优个体获取方法中引进了局部搜索算法, 解决了原算法局部搜索能力差的缺点; 在解决规模更大的优化问

\* 收稿日期: 1999-05-17; 修改日期: 2000-01-13

基金项目: 浙江省教委基金资助项目(961100)

作者简介: 金炳尧(1964—), 男, 浙江兰溪人, 副教授, 主要研究领域为化学计量学, 模式识别, 进化计算; 蔚承建(1957—), 男, 吉林四平人, 副教授, 主要研究领域为进化计算理论及其应用研究; 何振亚(1922—), 男, 江苏盐城人, 教授, 博士生导师, 主要研究领域为自适应信号处理, 多维信号, 神经网络理论。

题中使用了一个非常有效的概率加速算法,使该算法的收敛问题得到较好的解决;在学习算法的结束条件上,使用了系统信息熵的概念,使学习算法的进程与结束都能很好地控制。

## 1 基因学习算法原理

### 1.1 等位基因结构、概率表示及初始化

设  $f: S \rightarrow R$  为被优化的目标函数,其中解空间  $S$  为该问题的可行解集.不失一般性,这里考虑函数最小化问题:  $\min f(s), s \in S$ . 与遗传算法类似,使用基因学习算法必须首先将原优化问题的解空间  $S$  映射到基因学习算法能够操作的基因解空间  $S'$ .

**定义 1.** 设可行解  $s' \in S'$  由  $l$  个基因位组成,其中第  $i$  位的值可以是集合  $\{a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{in_i}\}$  中的任意一个或多个.集合  $\{a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{in_i}\}$  称为第  $i$  位的等位基因.如果第  $i$  位只能取  $\{a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{in_i}\}$  中的一个值,则称第  $i$  位为单等位基因位.如果第  $i$  位必须取  $\{a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{in_i}\}$  中确定个数的多个值,则称第  $i$  位为复等位基因位.

对于有  $l$  个基因位,每个基因位都可以从  $n$  个等位基因中取值的优化问题,其基因解可以用一个布尔矩阵  $S'_{l \times n}$  来表示,如果矩阵元素  $s_{ij} = 1$ ,就表示第  $i$  个基因位的取值为该基因位的第  $j$  个等位基因值.很明显,布尔矩阵描述法可以把单等位基因与复等位基因问题统一起来.基因学习算法中的基因位既可以是单等位基因位,又可以是复等位基因位,甚至可以由单等位基因位与复等位基因位组成的混合结构.

**定义 2.** 在解空间  $S'$  的  $l$  个基因位中,每个基因位取与该基因位对应的等位基因值的概率由矢量  $P^i = (P_{i1}, P_{i2}, \dots, P_{in_i})$  来表示.其中,第  $i$  个基因位取与该基因位对应的  $n_i$  个等位基因值的概率用矢量  $P_i = (p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{in_i})$  描述,  $p_{ij}$  为第  $i$  个基因位取等位基因集合  $\{a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{in_i}\}$  中第  $j$  个值的概率,  $j = 1, 2, \dots, n_i$ ,且每个基因位取等位基因的概率之和都为 1,即概率矢量  $P_i (i = 1, 2, \dots, l)$  都是归一化的:

$$\sum_{j=1}^{n_i} p_{ij} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, l.$$

等位基因概率的初始化一般是采用等位基因等概率的初始化方法.对于有  $m$  个等位基因的基因位,每个等位基因的初始概率为  $p = 1/m$ .不过,如果有适当的启发式初始化算法将会使大规模的 NP 问题的计算更快速.

### 1.2 基因重组及每代最优个体的获得方法

**定义 3.** 在基因空间  $S'$  中,通过概率  $P^i$  采样得到的可行解  $s' \in S'$  称为个体或人口.该概率采样的过程称为基因重组.

基因重组算法根据问题的基因结构的不同而有所不同.对于最简单的无约束的单等位基因问题,其基因重组算法可以用简单的赌盘选择算法:把第  $i$  个基因位的  $n_i$  个等位基因的概率看成是赌盘上的  $n_i$  个不同区域,区域的大小为其概率值.这  $n_i$  个区域恰好组成一个完整的赌盘( $n_i$  个概率是归一化的).每次采样时用  $0 \sim 1$  均匀分布随机数来选择每个基因位的等位基因.其过程可描述如下( $k$  为最后的采样所得的等位基因序号):

- (1) 产生一个  $0 \sim 1$  均匀分布的随机数  $r$
- (2)  $k = 1; \text{sum} = 0;$
- (3) While ( $\text{sum} < r$  且  $k < n_i$ )
- (4)  $\text{sum} = \text{sum} + p_{ik}$

(5)  $k=k+1$

(6) End

基因学习算法通过不断地对每一代最优个体的等位基因的累积学习,使等位基因的概率得到优化学习.在基因学习算法中,每一代最优个体的获得可以使用3种方法:群体选择法、局部搜索法以及这两种方法的混合算法.

群体选择法是通过基因重组获得一个群体,计算并比较群体的每个个体的目标函数值,从中选取最优者.局部搜索法是通过基因重组获得一个单独的个体,然后通过多次局部搜索操作来获得更优的个体.混合法是通过基因重组产生  $n$  个个体,根据其目标函数值选择最优的个体,然后对该最优个体再进行  $m$  次局部搜索操作;或通过基因重组产生  $n$  个个体,对每个个体分别进行  $m$  次局部搜索操作,然后再根据它们的目标函数值选择最优的个体.混合法是两者方法的结合并兼具两者的优点.使用混合法计算效果更好.

### 1.3 等位基因概率的修正方法

等位基因概率修正是基因学习算法中的对基因学习的累积操作,即通过不断地用每一代最优解的基因组去修正等位基因概率.其方法可以是多种多样的,其中最为方便的是直接将最优个体中出现的等位基因所对应的概率加上一个修正因子  $F$ , 然后进行等位基因的概率归一化处理(如等比归一化,即等位基因同乘一个归一化系数).

$$p_{ij} = p_{ij} + F \times s_{ij},$$

$$p_{ij} = p_{ij} \times \frac{1}{\sum_j p_{ij}},$$

其中  $i=1,2,\dots,l, j=1,2,\dots,n, s_{ij}$  为最优解的布尔矩阵中的元素. 概率修正因子取值的范围一般在  $10^{-3} \sim 10^{-1}$  量级. 对于规模较小的问题,在计算时间允许的情况下,概率修正因子相对来说可以取较小的值,这有利于获得较好的计算结果;而对于一些规模较大的组合优化问题,相对来说概率修正因子就需取稍大一点的值,才能保证在适当的时间内收敛,并获得较好的计算结果.

### 1.4 收敛加速方法与基因学习算法的结束条件

许多组合优化问题,尤其是规模较大的问题,必须采用适当的加速算法,才能收敛或获得满意的结果.本文提出了一个概率指数采样法来加速收敛.概率指数采样法是指在采样的过程中不直接使用概率  $p_{ij}$ ,而是使用概率的指数  $p_{ij}^\alpha (\alpha > 1)$ . 由于  $\alpha > 1$ , 因此  $p_{ij}^\alpha$  可以使赌盘中各等位基因所对应的区域大小对比加大.也就是说,如果  $p_{ij}/p_{ik} > 1$ , 则  $(p_{ij}^\alpha/p_{ik}^\alpha) > p_{ij}/p_{ik}$ , 使原来  $p_{ij}$  值大的等位基因在概率指数采样法中变得取值的概率更大,从而加速了概率收敛的速度.

由于指数的计算量非常大,在实际应用中可以采用部分基因位的概率幂乘(平方、立方)来控制收敛速度.这里使用概率幂乘的基因位在每次采样中都是随机选取的,并且可以用一个称为加速率的参数来控制:加速率为 0 时,完全不加速;加速率为 1 时,全部基因位都采用概率幂乘加速法.

基因学习算法的终止条件一般是直接规定一个最大学习(进化)代数,这是最简单也是最常用的方法.但是,在解决一些复杂问题时,有时很难确定最大学习(进化)代数,更无法确切地了解基因学习算法进行的程度.这里提出一个利用系统信息熵来估计基因学习算法计算进行的程度并作为终止学习计算的方法.

熵是对系统信息量的描述.对于一个有  $n$  种状态的信息系统,如果每种状态的归一化概率分别为  $p_1, p_2, \dots, p_n$ , 则该信息系统的信息熵为

$$S_{\text{entropy}} = - \sum_{i=1}^n p_i \ln p_i.$$

由信息熵的定义可以看出,使用信息熵来估计基因学习过程中等位基因概率变化的进程是最自然、最精确的方法.用等位基因的信息熵作为基因学习算法的结束条件也是十分方便的.如基因长度为 $l$ ,等位基因数都为 $n$ 的单等位基因问题,其最大熵为 $S_{\text{max}} = l \ln n$ (初始化时的等概率状态),而最小熵为 $0$ (最终收敛时,某个等位基因的概率为 $1$ ,其余等位基因的概率都为 $0$ ).根据等位基因系统信息熵在学习过程中的变化情况,基因学习算法的结束条件可以选择一个比最小熵略大的值,当熵值小于该值时,则结束基因学习算法.

## 2 基因学习算法在组合优化问题中的几个典型应用

### 2.1 $\{0,1\}$ 单等位基因问题

许多组合优化问题的解可以用这种 $\{0,1\}$ 单等位基因结构来表示.其中较为典型的是 $\{0,1\}$ 背包问题、图论中的最大截问题、独立集问题等.图的最大截问题是将带权图 $G=(V,E)$ 的顶点集 $V=\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 划分为两个子集 $V_0$ 与 $V_1$ ,使边集 $E$ 中所有顶点分属两个子集 $V_0$ 与 $V_1$ 的边的权之和最大.很明显,这是一个有 $n$ 个基因位,每个基因位只能取 $\{0,1\}$ 值的单等位基因问题.这里, $0$ 表示属于 $V_0$ , $1$ 表示属于 $V_1$ .

表1是顶点数分别为 $n=50, 100, 200$ 的最大截问题的计算结果(概率修正因子为 $0.005$ ).例子的数据按照文献[3]描述的方法产生.从表中的数据可以明显地看出,局部搜索法由于缺乏全局优化能力,计算结果不理想.同样地,基因学习算法的群体选择法由于缺乏局部优化能力,计算结果也不理想.表中的数据为50次的平均值,括号中的数据为50次中的最大值.这里的局部搜索法采用与模拟退火方法相同的邻域结构,详见文献[5].混合法使用先群体选择,再以局部搜索的方式进行.

Table 1 The results of some maximum cut problems (MCP)

表1 图的最大截问题的计算结果

$N$	Local search <sup>①</sup>	Simulated annealing <sup>②</sup>	GL (population) <sup>③</sup>	GL (local search) <sup>④</sup>	GL (hybrid) <sup>⑤</sup>
50	1 057.0(1106)	1 103.5(1106)	1 100.3(1106)	1 105.6(1106)	1 103.8(1106)
100	1 963.6(2064)	2 053.7(2064)	2 026.0(2064)	2 058.1(2064)	2 057.2(2064)
200	4 086.8(4214)	4 239.0(4282)	4 173.5(4236)	4 260.8(4290)	4 253.1(4284)

①局部搜索法,②模拟退火法,③基因学习法(群体法),④基因学习法(局部搜索法),⑤基因学习法(混合法).

### 2.2 有 $m$ 个等位基因的单等位基因问题

有 $m$ 个等位基因的单等位基因问题是较为常见的.调度问题、时间表安排问题、图的着色问题都属于这一类问题.本文以多机并行调度问题为计算实例.该调度问题可以描述如下<sup>[4,5]</sup>:有 $n$ 个相互独立的工件 $J_1, J_2, \dots, J_n$ ,加工完成所需时间分别为 $t_1, t_2, \dots, t_n$ ,均可由 $m$ 台机器 $M_1, M_2, \dots, M_m$ 中的任一完成,且每台机器一次能完成一个任务.要找一个最小调度,即找对 $n$ 个任务的一个调度,使完成所有任务的时间最短.

对于 $n$ 个工件, $m$ 台机器的调度问题,其解的基因结构可以这样构造:每个工件为一个基因位,而每个工件可选的加工机器号为等位基因.很显然,这是一个有 $n$ 个基因位,每个基因位都有 $m$ 个等位基因的无约束单等位基因结构问题.本文计算了文献[5]中30个工件10台机器的调度,并与原文献进行比较,结果见表2.该调度问题的目标函数采用文献[4,5]中描述的最小平方和函数,基因学习算法中的局部搜索法使用与文献[4]中相同的邻域结构进行搜索.

**Table 2** The results of scheduling problem (data from Ref. [5])**表 2** 多机并行调度问题的计算结果(数据取自文献[5])

Method <sup>①</sup>	GL (population) <sup>②</sup>	GL (local search) <sup>③</sup>	GL (hybrid) <sup>④</sup>	Simulated annealing <sup>[5]⑤</sup>	Evolutionary programming <sup>[5]⑥</sup>
Average results <sup>⑦</sup>	41.50	41.75	40.55	46	42.5
Optimal results <sup>⑧</sup>	40	40	39	44	41

①计算方法,②基因学习法(群体法),③基因学习法(局部搜索法),④基因学习法(混合法),  
⑤模拟退火法<sup>[6]</sup>,⑥EP法<sup>[5]</sup>,⑦平均结果,⑧最优结果.

表中的群体选择法、局部搜索法、混合法(先群体选择,再局部搜索)的参数如下:群体规模为每代 100 个,优化变异次数为每代 100 次,概率修正因子为 0.01. 计算结果表明,用基因学习算法解调度问题的结果明显优于文献[5]中模拟退火与 EP 算法的结果.

### 2.3 复等位基因问题

TSP(travelling salesman problem)是  $n$  个城市的最小环行路线问题的简称. 其特点是遍历、环行. 每个城市必须且只能与两个不同的城市相连. 根据这一特点,本文设计了以下解的基因结构:  $n$  个城市作为  $n$  个基因位;每个基因位的等位基因数为  $n-1$  个(除本身以外的其他城市);每个基因位必须同时取两个不同的等位基因(满足环行条件). 本文对文献[6]中的  $n=30,50,75$  这 3 个例子进行计算(20 次),得到了较为满意的结果(见表 3 及图 1). 另外,对文献[4]中的 TSP 问题(CHN144)的数据也进行了计算(20 次),将 TSP 问题的最优结果从原来的 30 380 提高到现在的 30 349. 这里用先群体选择后局部搜索的混合法,局部搜索用 Lin 的 2-opt 法<sup>[7]</sup>. 计算结果显示,使用该算法不仅最优结果好,而且平均结果也非常好. 这表明该算法搜索能力强,结果稳定.

**Table 3** The results of some TSP examples**表 3** 几个 TSP 实例的基因学习算法计算结果

Name of TSP examples <sup>①</sup>	Fogel-30	Fogel-50	Fogel-75	CHN144
Optimal results from Ref. [6] <sup>②</sup>	423.74	427.86	549.18	30 380
Optimal results of this paper <sup>③</sup>	423.74	427.86	542.31	30 349
Probabilities updating factor <sup>④</sup>	0.02	0.02	0.02	0.003 5
Sampling accelerating probability ( $\alpha=2$ ) <sup>⑤</sup>	0	0.1	0.2	1
Average results of this paper: (20 times) <sup>⑥</sup>	424.05	429.52	544.07	30 580.5

①问题名称,②文献[6]的最优结果,③本文的最优计算结果,④概率修正因子,⑤采样加速率( $\alpha=2$ ),⑥本文的平均计算结果(20次).

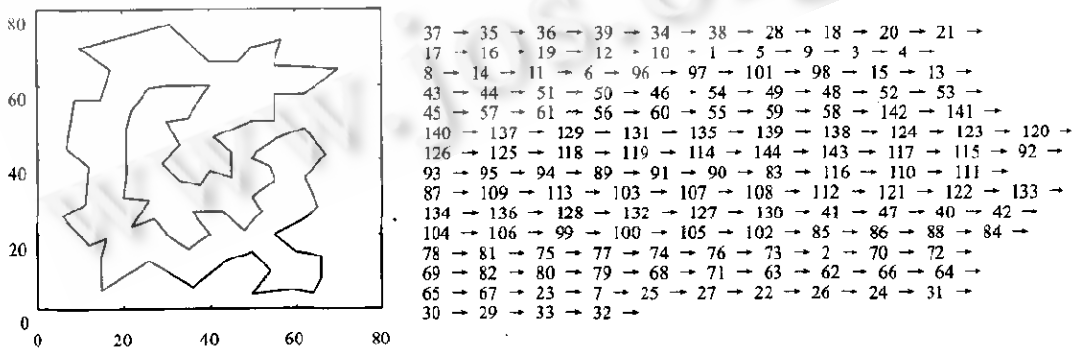


Fig. 1 The optimal results of two examples; left is Fogel-75, right is CHN144

图 1 TSP 的最优路线图:左为 Fogel-75 的结果,右为 CHN144 的结果

### 3 结束语

本文系统地阐述了基因学习算法的算法原理,并列举了若干个典型的应用实例. 由于基因学习

算法同时吸取了遗传算法与局部搜索算法的优点,克服了遗传算法的局部搜索能力不足以及局部搜索算法的全局优化效果差的缺点,使该算法具有很强的适应性.因此,基因学习算法是一个将遗传与局部搜索结合在一起的理想的优化学习算法.不过,基因学习算法与其他任何智能计算方法一样,都不能保证得到全局最优解,尤其是在规模较大时.

### References:

- [1] Baluja, S. Population-Based incremental learning. Technical Report, CMU-CS-94-163, Carnegie Mellon University, 1994.
- [2] Corno, F., Reorda, M., Squillero, G. A new evolutionary algorithm inspired by the selfish gene theory. In: Proceedings of the ICEC'98. Piscataway, IEEE Service Center, 1998. 575~580.
- [3] Aarts, E. H. L., Korst, J. H. M. Simulated Annealing and Boltzmann Machines. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1989.
- [4] Kang, Li san, Xie, Yun, You, Shi yong, *et al.* Nonnumeric Parallel Algorithm (Simulated Annealing Algorithm). Beijing: Science Press, 1994. 149~153 (in Chinese).
- [5] Liu, Min, Wu, Cheng, Jiang, Xin-song. Application of evolutionary programming method in identical parallel machine scheduling problem. Journal of Tsinghua University (Sci. & Tech. ed.), 1998, 38(8):100~103 (in Chinese).
- [6] Fogel, D. B. Applying evolutionary programming to selected traveling salesman problems. Cybernetics and Systems, 1993, 24(1):27~36.
- [7] Lin, S., Kernighan, B. W. An effective heuristic algorithm for the travelling salesman problem. Operations Research, 1972, 21(5):498~516.

### 附中文参考文献:

- [4] 康立三,谢云,尤矢勇,等.非数值并行算法(模拟退火算法).北京:科学出版社,1994.
- [5] 刘民,吴澄,蒋心松.进化规划方法在并行多机调度问题中的应用.清华大学学报(自然科学版),1998,38(8):100~103.

## A Learning Algorithm for Optimum Search\*

JIN Bing-yao<sup>1</sup>, WEI Cheng-jian<sup>2</sup>, HE Zhen-ya<sup>2</sup>

<sup>1</sup>(College of Computer Science and Engineering, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004, China);

<sup>2</sup>(Department of Radio Engineering, Southeast University, Nanjing 210096, China)

E-mail: byjin@mail.jhptt.zj.cn

http://www.zjnu.edu.cn

**Abstract:** In this paper, a new gene learning algorithm for optimum search problem is proposed, which extended the binary population-based incremental learning (PBIL) and selfish algorithm (SA) by allowing a gene's allele to be multi-valued. In this new algorithm, the entropy of probability distribution as used as the criterion of termination, and the evolution process is combined with local heuristic search. Three typical combinatorial optimization problems (maximum cut problem, scheduling problem and travelling salesman problem) are solved and some results are better than the best result of existing algorithm.

**Key words:** evolutionary computation; genetic algorithm; local search; probabilistic modeling; gene learning algorithm (GL)

\* Received May 17, 1999; accepted January 13, 2000

Supported by the Scientific Foundation of Education Commission of Zhejiang Province of China under Grant No. 961100