第33卷 第16期 计 算 机 工 程 2007年8月
Vol.33 No.16 Computer Engineering August 2007
·人工智能及识别技术· 文章编号：1000—3428(2007)16—0153—03 文献标识码：A 中图分类号：TP18

基于变异的Bayesian优化算法

武 燕[1]，王宇平[2]，刘小雄[3]
(1. 西安电子科技大学理学院，西安 710071；2. 西安电子科技大学计算机学院，西安 710071；3. 西北工业大学自动化学院，西安 710072)

摘 要：将变异算子与Bayesian优化算法相结合，提出了一种基于变异的Bayesian优化算法。在算法中设计了一个种群多样性函数，通过此函数引入变异算子，目的是利用变异算子的邻域搜索能力，保持种群多样性，将贝叶斯概率模型提取的全局信息与变异算子的局部信息联系起来，避免陷入局部最优。仿真研究表明基于变异的Bayesian优化算法的寻优能力比Bayesian优化算法更强。

关键词：变异算子；Bayesian优化算法；种群多样性

Bayesian Optimization Algorithm Based on Mutation Operator

WU Yan[1], WANG Yu-ping[2], LIU Xiao-xiong[3]
(1. School of Science, Xidian University, Xi'an 710071; 2. School of Computer Science and Technology, Xidian University, Xi'an 710071;
3. College of Automation, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072)

【Abstract】A new Bayesian optimization algorithm is presented by incorporating mutation operator into Bayesian optimization algorithm. A diversity function of population is proposed and the mutation operator is incorporated in BOA through this function. The original objective is to maintain the diversity of population using the neighborhood search of mutation operator. It is expected that the proposed algorithm can get genuine global information by combining the global information in current population extracted by Bayesian probability model and local information explored by mutation operator. Experimental results show that the proposed algorithm outperforms BOA.

【Key words】mutation operator; Bayesian optimization algorithm; population diversity

Bayesian优化算法(BOA)是近年来逐渐兴起的一种基于概率分布的进化算法[1~3]，它结合了图形模式和进化计算两个领域的知识。BOA利用当前种群的优秀解所提供的信息，建立贝叶斯网络概率模型以反映变量之间的依赖关系以及优秀解的分布，并通过此概率模型抽样产生新的解作为下一代种群，如此重复，直到满足终止条件为止。BOA由概率模型取代遗传算法[4]中的变异和杂交算子，利用优秀解的概率分布指导解的生成，避免了杂交和变异算子对积木块(building block)的破坏，克服欺骗问题，是对遗传算法的一种改进。已经验证BOA在一些经典问题上，尤其是有关欺骗函数的问题，表现出良好的性能。

虽然Bayesian优化算法表现出了良好的性能，但是对于某些问题，仍然会陷入局部极值点[1]。由于BOA是利用从当前种群中提取的优秀解分布信息，即全局信息，来指导算法搜索最优解，但是此全局信息只是当前种群的全局信息，并不能代表整个问题优秀解的全部信息。如果信息提供或提取错误，就会发生指导性错误，从而陷入局部极小。

1 Bayesian 优化算法

1.1 Bayesian 优化算法的框架

Bayesian 优化算法利用优秀解所提供的信息，建立贝叶斯网络概率模型，并通过此概率模型抽样产生新的解。同遗传算法相似，Bayesian 优化算法也是基于种群进化的一种算法，通常初始种群由满足均匀分布的可行解组成。其算法描述如下：

(1) $t\leftarrow 0$，随机产生初始群体，P(t)。

(2)根据某种选择机制从 P(t)中选择部分优秀解构成D(t)。

(3)用 Bayes 网络概率模型建立 D(t)的概率分布。

(4)依据概率分布抽样产生下一代种群 P(t+1)。

(5)若终止条件不满足，$t\leftarrow t+1$，转(2)。

(6)群体 P(t)为所求解。

在 Bayesian 优化算法中，建立 Bayes 网络是算法的核心和关键。Bayes 网络是联合概率分布的图形表示形式。一个 Bayes 网络由两部分组成：结构 B 和参数θ。结构 B 是一个有向无环图，其节点表示各个变量，节点之间的有向边表示变量之间的条件依赖关系。参数θ是各变量条件概率分布表的集合$\{\theta_{X_i|\Pi_i}\}$，其中$\theta_{X_i|\Pi_i}=P(X_i\,|\,\Pi_i)$，表示变量$X_i$在其父节点(若有从$v_i$到$v_j$的有向边，则$v_i$称为$v_j$的父节点)集$\Pi_i$下的条件概率分布。由 Bayes 网络可以将个体的联合概率分布分解为$P(X)=P(X_1,X_2,...,X_n)=\prod_{i=1}^{n}P(X_i\,|\,\Pi_i)$。

这里 Bayes 网络是用来描述所选择的优秀解的特征和分布，以此来指导新解的生成。Bayes 网络的学习是一个 NP-难题，对它的研究已经非常深入，通常情况下采用记分搜索方法，本文使用 BIC 评价标准，贪婪算法，建立 Bayes 网络，详细内容可参考文献[1,2]。

1.2 算法分析

虽然BOA利用概率模型取代遗传算法中的杂交和变异算

基金项目：国家自然科学基金资助项目(60374063)
作者简介：武 燕(1976－)，女，博士研究生、讲师，主研方向：组合优化，遗传算法；王宇平，教授、博士生导师；刘小雄，博士研究生
收稿日期：2006-10-13 **E-mail：**yanerch@163.com

子，避免了这两个算子对积木块的破坏，改善GA现存的连锁问题，但是BOA又面临新的问题。BOA的主要思想是从当前种群中选择优秀解，从这些解中提取信息建立Bayes概率模型，以此来描述变量(即基因)之间的依赖关系及优秀解的分布信息(即全局信息)，并从模型中抽样产生新解，指导解的生成。但是如果优秀解的信息提供或提取错误，将会导致错误的概率模型、错误的指导，最终陷入局部极小而不能跳出。错误信息的提供有两个原因：(1)由函数本身的特性所决定的；(2)由选择机制决定的。下面以一个陷阱函数[5]为例进行分析。

一个五阶陷阱子函数定义为

$$trap_5(u)=\begin{cases}5, & u=5\\ 4-u, & \text{else}\end{cases}$$

其中，u 是长为 5 的输入字串中 1 的个数。每个陷阱子函数有一个全局最优解 11111，以及一个局部最优解 00000。一个 n 位的五阶陷阱和函数可以由下面的形式表示：

$$f(X)=\sum_{i=1}^{m} trap_5(u)$$

其中，$n=5m$，函数有 m 个局部极值以及唯一的一个全局极值。

对于二进制编码的问题，以 Hamming 距离定义个体(即染色体)的邻域。在上述问题中取 m=2，个体的邻域是 Hamming 距离为 1 的所有的个体，那么可得到唯一的一个全局最优解为 11111111，两个局部最优解 11110000 和 00001111。图 1 和图 2 为全局最优解 11111111，局部最优解 11110000 及其邻域的适应值表示，括号外为个体编码，括号内为对应的适应值，点表示个体，两个点之间的边表示 Hamming 距离为 1。

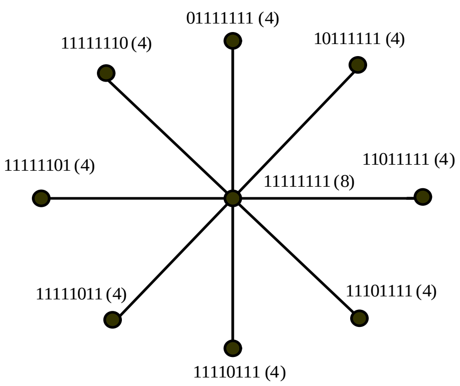

图 1　全局最优解及其邻域的适应值

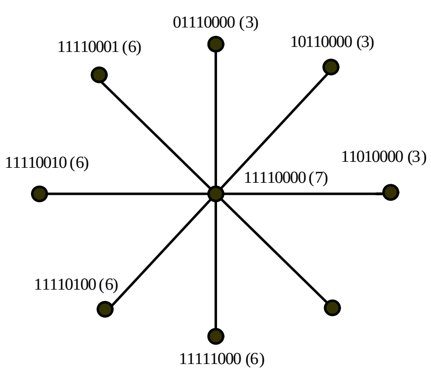

图 2　一个局部最优解及其邻域的适应值

从图 1 和图 2 中可以看出，全局最优解邻域内所有点的适应值都比局部最优解邻域内的某些点的适应值差，虽然通过均匀分布可以产生这些点的一部分，但是经选择之后这些点并不能进入所选择的优秀解集合中，那么这样选择的优秀解并不能代表真正的优秀解的分布信息，致使提供信息错误，陷入局部最优。但是如果能保持种群多样性，最优解邻域内的较差点容易被看作较好点选择到优秀解集合中，这样优秀解集所提供的信息才能反映整个问题优秀解的分布信息。为了避免早熟，陷入局部最优，研究者们[1]希望通过改变选择策略来改善这一问题，例如基于排序的选择策略，但是最优解邻域内的这些适应值较差点还是很难被选择。基于以上原因，本文利用遗传算法中变异算子的邻域搜索能力来改善这一缺陷，保持种群多样性。

2　基于变异的 Bayesian 优化算法

BOA 通过建立概率模型描述进化过程解的分布情况，可以提取当前代最优解的分布信息，即全局信息，并依据此信息指导解的生成。但是这些信息只是当前代的全局最优信息，并不能反映问题的最优信息，如果种群多样性得不到保证，不能够探索更大搜索空间，那么这些信息就会发生错误指导，容易陷入局部最优。而变异算子利用邻域搜索能力可以扩大搜索空间，充分发挥局部信息的作用，可保持种群多样性。

本文将变异算子结合到 BOA 中，提出基于变异的 Bayesian 优化算法 M-BOA，目的是保持种群多样性。为了避免多余的计算及算法的随机性，设计了一个种群多样性函数，以此函数来控制变异算子。具体算法如下：

(1) $t\leftarrow 0$，按均匀分布随机产生包含 N 个个体的初始群体，P(t)。

(2)根据某种选择机制从 P(t)中选择部分优秀解构成 D(t)。

(3)用 Bayes 概率模型建立 D(t)的概率分布。

(4)依据概率分布抽样产生后代O_1(t+1)。

(5)从群体P(t)，O_1(t+1) 中选择N个优秀个体作为后代P(t+1)。

(6)分两种情况：1)种群多样性函数为静态情况(static)，$div(P)<[\frac{n}{2}]$；2)动态情况(dynamic)，$div(P)<[\frac{n}{2}(1-\frac{gen}{gen+N})]$；其中，$gen$ 为种群代数；[] 为四舍五入取整；n 表示个体长度。

选择其中一种作为判断标准 ，如P(t+1)满足种群多样性函数的条件，对P(t+1)中个体进行变异，产生后代O_2(t+1)。否则，转(8)。

(7)从群体P(t+1)，O_2(t+1)中选择N个优秀个体作为后代P(t+1)。

(8)若终止条件不满足，$t\leftarrow t+1$，转(2)。

(9)群体 P(t)为所求解。

种群多样性函数的设计可以有多种方式。对于二进制编码问题利用Hamming距离来设计种群多样性函数。设搜索空间为 $\{0,1\}^n$，个体表示为 $X^j=(X^j{}_1,X^j{}_2,...,X^j{}_n)$，$X^j{}_i\in\{0,1\}^n$，$i=1,2,...,n$，$j=1,2,...,N$。$n$是个体长度；$N$是种群规模；$X^j$是当前种群中的第j个个体。

设 b 与 $b^{'}$ 是两个长度为 l 的二进制串，

$$H(b,b^{'})=\sum_{i=1}^{l}(b_i\,\&\,\tilde{}\,b_i^{'})$$

其中，$b_i\,\&\,\tilde{}\,b_i^{'}$ 表示 b_i 与非 $b_i^{'}$ 求与运算。由此 b 与 $b^{'}$ 的 Hamming

距离即是 b 与 b' 相异的位数。

设当前代的最优值为 g_{best}，其它个体与 g_{best} 的 Hamming 距离为 $h_j = H(X^j, g_{best})$， $j = 1,2,...,N$ 。种群多样性函数定义为 $div(P) = \max_{1\le i\le N}\{h_i\}$，或 $div(P) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} H(X^i, g_{best})$。

种群多样性函数可以根据具体问题设计，对于非二进制表示的个体，单目标函数可以采用解空间的几何距离来定义，对于多目标函数可以采用目标空间的距离来设计。

3 实验结果

本文对下面 3 个有代表性的函数进行了测试，并给出了比较性研究：

(1)五阶欺骗函数，如 1.2 节所述。

(2)六阶双极函数[6]： $f(u) = \begin{cases} 0.9, & u=3 \\ 0.8, & u=2, u=3 \\ 0, & u=1, u=5 \\ 1, & u=0, u=6 \end{cases}$

(3)五阶重叠欺骗函数[1]：

$$f(x) = \sum_{j=0}^{m-1} f^5(s_j)$$

其中， $s_j = x_{4j+1}x_{4j+2}x_{4j+3}x_{4j+4}x_{4j+5}$ ， $n = 4m+1$。

$$f^5(x) = \begin{cases} 4\times f^3(x_1x_2x_3), & x_2 = x_4 \text{and} x_3 = x_5 \\ 0, & \text{else} \end{cases}$$

$$f^3(x) = \begin{cases} 0.595, & x=000 \\ 0.200, & x=001 \\ 0.595, & x=010 \\ 0.100, & x=011 \\ 1.000, & x=100 \\ 0.050, & x=101 \\ 0.090, & x=110 \\ 0.150, & x=111 \end{cases}$$

由于计算量是衡量算法性能的一个重要指标，因此实验主要在进化代数与适应值计算方面对 BOA 与 M-BOA 这两种算法进行了比较。图 3~图 5 为进化代数与最优值比较。

由图 3~图 5 可以看出，在相同种群规模下 M-BOA 达到最优值所需代数较小，这说明在算法中保持种群的多样性是很有必要的，而且通过遗传算法中的变异算子可以达到保持种群多样性的目的。在本实验中 dynamic M-BOA 总能以很小的代数达到最优值，而 static M-BOA 有时达不到最优值。表 1 为适应值评价次数比较。

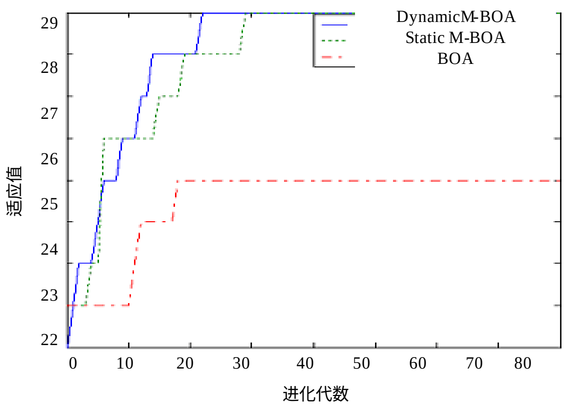

图 3 五阶欺骗函数在相同种群规模下的比较

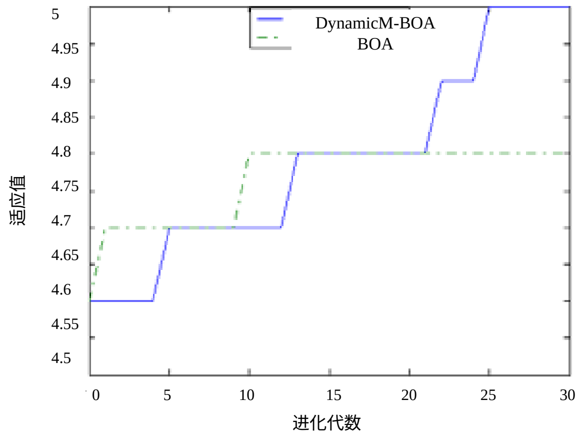

图 4 对于六阶双极函数在相同种群规模下的比较

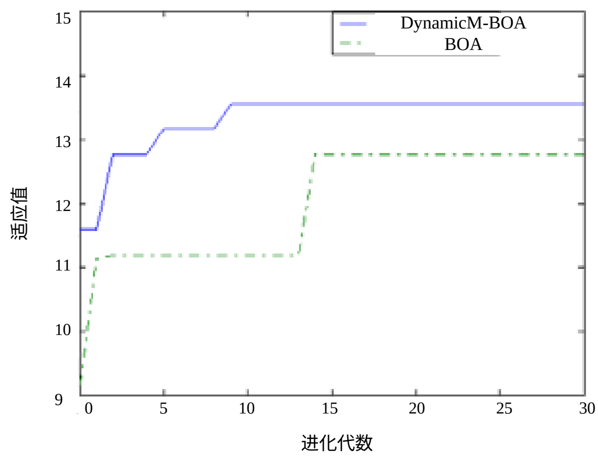

图 5 五阶重叠欺骗函数在相同种群规模下的比较

表 1 评价次数的比较

函数 \ 算法		BOA 评价次数	M-BOA 评价次数
五阶欺骗函数	n=30	12 000	6 000
	n =60	51 200	32 000
六阶双极函数	n =30	14 400	7 200
	n =60	57 600	28 800
五阶重叠欺骗函数	n=21	40 960	20 480

表 1 中给出了算法达到最优值所花费的平均适应值评价次数。n 表示个体长度，对同一函数给出了几种不同的规模，算法采用最大代数作为停止准则。

从试验结果可得到以下结论：

(1)对于 BOA 保持种群的多样性是很有必要的。可以看出在相同种群规模下，达到最优解的代数减小，而且不易陷入局部最优。因此，引入变异算子可以保持种群多样性，避免算法陷入局部最优，加快算法收敛，提高了算法性能。

(2)从平均适应值评价次数可以看出，虽然引入变异算子，增大了计算量，但是达到最优解所需的种群规模降低了，从总体上减少了计算量。

(3)随着问题复杂度的增加，所需群体规模增加了。

4 结论

Bayesian 优化算法通过从当前代提取信息，建立概率分

(下转第 158 页)