AS 的重要步骤

AS 算法对 TSP 的求解流程主要有两大重要步骤：

1. 路径构建
2. 信息素更新

路径构建

定义：AS 中的随机比例规则

对每只蚂蚁 k，路径记忆向量 $\mathbf{R}^k$ 按照访问顺序记录了所有 k 已经经过的城市序号。设蚂蚁 k 当前所在的城市为 i，则其选择城市 j 作为下一个访问对象的概率为：

$$p^k(i,j) = \begin{cases} \dfrac{[\tau(i,j)]^\alpha[\eta(i,j)]^\beta}{\sum_{u\in J_k(i)}[\tau(i,u)]^\alpha[\eta(i,u)]^\beta}, & j \in J_k(i) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

其中; $J_k(i)$ 表示从城市 i 可以直接到达的且又不在蚂蚁访问过的城市序列 $\mathbf{R}^k$ 中的城市集合; $\eta(i,j)$ 是一个启发式信息, 通常由 $\eta(i,j) = 1/d_{ij}$ 直接计算; $\tau(i,j)$ 表示边 (i,j) 上的信息量.

信息素更新

- 初始化：$\tau_0 = m/C^{nn}$
- 更新公式：

$$\tau(i,j) = (1-\rho)\cdot\tau(i,j) + \sum_{k=1}^{m}\Delta\tau^k(i,j) \tag{2}$$

$$\Delta\tau^k(i,j) = \begin{cases} (C_k)^{-1}, & (i,j)\in\mathbf{R}^k \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

其中, m 是蚂蚁的个数; C^{nn} 是由贪心算法构造的路径的长度; $\rho\in(0,1]$ 是信息素的蒸发率, 通常设置为 $\rho=0.5$; $\Delta\tau^k(i,j)$ 是第 k 只蚂蚁在它经过的边上释放的信息素量; C_k 表示路径的长度, 它是 $\mathbf{R}^k$ 中所有边的长度和.

智能优化技术

分布估计算法（Estimation of Distribution Algorithms）

龚文引 (教授、博士生导师)

中国地质大学（武汉）计算机学院

1. 大纲

- 算法简介
- 几个简单示例
- 典型 EDA 简介
- 小结

2. 算法简介

- 算法简介
- 几个简单示例
- 典型 EDA 简介
- 小结

2. 算法简介

智能优化中的学习与建模（learning/modeling）

- 智能优化方法具有自适应性（adaptive）
  - 下一次的搜索（方向和步长）依赖于对以前搜索经验的估计（如：函数值、梯度等）
- 传统的演化算法采用杂交和变异产生新个体，其学习和建模过程是隐式的（implicit）
- 有的优化算法采用显式的（explicit）学习和建模产生新个体
  - Nelder-Mead 单纯形法
  - 基于响应面（Response surfaces ）的方法：meta-modeling, surrogate function
  - 基于概率估计（Probability estimation）的方法：分布估计算法（Estimation of Distribution Algorithms, EDA）

2. 算法简介

分布估计算法 (Estimation of Distribution Algorithms)

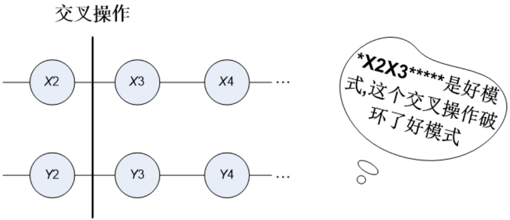
- 简称 EDA;
- 基于种群的新型演化算法;
- 思想起源于遗传算法;
- 采用（无监督的）密度估计或产生式统计模型.

P. Larranaga and J. A. Lozano (eds.). *Estimation of Distribution Algorithms: a new tool for evolutionary computation*. Kluwer Academic Publishers, 2002.

2. 算法简介

算法思想

- 改进遗传算法的交叉操作和变异操作，防止破坏积木块;
- 采用概率建模和抽样的显式形式产生新个体;
- 其主要思想是把优化问题转化成概率分布的搜索过程.



2. 算法简介

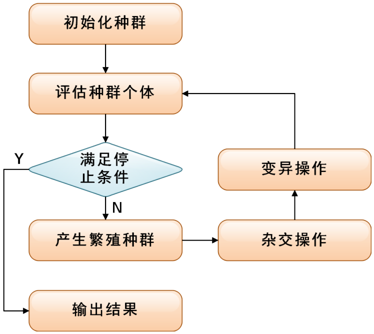


Figure: GA 流程图

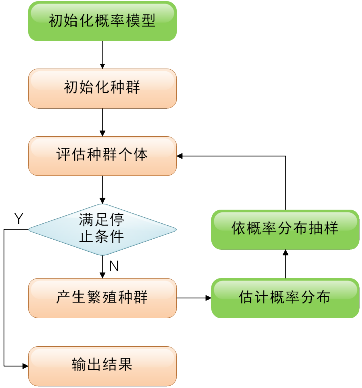


Figure: EDA 流程图

2. 算法简介

发展历史

- 开山始祖
  - Population-based incremental learning (PBIL)
  - Univariate marginal distribution algorithm (UMDA)
- 早期算法专注于二进制编码
  - Mutual information maximizing input clustering (MIMIC)
  - Bayesian optimization algorithm (BOA)
  - Bivariate marginal distribution algorithm (BMDA)
  - Extended compact genetic algorithm (eCGA)
- 逐渐扩展到连续 EDA
  - PBILc
  - UMDAc
  - . . .

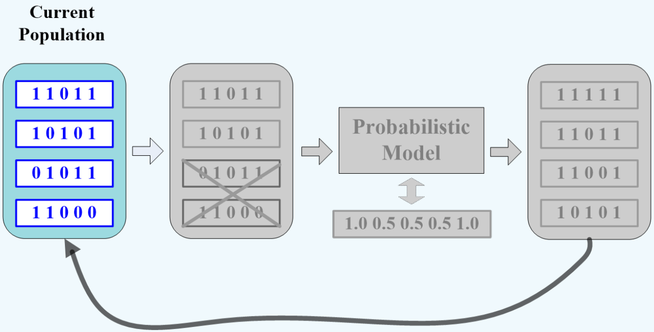
EDA 方法分类

不同 EDA 算法的主要区别在于：估计概率密度的方法不同，即建模的不同

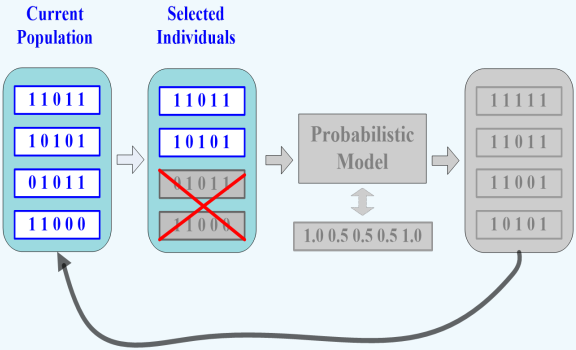
- 独立变量 EDA
    - Population-based incremental learning (PBIL)
    - Univariate marginal distribution algorithm (UMDA)
    - Compact genetic algorithm (cGA)
- 双变量依赖 EDA
    - Mutual information maximizing input clustering (MIMIC)
    - Bivariate marginal distribution algorithm (BMDA)
- 多变量依赖 EDA
    - Bayesian optimization algorithm (BOA)
    - Linkage-tree Genetic Algorithm (LTGA)

https://en.wikipedia.org/wiki/Estimation_of_distribution_algorithm

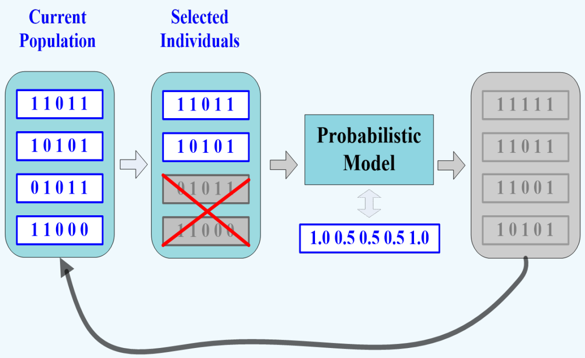
初始群体


Current
Population
1 1 0 1 1
1 0 1 0 1
0 1 0 1 1
1 1 0 0 0
1 1 0 1 1
1 0 1 0 1
0 1 0 1 1
1 1 0 0 0
Probabilistic
Model
1.0 0.5 0.5 0.5 1.0
1 1 1 1 1
1 1 0 1 1
1 1 0 0 1
1 0 1 0 1

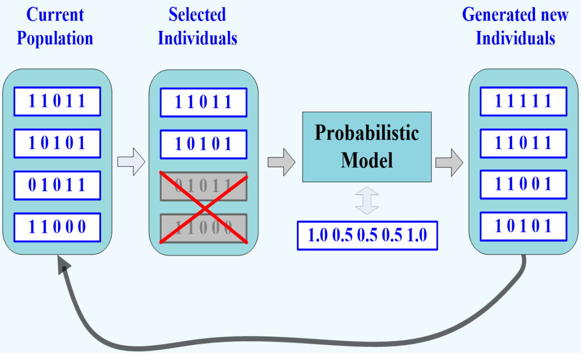
繁殖选择


Current Population
11011
10101
01011
11000
Selected Individuals
11011
10101
01011
11000
Probabilistic Model
1.0 0.5 0.5 0.5 1.0
11111
11011
11001
10101

概率密度估计（modeling）



新种群产生（sampling）



问题

假设有如下离散优化问题：

$$\min \quad f(\mathbf{x}) = x_1 + x_2$$

其中，$x_1 \in \{1,2,3,4,5\}$，$x_2 \in \{6,7,8,9,10\}$.

建立概率模型

建立一个概率模型。这里我们只需建立一个离散的概率模型（假设 x_1, x_2 相互独立），初始化如下：

x_1	1	2	3	4	5
p_1	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
x_2	6	7	8	9	10
p_2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2

采样与选择

1) 采样（Sampling）：
   - 根据概率模型，采用若干个点（6 个）。假设采到的点为：
     $\mathbf{y}_1=(2,7)$, $\mathbf{y}_2=(3,9)$, $\mathbf{y}_3=(3,10)$, $\mathbf{y}_4=(4,8)$, $\mathbf{y}_5=(2,9)$, $\mathbf{y}_6=(5,6)$;
2) 计算适应值（Fitness evaluation）：
   - $f(\mathbf{y}_1)=9$, $f(\mathbf{y}_2)=12$, $f(\mathbf{y}_3)=13$, $f(\mathbf{y}_4)=12$, $f(\mathbf{y}_5)=11$, $f(\mathbf{y}_6)=11$;
3) 选择（Selection）：
   - 选择最优的 3 个点：$\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_5, \mathbf{y}_6$.

更新概率模型 1

根据所选择的点更新概率模型：$\mathbf{y}_1 = (2,7)$, $\mathbf{y}_5 = (2,9)$, $\mathbf{y}_6 = (5,6)$

1) 更新变量 x_1 的分布:
   - $p_1'(x_1=1)=0$, $p_1'(x_1=2)=2/3$, $p_1'(x_1=3)=0$, $p_1'(x_1=4)=0$, $p_1'(x_1=5)=1/3$.
2) 更新变量 x_2 的分布:
   - $p_2'(x_2=6)=1/3$, $p_2'(x_2=7)=1/3$, $p_2'(x_2=8)=0$, $p_2'(x_2=9)=1/3$, $p_2'(x_2=10)=0$.

x_1	1	2	3	4	5
p_1'	0	2/3	0	0	1/3
x_2	6	7	8	9	10
p_2'	1/3	1/3	0	1/3	0

更新概率模型 2

对分布函数进行平滑处理（防止有一些点的概率为 0，自变量的值相差较近则概率应该相差不大）

- 以 x_1 为例：

$$p_1''(x_1 = i) = \sum_{j=1}^{5} \exp\left(-|i-j|\right) p_1'(x_1 = j)$$

并归一化. 同理求 p_2'', 得到:

x_1	1	2	3	4	5
p_1''	0.139861	0.380183	0.16124	0.117459	0.201247
x_2	6	7	8	9	10
p_2''	0.277140	0.279550	0.125736	0.108491	0.209084

更新概率模型 3

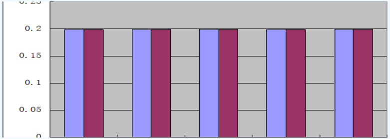
按照增量（Incremental）方式更新概率分布：

- $p_1 = \gamma \cdot p_1'' + (1-\gamma) \cdot p_1$
- $p_2 = \gamma \cdot p_2'' + (1-\gamma) \cdot p_2$
- 其中 $\gamma \in [0,1]$ 是学习因子，此处设 $\gamma = 0.5$.

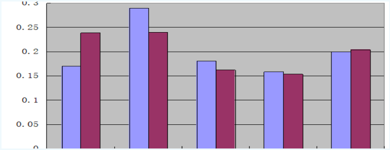
x_1	1	2	3	4	5
p_1	0.169931	0.290091	0.180625	0.158729	0.200624
x_2	6	7	8	9	10
p_2	0.238570	0.239775	0.162868	0.154245	0.204542

更新概率模型

- 学习之前



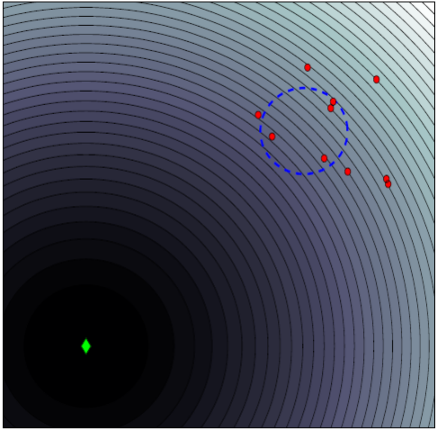
- 学习之后



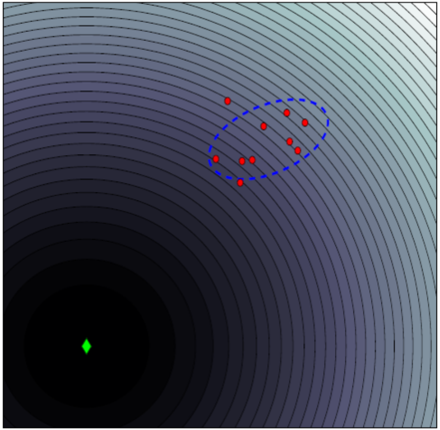
更新概率模型

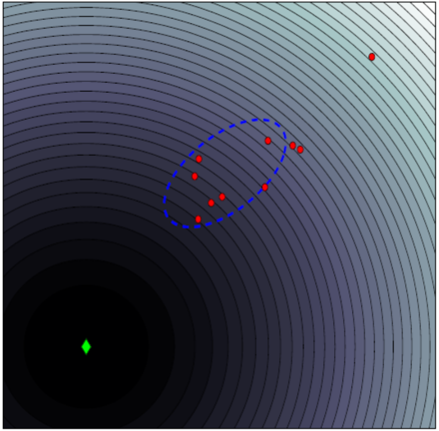
- 经过学习之后，优秀个体对应的坐标的概率会变高;
- 平滑处理可以保证:
  - 若一个个体位置和优秀个体距离较近，那么该位置会受惠于该优秀个体，概率也会比较高（基于这样一个假设：若个体相差不大，则其适应度应该也相差不大）

示例 3

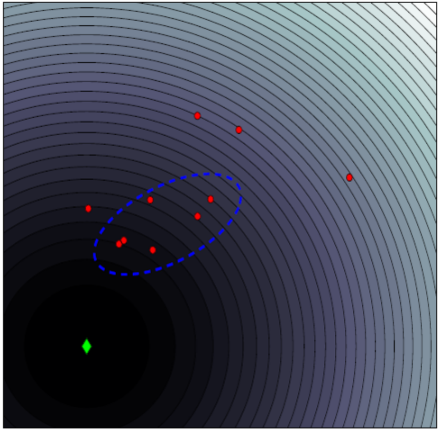


示例 3

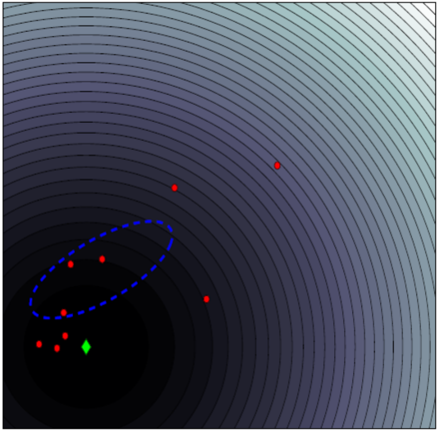




示例 3



示例 3



4. 典型 EDA 简介

Univariate marginal distribution algorithm (UMDA)

UMDA 是一种简单的 EDA，它通过估计所选择个体的边界概率（marginal probabilities）来建立概率模型。

- 从当前群体中选择 λ 个个体组成繁殖群体 $S(t)$;
- 依据 $S(t)$ 建立如下概率模型：

$$p_{t+1}(x_i) = \frac{1}{\lambda} \sum_{\mathbf{x} \in S(t)} x_i, i = 1, \cdots, n$$

Population-based incremental learning (PBIL)

PBIL 是 UMDA 的一种改进，它通过增量的方式来建立概率模型。

- 从当前群体中选择 λ 个个体组成繁殖群体 $S(t)$;
- 依据 $S(t)$ 建立如下概率模型：

$$p_{t+1}(x_i) = (1-\gamma)\cdot p_t(x_i) + \gamma \cdot \frac{1}{\lambda} \sum_{\mathbf{x}\in S(t)} x_i$$

$$i = 1, \cdots, n$$

- 其中，$\gamma \in (0, 1]$ 是学习因子（learning rate）.

基于高斯模型的 EDA：算法流程

1. 随机生成初始种群 $P(0)$, 初始化高斯模型的均值 μ 与方差 δ. 假设每维变量对应的高斯模型为: $\{N(\mu_1, \delta_1), \cdots, N(\mu_n, \delta_n)\}$, n 为自变量维数;
2. 根据各维变量对应的高斯模型, 抽样产生新种群 $T(t)$; // 抽样
3. 从新种群中选择优秀个体集合 $S(t)$; // 选择
4. 计算 $S(t)$ 在各维变量上的均值与方差, 对原有的高斯模型进行更新; // 建模
5. 若未达到停止条件则返回步骤2; 否则算法退出.

基于高斯模型的 EDA：更新概率模型参数

- 更新均值：

$$\mu_j^{t+1} = (1-\alpha)\cdot\mu_j^t + \alpha\cdot\left(x_j^{\text{best},1} + x_j^{\text{best},2} - x_j^{\text{worst}}\right)$$

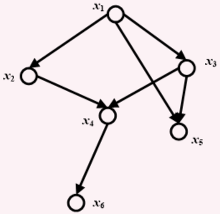
- 更新方差：

$$\delta_j^{t+1} = (1-\alpha)\cdot\delta_j^t + \alpha\cdot\sqrt{\left(\sum_{k=1}^{K}(x_j^k - \overline{x}_j)\right)/K}$$

- 其中，$\alpha \in [0,1]$ 是学习因子，K 为所选择的优秀个体数目，$\overline{\mathbf{x}}$是所选择的优秀个体的平均值向量，$\mathbf{x}^{\text{best},1}, \mathbf{x}^{\text{best},2}$ 是当前群里中最好的两个个体，$\mathbf{x}^{\text{worst}}$ 是当前群体最差的个体;
- 更新的方式多种多样, 也可以直接用优秀个体的均值和方差替代原来的均值与方差.

Bayesian optimization algorithm (BOA)

- BOA 采用贝叶斯网络（Bayesian networks）来描述变量之间概率依赖关系



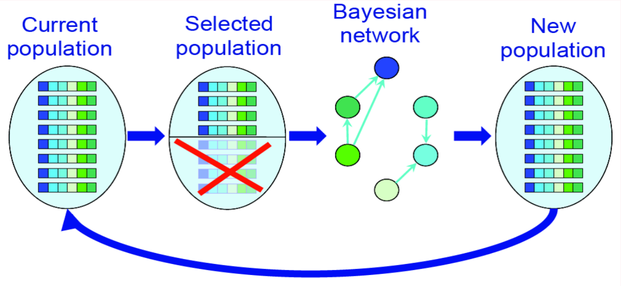
其中节点代表变量，边表示变量之间的概率依赖关系;

- 基于贝叶斯网络的联合概率密度为：

$$p(\mathbf{x}) = p(x_n|x_{n-1}, \cdots, x_1) \cdot p(x_n - 1|x_{n-2}, \cdots, x_1) \cdots p(x_2|x_1) \cdot p(x_1)$$

Bayesian optimization algorithm (BOA)

- BOA 的关键问题：
  - 贝叶斯网络的结构如何确定？



课外作业

在网上下载 PBIL 源程序，读懂，并运行。

1. 对每行代码添加中文注释。

5. 小结

算法简介

几个简单示例

典型 EDA 简介

小结

5. 小结

本章小结

1. EDA 简介
2. 简单示例
3. 典型 EDA 简介

思考

在网上下载几种 EDA 源程序，读懂，并运行。思考以下问题：

1. 不同 EDA 建立概率模型的方法有何异同？
2. 能否把传统演化算法与 EDA 方法结合？

5. 小结

网络资源

- http://www.iba.t.u-tokyo.ac.jp/english/EDA.htm
- http://martinpelikan.net/presentations.html
- http://medal.cs.umsl.edu/
- http://www-illigal.ge.uiuc.edu/
- http://www.evolution.re.kr/

5. 小结

进一步阅读资料

- 周树德, 孙曾圻. “分布估计算法综述,” 自动化学报, vol. 33, no. 2, pp. 112 - 124, 2007.
- M Pelikan, D.E Goldberg & E Cantu-paz: “Linkage Problem, Distribution Estimation and Bayesian Networks,” *Evolutionary Computation*, vol. 8, no. 3, pp. 311 - 340, 2000.
- W. Dong, T. Chen, P. Tino and X. Yao, “Scaling Up Estimation of Distribution Algorithms for Continuous Optimization,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, vol. 17, no. 6, pp. 797-822, Dec. 2013.

Thank you!

AUTHOR: GONG, Wenyin
ADDRESS: School of Computer Science,
China University of Geosciences,
Wuhan, 430074, China
E-MAIL: wygong@cug.edu.cn
HOMEPAGE: http://grzy.cug.edu.cn/gongwenyin