嘉兴学院学报
Journal of Jiaxing University
第 25 卷第 6 期 2013 年 11 月
Vol. 25 No. 6　2013. 11

10.3969/i.issn.1008－6781.2013.06.019

最大熵分布估计算法及其在旅行商问题中的应用

常　城[1]，高慧敏[2]

（1. 太原科技大学 电子信息工程学院，山西太原 030024；
2. 嘉兴学院 机电工程学院，浙江嘉兴 314001）

摘　要：分布估计算法是一种基于遗传算法的种群进化算法，但在处理较大规模的旅行商问题时容易过早陷入局部最优. 针对这一情况，将最大熵理论引入分布估计算法，对其概率分布模型及种群生成策略进行改进，提出了一种最大熵分布估计算法. 并基于旅行商标准测试库 TSPLIB 进行了实例仿真测试，结果表明，最大熵分布估计算法的性能得到了有效的改善.

关键词：分布估计算法；最大熵理论；旅行商问题

中图分类号：O414.11　　**文献标识码**：A.　**文章编号**：1008－6781(2013)06－0100－05

Maximum Entropy Estimation of Distribution Algorithm and Its Application in TSP

CHANG Cheng[1], GAO Hui－min[2]

(1. School of Electronics and Information Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan, Shanxi 030024;
2. School of Mechanical and Electrical Engineering, Jiaxing University, Jiaxing, Zhejiang 314001)

Abstract: Estimation of distribution Algorithm (EDA) is a new type of population evolutionary algorithm, but it's easy for the algorithm to fall into local optimum especially in solving large－scale traveling salesman problem. By introducing maximum entropy principle into EDA, a new Estimation of Distribution Algorithm (MEEDA) is proposed, which improves the distribution probability model and population generation strategy. Simulation tests have been made based on traveling salesman standard test library－TSPLIB, and the results show that the performance of the maximum entropy estimation of distribution algorithm has been effectively improved.

Key words: estimation of distribution algorithm; maximum entropy principle; traveling salesman problem

0　引言

分布估计算法[1]（Estimation of Distribution Algorithms，EDAs）是由遗传算法发展而来的一种新型随机优化搜索算法. 遗传算法[2]适用于诸多组合优化问题，但其需要预先获取先验知识才能控制进化过程. 因此，找到一组合适的参数集编码并与待解决问题关联起来是比较困难的；另外，从进化角度讲，交叉变异操作用来实现种群中个体之间信息交换，而选择操作用来指导进化过程，两者均没有充分利用同代种群中个体之间的关系，减少了 GA 算法的执行效率. 为克服上述缺陷，H.

收稿日期：2013－02－28

基金项目：山西省自然科学基金（2009011011－3）；山西省回国留学人员科研资助项目（2011－078）；山西省软科学项目（2011041001－02）

作者简介：常城（1987－　），男，山东滨洲人，太原科技大学电子信息工程学院硕士研究生，研究方向为优化算法；通信作者：高慧敏（1970－　），男，山西曲江人，嘉兴学院机电工程学院博士，教授，研究方向为复杂系统建模与优化.

网络出版时间：2013－11－04 11:35　**网络出版地址**：http://www.cnki.net/kcms/detail/33.1273.Z.20131104.1135.010.html

Mühlenbein 及 G. Paaβ 在 1996 年首先提出了分布估计算法并吸引了大批的研究者相继参与，[3] 使 EDAs 一直是进化计算领域理论及应用的一个研究热点，也取得了一系列丰硕成果.

EDAs 没有遗传算法中的交叉与变异过程，它是通过优势群体的概率分布作为进化模型产生下一代新种群，并使用跟踪优化方法取代遗传算法模式中的重组方法. 由于进化模型由信息的统计学概率分布推导而来，因此它揭示了种群的主要特性，利用依存信息更准确地反应变量之间的关系. Lu Lin 在文献［4－5］中提出了一种基于最大熵理论的连续系统分布估计算法，并将其分别用于 PID 控制器及 JSSP 中，取得了不错的应用效果. Feng Gao[6] 等针对多 TSP 问题，基于分解策略提出了一种多目标分布估计算法——MEDA/D. 该算法将用于多目标的进化算法分解为多个子集，运用先验知识及学习知识对这多个子集并行优化取得了不错的效果. 但这种方法其先验知识的获取并不容易，而且划分后的各子集的最优解若陷入局部最优则并不能保证该子集划分的合理性.

已有分布估计算法在求解问题规模较大时，先验知识的获取困难且计算量很大.[7] 针对这一情况，本文引入最大熵理论并对传统 EDAs 算法进行改进，[8] 提出了最大熵分布估计算法（Maximum Entropy Estimation of Distribution Algorithm，MEEDA），通过对比发现，最大熵分布估计算法的性能得到了有效的改善.

1 最大熵分布估计算法

1.1 原理

最大熵方法是通过随机值的熵值来估计其概率分布，首先由 Jaynes 提出，其核心概念是“最真实的分布概率揭示了信息论界限的最大熵”. 对离散随机变量 x，考虑其具有 n 个可能取值，为使熵最大，根据熵的定义及约束条件有：

$$\begin{cases} H(x) = -k\sum_{i=1}^{n} p(x_i)\ln p(x_i) \\ s.\ t.\ \ \sum_{i=1}^{n} p(x_i) = 1,\ (p(x_i) \geqslant 0,\ i = 1,\ 2,\ \cdots,\ n) \end{cases} \tag{1}$$

其中，$p(x)$ 为变量 x 的概率密度函数，初始概率密度为 $p(x_i) = \frac{1}{n}$，$i = 1, 2, \cdots, n$. 通过统计采样调整 $p(x)$ 获得新的熵 $H(x)'$，而后确定最大熵分布，并根据拉格朗日乘数法求解最优化问题，取 k 为 1，得：

$$L(x,\ \lambda) = -\sum_{i=1}^{n} p(x_i)\ln p_i + (\lambda_0 + 1)\sum_{i=1}^{n} p(x_i) + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i x^i p(x_i) \tag{2}$$

其中，λ_i（$i = 0, 1, 2, \cdots, n$）为相应 Lagrange 乘子. 概率密度函数表达式为：

$$p(x_i) = \sum_{i=1}^{n}\exp\left(\lambda_0 + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i x^i\right) \tag{3}$$

通过更进一步定义参数 λ 可以细化 $p(x)$，对（3）式进行求导可得：

$$\lambda_0 = -\ln\sum_{i=1}^{n}\left(\exp\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i x^i\right)\right) \tag{4}$$

其中，$\lambda_i (i = 1, 2, \cdots, m)$ 可通过式（5）的最小平方差确定.

$$\delta_i = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} x^i \exp\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i x^i\right)}{\mu_i \sum_{i=1}^{n}\exp\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i x^i\right)} \tag{5}$$

即当 δ_i^2 的值取最小时可确定 λ_i 的值.

1.2 计算步骤

通过给出的最大熵理论，采用全新的进化模式，通过估计待求问题解空间的密度函数得出熵分

布，实现求解.

MEEDA 算法具体可以归结为以下 5 个步骤：

Step1：随机生成 N 个初始种群，根据适应度函数计算各初始种群的适应度值；

Step2：从 N 个种群中选出 S 个优势种群，满足 $S \leqslant N$ ；

Step3：将 S 个优势种群的适应度值代入（4）式及（5）式，并计算出 λ_0 和 λ_i 的值，然后代入（3）式确定优势种群的概率密度函数 $p(x)$，再将 $p(x)$ 代入（1）式求得优势群体最大熵并建立 n 维概率模型；

Step4：由得到的 n 维概率模型生成新的 N 个种群，新生成的种群完全取代老种群；

Step5：判断进化终止条件是否满足，若满足，输出最终最优路径，否则跳转至 Step2. 终止条件为优势群体中的最优个体与最差个体的适应度相等或进化代数达到了规定的最大限.

2 TSP 问题的最大熵分布估计算法求解

2.1 TSP 问题的描述

旅行商（Traveling Salesman Problem，TSP）问题是一种求最优哈密顿回路问题，即求加权完全无向图中每个顶点只访问一次且最终返回出发点的闭合回路总权值最小问题. TSP 问题之所以被诸多领域所关注，原因在于 TSP 具有和 NPC（Non－deterministic Polynomial Complete）相同的计算复杂度，而任何 NP 问题都可归为 NPC 问题. 因此，解决好 TSP 问题具有重要的实践及理论价值.

在一个具有 n 个点的 TSP 问题中，共有（$n-1$）！条哈密顿回路，传统的方法需要进行（$n-1$）！/2 次比较并最终选出最优路径. 随着点数 n 的增加，可能的哈密顿回数 M 增长迅速，当 M 增大到一定程度时，计算量将远远超过一般计算机所允许的极限. 穷举法可确保求得最优解，以一个 $M=50$ 的问题为例，需要每秒计算能力为 1 亿次的计算机计算 5×1048 年.[9] 为解决这一问题，使用 MEEDA 算法可对复杂的 TSP 问题进行优化求解.

2.2 TSP 问题的求解

对具有 n 个节点的 TSP 问题，随机生成 T 组可行编码（$T \gg (n-1)!$），每一组可行编码均为 n 个节点的全排列，每 i 个元素均为城市路径上第 i 个位置. 一个均匀分布的可行编码表示为（x_a，…，x_b，…，x_c），满足 $1 \leqslant a$，b，$c \leqslant n$，$a \neq b \neq c$. 对所有生成的哈密顿回路，使用适应度函数为：

$$D = d(x_M,\ x_1) + \sum_{i=1}^{M-1} d(x_i,\ x_{i+1}) \tag{6}$$

其中，x_i 为第 i 个节点，d（x_i，x_{i+1}）为相邻节点 i 到 $i+1$ 之间的距离. ……. 表示为：

$$d(x_i,\ x_{i+1}) = \sqrt{(x_{i+1}.\ x - x_i.\ x)^2 + (x_{i+1}.\ y - x_i.\ y)^2} \tag{7}$$

其中 $x_i.\ x$ 及 $x_i.\ y$ 为节点 i 的横坐标和纵坐标.

通过使用（6）式计算 T 组的适应度值，对 T 组适应度值按从低到高进行快速排序，从中选出排在前列的 S 组适应度值对应的编码. 根据熵分布函数建立模式向量为：

$$E^t = [e_1^t \quad e_2^t \quad \cdots \quad e_n^t]$$

其中 t 为进化代数，初始值取 0. 第 t 代模式向量元素为：

$$e_i^t = -\sum_{i=1}^{n}\left[\sum_{i=1}^{n}\exp\left(\lambda_0 + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i x^i\right)\ln\left(\lambda_0 + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i x^i\right)\right] \tag{8}$$

选出 S 个优势熵对应的种群

$$M^t = [m_1^t \quad m_2^t \quad \cdots \quad m_s^t]$$

根据 m_2^t 到 m_s^t 这 $S-1$ 个值更新种群，m_1^t 直接进入下一代. 当 $\forall i$，$j \in [1，n]$，恒有 $e_i^t = e_j^t$ 或 $t \geqslant$ MaxG 即满足进化退出要求，输出此时对应的最优路径. 其中，MaxG 设定的为最大允许进化代数.

3 仿真实验结果

为比较 EDAs 算法与 MEEDA 算法的性能，选取一种典型的 EDA 算法——UMDA 算法为例，[10] 对 TSP 问题进行实验对比分析．在 Visual Studio 2010 上完成这两种算法，得出数据后通过 Matlab 画出测试实例收敛图．实验数据均在 Windows7 Intel i3 2.0Ghz 的 PC 上实现，测试实例选用 TSPLIB 测试库，以验证算法的有效性．在种群规模分别为 100 及 1 000 时，独立进行 50 次测试，算法改进前后的性能测试对比结果如表 1、表 2 所示，设定最大进化代数为 500 000.

表 1　n＝100 时算法的 TSP 实例求解性能对比测试

测试实例	TSPLIB 最短路径	TSPLIB 最优路径	UMDA 最优路径	MEEDA 平均结果	UMDA 平均进化代数	MEEDA 平均进化代数
eil51	426	429.9833	429.5426	432.0425	3 000	2 458
gr48	5 046	5 046	5 046	5 064.7	89 799	62 242
krod100	21 294	41 294.29	41 294.16	21 356.32	168 322	140 384

表 2　n＝1 000 时算法的 TSP 实例求解性能对比测试

测试实例	TSPLIB 最短路径	TSPLIB 最优路径	UMDA 最优路径	MEEDA 平均结果	UMDA 平均进化代数	MEEDA 平均进化代数
eil51	426	429.983 3	429.528 4	431.5391	3 000	2 337
gr48	5 046	5 046	5 046	5 064.7	62 872	60 834
krod100	21 294	41 294.29	41 294.13	21 355.93	154 286	132 962

由表 1 及表 2 的测试数据可得，对于同一 TSP 问题，当种群规模较大时，MEEDA 算法的最优路径取值、平均结果都更接近最短路径，进化代数更少．在相同种群规模时，MEEDA 算法 eil51 与 krod100 实例可以得出更好的最优解，甚至比最优路径解更接近实际值，gr48 最优路径与路径长度平均值相同.

图 1～图 3 为三个种群规模为 100 时 50 次试验平均值的实验数据收敛图，表述了适应度与进化代数之间的关系.

由以上各图可知，MEEDA 算法与 UMDA 算法相比可以更快速收敛至最优解，说明 MEEDA 算法具有较好的搜索全局最优解的能力．并且达到最优解后很稳定，说明收敛性很好.

4 结语

1）基于最大熵理论提出了一种最大熵分布估计算法——MEEDA．通过对分布概率模型及种群生成策略进行改进，可有效避免算法在求解 TSP 问题时陷入局

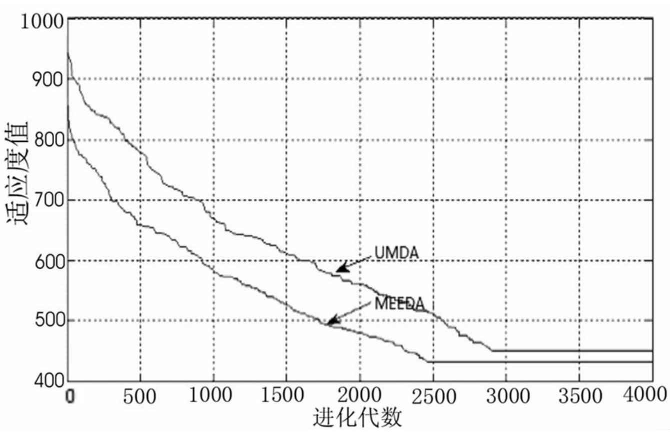

图 1　eil51 实例的平均数据收敛图

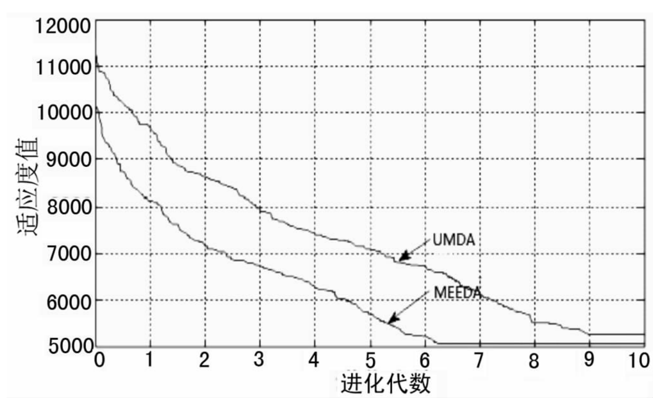

图 2　gr48 实例的平均数据收敛图

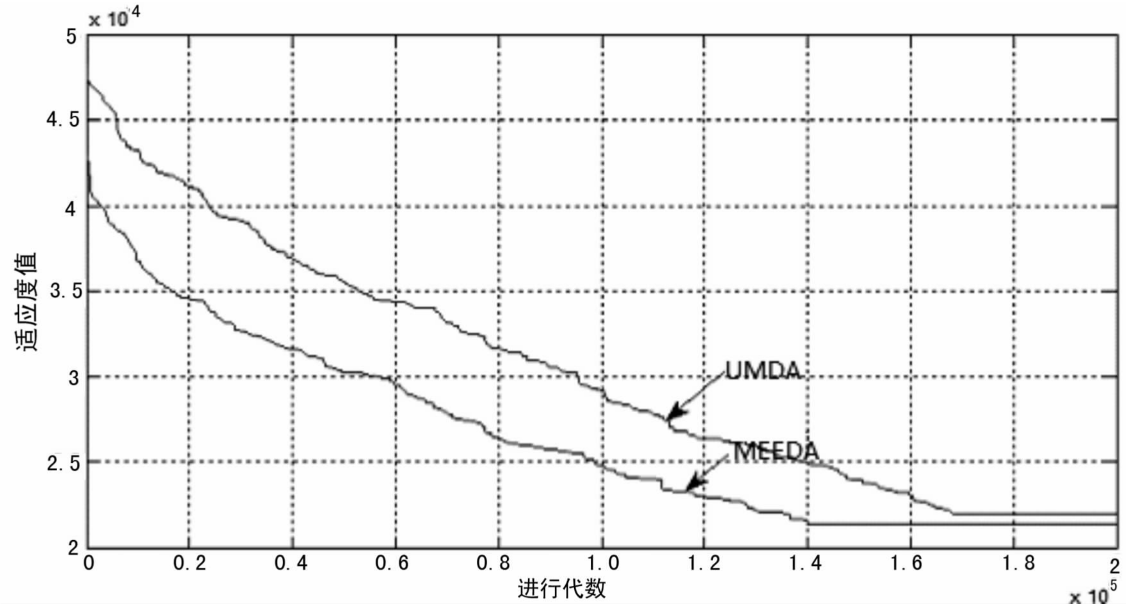

图 3 krod100 实例的平均数据收敛图

部最优解.

2）使用旅行商标准测试库 TSPLIB 进行实例仿真测试，结果表明，基于最大熵分布估计算法比所列大部分测试实例最优解和进化代数优异，具有一定的应用参考价值.

参考文献：

[1] 周树德，孙增圻. 分布估计算法综述［J］. 自动化学报，2007，33（2）：113－124.

[2] GOLDBERG D E. Genetic Algorithms in Search Optimization and machine Learning［M］. Boston：Addison－Wesley，1989.

[3] H MüHLENBEIN，G. PAAβ. From recombination of genes to the estimation of distributions I. Binary parameters［J］. Lecture Notes in Computer Science1411：Parallel Problem Solving from Nature－PPSN IV（1996）：pp. 178－187

[4] LU LIN. Optimal Design for 2－DOF PID Controller Based on Maximum Entropy Estimation of Distribution Algorithm［M］. Proceedys of 3rd. International Conference on Intelligent System and Knowledge Engineering，17－19，Nov. 2008，1：1338－1342

[5] LU LIN. Maximum Entropy Estimation of Distribution Algorithm for JSSP under Uncertain Information Based on Rough Programming［M］. Proceediy of International ccorkshop on mtelligent systems and applications，23－24 May，2009，Wuhan，China，IEEE Press，PP：1－4.

[6] FENG GAO，AIMIN ZHOU，GUIXU ZHANG. An Estimation of Distribution Algorithm based on Decomposition for the Multiobjective TSP［M］. Proceediy of Sth International conference on hatnral camputation，29－31，May，2012，Chongging，China，ZEEE Press. PP：817－821.

[7] 姜群，王越. 基于最大熵的分布估计算法［J］. 微电子学与计算机，2007，24（11）：73－76

[8] JAYNES E T. Information theory and statistical mechanics［J］. Physical Review，1957，106：620－630

[9] 郝成伟，高慧敏. 求解 TSP 问题的一种改进的十进制 MIMIC 算法［J］. 计算机科学，2012，39（8），233－236.

[10] MüHLENBEIN H. The equation for response to selection and its use for prediction［J］. Evolutionary Computation，1997，5（3）：303－346.

（责任编辑 张争）