

一种协方差矩阵的多尺度量子谐振子算法

陆志君¹, 王鹏², 安俊秀¹

(1. 成都信息工程大学 软件工程学院, 成都, 610225;
2. 西南民族大学 计算机科学与技术学院, 成都 610225)

摘要: 针对多尺度量子谐振子算法在处理高维全局优化问题时难以收敛问题, 提出一种协方差矩阵的多尺度量子谐振子优化算法. 改进了多元正态分布评估算法中的协方差矩阵生成方式, 保留了当前迭代过程之前采样点的记忆, 加入动态迭代步长加快新协方差矩阵的更新速度, 最后给出了新算法核心部分的数学模型. 实验采用 6 个经典评测函数与原算法在多个维度上作对比, 并与 4 个经典优化算法在 30 维优化问题上作对比, 结果表明该算法性能远超原算法, 尤其对于高维、复杂函数的表现尤为明显, 并且在收敛精度、收敛速度、鲁棒性上的表现总体优于其他四种算法.

关键词: 全局优化; 量子谐振子; 多元正态分布; 协方差矩阵

中图分类号 TP18

文献标识码 A

A covariance-matrix multi-scale quantum harmonic oscillator algorithm

LU Zhijun¹, WANG Peng², AN Junxiu¹

(1. Software Engineering Department, Chengdu University of Information and Technology, Chengdu 610225, China; 2. Computer Science and Technology, Southwest University for Nationalities, Chengdu 610225, China)

Abstract: For global optimization problems with high dimension, the multi-scale quantum harmonic oscillator algorithm is hard to converge. For this problem, a covariance-matrix multi-scale quantum harmonic oscillator algorithm is proposed, which improves the method of generating covariance matrix from the estimation of multivariate normal algorithm and reserves the memory of old sampling points. Moreover, it introduces dynamic iteration steps to accelerate update of the new covariance matrix. The mathematical model of the new algorithm's core part is also given. The proposed algorithm is compared with the original algorithm by six classic test functions in multiple dimensions, and compared with four classic optimization algorithm in thirty dimensions. The experimental results show that the performance of the proposed algorithm is far better than the original algorithm, especially for high-dimension and complex functions. In addition, its overall performance is better than other four algorithms on convergence precision, convergence rate and robustness.

Key word: global optimization; quantum harmonic oscillator; multivariate normal; covariance matrix

优化问题普遍存在于工业设计、控制决策、自动化等应用科学中, 许多基于群体的优化算法被广泛采用, 国内外也有许多学者对基本算法改进以提高优化性能^[1,2]. 多尺度量子谐振子算法 (Multi-scale Quantum Harmonic Oscillator Algorithm, MQHOA)^[3] 是近年提出的一种新的全局优化算法, 文献[4]把 MQHOA 与模拟退火算法

(Simulated Annealing, SA)、量子退火算法 (Quantum Annealing, QA)、量子粒子群算法 (Quantum-behaved Particle Swarm Optimization, QPSO) 作了对比, 相比之下更具有稳定性和更好的计算精度. 此外, MQHOA 还可用来处理机器学习 and 多峰优化问题, 比如文献[5]提出了一种基于量子谐振子模型的聚类中心选取算法来处理聚

收稿日期: 2016-07-07

基金项目: 国家自然科学基金项目(60702075), 国家社会科学基金项目(12XSH019)

作者简介: 陆志君(1991-), 男, 江苏无锡人, 硕士生, 主要研究方向为智能优化算法.

安俊秀(联系人): 女, 教授, Email: anjiux@cuit.edu.cn.

类中心选择问题, 文献[6]提出一种基于划分的多峰优化方法并有很好的查全率和准确率, 此外还可以用来处理组合优化、蚁群算法等^[7,8]。然而 MQHOA 在高维度下, 相比于传统智能优化算法来说对复杂函数不容易收敛。

目前对 MQHOA 没有大的改进, 为了克服 MQHOA 的不足, 解决其在高维函数时性能不佳、不容易收敛的情况, 本文重点分析了 MQHOA 收敛的两个过程, 提出了一种协方差矩阵的多尺度量子谐振子算法 (Covariance-Matrix Multi-scale quantum harmonic oscillator algorithm, CM-MQHOA), 并将其应用于复杂高维函数求解。为解决 MQHOA 收敛中的量子谐振子收敛过程问题, 引入并改进了文献[7]中的 EMNA (Estimation of multivariate normal algorithm) 协方差矩阵生成方式; 为解决多尺度收敛问题, 加入了动态衰减机制, 利用动态迭代步长保证重要维度采样信息的同时加速收敛; 随后, 通过实验比较 CM-MQHOA 与 MQHOA 的性能区别, 与选取的 4 个经典优化算法对比说明改进算法的适用性和有效性。

1 多尺度量子谐振子算法

量子谐振子是量子力学重要的物理模型之一, MQHOA 基于这个模型近似模拟分子运动规律, 利用微粒动态振动时在振子平衡位置达到势能最低点来解决全局优化问题。在理论中利用量子谐振子波函数的概率解释构造算法核心, 并凭借量子隧道效应保证全局最优区域采样数目足够大以避免陷入局部最优位置。通过与其他算法进行对比, 实验结果进一步说明了其具有更好的计算速度和计算精度^[3]。

其核心是利用量子谐振子的薛定谔方程的解得到如下概率密度函数:

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} |H_n(\alpha x)|^2 \quad (1)$$

其中: ψ 表示波函数, m 表示粒子的广义质量, ω 表示粒子的振动频率, \hbar 为普朗克常量, H 为哈密顿算符, n 表示能级数。式(1)随着能级的减少量子谐振子从高能态到低能态逐渐收敛, 直到收敛到基能态: $\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2(x-x_0)^2/2}$, 因此定义 MQHOA 算法在尺度 σ_s 下的波函数为 k 个以 k_i 为中心的高斯概率密度函数的迭加:

$$\psi_{QHO}(x) = \sum_{i=1}^k \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_s} e^{-\frac{(x-k_i)^2}{2\sigma_s^2}} \quad (2)$$

$\psi_{QHO}(x)$ 近似代表了目标函数以 k 个最优解为中心的目标函数在可行域上的概率分布, 通过引入多尺度优化函数二进信息采样模型, 把高斯函数作为二进小波尺度函数按照不同尺度和不同精度要求进行聚焦搜索, 可以保证信息的不遗漏采样, 从而获得全局最优解。

文献[4]把 MQHOA 的收敛过程划分为两个过程, 即在同一尺度向量 δ_s 下的量子谐振子收敛过程 (Quantum Harmonic Oscillator, QHO 收敛), 和多尺度收敛过程 (Multi-scale, M 收敛)。前者可以理解是横向收敛过程, 后者是纵向收敛过程。QHO 收敛过程实现对搜索空间的逐步收缩定位, M 收敛过程实现对采样精度的逐步提高。研究发现, MQHOA 虽然在低维下收敛速度快, 结果精确, 但当维度升高 (大于 10 维) 后就很难收敛。其原因在于 QHO 收敛过程中随机迭代算法所固有的“无记忆性”, 不能将迭代过程中的优良个体有效保留, 另一方面 M 收敛过程直接采用尺度减半的固定方式会导致在某些重要维度上搜索的细节缺失, 而这些重要维度对函数值的影响至关重要, 不应该与其他维度上的搜索同等对待。

2 协方差的多尺度量子谐振子算法

下面将根据协方差矩阵分别对 MQHOA 的两个收敛过程加以改进以增强算法性能。为了使描述便于理解, 先给出以下概念:

如果随机向量 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)'$ 的概率分布密度函数有如下形式: $f(x_1, \dots, x_n) = f(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} |\mathbf{C}|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{m})' \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{m})\right\}$ 。其中 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)'$, \mathbf{C} 为 $n \times n$ 正定矩阵, $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_n)$ 为常向量, 则称 \mathbf{X} 服从 n 元正态分布, 记作 $\mathbf{X} \sim N_n(\mathbf{m}, \mathbf{C})$ 。 \mathbf{X} 的均值向量 $E\mathbf{X} = \mathbf{m}$, 协方差矩阵 $\text{cov}(\mathbf{X}) = \mathbf{C}$ 。对于任意常数 $c \geq 0$, \mathbf{X} 的概率分布密度在曲面 $(\mathbf{x} - \mathbf{m})' \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{m}) = c$ 上, 称为 \mathbf{X} 的等密度曲面, 其在 R^n 空间为以 μ 为中心的超椭圆。

根据线性代数正定矩阵概念可以推出如下定理:

定理 1: 设 \mathbf{C}_s 是来自正态总体 $N_n(\mathbf{m}, \mathbf{C})$ 的样本协方差矩阵, 样本数为 λ , \mathbf{C}_s 为正定矩阵的充要条件为 $\lambda > n$ 。

文中默认所有的样本协方差矩阵都满足定理 1。既然 \mathbf{C} 正定, 可以通过矩阵正交分解得到规范正交基 $\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n]$, 特征向量记作 D^2 , 其对应的特征值 $d_1^2, \dots, d_n^2 > 0$, 其正交分解可表示成:

$$\mathbf{C} = \mathbf{B} D^2 \mathbf{B}^T \quad (3)$$

同样我们定义 \mathbf{C} 的均方根

$$\mathbf{C}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{B} \mathbf{D} \mathbf{B}^T = \mathbf{B} \text{diag}(d_1, \dots, d_n) \mathbf{B}^T, d_1, \dots, d_n > 0 \quad (4)$$

也很容易推出

$$\mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} = \mathbf{B} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{B}^T = \mathbf{B} \text{diag}\left(\frac{1}{d_1}, \dots, \frac{1}{d_n}\right) \mathbf{B}^T$$

$$d_1, \dots, d_n > 0 \quad (5)$$

最终多元正态分布 $N(\mathbf{m}, \mathbf{C})$ 可以写成如下:

$$\begin{aligned} N(\mathbf{m}, \mathbf{C}) &\sim \mathbf{m} + N(0, \mathbf{C}) \\ &\sim \mathbf{m} + \mathbf{C}^{\frac{1}{2}} N(0, \mathbf{I}) \\ &\sim \mathbf{m} + \mathbf{B} \mathbf{D} \mathbf{B}^T N(0, \mathbf{I}) \\ &\sim \mathbf{m} + \mathbf{B} \mathbf{D} N(0, \mathbf{B}^T \mathbf{I} \mathbf{B}) \end{aligned}$$

$$\sim \mathbf{m} + \mathbf{B}\mathbf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{D}^2) \quad (6)$$

其中 \mathbf{I} 为单位矩阵.式(6)的几何意义描述了等密度超椭圆面的形态,其中心点为 \mathbf{m} , \mathbf{D} 表示这个超椭圆面的轴长,对于二元正态分布对应椭圆长轴和短轴, \mathbf{B} 表示超椭圆面的旋转矩阵.对于二元正态分布对应椭圆逆时针旋转大小,但对于高维超椭圆面旋转变得更加复杂,它们不再由一个角度来刻画,并可能影响多个平面子空间.

2.1 改进的 QHO 收敛过程

原 QHO 过程的采样搜索点根据多元正态分布生成, λ 个采样搜索点均满足:

$$\mathbf{x}_k \sim \mathbf{N}(\mathbf{m}, \mathbf{D}^2) \sim \mathbf{m} + \mathbf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{D}^2), k = 1, \dots, \lambda \quad (7)$$

其中 \mathbf{D} 是对角矩阵, $\mathbf{D} = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$, $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_n)$ 为样本均值向量, n 为采样搜索点的维度, σ_i 为标准差, m_i 为各维度均值, $i = 1, \dots, n$.当 \mathbf{D} 对角线上值相等时,其等密度曲面为高维球面,当不相等时,其等密度曲面为高维椭球面,如下图1所示.

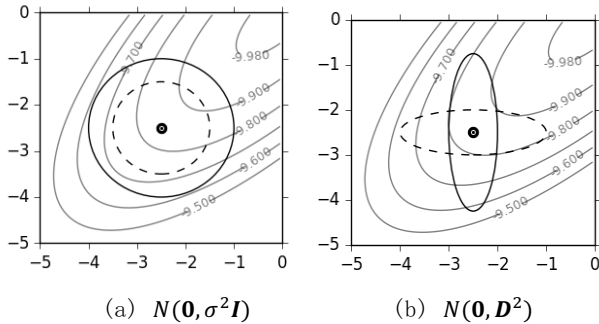


图 1 4 种不同高斯分布等密度曲线

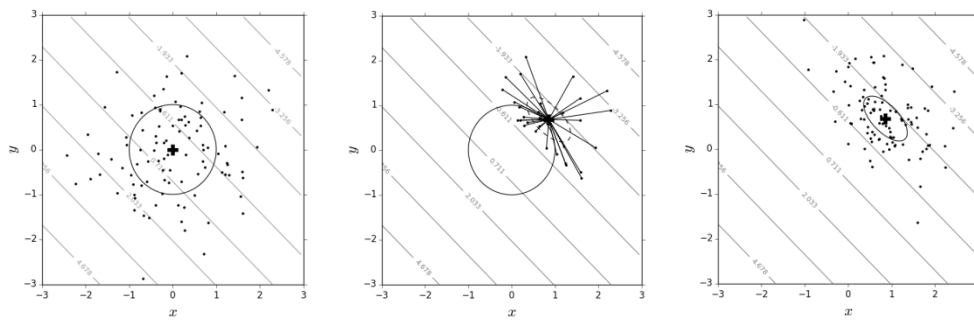


图 2 使用 $C_{EMNA_{global}}$ 对 f_l 演化过程

Fig.2 evolution process of f_l by using $C_{EMNA_{global}}$

左图为初始化采样点状态图,此时 $C_{EMNA_{global}} = \mathbf{I}$.中图通过对这100个采样点对应的评价函数值排序,选择最好的30个点来评估下一轮的 $C_{EMNA_{global}}$ 和均值向量 \mathbf{m} .右图以评估产生的 \mathbf{m} 与 $C_{EMNA_{global}}$,利用式(8)生成新的100个采样点,依次循环直到满足收敛条件.虽然迭代过程中采样均值点不断靠近最小点,但从图中可见在梯度方向上采样均值中心点的移动步长不断减小,这容

Fig.1 Lines of equal density of four different normal distributions

图1灰色曲线为某二维椭球面 $z = f_{ell}(x, y)$ 在一定范围内的等高线,左图中的圆为等密度曲面投影,其中 \mathbf{I} 为单位矩阵,黑点为均值坐标,其采样点沿黑点向周围均匀扩散.右图的两条椭圆曲线分别是不同等密度曲面投影,两者的 \mathbf{D} 矩阵对角线上值均相异,其采样点沿坐标轴分布.MQHOA初始化 \mathbf{D} 后, QHO 收敛过程依赖于 \mathbf{D} ,在没有到达 QHO 收敛条件的情况下 \mathbf{D} 始终不变,在各维度上没有动态尺度变化.

多元相关性的分布估计算法(Estimation of distribution algorithms,EDA)在连续域内有一种类似 QHO 收敛过程的 EMNA(Estimation of multivariate normal algorithm)算法,其同样采用了多元正态模型来表示采样搜索点的概率分布,在进化过程中每一代采用最大似然估计方法,估计多元正态分布的均值向量和协方差矩阵^[9].其协方差矩阵可以表示如下:

$$\mathbf{C}_{EMNA_{global}} = \frac{1}{u} \sum_{i=1}^u (\mathbf{x}_{i:\lambda} - \mathbf{m})(\mathbf{x}_{i:\lambda} - \mathbf{m})^T \quad (8)$$

其中 u 表示从 λ 个采样搜索点中选取的适应度值最好的点个数, $\mathbf{x}_{i:\lambda}$ 表示从 λ 个采样搜索点中选取的适应度值排在第 i 位的点, $\mathbf{m} = \frac{1}{u} \sum_{i=1}^u \mathbf{x}_{i:\lambda}$ 为均值向量. $\mathbf{C}_{EMNA_{global}}$ 是对变量总体的一致性估计,利用 EMNA 在二维线性函数 $f_l = -\sum_{i=1}^2 x_i$ 上计算最小值,演化过程如图2所示.图2中的散点为采样点,采样点个数 $\lambda=100$,选择评估点数 $\mu=30$, '+' 为采样点均值向量坐标,曲线为协方差分布等密度曲面在 $f_l=0$ 处的投影.

易导致其变得过早收敛.对此本文提出新的协方差矩阵 \mathbf{C}_{qho} 以及均值向量的生成模型:

$$\mathbf{C}_{qho} = \sum_{i=1}^u \omega_i (\mathbf{x}_{i:\lambda} - \mathbf{m}_{old})(\mathbf{x}_{i:\lambda} - \mathbf{m}_{old})^T \quad (9)$$

$$\mathbf{m} = \sum_{i=1}^u \omega_i \mathbf{x}_{i:\lambda} \quad (10)$$

$$\sum_{i=1}^u \omega_i = 1, \omega_1 \geq \omega_2 \geq \dots \geq \omega_u > 0 \quad (11)$$

比较式(8)与式(9),其最大不同点在于均值向量的选择,式(8)估计协方差使用当前所选择样本点

的均值向量, 式(9)使用了上一代种群样本的均值向量, 这就解决了原 QHO 过程的“无记忆性”问题, 这种选择还大大增加了在梯度方向上的方差值. 此外如式(10) 式(11)所示, 均值向量和协方差矩阵的计算方法多了加权方式, 增加了种群差异性, 比如可以选择典型的简单排序编码法设置权重为

$\omega_i \propto u - i + 1, i = 1 \dots \mu$. 特别当 $\omega_i = \frac{1}{\mu}$ 时, 式(8)与式(9)除了均值向量选择的不同外其他都相同. 为了与 EMNA 作对比, 取 $\omega_i = \frac{1}{\mu}, i = 1 \dots \mu$, 重复图 2 算法迭代过程, 结果如图 3 所示.

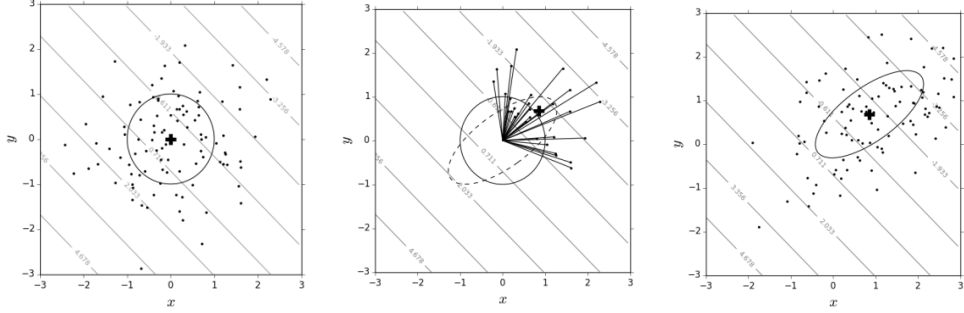


图 3 使用 C_{qho} 对 f_l 演化过程

Fig.2 evolution process of f_l by using C_{qho}

图 3 中左图与图 2 一致, 中图以原始均值向量构造协方差矩阵, 椭圆曲线即等密度曲面在 $f_l = 0$ 处的投影, 右图重新以最新的均值向量构造协方差矩阵, 相当于把中图椭圆的中心点平移到最新的均值向量中去. 从图中可见在梯度方向上的方差增加了, 更容易找到最好点.

2.3 改进的 M 收敛过程

由于原 M 收敛过程是固定衰减, 没有动态衰减机制, 容易丢失重要维度的采样信息, 因此这里增加动态迭代步长:

$$p = \|BD^{-1}B^T(m - m_{old})\| \quad (12)$$

式中 B 是 C 的正交矩阵, 根据前面描述的几何意义可知, B^T 把向量空间变换到坐标轴上, D^{-1} 使坐标轴变化尺度相同, B 重新把向量从坐标轴变换到其原本的向量空间中去, 确保差向量的向量空间与原多元正态分布的超椭球等密度曲面的向量空间一致. 此外, $m - m_{old}$ 越小 p 越小, 也就是下次迭代在梯度方向上的步长越小, 同样 $m - m_{old}$ 越大 p 越大, 下次迭代在梯度方向上的步长越大. 这样当前后两代的均值中心点接近时会进一步进行精确搜索, 而当两代均值中心点较远时, 相比上一代搜索范围将扩大, 这样也可以减少迭代次数并加快算法收敛. 但快速收敛也就会提高算法的不稳定性, 因此改进算法需要提供较多采样点以保证算法稳定性. 根据式(6), 式(12)也可写成

$$p = \|C^{-\frac{1}{2}}(m - m_{old})\| \quad (13)$$

综合以上公式, 可以总结出基于协方差矩阵的 MQHOA 算法的采样点分布:

$$\begin{aligned} x_k &\sim m + pN(0, C_{qho}) \\ &\sim m + \|C^{-\frac{1}{2}}(m - m_{old})\| N(0, C_{qho}) \\ &\sim m + \|BD^{-1}B^T(m - m_{old})\| BN(0, D^2) \\ k &= 1, \dots, \lambda \end{aligned} \quad (14)$$

3 改进 MQHOA 算法描述

CM-MQHOA 整个算法流程可以描述如下:

- Step1** 输入样本数 λ , 评估点比例 α , 评估点数 $\mu = \alpha\lambda$, 以及对应的权重向量 $\omega = [\omega_1, \dots, \omega_u]$, 初始样本均值向量 m , 收敛精度 σ_{crit} , 初始迭代步长 p , 初始标准差向量 σ , 由 σ 构成初始方差矩阵 C 的对角线.
- Step2** 依据式(14)生成 λ 个样本点.
- Step3** 根据这些点的评价函数值选取 μ 个最好的点作为评估点, 依据式(9) 式(10)产生新的协方差矩阵 C 和均值向量 m , 依据式(12)产生新的迭代步长 p .
- Step4** 对于 $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$, 如果 $\min_{1 \leq i \leq n} d_i > \sigma_{crit}$, 返回 Step2.
- Step5** 对最终 λ 个采样点对应的评价值排序, 取最好的一个点作为最终解.

一般设置初始迭代步长 $p = 1$, $\sigma_{crit} = 1E - 6$, $\sigma = \text{MAX} - \text{MIN}$, $[\text{MIN}, \text{MAX}]$ 为目标函数定义域边界范围, ω 满足式(10), 在实际工程应用中设置 $\omega_i \propto \ln \frac{u+1}{i}$, $i = 1 \dots \mu$ 是较好的选择, 但相对来说以上参数并不是关键参数, 这些参数相对较自由且不会妨碍算法收敛. 选择 $\lambda > n$, 为了保证算法鲁棒性并且能在多峰函数中有更强的搜索能力, 可以增大 λ 的值, 同时对于单峰等简单问题可以适当减少 λ 的值或者置 $\alpha = \frac{1}{4}$, 这样将使算法快速收敛.

4 实验

实验采用六个经典评测函数, 其中前三个是多峰函数, 后三个是单峰函数, 最优值均为 0, 所有函数和算法均以 python 实现, 版本为 3.4.5, 实验主机为 MAC, 处理器是 2.9 GHz, 酷睿 i5, 8 GB

RAM.为降低实验统计错误率,每种测试重复 30 次运行.

4.1 与原算法对比

算法参数设置与文献[3]一致,具体来说定义样本数 $\lambda = 120$, 边界范围为 $[-10, 10]$, $\sigma_{crit} = 1E-6$, $\alpha = \frac{1}{4}$, 初始迭代步长 $p = 1$, 初始中心点

在定义域内随机选择.最后汇总适应度函数迭代次数(Number of Fitness Function Evaluations, NFFE)并取平均值记录在表 2,其中空白记录表示数值大于 10^6 ,也就是需要花费非常长的迭代时间.表中记录行上面数值是原 MQHOA 算法迭代次数,下面数值为 CM-MQHOA 算法迭代次数.

表 1 基于协方差矩阵的 MQHOA 与原算法迭代次数比较
Table 1 Comparison improved MQHOA's iteration with the original one

函数名称	函数维度						
	3	4	5	6	7	8	10
Griewank ^[11]	6880	6900	71500	158280			
	1840	2960	3480	5010	6560	8540	12020
Rastrigrin ^[11]	1500	4110	1260	246660	323440	1692830	
	2460	2700	3520	4720	5620	9840	28220
Levy ^[12]	1100	1540	2060	2500	3300	4760	12620
	2020	2520	3140	3700	4680	5540	8040
Zakharov ^[12]	1160	1820	2520	3120	4740	7180	20520
	1800	2240	2740	3200	4120	4600	7020
Sum	1100	1680	2240	3980	8020	19280	339820
Square ^[12]	1820	2240	2620	2400	3840	4640	7240
	1060	1460	1860	2260	2850	3500	6320
Sphere ^[11]	2280	2740	3620	4320	5680	6520	7040
							29740

从表 1 可见, CM-MQHOA 迭代次数要远小于原 MQHOA, 尤其是在高维部分和复杂函数部分, 而原 MQHOA 虽然在低维简单函数能够取得暂时的优势, 但算法总体而言随着维度增长总迭代次数也呈几何增长, 尤其对复杂多峰函数在维度较高情况下算法很难收敛.对此特用 Griewank 函数的比较来对这两个算法单独分析, 如下图 4 所示.

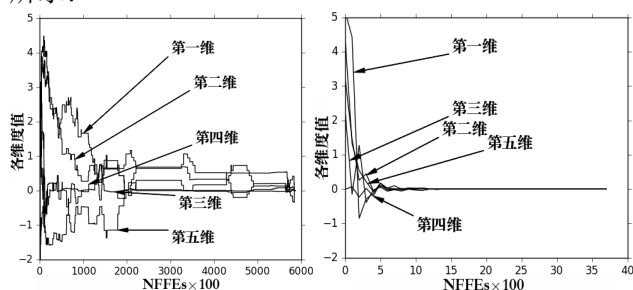


图 4. CMMQHOA 与原算法各维度对 Griewank 函数收敛情况
Fig.4 MQHOA based on covariance matrix and the original's convergence situation about all dimension of Griewank

左图中, 原 MQHOA 由于各维尺度不能动态调节, 在未达到 QHO 收敛条件的情况下, 尺度固定不变, 故收敛情况呈阶梯走势.当算法搜索到最优解附近时(左图中迭代次数约为 5700), 也因

为尺度较大而使下次迭代过程中错过最优解, 而当算法搜索到最优解附近且尺度也很小时, 收敛速度非常快(左图最右端所示).右图中, 函数各维度平滑收敛, CM-MQHOA 使改进的 QHO 收敛过程快速定位最优解, 图中可见在第 10 次迭代过程中基本锁定了最优解.通过对比可知, CM-MQHOA 解决了原算法尺度不能动态调节问题, 并且加快了收敛速度.

4.2 与其他算法对比

为更好评估此算法, 实验选择一些经典的优化算法作为对比, 这些算法分为进化和群智能两方面, 有粒子群优化算法(Particle Swarm Optimization, PSO)^[11]、快速进化策略算法(Fast Evolution Strategies, FES)^[13]、人工蜂群算法(Artificial Bee Colony, ABC)^[14]、差分进化算法(Differential Evolution, DE)^[15].这些算法对非线性多维空间有很好的搜索能力, 其参数按对应文献设置.所有算法均设置样本数为 100, 设置 NFFE 为 100000, 分别求解 30 维与 50 维问题, 记录结果于表 2、表 3, 最好值用加粗表示, 并统计 30 次独立重复实验的方差, 此外分别使用自由度为 29 与 49 的 t 双边检验来说明结果的有效性, 显著性水平设为 0.05, 用[†]标记统计有效性.

表 2 30 维函数比较结果
Table 2 Compare results for 10-D problems

F	CM-MQHOA	PSO	FES	ABC	DE
Griewank	6.14E-59 ±1.25E-59 [†]	6.48E-16±2.18E-16 [†]	1.01E+02±1.03E+02	6.93E-22±2.20E-22 [†]	6.79E+01±2.49E+01
Rastrigrin	3.24E+00 ±1.61E+00 [†]	1.22E+01±6.01E+00 [†]	7.04E+01±4.97E+00 [†]	1.79E+01±7.96E+00 [†]	1.68E+02±1.07E+01 [†]
Levy	1.22E-32 ±1.35E-32 [†]	2.64E-20±1.18E-20 [†]	5.86E+00±2.15E+00 [†]	1.60E-32±1.41E-32 [†]	6.41E-01±1.06E-01 [†]
Zakharov	3.26E-55 ±4.10E-56 [†]	6.98E+00±2.02E+00 [†]	4.01E+02±1.17E+01	1.82E+00±2.10E-01 [†]	1.53E+01±1.63E+01
Sum Square	3.23E-58 ±1.40E-58 [†]	8.54E-18±2.03E-18	1.88E+00±1.34E+00 [†]	2.73E-56±2.67E-57 [†]	3.46E+00±9.02E-01 [†]

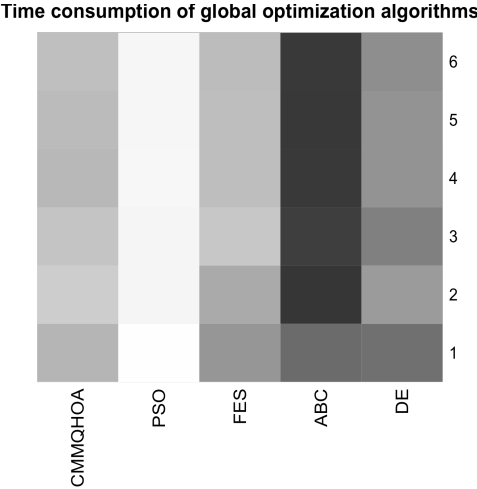
<i>Sphere</i>	4.71E-60±1.72E-60 [†]	1.65E-20±4.00E-21 [†]	2.04E-01±1.25E-02 [†]	5.59E-66±1.43E-67[†]	3.29E-02±1.70E-02
---------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------------	-------------------

表 3 50 维函数比较结果
Table 2 Compare results for 10-D problems

F	CM-MQHOA	PSO	FES	ABC	DE
<i>Griewank</i>	2.38E-37±3.17E-38[†]	8.22E-09±2.18E-09 [†]	8.46E+01±1.53E+02	1.05E-35±2.20E-36 [†]	6.79E+01±2.49E+01
<i>Rastrigin</i>	1.41E+01±2.26E+00[†]	2.41E+01±1.01E+01	4.08E+02±8.97E+01 [†]	4.97E+01±7.96E+00 [†]	3.80E+02±7.07E+01 [†]
<i>Levy</i>	1.35E-28±1.35E-29 [†]	8.36E+00±1.18E+00 [†]	3.86E+01±2.15E+00 [†]	1.50E-30±1.41E-30[†]	5.41E-01±1.05E-01 [†]
<i>Zakharov</i>	3.92 E-32±4.10E-34[†]	6.61E+02±2.02E+02	1.01E+03±2.17E+02 [†]	2.63E+02±4.10E+01 [†]	3.15E+01±1.63E+01 [†]
<i>Sum Square</i>	1.15E-40±4.07E-41[†]	2.13E-07±4.03E-08 [†]	4.18E+01±1.14E+01 [†]	4.84E-40±1.77E-40 [†]	1.36E+02±9.02E+01 [†]
<i>Sphere</i>	5.14E-42±5.41E-43[†]	1.84E-08±2.10E-09 [†]	1.04E+00±1.45E-01 [†]	1.14E-39±1.27E-41	1.21E+02±20E+01 [†]

从表 2、表 3 可见 CM-MQHOA 与常用的优化算法相比优化结果要好，适应度值均非常接近最优值.从横向上，除了 30 维的 Sphere 函数与 50 维的 Levy 外,CM-MQHOA 均表现最优,而 Sphere 与 Levy 分别是表中单峰函数与多峰函数中最简单的函数，结合无免费午餐原理，CM-MQHOA 相比其他算法更适合处理复杂的函数.此外从表中方差可见 CM-MQHOA 算法比较稳定，结果不会有大的波动，尤其对多峰函数效果更加明显.纵向比较两表,可见在相同 NFFEs 下,维度的增加使 CM-MQHOA 优化性能下降，但下降程度并不明显，得到的适应度值仍然很小.

统计这五种算法在 50 维的平均迭代时间，按照排名绘制成图 5.



参考文献：

[1] 姜建国, 周佳薇, 郑迎春, 等. 一种自适应细菌觅食优化算法[J]. 西安电子科技大学学报, 2015, 42(1): 75-81.
GIANG Jianguo, ZHOU Jiawei, ZHEN Yingchun, et al. Adaptive bacterial foraging optimization algorithm[J]. **Journal of Xidian University**, 2015, 42(1): 75-81.

[2] ELSAYED S M, SARKER R A, ESSAM D L. An improved self-adaptive differential evolution algorithm for optimization problems[J]. **Industrial Informatics**, IEEE Transactions on, 2013, 9(1): 89-99.

[3] 王鹏, 黄焱, 任超, 郭又铭. 多尺度量子谐振子高维函数全局优化算法[J]. 电子学报, 2013, 41(12): 2468-2473.
WANG Peng, HUANG Yan, REN Chao, et al. Multi-Scale quantum harmonic oscillator for High-Dimensional function global optimization algorithm. **Acta Electronica Sinica**, 2013, 41(12): 2468-2473.

[4] 王鹏, 黄焱. 多尺度量子谐振子优化算法物理模型[J]. 计算机科学与探索. 2015, 9(10): 1271-1280.
WANG Peng, HUANG Yan. Physical model of multi-scale quantum harmonic oscillator optimization algorithm[J]. **Journal of Frontiers of Computer Science and Technology**, 2015, 9(10):1271-1280.

[5] 燕京京, 王鹏, 范家兵, 等. 基于量子谐振子模型的聚类中心选取算法[J]. 电子学报, 2016, 44(2): 405-412.
YAN Jing-jing, WANG Peng, FAN Jia-bing, et al. Clustering center selecting algorithm based on quantum harmonic oscillator model[J]. **Chinese Journal of Electronics**, 2016, 44(2): 405-412.

[6] 陆志君, 安俊秀, 王鹏. 基于划分的多尺度量子谐振子算法多峰优化[J]. 自动化学报, 2016,42(2): 235-245.

图 5 各算法时间消耗热力图
Fig .5 The thermodynamic diagram of the algorithms' time consumption

图中颜色越深代表所耗时间越多，可见 PSO 所消耗时间最少，但从表 3 可知其优化性能不如 ABC，但 ABC 相比于其他算法来说消耗时间最多。CM-MQHOA 的时间消耗与 FES 差不多，但 FES 在表 3 中优化性能最差，而 CM-MQHOA 表现最优。综合上述分析，CM-MQHOA 具有较好的寻优准确度和收敛速度。

5 结论

本文分析了 MQHOA 原理，针对其不足提出了一种协方差的多尺度量子谐振子算法，利用协方差矩阵和动态迭代步长等解决了原算法在 QHO 收敛和 M 收敛过程中存在的问题，使算法在各维度上能动态调节.通过与原 MQHOA 算法的对比实验可知 CM-MQHOA 算法收敛速度更快，并且更适合处理高维问题.随后本文将基于协方差矩阵的 MQHOA 算法与群体优化领域内经典算法作对比，包括 PSO 算法、FES 算法、ABC 算法和 DE 算法，实验结果表明 CM-MQHOA 算法在收敛精度、准确性、鲁棒性上的表现总体优于其他算法.本文还有很多潜在的地方值得去挖掘和完善，以处理更高维的函数，这些将是今后的研究点，以进一步提高 CM-MQHOA 的性能.

- LU Zhijun, AN Junxiu, WANG Peng. Partition-based MQHOA for Multimodal Optimization[J]. *Acta Automatica Sinica*. 2016, 42(2): 235-245.
- [7] 王鹏, 黄焱, 安俊秀, 等. 多尺度量子谐振子算法在组合优化问题中的性能分析[J]. 电子科技大学学报, 2016, 45(3): 470-474.
WANG Peng, HUANG Yan, AN Jiuxiu, et al. Performance Analysis of Multi-Scale Quantum Harmonic Oscillator Global Optimization Algorithm in Combinatorial Optimization Problems[J]. *Journal of University of Electronic Science and Technology of China*, 2016, 45(3): 470-474.
- [8] 秦永波, 王鹏, 肖黎彬, 等. 量子谐振子蚁群算法[J]. 计算机应用, 2011, 31(增 2): 54-69.
QIN Yong-bo, WANG Peng, XIAO Li-bin, et al. Ant colony optimization of quantum harmonic oscillators[J]. *Journal of Computer Applications*, 2011, 31(z2): 54-69.
- [9] HAUSCHILD M, PELIKAN M. An introduction and survey of estimation of distribution algorithms[J]. *Swarm and Evolutionary Computation*, 2011, 1(3): 111-128.
- [10] ZHU L, DEB K, KULKARNI S. Multi-scenario optimization using multi-criterion methods: A case study on Byzantine agreement problem[C]// *Evolutionary Computation*. Beijing, China: IEEE, 2014: 2601-2608.
- [11] LIANG J J, QIN A K, SUGANTHAN P N, et al. Comprehensive learning particle swarm optimizer for global optimization of multimodal functions[J]. *Evolutionary Computation*, IEEE Transactions on, 2006, 10(3): 281-295.
- [12] SABAT S L, ALI L, UDGATA S K. Integrated learning particle swarm optimizer for global optimization[J]. *Applied Soft Computing*, 2011, 11(1): 574-584.
- [13] BEYER H G, SCHWEFEL H P. Evolution strategies—A comprehensive introduction[J]. *Natural computing*, 2002, 1(1): 3-52.
- [14] Seeley T D, Visscher P K, Schlegel T, et al. Stop signals provide cross inhibition in collective decision-making by honeybee swarms.[J]. *Science*, 2012, 335(6064): 108-11.
- [15] CIVICIOGLU P, BESDOK E. A conceptual comparison of the Cuckoo-search, particle swarm optimization, differential evolution and artificial bee colony algorithms[J]. *Artificial Intelligence Review*, 2013, 39(4): 315-346.