
* 短文 *

离散复杂系统最优化的 Darwin & Boltzmann 混合策略

田 澎 杨自厚 张嗣瀛

(东北大学自动控制系 沈阳 110006)

摘 要

离散复杂系统最优化具有广泛的理论和应用背景. 基于对现实自然和社会进化中 Darwin 过程和不可逆热动力过程的分析, 本文提出并构造了一类新的求解离散复杂系统最优化问题的随机方法—— Darwin & Boltzmann 混合寻优策略. 分析和计算结果表明, Darwin & Boltzmann 混合策略求解离散复杂系统最优化问题是有效的且优于模拟退火法. 本文的工作无疑为离散复杂系统最优化的分析和求解提供了新的途径.

关键词: 离散复杂系统最优化, Darwin & Boltzmann 混合策略, 全局渐近收敛性, 多项式算法.

1 引言

考虑如下离散复杂系统最优化问题,

$$\min f(x), \quad (1a)$$

$$\text{s. t. } x \in S. \quad (1b)$$

其中 x 为系统变量, S 为离散的 (一般为有限的) 可行解集合, $f(\cdot): S \rightarrow R_d$ 为最优化目标函数, R_d 为可数实数集合. 并令 S_{opt} 为最优解集合, 即 $S_{opt} = \{x_{opt} \in S | f(x_{opt}) \leq f(x); x \in S\}$, $N(x) \subset S$ 为 x 的邻域.

对于上述问题 (1), 通常的分析和求解方法 (包括非线性规划、整数规划等) 往往难以奏效, 同时, 计算复杂性研究表明其具有 NP 难解性^[1]. 因此, 其近似分析和求解具有特殊意义. 通过对现实自然和社会进化中 Darwin 过程和不可逆热动力过程这两个基本过程的分析, 并基于对模拟退火法 (Simulated Annealing, SA) 和随机进化法 (Stochastic Evolution, SE) 等的深入研究, 本文提出一类新的离散复杂系统最优化的随机方法—— Darwin & Boltzmann 混合寻优策略 (简记 D&B 策略). 分析和计算结果表明, 其求解是有效的且优于模拟退火法.

2 Darwin & Boltzmann 混合策略

我们应当承认, 自然和社会中多数复杂系统都是某种进化过程的产物. 而基本的进化过程之一就是不可逆热动力过程, 即 Boltzmann 策略结合退火过程, 其基本要素是: ① 沿梯度方向搜索以使过程最速下降; ② 随机热扰动以避免过程陷于局域极小; ③ 降低热扰动温度以增加搜索精度. 1983 年 S. Kirkpatrick 等人提出了组合最优化的模拟退火法^[2], 其寻优原理就是 Boltzmann 退火策略, 也可以说, 模拟退火算法是 Boltzmann 退火策略的一个具体实现.

粗略地讲, 现实自然和社会进化中的另一个基本过程是 Darwin 策略, 它通常包括遗传(或自繁殖)、变异(突变)和自然选择等过程. W. Ebeling 等人曾认真研究了 Darwin 策略对当代技术系统的设计和构造的意义, 其中包括为组合最优化问题开发有效的求解技巧^[3, 4]. Darwin 策略的基本要素为: ① 优良物种进行自繁殖和选择以获得最大适应性; ② 引入变异过程改变物种表型性质和水平以使进化过程免于陷入局域稳定和停滞; ③ 适时地增加自繁殖选择和变异过程的精度. 已经证明^[3], Darwin 策略的自繁殖选择过程突出地具有局域寻优性质.

结合 Darwin 策略和 Boltzmann 退火策略, 我们给出求解离散复杂系统最优化问题(1)的 D&B 策略如下:

步骤 1. 任选初始解 x ; 给定初始变异参数 $M > 0$.

步骤 2. 进行自繁殖选择寻优过程, 即对于 $\forall x' \in N(x)$, 若 $f(x') \leq f(x)$, 则 $x = x'$.

步骤 3. 随机引入变异扰动 $x' \in N(x)$, 依 Metropolis 判据接受 x' , 即若 $\min \left\{ 1, \exp \left(\frac{f(x) - f(x')}{M} \right) \right\} > \eta$, 则 $x = x'$.

步骤 4. 若在此 M 下 Metropolis 迭代过程尚未稳定, 即变异过程尚未结束, 转步骤 3.

步骤 5. 若满足算法终止条件, 即进化退火过程完成, 则输出解 x , 算法终止; 否则, 按一定方式衰减变异参数, 即 $M = M - \Delta M$, ($\Delta M > 0$), 转步骤 2.

从中可看出, 以上 D&B 策略将 Boltzmann 退火过程引入到 Darwin 策略中的变异过程及其参数调整. D&B 策略寻优过程是在 Darwin 策略和 Boltzmann 退火策略两个子寻优过程之上交替反复展开的. 自繁殖选择过程实现了最速下降搜索并获得局域极小解; 变异过程总是以某一局域极小解开始进行 Boltzmann 策略的“爬山”过程以逃离局域极小“陷阱”; 同时, 伴随变异参数不断衰减的退火过程, 使寻优过程最终获得全局最优解.

3 全局渐近收敛性

由于 D&B 策略为随机迭代算法, 所以可用 Markov 链理论数学地加以描述和分析.

引理. 以 $p_{ij}(\cdot)$ 为转移概率的离散参数时齐 Markov 链具有强 Markov 性, 而且

$$E(\xi_{t+\tau}=j | \mathcal{F}_t) = p_{\xi_t j}(t),$$

或
$$P(\xi_{k+\tau}=j | \xi_k=i) = p_{ij}(k). \quad (2)$$

其中 τ 为停时.

推论. D&B 策略对应的离散参数有限时齐 Markov 链具有强 Markov 性, 而且

$$P_M(\xi_k=x' | \xi_{k-1}=x) = p_{xx'}^M(k, k-1) = p_{xx'}^M(1) = p_{xx'}(M), \quad k \in \tau(\cdot). \quad (3)$$

其中 $\tau(\cdot)$ 和 $p_{xx'}(M)$ 的定义参见作者论文¹⁾.

定理. 给定离散复杂系统最优化问题 (S, f) , $p_{xx'}(M)$ 为 D&B 策略对应的离散参数有限时齐 Markov 链 $\xi(M)$ 的一步转移概率. 则存在一平稳分布 $q(M)$, 其分量由下式给出,

$$\forall x, x' \in S: q_x(M) = \lim_{k \rightarrow \infty} P_M(\xi_k=x | \xi_0=x') = \frac{\exp(-f(x)/M)}{\sum_{z \in S} \exp(-f(z)/M)}, \quad (4)$$

进而, 有
$$\lim_{M \rightarrow 0} q_x^i(M) = q_x^* = \frac{1}{|S_{opt}|} I_{(S_{opt})}^*(x), \quad (5)$$

即
$$\lim_{M \rightarrow 0} \lim_{k \rightarrow \infty} P_M(\xi_k \in S_{opt}) = 1. \quad (6)$$

详细证明参见作者论文¹⁾

从定理可知, 离散复杂系统最优化的 D & B 策略以概率 1 求得全局最优解, 即渐近收敛于全局最优解集合.

4 一个多项式实现

对给定离散复杂系统最优化问题的 D&B 策略求解的实现主要包括: ① 确定解转移机制, 即随机抽样方法; ② 设计变异参数控制程序, 其中包括变异参数初值、变异过程结束判据、变异参数衰减方式和算法终止判据. D&B 策略的计算复杂性主要由变异参数控制程序决定. 这里我们设计了如下具有多项式计算特性的变异参数控制程序, 即以此构成 D&B 策略的一个多项式实现.

$$M_0 \geq - \frac{\Delta f_{\max}}{\ln \alpha_0}, \quad (7)$$

$$L_k = L = \beta \cdot \max_{x \in S} |N(x)|, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

$$M_{k+1} = \frac{M_k}{1 + M_k \cdot \ln(1 + \varepsilon) / f_{\max}(M_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (9)$$

1) 田澎. 离散最优化的 Darwin & Boltzmann 混合策略: 理论及应用. 东北大学博士学位论文, 沈阳, 1993.

$$M_f \leq \frac{\Delta f_{\min}}{\ln(|S|/\delta)}. \quad (10)$$

所有参数的定义和有关分析证明详见作者论文

5 应用例子

设有一离散复杂系数最优化问题为,

$$\begin{aligned} \min f(x_1, x_2, x_3, x_4) = & (x_1 - 3)^4 \cdot \cos \pi x_1 + (x_2 - b) \cdot \sin \frac{\pi}{4} x_2 \\ & + (x_3 - 2.5)^2 \cdot (x_2 + 2)^{-1} + (x_3 + 2)^3 \cdot e^{-x_4} \end{aligned} \quad (11a)$$

$$\text{s. t. } x_i \leq b_i, \quad x_i \in \mathbb{Z}^+, \quad i = 1, 2, 3, 4. \quad (11b)$$

其中, x_i 为系统变量; b_i 为非负整数; 可行解集合 $S = \{x_1, x_2, x_3, x_4 \mid x_i \leq b_i; x_i \in \mathbb{Z}^+, i = 1, 2, 3, 4\}$. 对于这个非线性整数规划问题, 目前除穷举法外还无法精确求解.

相应地, 我们设计随机抽样算法如下:

步骤 1. 已知解 $x = (x_1, \dots, x_n)$.

步骤 2. $r = \text{random}[1, n]$.

步骤 3. 若 $x_r = b_r$, 则 $k = 1$, $C = \text{random}[4, 5]$, 转步骤 C; 若 $x_r = 0$, 则 $k = 0$, $C = \text{random}[4, 5]$, 转步骤 C; 否则, $k = \text{random}[1, n]$, 转步骤 5.

步骤 4. $x_r' = x_r$, 转步骤 6.

步骤 5. $x_r' = x_r + (-1)^k$.

步骤 6. 获得新解 $x' = (x_1, \dots, x_r', \dots, x_n)$, 算法结束. 其中, $\text{random}[n_1, n_2]$ 为在区间 $[n_1, n_2]$ 上产生均匀分布伪随机整数的程序函数.

对于给定的 $b_i, i = 1, 2, 3, 4$, 通过穷举法求得优化问题 (11) 对应问题实例的最优解和最优值, 如表 1 所示; 同时, 分别以 D&B 策略和模拟退火法 (SA) 求解问题 (11), 所得结果列于表 2. 其中, 最优率、偏差和空间搜索率等性能指标定义如下:

$$\text{最优率 (\%)} = \frac{\text{求得最优值 } f(x_{opt}) \text{ 的次数}}{\text{求解总次数}} \times 100, \quad (12)$$

$$\text{偏差 (\%)} = \frac{\text{第 } i \text{ 次求解最终值 } f_i - f(x_{opt})}{f(x_{opt})} \times 100, \quad (13)$$

$$\text{空间搜索率 (\%)} = \frac{\text{迭代次数}}{|S|} \times 100. \quad (14)$$

表 1 穷举法计算结果

实例	b_i	$ S $	x_{opt}	$f(x_{opt})$
I	(40, 40, 40, 40)	2825761	(39, 38, 2, 28)	-1679647
II	(50, 50, 50, 50)	6765201	(49, 46, 2, 26)	-4477495
III	(60, 60, 60, 60)	13845841	(59, 54, 2, 25)	-9834543

表 2 D&B 和 SA 求解结果

算法	实例	最优率 (%)	偏差 (%)			迭代 次数	空间搜 索率 (%)
			均值	方差	最差		
D&B	I	99	0.24	5.92	24.45	≈4320	≤0.150
	II	98	0.62	19.71	37.57	≈5350	≤0.079
	III	98	0.54	14.82	30.23	≈5590	≤0.040
SA	I	85	6.77	325.60	72.79	17280	≤0.610
	II	82	5.68	309.03	86.27	21410	≤0.310
	III	79	7.82	485.69	93.75	22380	≤0.160

参 考 文 献

- [1] Garey M R, Johnson D S. Computers and intractability: a guide to the theory of NP-completeness. W H Freeman and Company: San Francisco, 1979.
- [2] Kirkpatrick S, Gelatt Jr C D, Vecchi M P. Optimization by simulated annealing. *Science*, 1983, **220** (4598): 671 — 680.
- [3] Ebeling W, Feistel R. Stochastic theory of molecular replication processes with selection character. *Annalen der Physik*, 1977, **7**: 81 — 90.
- [4] Ebeling W, Engel A. Models of evolutionary systems and their application to optimization problems. *Syst. Anal. Model. Simul.*, 1986, **3**: 377 — 385.

DARWIN & BOLTZMANN MIXED STRATEGY FOR OPTIMIZATION OF DISCRETE COMPLEX SYSTEMS

TIAN PENG YANG ZIHOU ZHANG SIYING

(Department of Automatic Control, Northeastern University, Shenyang, 110006)

ABSTRACT

On the basis of analysing for Darwinian processes and irreversible thermodynamic processes in real nature and society evolution, this paper proposes and implements a Darwin and Boltzmann mixed strategy, a new and effective general stochastic approach, for optimization of discrete complex systems which has an extensive theoretical and applicational background. The results of analyses and evaluations show that the strategy is efficient and superior to simulated annealing algorithm. Undoubtedly, the research works of the paper will provide a new way of analysing and solving for optimization of discrete complex systems.

Key words: Discrete complex systems optimization, Darwin & Boltzmann mixed strategy, global asymptotical convergence, polynomial algorithm.