

文章编号: 1001-0920(2006)10-1193-04

基于模式优选思想改进的粒子群优化算法

李绍军, 王 惠, 钱 锋

(华东理工大学 自动化研究所, 上海 200237)

摘 要: 针对粒子群优化算法(PSO)容易陷入局部最优值的缺点, 提出一种基于遗传算法模式定理思想改进的粒子群优化算法(IPSO)。新算法改善了粒子群优化算法摆脱局部极小点的能力。对典型函数的测试表明, IPSO 算法的全局搜索能力有了显著提高, 特别是对多峰函数能有效地避免早熟收敛问题。将改进的粒子群优化算法用于氧化反应动力学参数的优化, 计算结果表明, 新算法优化结果明显优于文献报道。

关键词: 粒子群; 模式; 反应动力学; 优化

中图分类号: TP273 **文献标识码:** A

Improved Particle Swarm Optimization Algorithm by Schema

L I Shao-jun, W A N G H ui, Q I A N F eng

(Research Institute of Automation, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China
Correspondent: L I Shao-jun, E-mail: lishaojun@263.net)

Abstract: An improved particle swarm optimization algorithm (IPSO) is proposed based on the idea of schema optimal choice, which is the basic character of genetic algorithm. The IPSO has merits of both PSO and genetic algorithm choice. Both IPSO and basic PSO are used to resolve several well-known benchmark functions optimization problems. Results show that IPSO has greater efficiency and better performance than PSO, especially to the high-dimensional, multi-apices functions. The application of IPSO to estimate of the kinetic parameters of 2-chloropheol oxidation in supercritical water provides better parameters than those reported in the literature.

Key words: Particle swarm; Schema; Kinetic; Optimization

1 引 言

粒子群优化算法(PSO)^[1,2]是一种基于群智能方法的演化计算技术。作为一种新的并行优化进化算法,粒子群算法可以解决大量非线性、不可微、非连续和多峰的优化问题,并已广泛应用于科学和工程领域,如:函数优化、神经网络训练、模式分类、模糊系统控制等。但是,算法运行过程中如果某粒子发现一个当前最优位置,其他粒子将迅速向其靠拢;如果该最优位置为一局部最优点,粒子群就无法在解空间内重新搜索,算法陷入局部最优,出现了所谓的早熟收敛现象。为了克服传统粒子群算法的缺点,人们提出了许多改进粒子群优化算法,如: Shi^[3]提出

的带惯性因子的粒子群优化算法, Clerc^[4]提出的带约束因子的粒子群优化算法, Shi^[5]提出的模糊自适应粒子群优化算法等。这些算法从不同方面对粒子群算法进行了改进,虽然在不同程度上提高了收敛速度和精度,但并没有很明显的效果。本文根据遗传算法中模式定理的思想提出一种改进的粒子群优化算法,并将其应用到反应动力学参数的优化中。标准测试函数实验和反应动力学参数优化的实例应用均表明本文提出的算法是有效的。

2 基于模式优选思想改进的粒子群优化算法

2.1 标准粒子群优化算法

收稿日期: 2005-07-21; 修回日期: 2005-10-16

基金项目: 国家 973 计划项目(2002CB3122000); 国家 863 计划项目(2003AA412010); 上海科委科技攻关项目(04DZ11010); 上海市优秀学科带头人计划项目。

作者简介: 李绍军(1970—), 男, 山东高唐人, 博士, 从事化工过程建模、仿真与智能优化算法的研究; 王惠(1971—), 女, 山东莱芜人, 硕士, 从事管理信息系统与进化算法的研究。

假设在一个 D 维的目标搜索空间中, 有 m 个粒子组成一个群落, 其中第 i 个粒子表示为一个 D 维的向量 $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iD})$, $i = 1, 2, \dots, m$, 即第 i 个粒子在 D 维搜索空间中的位置 x_i . 将 x_i 带入目标函数便可计算出其适应度值, 根据适应度值的大小可衡量 x_i 的优劣. 第 i 个粒子的“飞翔”速度也是一个 D 维的向量, 记为 $v_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{iD})$. 将第 i 个粒子迄今为止搜索到的最优位置记为 $p_{bi} = (p_{bi1}, p_{bi2}, \dots, p_{biD})$, 整个粒子群中, 所有粒子所搜索到的最优位置记为 $gb = (gb_1, gb_2, \dots, gb_D)$. 每代粒子的进化采用如下公式进行操作:

$$v_{id}^{k+1} = \omega v_{id}^k + c_1 R_1 (p_{bid}^k - x_{id}^k) + c_2 R_2 (gb_d^k - x_{id}^k), \quad (1)$$

$$x_{id}^{k+1} = x_{id}^k + \alpha v_{id}^{k+1}. \quad (2)$$

其中: ω 是非负数, 称为惯性因子; α 称为约束因子, 目的是控制速度的权重; $i = 1, 2, \dots, m$ 是粒子数; $d = 1, 2, \dots, D$ 是向量维数; $k = 1, 2, \dots, n$ 是迭代次数; 学习因子 c_1 和 c_2 是非负常数, 分别调节向全局最好粒子和个体最好粒子方向飞行的步长; R_1 和 R_2 是介于 $(0, 1)$ 之间的随机数. 迭代中止条件根据具体问题而定, 一般选最大迭代次数或粒子群搜索到的最优位置满足预定值作为终止条件.

基本 PSO 算法需要调整的参数并不多, 而且采用实数编码使其操作简单, 故使用起来比较方便. 但其缺点是易陷入局部极值点, 搜索精度不高.

2.2 模式优选

根据模式定理, 遗传算法所具有的隐含并行性是由于它对个体的搜索过程实际上就是对个体的某些相似模式的搜索过程. 模式^[6]表示一些相似的模块, 它描述了在某些位置上具有相似结构特征的个体编码串的一个子集. 以二进制编码方式为例, 个体是由二值字符集 $\{0, 1\}$ 组成的编码串, 而模式是由三值字符集 $\{0, 1, *\}$ 中的元素所组成的一个编码串, 其中“*”表示通配符, 它既可以当作“1”, 也可以当作“0”.

模式的阶是指在模式中确定位置的数目, 记为 $\Delta(H)$. 在二进制编码的染色体中一个模式的阶就是所有 0 或 1 的个数. 例如, 模式 010 的阶 $\Delta = 3$ 而模式 $1***$ 的阶 $\Delta = 1$. 模式定义距是指模式中第一个确定基因位置与最后一个确定基因位置之间的距离, 记为 $d(H)$. 如模式 $0*10*$ 的定义距的第一个确定基因在第 1 位, 最后一个确定基因在第 4 位, 所以其定义距 $d = 4 - 1 = 3$, 而模式 $1***$ 的定义距为 0.

模式定理^[6] 在遗传算法选择算子的作用下, 对于适应度值高于平均适应度值的模式, 其样本数

将呈指数级增长; 而对于适应度值低于平均适应度值的模式, 其样本数将呈指数级减少. 模式的适应度值越高, 该模式被选中的概率越大. 低阶、短定义距、高适应度值的模式在遗传算法中起着重要的作用, 一般称之为结构单元 (也有称为积木块, building blocks). 遗传算法的寻优机制是通过使结构单元这种具有较优结构特征的模式按一定的规律相互融合而逐步逼近最优解的.

如果利用遗传算法模式定理的思想进行粒子群算法的改进, 将有助于提高粒子群算法的收敛速度和达到全局最优值的能力. 具体实现首先对不同的模式进行评价, 将最好的模式加入到粒子群中, 作为一个“虚拟”粒子参与迭代. 这将加快粒子群的收敛速度, 同时将增加寻找到全局最优的可能性. 这里采用的模式的阶为 1, 模式的定义距为 0. 具体十进制编码的粒子群模式优选采用以下方法实现:

- 1) 将每个变量在其定义域内等分 N 等份, 每一等份算作一个模式;
- 2) 计算具有相同模式的粒子平均适应度值, 作为该模式的适应度值, 同时计算该模式对应变量的平均值;
- 3) 找出每个变量具有最大适应度值的模式;
- 4) 由所有变量具有最大适应度值的模式组成新的粒子 (优选结果), 相应变量取值为该模式下变量的平均值.

2.3 基于模式优选思想的粒子群优化算法的实现

为解决大规模优化问题, 充分利用粒子群优化算法的优越性, 进一步提出了将模式优选思想加入粒子群优化算法的改进算法 (IPSO). 改进的粒子群优化算法的步骤如下:

- 1) 初始化粒子群, 将粒子随机地散布在解空间中, 给每个粒子随机赋予一个初始化速度;
- 2) 设置每个粒子的当前位置为个体最优 p_{bi} , 找出初始群体中的最佳粒子 gb ;
- 3) 在线性调整惯性权重的基础上, 每个粒子按照式 (1) 和式 (2) 更新粒子的速度和位置;
- 4) 对每个粒子, 用评价函数根据其在解空间中的位置计算出适应度值;
- 5) 进行模式寻优, 对每个变量计算其在不同定义域子区间上的适应度值和变量的平均值, 每隔若干次迭代由具有最佳适应度值所对应的变量平均值组成虚拟的粒子, 并将其加到粒子群中, 对其进行评价;
- 6) 更新每个粒子的个体最优 p_{bi} 和整个群体的全局最优 gb ;
- 7) 判断是否满足结束条件 (如达到最大迭代次

数, 或找到的最优解已符合要求), 满足条件输出全局最优 g_{best} , 退出计算, 否则迭代次数加 1, 返回步骤 3) 继续进行迭代

3 算法性能分析

为了说明改进算法的效果, 本文以 4 个常用的标准测试函数^[6] 为例, 分别用改进的粒子群优化算

法 (IPSO) 和标准粒子群算法 (PSO) 进行仿真分析表 1 给出了 4 个标准测试函数的表达式、变量维数、变量范围和达优值。仿真实验设置的参数为: 惯性权重 ω 从 0.95 线性减小到 0.4, $c_1 = c_2 = 2.0$, 最大迭代次数取 8 000, 进行模式运算时对每个变量平均 50 等份

表 1 标准测试函数

函数名	表达式	变量维数	变量范围	达优值
Schaffers	$f(x) = 0.5 - \frac{(\sin \sqrt{x_1^2 + x_2^2})^2 - 0.5}{[1 + 0.001(x_1^2 + x_2^2)]^2}$	2	[-100, 100]	10^{-5}
Schwefel	$f(x) = -\sum_{i=1}^n x_i \sin(\sqrt{ x_i })$	10	[-500, 500]	-4 189.6
Rastrigin	$f(x) = \sum_{i=1}^n (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i) + 10)$	30	[-5.12, 5.12]	0.1
Griewangk	$f(x) = \frac{1}{4000} \sum_{i=1}^n (x_i)^2 - \prod_{i=1}^n \cos(\frac{x_i}{\sqrt{i}}) + 1$	30	[-600, 600]	0.1

表 2 给出了上述每个测试函数利用 PSO 和 IPSO 各重复 50 次计算所收敛到达优值的次数及平均收敛迭代次数。一般文献中 Rastrigin 函数的达优值选为 100, 为了说明本算法的有效性, 将达优值取为 0.1 来进行比较 (实际最优为 0)。

表 2 基本 PSO 和改进 IPSO 的仿真结果

函数名	粒子数	IPSO		PSO	
		收敛次数	迭代次数	收敛次数	迭代次数
Schaffers	50	50	230	25	384
Schwefel	100	45	1 211	0	-
Rastrigin	100	50	3 421	42	4 652
Griewangk	100	50	4 678	36	5 796

从表 2 的数据对比可以看出, IPSO 算法对 4 个基本测试函数的优化结果都具有较好的全局收敛能力, 特别是易陷入局部最小的多峰函数 Schwefel, Rastrigin 和 Griewangk, 改进的算法与标准粒子群优化算法相比具有较好的全局搜索能力和较高的精度, 有效地避免了早熟现象。

这是由于改进的粒子群优化算法既拥有基本粒子群算法的优点, 同时它在一定程度上也拥有遗传算法的搜索机制。改进的算法具有一定的隐含并行性。遗传算法的寻优实际就是对具有较高适应度的模式的寻优过程。改进的粒子群算法直接将最优模式提取出来, 并组成“虚拟”的粒子参与新的迭代, 该“粒子”不是直接搜索到的, 而是算法对模式“并行”处理的结果, 相当于在进行基本 PSO 的过程中同时进行了遗传算法的选择操作。当模式计算积累到一定程度时, 最优模式拥有了全局最优的信息, 因而具有更高的效率, 可使算法加速收敛并跳出局部最优值。Schwefel 函数的优化说明了这一点, 采用 PSO 算法进行搜索时并没有搜索到全局最优, 而 IPSO 的收敛概率较高。改进的粒子群优化算法对高

维优化问题也具有较好的收敛性能。

4 利用 IPSO 法进行反应动力学参数的估计

超临界水氧化法在处理高浓度、难降解的有机废水方面是一项极具发展潜力的技术, 具有反应速度快、氧化完全彻底等优点。有机物在超临界水中氧化的反应动力学机理也成为研究热点。在实验数据基础上准确估计超临界水氧化反应动力学参数, 对机理解释和实现该技术的工业化至关重要。

含 2- 氯苯酚废水在超临界水中分解为二氧化碳、氯化氢和水。反应速率同时受到反应温度、2- 氯苯酚浓度、氧化剂浓度等因素的影响。文献[7] 在实验基础上提出反应动力学方程为

$$\frac{dX}{d\tau} = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) [2CP]^a [O_2]^b [H_2O]^c, \quad (3)$$

式中: A, E_a, a, b 和 c 是 5 个待定参数, 分别代表指前因子、反应活化能、2- 氯苯酚的反应级数、氧气的反应级数和水的反应级数。需基于采样数据构建优化问题进行估计, 目标函数由某个指标的实测值与计算值的偏差平方和组成。由于反应速率较难测定, 故以去除率作为指标, 通过对式 (3) 进行积分, 并采用初始条件 $\tau = 0, X = 0$ 来计算, 得到下式:

$$\begin{aligned} & [(1 - X)^{1-a} - 1] = \\ & (a - 1)A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) [2CP]_0^{a-1} [O_2]_0^b [H_2O]_0^c \tau \end{aligned} \quad (4)$$

实验数据参见文献[7]。设第 i 个样本的去除率为 X_i , 它与估计值 X_i 的偏差平方和记为

$$SSE(a, b, c, A, E_a) = \sum_{i=1}^n (X_i - \hat{X}_i)^2 \quad (5)$$

参数估计就是搜索使式 (5) 达到最小的 A, E_a, a, b 和 c 。表 3 给出了不同文献方法优化得到的参数对比。利用本文算法进行 10 次优化都收敛到表 3 所

列的目标值 从表中数据对比可以看出, 本文提出的 IP SO 算法明显优于文献[7] 和文献[8], 与文献[9] 相当, 说明 IP SO 算法对于实际优化问题是有效的

表 3 反应动力学参数优化结果对比

方法	a	b	c	A	E_a	SSE
文献[7]	0.88	0.41	0.34	100	46.200	0.2494
文献[8]	0.8181	0.4750	0.3276	70.4	45.1532	0.2225
文献[9]	0.8067	0.4425	0.3336	71.06	46.502	0.2177
IP SO	0.8081	0.4444	0.3239	63.5465	45.626	0.217685

5 结 论

本文提出的基于模式优选思想改进的粒子群优化算法能有效地搜索到全局最优解, 通过函数测试表明, 该算法的优化效率和优化性能较 PSO 有显著的提高 应用改进的粒子群优化算法进行反应动力学参数的估计, 得到的优化结果较文献报道的结果更好

参考文献(References)

- [1] Kennedy J, Eberhart R. Particle Swarm Optimization [A]. *IEEE Int Conf on Neural Networks* [C]. Perth, 1995: 1942-1948
- [2] Eberhart R, Kennedy J. A New Optimizer Using Particle Swarm Theory [A]. *Proc of the 6th Int Symposium on Micro Machine and Human Science* [C]. Vagoya, 1995: 39-43
- [3] Shi Y, Eberhart R. A Modified Particle Swarm Optimization [A]. *IEEE World Congress on Computational*

Intelligence [C]. Anchorage, 1998: 69-73

- [4] Clerc M. The Swarm and the Queen: Towards a Deterministic and Adaptive Particle Swarm Optimization [A]. *Proc of the Congress on Evolutionary Computation* [C]. Washington DC, 1999: 1951-1957
- [5] Shi Y, Eberhart R C. Fuzzy Adaptive Particle Swarm Optimization [A]. *Proc of the Congress on Evolutionary Computation* [C]. Seoul, 2001: 101-106
- [6] 陈国良, 王煦法, 庄镇泉. *遗传算法及其应用* [M]. 北京: 人民邮电出版社, 1996
(Chen G L, Wang X F, Zhuang Z Q. *Genetic Algorithm and Its Application* [M]. Beijing: People Posts and Telecom Press, 1996)
- [7] Li R, Savage P E, Szmukler D. 2-chlorophenol Oxidation in Supercritical Water: Global Kinetics and Reaction Products [J]. *AIChE J*, 1993, 39(1): 178-187
- [8] 颜学峰, 陈德钊, 胡上序, 等. 混沌遗传算法估计反应动力学参数 [J]. *化工学报*, 2002, 53(8): 810-814
(Yan X F, Chen D Z, Hu S X, et al. Estimation of Kinetic Parameters Using Chaos Genetic Algorithms [J]. *J Chem Ind and Eng*, 2002, 53(8): 810-814)
- [9] 张兵, 陈德钊, 饶骏. 先进策略支持的进化规划估计反应动力学参数 [J]. *高校化学工程学报*, 2004, 18(5): 638-642
(Zhang B, Chen D Z, Rao J. Estimation of Kinetic Parameters by Using Eugenic Evolution Programming [J]. *J of Chemical Engineering of Chinese University*, 2004, 18(5): 638-642)

(上接第 1192 页)

5 结 语

本文引入一种基于独立源分析(ICA) 的新型统计方法应用于过程监测, 采用了 I^2 图, I_e^2 图和 SPE 图作为故障监测的在线监测图 最后以 3 水箱系统监测为例, 对此方法进行了应用研究, 取得了很好的应用效果

参考文献(References)

- [1] Ypma A, Tax D, Duin R. Robust Machine Fault Detection with Independent Component Analysis and Support Vector Data Description [A]. *Proc of the 1999 IEEE Signal Processing Society Workshop* [C]. Madison, 1999: 67-76
- [2] Comon P. Independent Component Analysis — A New Concept? [J]. *Signal Processing*, 1994, 36(3): 287-314

- [3] Hyvärinen A, Oja E. Independent Component Analysis: Algorithms and Applications [J]. *Neural Networks*, 2002, 13(4): 411-430
- [4] Li R F, Wang X Z. Dimension Reduction of Process Dynamic Trends Using Independent Component Analysis [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2002, 26(3): 467-473
- [5] Cardoso J F, Soulomica A. Blind Beamforming for Non-Gaussian Signals [J]. *IEEE Proc F*, 1993, 140(6): 362-370
- [6] Cheung Y M, Xu L. Independent Component Ordering in ICA Time Series Analysis [J]. *Neuro Computing*, 2001, 41(1): 145-152
- [7] Wand M P, Jones M C. *Kernel Smoothing* [M]. London: Chapman and Hall, 1995