



基于不确定度采样准则的费时问题优化算法

孙超利, 李婵, 秦淑芬, 张国晨, 李晓波

引用本文:

孙超利, 李婵, 秦淑芬, 张国晨, 李晓波. 基于不确定度采样准则的费时问题优化算法[J]. 控制与决策, 2022, 37(6): 1541–1549.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.1798>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一种基于MOEA/D的组合权重方法

A combination weight method based on MOEA/D

控制与决策. 2021, 36(12): 3056–3062 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.0592>

超启发式交叉熵算法求解模糊分布式流水线绿色调度问题

Hyper-heuristic cross-entropy algorithm for green distributed permutation flow-shop scheduling problem with fuzzy processing time

控制与决策. 2021, 36(6): 1387–1396 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.1681>

基于多种群分解预测的动态多目标引力搜索算法

Dynamic multi-objective gravitational searching algorithm based on multi-population decomposition prediction

控制与决策. 2021, 36(12): 2910–2918 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.1002>

基于分解的多目标多因子进化算法

A multiobjective multifactorial evolutionary algorithm based on decomposition

控制与决策. 2021, 36(3): 637–644 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.0525>

基于反时限混沌郊狼优化算法的BP神经网络参数优化

Parameter optimization of BP neural network based on coyote optimization algorithm with inverse time chaotic

控制与决策. 2021, 36(10): 2339–2349 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.0408>

基于不确定度采样准则的费时问题优化算法

孙超利¹, 李 婵¹, 秦淑芬², 张国晨^{1†}, 李晓波¹

(1. 太原科技大学 计算机科学与技术学院, 太原 030024; 2. 太原科技大学 电子信息工程学院, 太原 030024)

摘 要: 在实际工程和控制领域中,许多优化问题的性能评价是费时的,由于进化算法在获得最优解之前需要大量的目标函数评价,无法直接应用其求解这类费时问题. 引入代理模型以辅助进化算法是求解计算费时优化问题的有效方法,如何采样新个体对其进行真实的目标函数评价是影响代理模型辅助的进化算法寻优性能的重要因素. 鉴于此,利用径向基函数神经网络作为代理模型辅助进化算法,提出一种新的不确定度计算方法,同时结合模型估值构造一种新的填充采样准则以自主地选择新的采样点,从而引导算法在评价次数有限的情况下尽可能地找到目标函数值较好的解. 所提出算法与近年来针对计算费时问题的优化算法在 7 个高达 100 维的基准问题上进行测试比较,实验结果表明所提出算法在相同评价次数下可以获得更好的优化结果.

关键词: 代理模型; 进化算法; 计算费时问题; 不确定度; 填充采样准则; 径向基函数神经网络

中图分类号: TP273

文献标志码: A

DOI: 10.13195/j.kzyjc.2020.1798

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



引用格式: 孙超利,李婵,秦淑芬,等. 基于不确定度采样准则的费时问题优化算法[J]. 控制与决策, 2022, 37(6): 1541-1549.

An optimization algorithm with uncertainty-based sampling strategy for expensive problems

SUN Chao-li¹, LI Chan¹, QIN Shu-fen², ZHANG Guo-chen^{1†}, LI Xiao-bo¹

(1. College of Computer Science and Technology, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China; 2. School of Electronic Information Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: Some optimization problems in the practical engineering and controlling fields are normally computationally expensive, which limits the application of evolutionary algorithms for solving these problems because a number of objective evaluations are often required before locating at the optimal solution. The utilization of surrogate models to assist evolutionary algorithms is efficient for solving computationally expensive problems. However, the sampling method, which is used to select solutions to be evaluated using the exact time-consuming objective function, plays a key role to obtain a good performance of the surrogate-assisted evolutionary algorithm. In this paper, the radial basis function network is adopted as the surrogate model, and a new method to evaluate the uncertainty of the approximated value is proposed. Then, a new sampling strategy is given based on the approximation uncertainty and approximated value to adaptively select solutions for exact objective evaluation, which can assist the algorithm to find a better solution in a limited number of objective evaluations. The performance of the proposed method is verified by comparing to some state-of-the-art algorithms published in recent years on seven test problems with a maximum of 100 dimensions. The experimental results show that the proposed method can get better results in the same number of objective evaluations.

Keywords: surrogate models; evolutionary algorithms; computationally expensive problems; uncertainty; sampling strategy; radial basis function neural network

0 引 言

实际优化问题中,如电力系统^[1-2]、航空航天^[3-4]和汽车设计^[5-6]等其设计通常没有显式的数学公式,并且获得一次性能评估需要耗费大量的时间成本.

近年来,由于元启发式优化算法(包括进化算法^[7-9]和群智能优化算法^[10])的设计不需要考虑函数的连续可微性,在实际问题优化中得到了很好的应用. 然而,对于计算资源有限的优化问题,这类基于种群特性的

收稿日期: 2020-12-23; 录用日期: 2021-03-29.

基金项目: 国家自然科学基金项目(61876123); 山西省自然科学基金项目(201901D111262, 201901D111264).

责任编委: 陈家伟.

[†]通讯作者. E-mail: imzgc@tyust.edu.cn.

进化算法严重限制了其在实际工程领域的发展,即运行一次需要浪费大量的评价次数.目前,基于代理模型辅助的元启发式优化算法是解决这类问题比较流行的方法,其主要思想是通过用计算廉价的代理模型代替计算费时的优化问题进行性能评估,以期在计算资源有限的情况下尽可能找到问题的最优解.

在基于代理模型辅助进化的这一类算法中,常用的代理模型有径向基函数(RBF)^[11]、高斯过程模型(Kring)^[12]、支持向量机(SVM)^[13]等.根据它们在算法中的作用,这些代理模型又可分为全局代理模型、局部代理模型以及集成代理模型^[14-15].一般地,局部模型的设计是为了辅助优化全局模型,进一步增强局部区域的开采能力;相反地,全局模型是为了构造一个问题的宏观景观,以期得到更好的探索;而使用集成代理模型是为了尽可能通过训练多个模型提高对原问题的拟合度.Yu等^[16]通过训练一个全局RBF模型,结合重启策略以采样选择估值最小的解更新模型来解决决策变量数目不超过30的低维问题.随后又提出了一种基于分层的粒子群算法的RBF模型来解决决策空间达到100维的优化问题^[17],使用训练样本中最好的前 N 个样本训练RBF模型,这实质上是在有希望的区域建立了一个局部模型.Tian等^[18]通过训练一个GP全局模型,并利用其提供的估值和不确定信息作为两个目标构造了一种多目标填充准则策略选择采样点更新模型,以解决50维和100维的高维复杂问题.Sun等^[19]首次提出了基于两种粒子群优化算法协同优化的RBF模型辅助进化算法,其中基于社会学习的粒子群(SL-PSO)优化算法主要关注探索能力,粒子群优化(PSO)算法旨在开采有希望的区域,同时训练一个全局RBF模型辅助优化解决50维和100维的优化问题.Li等^[20]也提出一种RBF全局模型辅助的多粒子群优化算法,与文献^[19]不同的是, Li等设计了一种基于教-学的进化算法增强探索能力,并提出了一种预筛选策略选择一些个体真实计算以解决高达200维的优化问题.Liu等^[21]提出了GPEME算法解决20、30、50维的复杂问题,首先通过维度约简技术将决策变量降维,然后对降维后的训练数据训练一个局部GP模型,并从预筛选得到的子代中选择估值最好的解真实计算更新模型.除了上述仅使用全局和局部模型的算法外, Wang等^[22]通过建立全局集成代理和局部集成代理模型,结合全局和局部模型管理策略,交替执行解决30维以下的优化问题.另外, Wang等^[23]也提出了一种基于数据驱动的离线优化算法DDEA-SE解决达到100维的复杂问

题,首先利用获得的样本数据训练 T 个RBF模型,然后用训练好的集成模型对个体进行评估,优化过程中没有加入新的评估点更新模型. Liao等^[24]提出分别训练一个全局模型和一个局部模型,采用多任务优化框架将两个模型视为两个任务进行优化,以解决高达200维的费时问题.

综上所述,不管使用哪种模型或哪类模型,引导模型找到全局最优位置是非常重要的.因此,如何选择较好的采样点更新模型是代理模型辅助进化算法的重中之重.由于RBF模型对问题的决策维度不敏感^[25-26],该领域已使用其解决超过30维的复杂优化问题.但是RBF不能传递对模型估值的不确定度信息,因此本文提出一种基于不确定度采样策略的优化算法(an uncertainty-based sampling strategy assisted optimization algorithm, denoted by USSAOA),通过采用差分进化算法(DE)作为优化器,提出一种新的不确定度的计算方式,通过结合考虑采样个体与周围样本点的夹角和距离之间的关系衡量该个体用模型估计的不确定度信息.在设计不确定度公式的基础上,提出一种新的填充采样准则更好地平衡对搜索空间的开采和探索能力.通过结合个体估值和不确定度并以一种排名的方式选择两个采样个体真实评价更新模型.RBF作为一个全局代理模型代替原来的优化问题,以期在计算资源有限的情况下,提高算法的运行效率.

1 相关技术

1.1 径向基函数

径向基函数(RBF)最早由Powell^[27]提出,其后Broomhead等^[28]首次将RBF应用于神经网络的设计,即RBF网络,具有较强的输入和输出映射功能,学习过程较快,可以解决决策变量超过30维以上的优化问题.本文利用RBF模型代替原问题辅助差分进化算法优化,大大节约了计算成本,从而提高了算法的运行效率.令 $D = ((x_i, f(x_i)), i = 1, 2, \dots, n)$ 为训练样本库, n 为样本库大小, $x_i \in R^D$ 和 $f(x_i) \in R$ 分别为样本的决策变量和函数响应值, RBF公式如下:

$$\Phi(x) = \sum_{k=1}^{CN} \omega_k \varphi(\|x - c_i\|). \quad (1)$$

其中: CN为隐含层节点数, c_i 为第 i 个节点的中心位置. $\|\cdot\|$ 和 $\varphi(\cdot)$ 分别为欧氏距离和核函数, w_k 为权重系数. RBF中常见的核函数有高斯核(Gaussian)、立方核(cubic)和线性核(linear)等^[29], 本文采用cubic核函数作为径向基, 即 $\varphi(r) = r^3$.

1.2 差分进化算法

差分进化算法(DE)^[8]作为一种基于种群进化的优化算法,具有较强的全局搜索能力以及较好的可靠性和鲁棒性,主要包括变异、交叉和选择操作. 假设 P 表示一个父代种群,对于父代 P 中的每个个体 $x = \{x_1, x_2, \dots, x_d\}$ 产生一个子代个体 $y = \{y_1, y_2, \dots, y_D\}$,需要经过以下步骤.

step 1: 先经过“DE/rand/1”变异策略产生一个中间个体向量 $v = \{v_1, v_2, \dots, v_D\}$,即

$$v = x^{r^1} + F \cdot (x^{r^2} - x^{r^3}). \quad (2)$$

其中: x^{r^1} 、 x^{r^2} 和 x^{r^3} 为从 P 中随机选择的3个不同个体, $F \in [0, 2]$ 为控制参数,通常称为比例因子.

step 2: 由中间个体 v 执行交叉操作产生一个实验个体向量 $u = \{u_1, u_2, \dots, u_D\}$,即

$$u_j = \begin{cases} v_j, & \text{rand} \leq \text{CR} | j = j_r; \\ x_j, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (3)$$

其中:CR为交叉概率, D 为决策变量数目, $j = \{1, 2, \dots, D\}$, $\text{rand} \in [0, 1]$, j_r 为 $\{1, 2, \dots, D\}$ 中的随机数.

step 3: 比较实验个体 u 与原来父代个体 x ,选择适应值较好的个体进入下一代,即

$$y = \begin{cases} u, & f(u) \leq f(x); \\ x, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (4)$$

2 不确定度采样策略辅助的优化算法

2.1 USSAOA算法的整体流程

本文提出一种基于不确定度计算的RBF全局模型辅助进化算法求解计算费时的高维优化问题,利用DE优化器优化RBF模型,得到一组较好的候选解,根据提出的填充准则采样从中选择有希望的个体由原函数评价并更新模型,以加快找到原问题的最优解. 图1为算法USSAOA流程,对其进行如下简单描述.

step 1: 用拉丁超立方体采样(LHS)^[30]方法分别产生训练集DB和初始种群 P ,并利用原函数评价所有样本,存放到训练集DB中.

step 2: 判断是否满足最大评价次数(终止条件),若满足则输出全局最优解,否则执行step 3.

step 3: 利用DB中的样本为原问题训练一个RBF全局模型.

step 4: 利用DE优化RBF模型产生候选种群.

step 5: 由式(7),计算当前候选种群中每个个体的不确定度 uc_i .

step 6: 基于不确定度提出的采样准则选择个体,利用原函数评价并更新DB和当前全局最优解,返回step 2.

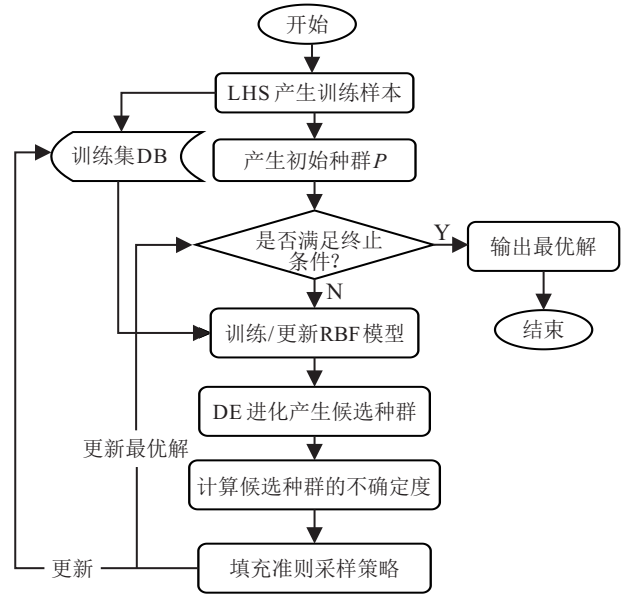


图1 算法USSAOA流程

下面就算法流程中的不确定度的计算方法和填充准则采样策略展开详细描述.

2.2 不确定度计算

在代理模型辅助的优化算法中,估值不确定度的使用在样本选择中非常重要. 高斯过程(GP)模型不仅可以给出模型的估值,还可以传递其不确定度信息,但是它对问题的决策维度比较敏感,即随着维度的增加,GP模型的训练时间在不断增加,相应的模型的预测准确度也会下降. 因此,使用对决策维度变化不敏感的RBF模型,通过考虑采样个体与周围训练样本之间在决策空间的远近关系作为当前采样个体估值的不确定度,这里的远近关系主要通过采样点与样本之间的夹角和距离来体现. 为了表明角度和距离同时使用构造不确定度的有效性,实验部分对比分析分别单独使用距离与角度的余弦值作为不确定度和结合以上两方面的实验结果.

为了计算一致性,采样个体与训练样本点之间的距离需要归一化到 $[0, 1]$,同时考虑它们之间夹角的余弦值. 决策空间中它们之间的夹角可以取到 $[0^\circ, 180^\circ]$,则对应的余弦值范围为 $[-1, 1]$,故对决策变量先进行坐标转换,即采样点和样本点的所有决策变量减去原空间的下界,有

$$x = x - \text{Lb}. \quad (5)$$

其中: $x = (x_1, \dots, x_D)$ 为一个采样点, d 为决策维度大小, $\text{Lb} = (\text{lb}^1, \text{lb}^2, \dots, \text{lb}^D)$ 为决策空间的下界. 这样对应的余弦值范围就变为 $[0, 1]$. 一个采样个体与一个样本点之间的远近关系可由 C_{ij} 表示,即

$$C_{ij} = \frac{\cos \theta_{ij}}{d_{ij}}. \quad (6)$$

其中: $\cos \theta_{ij}$ 为采样个体 i 与样本点 j 夹角的余弦值, d_{ij} 为其间的欧氏距离. 由于 $\cos \theta_{ij} \in [0, 1]$, 且 $d_{ij} \in [0, 1]$, $C_{ij} \in [0, +\infty]$, d_{ij} 越大且 $\cos \theta_{ij}$ 越小 (θ_{ij} 越大), 则 C_{ij} 值越小, 表明样本点 j 距离采样个体 i 较远. 需要注意的是, 当 $d_{ij} = 0$ 时, 设置其为一个很小的正数 $1e-20$, 以防止式 (6) 中分母为 0. 为了判断模型对采样个体 i 估值的不确定度, 需要知道该采样个体周围样本点数量的稀疏程度, 数量越稀疏模型对原函数拟合越不准确, 模型对该个体的估值越不确定, 故选择该个体周围 K 个样本点与其远近关系判断模型估值的不确定度.

首先, 对于采样个体 i , 计算其与 DB 中所有样本点的 C_{ij} 值, 并将这些值按降序排列; 然后, 选择前 K 个样本点的 C_{ij} 值并累加, 得到该个体与周围样本点的总体远近关系; 最后, 为了与不确定度大的描述相对应, 通过对 $\sum_{k=1}^K \frac{\cos \theta_{ik}}{d_{ik}}$ 增加负号, 将选择最小改为选择 $-\sum_{k=1}^K \frac{\cos \theta_{ik}}{d_{ik}}$ 最大的值进行真实计算, 即

$$uc_i = -\sum_{k=1}^K \frac{\cos \theta_{ik}}{d_{ik}}. \quad (7)$$

距离 d_{ik} 越大, 夹角余弦 $\cos \theta_{ik}$ 越小 (夹角 θ 越大), 则个体 i 的不确定度 uc_i 越大, 表明在决策空间中, 采样个体 i 附近的样本点很稀疏, 故模型对该个体的估计的不确定度很大. 在实验部分中, 对式 (7) 的参数 K 进行了敏感性分析.

2.3 填充采样准则

通常填充采样准则的设计既考虑了种群在有希望找到最优解的区域的开采 (exploitation) 能力, 同时也考虑了对未知区域的探索 (exploration) 能力. 目前, 比较流行的填充准则有 EI(expectative improvement)^[31-32]、LCB(lower confidence bound)^[33]、PI(probability of improvement)^[34-35], 其中全局优化算法 (EGO)^[36] 首先使用 EI 准则, 通过最大化 EI 值选择采样个体. 但是, 这些填充准则都是基于高斯过程模型提供的模型估值和不确定度信息而设计的, 并且只

适合于求解 30 维以下的优化问题. 因此, 本文在提出一种新的不确定度的计算方法的基础上, 设计一种同时满足开采和探索能力的填充采样准则以解决高维的费时优化问题.

一般认为选择最好的估值可能提供较好的开采能力, 以及选择不确定度最大的解能够提高搜索空间的探索能力. 在本文提出的策略中, 同样考虑了这两点, 结合这两个方面通过一种排名的方式尽可能地选择估值相对较小和不确定度相对较大的个体. 将优化模型得到的当前候选种群估值 S_f 和不确定度 S_{uc} 分别按升序排名, 这样, 每个个体 i 均有一个关于估值和不确定度对应的排名序号 R_i^f 和 R_i^{uc} , 对应个体的两个排名号相加构成该个体在种群中的最终排名, 即 $R_i = R_i^f + R_i^{uc}$. 从中选择最终排名最小和最大的两个个体, 用原函数进行评价并放入训练集 DB 中, 同时更新全局最优位置. 注意到, 为了表明所提出策略的有效性, 实验部分对比分析了 3 种策略的统计结果, 分别为所提出策略、只选择估值最好不确定度最大的解的策略以及两种解均选择的策略.

综上所述, 本文结合个体估值和不确定度信息设计采样策略, 平衡了对搜索空间的开采能力和探索能力, 以引导模型快速地找到原问题的全局最优位置.

3 实验设计及结果分析

本节列出测试函数特征和所有对比算法的参数设置, 并总结分析了所提出算法和其他 4 种流行算法 GORS-SSLPSO^[16]、CAL-SAPSO^[22]、DDEA-SE^[23]、SHPSO^[17] 在 10 维、20 维、30 维、50 维和 100 维测试问题下的结果对比. 另外, 对比分析了所提出不确定度计算方法的有效性, 以及填充采样策略对所提出算法的作用.

3.1 测试函数及参数设定

采用流行的单目标测试集 $F_1 \sim F_5$ ^[37] 和 F_6 、 F_7 (CEC2005^[38]) 验证本文算法的有效性. 表 1 列出了这 7 个问题的全局最优位置以及它们的函数特征, 包括单模态、多模态以及复杂的多模态等特征. 所有对比算法在 5 个不同维度下 7 个问题上都独立运行 20 次.

表 1 测试问题的函数特征

	函数名称	全局最优	特征
F_1	Ellipsoid function	0	unimodal
F_2	Rosenbrock function	0	multimodal with narrow valley
F_3	Ackley function	0	multimodal
F_4	Griewank function	0	multimodal
F_5	Rastrigin function	0	multimodal
F_6	Shifted Rotated Rastrigin	-330	very complicated multimodal
F_7	Rotated Hybrid Composition function	10	very complicated multimodal

在实验对比中,所有算法的终止条件(最大评价次数)在对应维度下的设置相同,即10维、20维和30维测试问题下,算法评价 $11 \times D$ 次,50维和100维问题下,所有算法评价1000次,其中 D 为决策空间维度.对于初始训练集DB容量,算法GORS-SSLPSO、CAL-SAPSO和SHPSO均为原算法默认设置 $5 \times D$,本文算法设为 $2 \times D$ ^[39].所有算法的种群大小 N 均为100,DE算子^[40]中的缩放因子 F 为0.5^[41],交叉率CR为0.3^[42].另外,对于式(7)的参数 K ,第2.2节已进行了相关的参数分析,最后设定为 $K = 10$.

3.2 不同维度下的算法比较

算法GORS-SSLPSO和CAL-SAPSO可以解决10维、20维和30维的较低维问题,算法DDEA-SE可以解决达到100维的情况,故将本文算法USSAOA与前3种算法在30维以下的问题进行对比测试.此外,算法SHPSO旨在解决50维和100维的较高维问题,选用该算法和DDEA-SE与USSAOA在50维和100维问题下进行对比.表2显示了4种算法在10维、20维和30维 $F_1 \sim F_5$ 问题上的统计结果.采用带有Bonferroni校验的Wilcoxon秩和检验方法^[43],对所有算法在每个测试问题下的20次结果进行显著性统计检验,其中“+”表示所提出算法显著优于其他对比算法,“-”表示所提出算法显著差于其他算法,“ $\approx$ ”表示所提出算法与其他算法相比没有显著性差异.由表2可见,算法USSAOA在 F_1 、 F_3 、 F_4 和 F_5 四个测试问题上基本优于其他3种算法,除了在函数 F_1 上,算法USSAOA和算法GORS-SSLPSO没有显著性差异,在10维和20维的测试函数 F_5 上结果次于GORS-SSLPSO.在 F_2 上,本文所提出算法与其他3种对比算法结果几乎相近.

表2 算法在10、20和30维问题上的结果比较

函数编号	维度	USSAOA	GORS-SSLPSO	CAL-SAPSO	DDEA-SE
F_1	10	3.60e-02	3.13e-02 ($\approx$)	1.57e+00(+)	9.42e-01(+)
F_1	20	1.59e-01	1.96e-01 ($\approx$)	1.65e+00(+)	2.49e+00(+)
F_1	30	5.86e-01	4.95e-01 ($\approx$)	3.50e+00(+)	4.41e+00(+)
F_2	10	1.84e+01	1.64e+01 ($\approx$)	1.69e+01 ($\approx$)	2.91e+01(+)
F_2	20	5.13e+01	4.75e+01($\approx$)	3.55e+01($\approx$)	4.43e+01($\approx$)
F_2	30	7.32e+01	9.59e+01($\approx$)	4.75e+01 (-)	5.59e+01(-)
F_3	10	1.39e+00	3.31e+00(+)	2.01e+01(+)	6.30e+00(+)
F_3	20	1.78e+00	4.38e+00(+)	2.01e+01(+)	5.08e+00(+)
F_3	30	1.79e+00	4.96e+00(+)	1.60e+01(+)	4.76e+00(+)
F_4	10	3.45e-01	8.26e-01(+)	1.12e+00(+)	1.30e+00(+)
F_4	20	1.52e-01	4.10e-01(+)	1.04e+00(+)	1.21e+00(+)
F_4	30	1.58e-01	3.43e-01(+)	1.01e+00(+)	1.30e+00(+)
F_5	10	3.04e+01	2.24e+01 (-)	9.40e+01(+)	5.14e+01(+)
F_5	20	6.42e+01	4.39e+01 (-)	7.79e+01(+)	8.01e+01(+)
F_5	30	7.70e+01	6.94e+01($\approx$)	9.10e+01($\approx$)	1.11e+02(+)
+/-/ $\approx$		NAN	6/2/7	11/1/3	13/1/1

表3列出了算法USSAOA、SHPSO和DDEA-SE

在50维和100维下测试函数 $F_1 \sim F_4$ 、 F_6 、 F_7 上的对比统计结果.可以看出,除了在 F_2 和 F_7 上,USSAOA稍逊于其他两种算法,其余测试问题上均具有较好的结果.由表3中 F_2 、 F_7 的分析可见,由于 F_2 和 F_7 具有复杂的多模态特征,随着维度的增加,空间的探索难度加大,导致在优化过程中种群可能陷入局部最优以至于算法后期收敛曲线停滞.

表3 算法在50和100维问题上的结果比较

函数编号	维度	USSAOA	SHPSO	DDEA-SE
F_1	50	4.27e-01	6.45e+00(+)	1.44e+01(+)
F_1	100	2.57e+01	1.17e+02(+)	2.85e+02(+)
F_2	50	7.19e+01	5.04e+01 (-)	9.34e+01(+)
F_2	100	3.35e+02	1.92e+02 (-)	2.37e+02(-)
F_3	50	1.21e+00	2.50e+00(+)	4.23e+00(+)
F_3	100	2.80e+00	5.12e+00(+)	6.85e+00(+)
F_4	50	5.48e-04	9.58e-01(+)	2.02e+00(+)
F_4	100	4.94e-01	1.12e+00(+)	1.75e+01(+)
F_6	50	-1.06e+02	1.19e+02(+)	7.15e+02(+)
F_6	100	8.01e+02	7.63e+02 (-)	1.81e+03(+)
F_7	50	1.05e+03	9.89e+02 (-)	1.19e+03(+)
F_7	100	1.43e+03	1.42e+03($\approx$)	1.26e+03 (-)
+/-/ $\approx$		NAN	7/4/1	10/2/0

为了更明显地看出所有算法在各个函数不同维度下的函数变化情况,图2和图3分别给出了USSAOA与其他对比算法(除算法DDEA-SE外)在10~30维 $F_1 \sim F_5$ 测试函数和50~100维 $F_1 \sim F_4$ 、 F_6 和 F_7 测试函数下的收敛曲线.需要说明的是,由于算法DDEA-SE是一种基于离线驱动的优化算法,优化过程中没有真实评价的个体,无法给出其收敛曲线.由图2可见,在10维、20维和30维 $F_1 \sim F_5$ 测试问题上,USSAOA相较于其他对比算法明显较快地收敛,其中算法CAL-SAPSO在大部分情况下收敛速度较慢,算法GORS-SSLPSO在算法后期函数曲线有明显下降趋势,但它们都需要消耗一定数量的评估点才能得到较好的结果,这在有限的评价资源下是不可取的.

由图3算法USSAOA、SHPSO在50维和100维下 $F_1 \sim F_4$ 、 F_6 、 F_7 的函数变化曲线图可见,算法USSAOA在大部分测试问题下的收敛速度较快,并且在整个函数曲线下降过程中,算法USSAOA获得的最优值一直优于算法SHPSO.在 F_2 和 F_7 测试问题上,算法SHPSO在消耗大量的函数评价次数后才获得与USSAOA相近似或者较好的结果.整体来看,在不同维度下的测试问题上,本文所提出算法相较于其他对比算法具有较快的收敛速度,能够在有限的计算资源下获得较好的结果.

3.3 不确定度设计的有效性分析

为验证所提出不确定度计算方法的有效性,对式(7)进行拆解分析.一方面只考虑采样个体与周围样

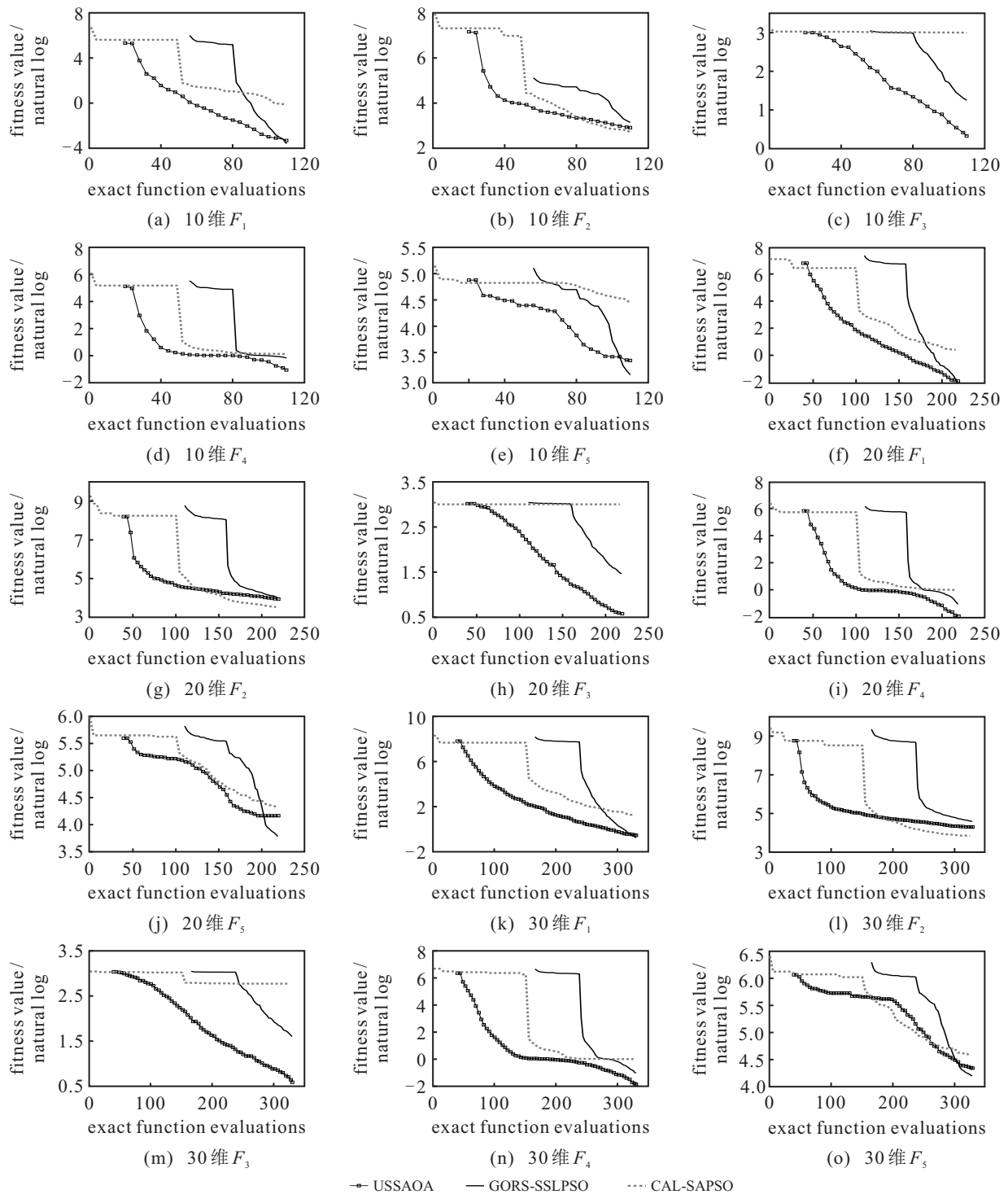


图2 10~30维收敛曲线

本点之间夹角余弦值之和的负值作为衡量该个体的不确定度;另一方面,采样个体与周围样本之间的距离之和用来传递该采样个体的不确定度信息.由于测试问题 F_1 、 F_2 和 F_6 分别具有单模、多模和复杂多模态的代表性函数特征,表4列出了两种策略(SAOA-cos θ 和SAOA-d)与式(7)在以上测试问题30维、50维和100维的对比统计结果.由结果可见,除了在函数 F_1 和50维的 F_6 上,式(7)和其他两种策略获得了相似的结果,在其他函数上本文提出的策略均好于其他两种策略.因此,本文将角度与距离相结合考虑更能准

确提供模型对采样个体估计的不确定度信息.

表4 USSAOA与只考虑角度或距离的对比

函数编号	维度	USSAOA	SAOA-cos θ	SAOA-d
F_1	30	5.86e-01	6.55e-01($\approx$)	8.84e-01($\approx$)
F_1	50	4.27e-01	5.67e-01($\approx$)	5.31e-01($\approx$)
F_1	100	2.57e+01	2.66e+01($\approx$)	2.81e+01($\approx$)
F_2	30	7.32e+01	8.99e+01(-)	9.40e+01(-)
F_1	50	7.19e+01	1.04e+02(-)	9.01e+01(-)
F_1	100	3.35e+02	4.05e+02(-)	3.46e+02($\approx$)
F_1	50	-1.06e+02	-1.18e+02($\approx$)	-1.42e+02($\approx$)
F_2	100	8.01e+02	1.26e+03(-)	8.62e+02(-)
+/-/ $\approx$		NAN	4/0/4	3/0/5

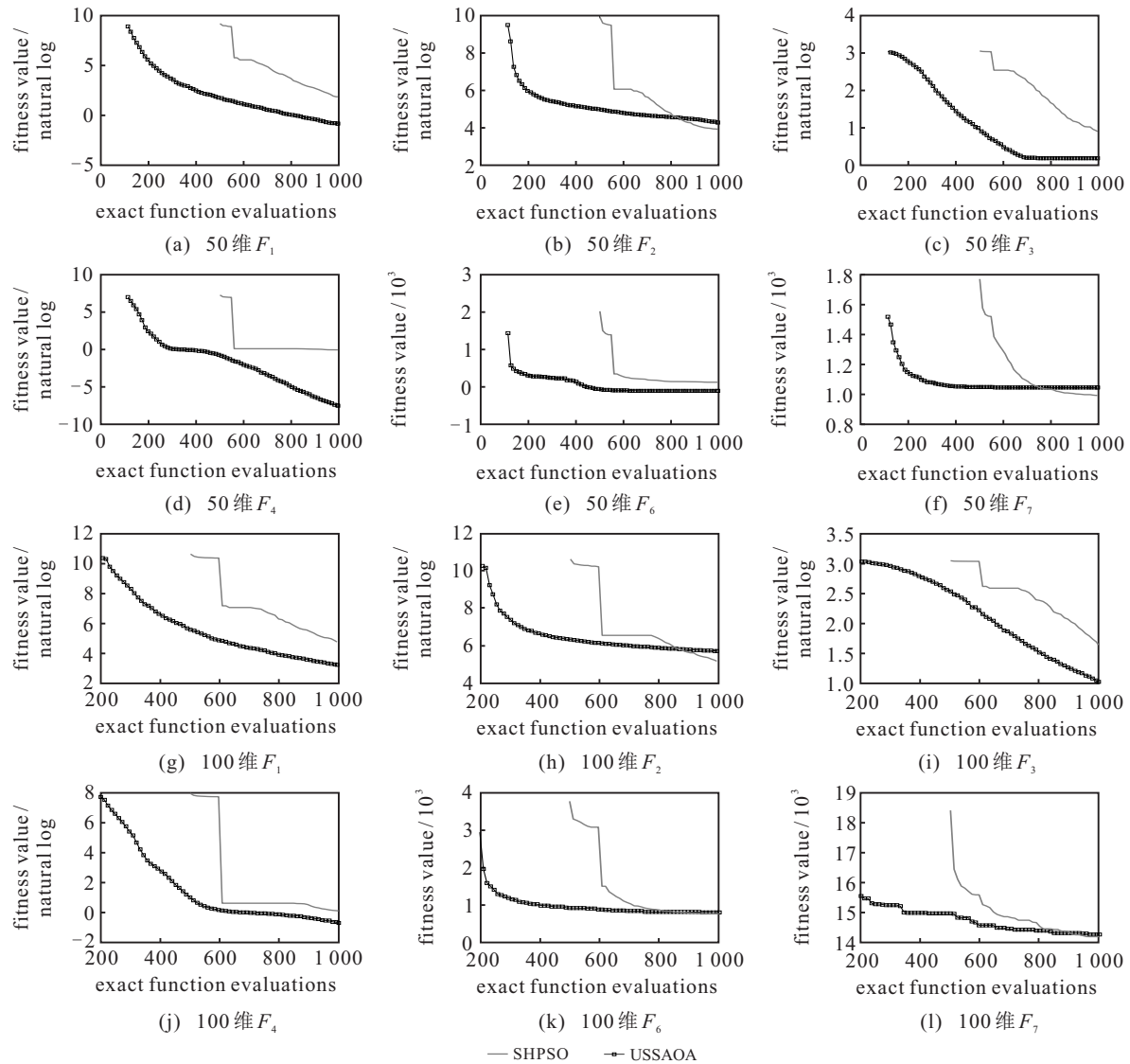


图3 50~100维收敛曲线

3.4 填充采样准则分析

本节主要研究所提出填充采样准则的有效性, 如何选择以及选择哪些采样个体真实评价是模型辅助进化算法的重中之重. 所提出填充采样准则以一种排名的方式同时考虑模型估值和其不确定度信息, 因此只选择模型估值最好的 (SAOA-fit) 个体和只选择不确定度最大 (SAOA-S) 的个体, 以及以上这两种个

表5 USSAOA与SAOA在30、50和100维问题上的对比

函数编号	维度	USSAOA	SAOA-fit	SAOA-S	SAOA-fitS
F_1	30	5.86e-01	2.89e+01(-)	1.13e+00(-)	9.28e-01(-)
F_1	50	4.27e-01	1.83e+00(-)	4.59e-01(-)	6.53e-01(-)
F_1	100	2.57e+01	4.53e+02(-)	2.22e+01(-)	5.14e+01(-)
F_2	30	7.32e+01	1.10e+02(-)	8.70e+01(-)	8.23e+01(-)
F_1	50	7.19e+01	1.71e+02(-)	9.94e+01(-)	8.98e+01(-)
F_1	100	3.35e+02	6.44e+02(-)	3.41e+02(-)	3.87e+02(-)
F_1	50	-1.06e+02	-2.56e+01(-)	-1.23e+02(≈)	-1.23e+02(≈)
F_2	100	8.01e+02	1.64e+03(-)	8.76e+02(-)	1.42e+03(-)
+/-/≈		NAN	8/0/0	7/0/1	7/0/1

体 (SAOA-fitS) 都选择的3种策略与本文所提出的方法进行对比分析. 同样地, 表5列出了所有算法在 F_1 、 F_2 和 F_6 上的对比统计结果. 可见, 相较于其他对比策略, 所提出的采样准则在8个测试问题上占8/8、7/8、7/8优势.

3.5 参数分析

对式(7)中的参数 K 进行敏感性分析. 实验中分别设置 $K = 1, 5, 10, 20, 40, 60$, 在30维的函数 $F_1 \sim F_5$ 进行测试对比. 图4显示了算法 USSAOA 随着参数 K

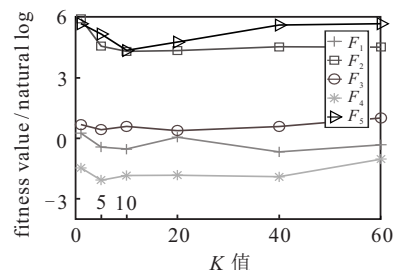


图4 参数变化曲线

值的增加在函数 $F_1 \sim F_5$ 的变化曲线. 可以看出, K 取不同值对算法的影响程度不大. 总体来看, $K = 10$ 对于不同的函数结果相对较好.

4 结 论

本文提出了一种新的基于不确定度设计的代理模型辅助进化优化算法 USSAOA, 以解决计算费时的高维优化问题. 该算法采用径向基函数(RBF)作为廉价的全局代理模型代替计算费时的原问题, 差分进化算法(DE)作为优化该模型的优化器. 由于RBF作为近似函数不能输出关于个体的不确定度信息, 通过考虑采样个体与其周围样本点间的夹角和距离的关系构造模型对该个体估计的不确定度公式. 在得到不确定度的基础上, 提出了一种以排名的方式将模型估值与其不确定度信息同时结合起来的新的填充采样准则, 综合考虑了对搜索空间的开采能力和探索能力, 以期选择较好的采样个体更新模型, 从而引导模型找到原问题的全局最优解. 实验表明, 相较于其他流行对比算法, 所提出算法 USSAOA 在 10 维、20 维、30 维、50 维和 100 维的测试问题上具有较好的结果, 表明该算法更有能力处理计算费时的高维优化问题. 另外, 对不确定度计算公式和填充采样准则有效性的统计进行了对比分析, 所提出方法相较于其他对比策略更有效. 从实验分析看, 所提出方法在函数特征复杂的问题上效果不佳, 分析其原因是所提出算法 USSAOA 可能在早期阶段已陷入了局部最优位置, 以至于到优化后期函数下降曲线几乎处于平缓趋势. 故在未来的工作中, 将增加考虑种群在搜索过程中的探索能力, 以期找到问题的全局最优解.

参考文献(References)

- [1] Kumano T. Intelligent system applications in power systems[J]. IEEE Transactions on Power and Energy, 2007, 127(5): 605-608.
- [2] Wang Y, Li B, Yuan B. Hybrid of comprehensive learning particle swarm optimization and SQP algorithm for large scale economic load dispatch optimization of power system[J]. Science China Information Sciences, 2010, 53(8): 1566-1573.
- [3] Esmaili M, Mosavi A. Variable reduction for multi-objective optimization using data mining techniques; application to aerospace structures[C]. The 2nd International Conference on Computer Engineering and Technology. Chengdu, 2010: V5-333.
- [4] Wang J F, Periaux J, Sefrioui M. Parallel evolutionary algorithms for optimization problems in aerospace engineering[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2002, 149(1): 155-169.
- [5] Regis R G. Evolutionary programming for high-dimensional constrained expensive black-box optimization using radial basis functions[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2014, 18(3): 326-347.
- [6] Ong Y S, Nair P B, Keane A J. Evolutionary optimization of computationally expensive problems via surrogate modeling[J]. AIAA Journal, 2003, 41(4): 687-696.
- [7] Sakulin A, Puangdownreong D. A novel metaheuristic optimization algorithm: Current search[C]. Proceedings of the 11th WSEAS international Conference on Artificial Intelligence, Knowledge Engineering and Data Bases. Piscataway: IEEE, 2012: 125-130.
- [8] Price K V, Storn R M, Lampinen J A. Differential evolution: A practical approach to global optimization[M]. Berlin: Springer, 2005: 37-41.
- [9] Goldberg D E. Genetic algorithm in search optimization and machine learning[J]. Addison Wesley, 1989(7): 2104-2116.
- [10] Lin Y L, Chang W D, Hsieh J G. A particle swarm optimization approach to nonlinear rational filter modeling[J]. Expert Systems with Applications, 2008, 34(2): 1194-1199.
- [11] 王凌, 吉利军, 郑大钟. 基于代理模型和遗传算法的仿真优化研究[J]. 控制与决策, 2004, 19(6): 626-630. (Wang L, Ji L J, Zheng D Z. Simulation optimization based on surrogate model and genetic algorithm[J]. Control and Decision, 2004, 19(6): 626-630.)
- [12] Snoek J, Rippel O, Swersky K, et al. Scalable Bayesian optimization using deep neural networks[J]. Statistics, 2015: 1861-1869.
- [13] Deb K, Hussein R, Roy P, et al. Classifying metamodeling methods for evolutionary multi-objective optimization: First results[C]. Evolutionary Multi-Criterion Optimization. New York: Springer, 2017: 160-175.
- [14] Jin Y C, Sendhoff B. Reducing fitness evaluations using clustering techniques and neural network ensembles[M]. Berlin, Heidelberg: Springer, 2004: 688-699.
- [15] Wang S, Minku L L, Yao X. Resampling-based ensemble methods for online class imbalance learning[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2015, 27(5): 1356-1368.
- [16] Yu H B, Tan Y, Sun C L, et al. A generation-based optimal restart strategy for surrogate-assisted social learning particle swarm optimization[J]. Knowledge-Based Systems, 2019, 163: 14-25.
- [17] Yu H B, Tan Y, Zeng J C, et al. Surrogate-assisted hierarchical particle swarm optimization[J]. Information Sciences, 2018, 454/455: 59-72.
- [18] Tian J, Tan Y, Zeng J C, et al. Multiobjective infill criterion driven Gaussian process-assisted particle swarm optimization of high-dimensional expensive problems[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2019, 23(3): 459-472.
- [19] Sun C L, Jin Y C, Cheng R, et al. Surrogate-assisted cooperative swarm optimization of high-dimensional

- expensive problems[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2017, 21(4): 644-660.
- [20] Li F, Cai X W, Gao L, et al. A surrogate-assisted multiswarm optimization algorithm for high-dimensional computationally expensive problems[J]. IEEE Transactions on Cybernetics, 2021, 51(3): 1390-1402.
- [21] Liu B, Zhang Q F, Gielen G G E. A Gaussian process surrogate model assisted evolutionary algorithm for medium scale expensive optimization problems[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2014, 18(2): 180-192.
- [22] Wang H D, Jin Y C, Doherty J. Committee-based active learning for surrogate-assisted particle swarm optimization of expensive problems[J]. IEEE Transactions on Cybernetics, 2017, 47(9): 2664-2677.
- [23] Wang H D, Jin Y C, Sun C L, et al. Offline data-driven evolutionary optimization using selective surrogate ensembles[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2019, 23(2): 203-216.
- [24] Liao P, Sun C L, Zhang G C, et al. Multi-surrogate multi-tasking optimization of expensive problems[J]. Knowledge-Based Systems, 2020, 205: 106262.
- [25] Er M J, Wu S Q, Lu J W, et al. Face recognition with radial basis function (RBF) neural networks[J]. IEEE Transactions on Neural Networks, 2002, 13(3): 697-710.
- [26] Kattan A, Galvan E. Evolving radial basis function networks via GP for estimating fitness values using surrogate models[C]. IEEE Congress on Evolutionary Computation. Brisbane, 2012: 1-7.
- [27] Powell F L. Adaptation to altitude-hypoxia and vertebrates[J]. The Quarterly Review of Biology, 1985, 60(4): 519-520.
- [28] Broomhead D S, Lowe D. Multivariable functional. interpolation and adaptative networks[J]. Complex Systems, 1988, 2: 321-355.
- [29] Gutmann H M. A radial basis function method for global optimization[J]. Journal of Global Optimization, 2001, 19(3): 201-227.
- [30] Stein M. Large sample properties of simulations using Latin hypercube sampling[J]. Technometrics, 1987, 29(2): 143-151.
- [31] Qin S F, Sun C L, Jin Y C, et al. Bayesian approaches to surrogate-assisted evolutionary multi-objective optimization: A comparative study[C]. IEEE Symposium Series on Computational Intelligence. Xiamen, 2019: 2074-2080.
- [32] Ponweiser W, Wagner T, Vincze M. Clustered multiple generalized expected improvement: A novel infill sampling criterion for surrogate models[C]. IEEE Congress on Evolutionary Computation. Hong Kong, 2008: 3515-3522.
- [33] Dennis J, Torczon V. Managing approximation models in optimization[C]. Multidisciplinary Design Optimization: State of the Art. Philadelphia: SIAM, 1997: 330-347.
- [34] Zhou Z Z, Ong Y S, Nair P B, et al. Combining global and local surrogate models to accelerate evolutionary optimization[J]. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics — Part C: Applications and Reviews, 2007, 37(1): 66-76.
- [35] Forrester A I J, Keane A J. Recent advances in surrogate-based optimization[J]. Progress in Aerospace Sciences, 2009, 45(1/2/3): 50-79.
- [36] Jones D R, Schonlau M, Welch W J. Efficient global optimization of expensive black-box functions[J]. Journal of Global Optimization, 1998, 13(4): 455-492.
- [37] Lim D, Jin Y C, Ong Y S, et al. Generalizing surrogate-assisted evolutionary computation[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2010, 14(3): 329-355.
- [38] Suganthan P N, Hansen N, Liang J J, et al. Problem definitions and evaluation criteria for the CEC 2005 special session on real parameter optimization[R]. Zhengzhou: Zhengzhou University, 2013.
- [39] Emmerich M T M, Giannakoglou K C, Naujoks B. Single- and multiobjective evolutionary optimization assisted by Gaussian random field metamodels[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2006, 10(4): 421-439.
- [40] 丁青锋, 尹晓宇. 差分进化算法综述[J]. 智能系统学报, 2017, 12(4): 431-442.
(Ding Q F, Yin X Y. Research survey of differential evolution algorithms[J]. CAAI Transactions on Intelligent Systems, 2017, 12(4): 431-442.)
- [41] Storn R, Price K. Differential evolution — A simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces[J]. Journal of Global Optimization, 1997, 11(4): 341-359.
- [42] Mezura-Montes E, Velázquez-Reyes J, Coello Coello C A. A comparative study of differential evolution variants for global optimization[C]. Proceedings of the 8th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation. Washington, 2006: 485-492.
- [43] Henley S. Principles and procedure of statistics: A biometrical approach[J]. Computers & Geosciences, 1983, 9(2): 275.

作者简介

孙超利(1978—), 女, 教授, 博士生导师, 从事计算智能、机器学习、代理模型辅助的进化优化及其在实际工程中的应用等研究, E-mail: chaoli.sun@tyust.edu.cn;

李婵(1996—), 女, 硕士生, 从事代理模型辅助进化优化的研究, E-mail: s20180573@stu.tyust.edu.cn;

秦淑芬(1998—), 女, 博士生, 从事多目标优化、大规模优化、代理模型辅助的进化优化及其在实际工程中的应用等研究, E-mail: shufen.qin@stu.tyust.edu.cn;

张国晨(1980—), 男, 副教授, 博士, 从事计算智能、机器学习、代理模型辅助的进化优化及车辆调度等研究, E-mail: imzgc@hotmail.com;

李晓波(1979—), 男, 讲师, 硕士, 从事代理模型辅助的进化优化及设备的健康管理等研究, E-mail: lixiaobo@tyust.edu.cn.

(责任编辑: 郑晓蕾)