arXiv:2304.05963v1 [cs.NE] 12 Apr 2023

一种信息论进化算法*

Arnaud Berny

2023年4月13日

摘要

我们提出一种基于信息论原理、作用于位向量的新型进化算法。信息论进化算法（it-EA）通过两个参数迭代更新搜索分布：中心（即应用标准位变异的比特向量）和变异率。变异率通过信息几何优化进行更新，中心则依据最大似然原理进行更新。我们还研究了中心的标准精英更新和非精英更新。实验展示了变异率的动态变化以及超参数的影响。在对 OneMax 和 LeadingOnes 进行的经验运行时间分析中，精英和非精英 it-EA 均取得了令人鼓舞的结果。

关键词：标准位变异、自适应变异率、信息几何优化、交叉熵方法

1 引言

信息论已成为进化计算领域中备受青睐的概念框架，既用于分析现有的演化算法，也用于构建新的算法[1]。这对于分布估计算法 [20, 15] 尤其如此：这类算法从搜索分布中抽样生成后代

*本文的四页版本将发表于遗传与进化计算会议伴会（*GECCO '23 Companion*）。https://doi.org/10.1145/3583133.3590548[1]顺便一提，信息论之父克劳德·E·香农的博士论文研究的是理论遗传学。

种群，并利用选定的个体估计其参数。特别是，MIMIC [6] 和 UMDA[23] 等算法会在每次迭代时完全重建模型。它们可以用信息几何来表述，其中涉及一族概率分布以及分布之间的距离 [28, 21]。变异和交叉等标准进化算子也可以在这一框架下进行解释。

信息几何对于分析诸如 PBIL [4] 和CMA-ES [13, 14] 这类演化算法同样是一项宝贵资源；这些算法估计的是模型参数的增量变化，而不是完整估计。从 PBIL和CMA-ES 出发，一系列研究促成了这一方法的形式化 [5, 30, 22, 29, 24]。在自然进化策略（NES） [30, 29] 和信息几何优化（IGO） [24],中，增量变化是通过相对于模型参数的估计自然梯度[2] 来确定的。自然梯度是搜索分布的Fisher 度量下的梯度，而搜索分布又是用Kullback–Leibler散度 [19]表示的。与欧几里得梯度相比，自然梯度的关键优势在于，搜索分布的演化不依赖于其参数的选择。

本文中，我们只关注固定长度比特向量的搜索空间。令人惊讶的是，尚不存在一种类似 CMA-ES、针对比特向量的进化算法。有人可能会反驳这一观点，认为 PBIL 是一个自然的候选算法。然而，它的参数都是连续的，而且以概率向量的形式存在，并不像 CMA-ES 中搜索分布的均值那样属于搜索空间。此外，我们预计，这种推测性进化算法将能够控制变异率，正如 CMA-ES 能够对相关变异进行最优控制一样。

进化算法中的自适应参数控制数十年来一直受到持续关注 [18, 1]。实践和理论 [9], 均已表明，与固定参数策略相比，自适应参数控制具有优势。然而，更新规则通常是作为启发式方法提出的，并非源自第一性原理。

一种著名的更新规则是所谓的五分之一成功规则 [25] ，该规则调整变异率，使变异的成功率等于或接近五分之一（如果变异产生了适应度更高的后代，则称该变异是成功的）。如果成功率大于（小于）五分之一，则应提高（降低）变异率。五分之一这一常数可以从在欧几里得空间中的球面问题上应用（$1+1$）演化策略的理论考量中推导出来。已经证明，配备类似基于成功率的更新规则的（$1+1$）进化算法，在 LeadingOnes 上能够达到与（$1+1$）EA 相同的性能

采用最优适应度相关变异率 [10]。采用基于成功率的变异率的双变异率（$1+\lambda$）EA，在所有 λ 并行黑盒算法 [12] 中，在 OneMax 上取得了最佳性能。

在另一条研究路线中，研究人员采用机器学习来解决算子选择和参数控制问题，包括自适应追踪 [27] 、动态多臂老虎机 [7], 或强化学习 [17]。这些方法通常假设算子或取值构成有限集合，因此需要对变异率等连续参数进行离散化。也可以考虑变异位数 [11]，而不是变异率本身。最后，自适应也被用于控制遗传算法中的变异率，这与进化策略中的做法类似[3]。

在这项工作中，我们提出了一种基于比特向量、源自信息论原理的新型进化算法。信息论进化算法（it-EA）通过两个参数迭代更新搜索分布：中心，即应用标准位变异的比特向量，以及变异率。变异率通过信息几何优化 [24] 进行更新，而中心则依据最大似然（ML）原理进行更新，类似于交叉熵方法（CEM） [26, 8]。我们还考虑了对中心进行标准的精英更新和非精英更新。

本文结构如下：第 2 节介绍变异模型。第 3 节介绍选择模型。在第 4 节和第 5 节中，我们基于 IGO 框架，推导出变异率的精确更新规则。在第 6 节中，我们应用最大似然原理，推导出搜索分布中心的更新规则。第 7 节介绍融合了上述所有原理的信息论进化算法。第 8 节给出了 it-EA 的实验。第 9 节总结全文。

2 变异模型

我们回顾比特向量的标准变异模型，并根据需要引入记号。我们考虑集合 $\{0,1\}^n$ 中的 n维比特向量，其中 $n \in \mathbb{N}^*$。标准位变异模型由随机位向量 U 给出，其分量相互独立同分布。更准确地说，对于所有 $u \in \{0,1\}^n$，

$$\mathbb{P}(U = u) = \prod_i \mathbb{P}(U_i = u_i)\,,$$

其中 $U = (U_i)$、 $u = (u_i)$ 和 $i \in [1..n]$。令 $p \in (0, 1)$ 为变异率。接着，

$$\mathbb{P}(U_i = u_i) = \begin{cases} p & \text{if } u_i = 1 \\ 1 - p & \text{if } u_i = 0 \end{cases}$$

and

$$\mathbb{P}(U = u) = p^{\|u\|}(1 - p)^{n-\|u\|},$$

其中 $\|u\| = \sum_i u_i$ 是 u 的汉明重量（比特计数）。我们将用 Q_p 表示 U 的概率分布，即 $Q_p(u) = \mathbb{P}(U = u)$。

设 x 为某个固定的比特向量，并假设我们希望探索 x的邻域。我们定义随机向量 $V = x \oplus U$，其中 U 具有概率分布 Q_p （简称$U \sim Q_p$ ），而 $\oplus$ 表示模2 加法。这类似于高斯情形，其中 U 将是一个中心化高斯随机向量，而 x 则是 V的均值。然而，对于位向量和模 2加法的情形，我们无法谈论均值。相反，我们将称 x 为搜索分布的中心。

事实证明，集合 $\{Q_p : p \in (0,1)\}$ 定义了一个指数族概率分布 [22, 24]。事实上，对于所有 $u \in \{0, 1\}^n$， $Q_p(u) = P_\theta(u)$，其中

$$P_\theta(u) = \frac{1}{Z(\theta)} e^{\theta T(u)}, \tag{1}$$

其中 $\theta = \text{logit}(p)$,

$$\text{logit}(p) = \log\left(\frac{p}{1-p}\right),$$

$T(u) = \|u\|$，且 $Z(\theta) = (1 + e^\theta)^n$ 是归一化常数。选择 P_θ 而不是 Q_p 的原因在于，IGO流在指数族中具有简单的表达式，并且搜索分布的演化在重参数化下保持不变。

3 选择模型

在黑箱情境中，我们希望最大化一个定义在维度为 $n \in \mathbb{N}^*$ 的比特向量上的任意函数 $f : \{0, 1\}^n \to \mathbb{R}$。令 $x \in \{0, 1\}^n$ 为某个固定的比特向量。我们将 f 的平移版本 g 定义为：对所有 $u \in \{0, 1\}^n$， $g(u) = f(x \oplus u)$。与上一节一样， u 表示变异位数。遵循 IGO 框架 [24], ，我们用选择权重 W_θ^g 替换 g。粗略地说，对于给定的 $u \in \{0, 1\}^n$，相对于 u 的改进概率越小，其选择权重 $W_\theta^g(u)$ 就越大。

假设对 f 进行最大化，因此 g，我们在采样分布 P_θ 下定义两个改进概率。更确切地说，对所有 $u \in \{0,1\}^n$，

$$\begin{aligned} q^{>}(u) &= \mathbb{P}(g(V) > g(u)) \\ q^{\geq}(u) &= \mathbb{P}(g(V) \geq g(u)) \,, \end{aligned} \tag{2}$$

其中 $V \sim P_\theta$。区分比较运算符是必要的，因为 P_θ 的支持集为 $\{0,1\}^n$，这意味着 that

$$\mathbb{P}(g(V) = g(u)) = q^{\geq}(u) - q^{>}(u)$$

对所有 $u \in \{0,1\}^n$ 均为正值。若不作此区分，我们可以对所有 $u \in \{0,1\}^n$ 将选择权重定义为 $W_\theta^g(u) = w(q(u))$，其中 $w\colon [0,1] \to \mathbb{R}$ 是一个非递增函数。相反，它被定义为 w 在区间 $[q^{>}(u)\ q^{\geq}(u)]$ 上的均值，或者

$$W_\theta^g(u) = \frac{1}{q^{\geq}(u) - q^{>}(u)} \int_{q^{>}(u)}^{q^{\geq}(u)} w(q)\, dq \,. \tag{3}$$

选择权重的一个重要性质是，对于所有 $\theta \in \mathbb{R}$，

$$\mathbb{E}_{u \sim P_\theta}(W_\theta^g(u)) = \int_0^1 w(q)\, dq \,,$$

其仅取决于 w。我们将选择 w 以使这一期望等于 1。

在 CMA-ES 中，每次迭代都会从 P_θ 中采样 λ 个个体，并根据适应度函数选出其中$\mu < \lambda$ 个最优个体，用于更新参数 θ。在 IGO 中，可以通过如下定义的阶跃函数w 对这一行为建模：对于所有 $q \in [0,1]$，有

$$w(q) = \frac{1}{q_0} 1_{q \leq q_0} \,, \tag{4}$$

其中 $q_0 = \mu/\lambda$。

4 IGO流

在IGO框架中，我们将要最大化的函数替换为选择权重关于搜索分布的期望。更准确地说，定义二元函数

$$\varphi(\theta, \theta') = \mathbb{E}_{u \sim P_\theta}(W_{\theta'}^g(u)) \,.$$

然后，作用于 θ 的IGO流定义为

$$\frac{d\theta_t}{dt} = \tilde{\nabla}_\theta \varphi(\theta, \theta_t)\,,$$

其中，自然梯度记为 $\tilde{\nabla}$，取于 $\theta = \theta_t$。与欧几里得梯度不同，自然梯度是必要的，以确保所得流不依赖于我们为概率分布 P_θ所选择的具体参数化方式。尽管 θ 是一个标量，我们仍将沿用梯度这一术语。我们可以将期望的梯度表示为另一个梯度的期望（对数导数技巧），并写作

$$\frac{d\theta_t}{dt} = \mathbb{E}_{u\sim P_{\theta_t}}\left(W^g_{\theta_t}(u)\cdot \tilde{\nabla}_\theta \log P_\theta(u)\right)\,,$$

其中，正如前面所述，自然梯度取于 $\theta = \theta_t$。我们不直接计算自然梯度，而是利用这样一个事实：变异模型定义了一个概率分布的指数族，正如我们在第 2 节中所看到的那样。对数导数的表达式可以在[22, 24]中找到。随后，IGO流可以表示为

$$\frac{d\overline{T}}{dt} = \mathbb{E}_{u\sim P_{\theta_t}}\left(W^g_{\theta_t}(u)\cdot (T(u) - \overline{T})\right)\,,$$

其中 $\overline{T} = \mathbb{E}_{u\sim P_{\theta_t}}(T(u))$。由于 $T(u) = \|u\|$和 $u \sim P_{\theta_t}$，我们有 $\|u\| \sim \mathcal{B}(n, p_t)$（二项分布）以及 $\overline{T} = np_t$。除以 n，并回想 $\mathbb{E}_{u\sim P_{\theta_t}}(W^g_{\theta_t}(u)) = 1$，即可得到

$$\begin{aligned}\frac{dp_t}{dt} &= \mathbb{E}_{u\sim P_{\theta_t}}\left(W^g_{\theta_t}(u)\cdot\left(\frac{\|u\|}{n} - p_t\right)\right)\\ &= \mathbb{E}_{u\sim P_{\theta_t}}\left(W^g_{\theta_t}(u)\cdot\frac{\|u\|}{n}\right) - p_t\,.\end{aligned} \tag{5}$$

现在可以这样理解该流：如果选定个体中的变异位频率高于（分别地，低于）当前变异率，则提高（分别地，降低）变异率。这类似于 IGO 流作用于高斯分布参数（尤其是其标准差）时的行为。动力系统 (5) 的渐近值 p 必须满足

$$p = \mathbb{E}_{u\sim P_\theta}\left(W^g_\theta(u)\cdot\frac{\|u\|}{n}\right)\,, \tag{6}$$

这意味着， p 必须等于所选个体中的变异位频率。即使给定初始条件 p_0 时， p_t 只能收敛到唯一的渐近值，也可能存在多个这样的不动点。

5 IGO 更新

我们的目标是利用上一节介绍的理论，为进化算法提供自适应变异率。理想情况下，我们希望在给定初始条件 p_0时，计算由式（6）定义的渐近值。由于计算限制，我们将采用式（5）的一个近似，称为 IGO 更新 [24], ；在该更新中，时间是离散化的，而关于 $\{0,1\}^n$ 的期望则通过随机变量的求和来估计。即便如此，我们也只能在进化算法的每次迭代中更新一次变异率。

让我们从离散时间 t 时公式 (5) 中的期望出发，描述 IGO 更新。与前几节一样，设 $x \in \{0,1\}^n$ 为某个固定的比特向量，并对所有 $u \in \{0,1\}^n$ 定义 $g = g(u) = f(x \oplus u)$。首先，我们采样 λ 个变异比特向量 $u^k \sim Q_{p_t}$、$k \in [1..\lambda]$，并计算它们在 g 下的相应映像。令 $\widehat{W}_k$ 为选择权重 $W^g_{\theta_t}(u^k)$ 的近似，其中 u^k。稍后我们将对其进行精确定义。于是，期望可估计为

$$\widehat{p} = \frac{1}{\lambda} \sum_{k=1}^{\lambda} \widehat{W}_k \cdot \frac{\left\| u^k \right\|}{n} \tag{7}$$

并将变异率更新为

$$p_{t+1} = p_t + \alpha \cdot (\widehat{p} - p_t)\,, \tag{8}$$

其中， α 是学习率或时间增量。根据 [24], 中的定理 6，当 $\lambda \to \infty$ 时，估计量 $\widehat{p}$ 以概率 1 收敛到公式 (5) 右侧的期望（一致性）。

现在我们转向选择权重。我们需要按照公式 (2) 中改进概率的相同方式定义排名。对于所有 $k \in [1..\lambda]$，令

$$\begin{aligned} r^{>}_k &= \#\{\ell \in [1..\lambda] : g(u^\ell) > g(u^k)\} \text{ and} \\ r^{\geq}_k &= \#\{\ell \in [1..\lambda] : g(u^\ell) \geq g(u^k)\}\,. \end{aligned}$$

则 $r^{>}_k/\lambda$ 是式（2）中定义的 $q^{>}(u^k)$的近似。我们将式（3）中的积分替换为有限求和，并定义经验权重

$$\widehat{W}_k = \frac{1}{r^{\geq}_k - r^{>}_k} \sum_{\ell=r^{>}_k}^{r^{\geq}_k - 1} w\left(\frac{\ell + 1/2}{\lambda}\right)\,, \tag{9}$$

其中， w 是式（4）中定义的阶跃函数。我们必须在权重计算中考虑等价个体。在定义于 $\{0,1\}^n$上的函数情况下，这一点尤其重要。通常，这种

函数相较于搜索空间的大小只取少量值。因此，我们根据 μ 相对于实区间 $[r_k^> + 1/2, r_k^\geq - 1/2]$ 的位置，将集合 $[1..\lambda]$ 划分为三个两两不相交且可能为空的子集。

- 设 $K_1 = \{k \in [1..\lambda] : \ \mu \geq r_k^\geq\}$。那么，对所有 $k \in K_1$， $\widehat{W}_k = \lambda/\mu$。权重的计算可直接由阶跃函数 w 的定义得出，因此省略。

- 设 $K_2 = \{k \in [1..\lambda] : \ r_k^> + 1 \leq \mu \leq r_k^\geq - 1\}$。那么，对所有 $k \in K_2$，式（9）右侧的求和项都会截断，并且

$$\widehat{W}_k = \frac{1}{r_k^\geq - r_k^>} \sum_{\ell=r_k^>}^{\mu-1} w\left(\frac{\ell + 1/2}{\lambda}\right) = c \cdot \frac{\lambda}{\mu},$$

  其中

$$c = \frac{\mu - r_k^>}{r_k^\geq - r_k^>}.$$

  系数 c 可作如下解释。 $\mu - r_k^>$权重 λ/μ 在所有 $r_k^\geq - r_k^>$等价个体之间均匀分配。例如，如果有两个等价个体，则每个个体都会被赋予等于 $\lambda/(2\mu)$ 的权重。这与一种更简单的规则形成对比：按照该规则，其中一个个体会被赋予等于 λ/μ的权重，而另一个个体的权重则为 0。

- Let $K_3 = \{k \in [1..\lambda] : \mu \leq r_k^\geq\}$. Then, for all $k \in K_3$, $\widehat{W}_k = 0$.

根据这些子集的定义，在假设它们均非空的情况下，可以验证得出

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{\lambda} \widehat{W}_k &= \sum_{k \in K_1} \widehat{W}_k + \sum_{k \in K_2} \widehat{W}_k + \sum_{k \in K_3} \widehat{W}_k \\ &= r_\ell^> \cdot \frac{\lambda}{\mu} + (r_\ell^\geq - r_\ell^>) \cdot \frac{\mu - r_\ell^>}{r_\ell^\geq - r_\ell^>} \cdot \frac{\lambda}{\mu} + 0 = \lambda,\end{aligned}$$

其中 ℓ 已在 K_2 中任意选取。这与 $\mathbb{E}_{u \sim P_\theta}(W_\theta^g(u)) = 1$ 一致，正如第 3 节所强调的那样。

最后，应当指出，这些选择权重对于其他算法也同样重要，例如 PBIL、UMDA，甚至是应用于取离散值函数时的 CMA-ES。

6 ML 更新

在前几节中，我们一直关注变异率的控制。现在，我们考虑在 it-EA中更新搜索分布中心的方法。除了在（$1+\lambda$）和（$1,\lambda$）进化算法中采用的精英选择和非精英选择之外，我们还提议将信息论应用于这一问题。更确切地说，我们应用交叉熵方法（CEM） [26, 8]。关于 IGO 与交叉熵方法的关系，参见 [24]。

主要思想是更新中心 x_t（搜索分布的一个离散参数），从而最小化选定个体与模型之间的 Kullback–Leibler 散度 [19]。换句话说，

$$x_{t+1} = \arg\min_y D_{\mathrm{KL}}(P'_{x_t,\theta_t} \parallel P_{y,\theta_t}) \,,$$

其中 $P_{x_t,\theta_t}(x) = P_{\theta_t}(x_t \oplus x)$ 是概率分布 P_{θ_t} 经x_t平移，并且 $P'_{x_t,\theta_t} = W^f_{\theta_t} \cdot P_{x_t,\theta_t}$ 是其在选择下的像。在下文中，我们直接使用 f而不是 g，如第 3 节至第 5 节中所述。由于 $\mathbb{E}_{x\sim P_{x_t,\theta_t}}(W^f_{\theta_t}(x)) = 1$,$P'_{x_t,\theta_t}$ 确实是概率分布。

除与 y 无关的常数项外，KL 散度等于 $P'_{x_t,\ \theta_t}$ 与 $P_{y,\ \theta_t}$ 之间的交叉熵，定义为

$$H(P'_{x_t,\theta_t}, P_{y,\theta_t}) = -\sum_x P'_{x_t,\theta_t}(x) \log P_{y,\theta_t}(x) \,.$$

交叉熵通过与公式 (5) 中的期望相同的方式进行近似

$$\widehat{H}(y) = -\frac{1}{\lambda} \sum_{k=1}^{\lambda} \widehat{W}_k \log P_{y,\theta_t}(x^k) \,.$$

$\widehat{\ }$根据 [24], 中的定理 6，当 $\lambda \to \infty$时，估计量 $H(y)$ 以$\widehat{\ }$概率 1 收敛到交叉熵（一致性）。函数 H 是对数似然的相反数。我们将看到，它可以被精确最小化。根据$P_{y,\ \theta_t}$ 和 P_{θ_t}的定义，

$$\begin{aligned} \log P_{y,\theta_t}(x^k) &= \log P_{\theta_t}(y \oplus x^k) \\ &= \left\| y \oplus x^k \right\| \cdot \log \frac{p_t}{1-p_t} + n \log(1-p_t) \,. \end{aligned}$$

除去关于 y的常数项,

$$\begin{aligned}\widehat{H}(y) &= \frac{1}{\lambda}\sum_{k=1}^{\lambda}\widehat{W}_k \cdot \left\|y \oplus x^k\right\| \cdot \log\frac{1-p_t}{p_t} \\ &= \sum_{i=1}^{n}\mathcal{L}_i(y_i) \cdot \log\frac{1-p_t}{p_t}\,,\end{aligned}$$

这是一个完全可分离的函数，其中

$$\mathcal{L}_i(y_i) = \frac{1}{\lambda}\sum_{k=1}^{\lambda}\widehat{W}_k \cdot (y_i \oplus x_i^k)\,.$$

对数因子不依赖于 y，且只影响优化的方向。对于给定的 $i \in [1..n]$，忽略相对于y_i的常数,

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_i(y_i) &= \frac{1}{\lambda}\sum_{k:x_i^k=1}\widehat{W}_k \cdot (1-y_i) + \frac{1}{\lambda}\sum_{k:x_i^k=0}\widehat{W}_k \cdot y_i \\ &= \left(1 - \frac{2}{\lambda}\sum_{k:x_i^k=1}\widehat{W}_k\right) y_i\,.\end{aligned}$$

现在可以给出更新规则。假设 $p_t \in (0, 1/2)$，或者等价地，$\log\frac{1-p_t}{p_t} > 0$。那么

$$x_{i,t+1} = \begin{cases} 0 & \text{if } \frac{1}{\lambda}\sum_{k:x_i^k=1}\widehat{W}_k < \frac{1}{2}, \\ 1 & \text{if } \frac{1}{\lambda}\sum_{k:x_i^k=1}\widehat{W}_k > \frac{1}{2}. \end{cases} \tag{10}$$

若两者相等，$x_{i,t+1}$ 在 $\{0,1\}$中均匀采样。因此，$x_{i,t+1}$ 通过多数规则确定。当 $p \in (1/2, 1)$时，必须反转不等号。

我们将这种更新规则称为 ML 更新。ML 更新可以视为一种多亲本交叉算子，因为它将所有选定个体结合起来，形成下一个中心。一方面，它倾向于强化，因为其目的是提高选定个体出现的概率。另一方面，它在一定程度上也倾向于探索，因为与局部搜索不同，这种更新规则可能会降低中心的适应度。此外，旧中心与新中心之间的汉明距离没有上界 1。最后，如果 $\mu = 1$，忽略等价个体，则 ML 更新类似于用于替换的非精英型 $(1, \lambda)$ 选择。

我们还将考虑一种 ML 更新的局部版本，其定义如下：

$$x_{t+1} = x_t \oplus \arg\min_{\|u\| \leq 1} D_{\mathrm{KL}}(P'_{x_t,\theta_t} \,\|\, P_{x_t \oplus u,\theta_t})\,.$$

这会导出一个类似于公式 (10) 的更新规则，其中个体 x^k 被突变 u^k 替换。由此得到的增量 ML 更新可以解释为增量多亲本交叉。

7 进化算法

所提出的信息论进化算法（it-EA，见算法1）结合了 IGO 更新（见第 5 节）和ML更新（见第 6节）。它接受五个参数：适应度函数 f、采样个体的数量 λ 、选定个体的数量 μ 、初始突变率 $p_0 \in (0,1)$ 以及学习率 $\alpha \in [0,1]$。

it-EA 是一种迭代算法，它会更新由搜索分布的中心 x 和变异率 p 构成的状态。在每次迭代开始时，算法会对比特向量种群进行采样，这与标准的 $(1+\lambda)$ 或 $(1,\lambda)$ EA 非常相似。种群会经过评估和排序。算法会确定集合 K_2 和系数 c，以考虑等价个体（见第 5 节）。最后，更新搜索分布的中心和变异率。缩放后的变异率 np （预期的变异位数）可视为在中心处进行随机局部搜索的半径。从这个角度来看，it-EA 实现了一种变邻域局部搜索。

我们在 $[1..\lambda]$ 上引入两个二元关系，以便于阅读算法并对其进行推理。它们取决于由位向量构成的种群 $(x^k)_{k \in [1..\lambda]}$。第一个关系是预序，定义如下：$k \preceq \ell$ 当且仅当 $f(x^k) \geq f(x^\ell)$。它用于对范围 $[1..\lambda]$ 排序。排序函数返回 $[1..\lambda]$ 的一个排列 σ。例如，$\sigma(1)$ 是适应度最高个体的索引。第二个关系是等价关系，定义如下：$k \equiv \ell$ 当且仅当 $f(x^k) = f(x^\ell)$。k 的等价类记为 $[k]$。它可以表示为整数区间 $[r_k^> + 1..r_k^\geq]$ 在 σ 下的像，这里使用的是第 5 节中定义的排名。也就是说，$[k] = \sigma([r_k^> + 1..r_k^\geq])$。

如果第 μ 个个体的等价类 $[\sigma(\mu)]$ 超出前 μ 个个体 $\sigma([1..\mu])$ 的范围，则集合 K_2 非空；等价地，如果 $\sigma(\mu) \equiv \sigma(\mu+1)$，则集合非空。在这种情况下，$K_2 = [\sigma(\mu)]$，$K_1 = \sigma([1..\mu]) \setminus K_2$，并且

$$c = \frac{\mu - r_\ell^>}{r_\ell^\geq - r_\ell^>} = \frac{\#\sigma([1..\mu]) \cap K_2}{\#K_2}\,,$$

其中 ℓ 已在 K_2中任意选取。

it-EA 有四个超参数， λ、 μ、 p_0 和 α，比标准（$1+\lambda$）EA 多两个。变异率的更新规则确保$0 \leq p \leq 1$ ，但如果变异率变得过小，搜索几乎会陷入停滞。为避免这种情况，我们可以在主循环末尾加入 $p \leftarrow \min(p_{\max}, \max(p_{\min}, p))$，为变异率设定取值范围，从而使 $p \in [p_{\min}, p_{\max}]$。

只需将$x \leftarrow \arg\max_{\{x, x^1, \ldots, x^\lambda\}} f$这一行替换 ML 更新，就可以轻松地将算法 1 转换为精英型（$1+\lambda$）EA；或者将 $x \leftarrow \arg\max_{\{x^1, \ldots, x^\lambda\}} f$这一行替换 ML 更新，将其转换为非精英型（$1, \lambda$）EA。精英型和非精英型 it-EA 分别记为 eit-EA 和 neit-EA。采用增量 ML 更新、且最多翻转一位（见第 6 节）的 it-EA 记为 it1-EA。

8 实验

8.1 变异率的演化

第一系列实验[2] 展示了将 it-EA 应用于 OneMax 时，更新规则和超参数对变异率演化的影响。需要注意的是，本小节中的每幅图都是一次随机搜索启发式算法运行的结果。在接下来的分析中，对于每幅图，我们重点关注两个指标：峰值变异率，以及变异率高于 $p_{\min}$ 的持续时间，后者称为图的宽度。随后，我们将研究这两个指标与变化条件之间的关系。

图 1 显示，更新规则会影响变异率演化的尺度。it1-EA（局部 ML 更新）达到最高峰值和最大宽度。

图 2 展示了学习率的影响。峰值随学习率增加而升高，而宽度则随之减小。

图3展示了选定个体数量 μ 的影响。 μ 的值主要影响峰值变异率。 μ 的值越小，峰值变异率越大。

图 4 展示了种群规模 λ 的影响。 λ 的值主要影响图的宽度。 λ 的值越大，宽度越大。

在接下来的一系列实验中，我们研究仅通过 IGO 更新时突变率的收敛情况。为此，我们使用算法 1

[2]所有实验均使用 HNCO 框架 [16] 生成。

算法 1信息论进化算法。

输入参数：$(f, \lambda, \mu, p_0, \alpha)$
对 x 在 $\{0,1\}^n$ 上均匀采样
评估 $f(x)$
$p \leftarrow p_0$
循环
  对于所有 $k \in [1..\lambda]$ **执行**
    样本 $u^k \sim Q_p$
    $x^k \leftarrow x \oplus u^k$
    评估 $f(x^k)$
  结束循环
  $\sigma \leftarrow$ 排序$([1..\lambda], \preceq)$
  如果 $\sigma(\mu) \equiv \sigma(\mu+1)$ **那么**
    $K_2 \leftarrow [\sigma(\mu)]$
    $c \leftarrow \frac{\#\sigma([1..\mu]) \cap K_2}{\#K_2}$
  else
    $K_2 \leftarrow \emptyset$
    $c \leftarrow 0$
  结束条件判断
  $K_1 \leftarrow \sigma([1..\mu]) \setminus K_2$
  对于所有 $i \in [1..n]$ **执行**
    $\mathcal{L}_i \leftarrow \sum_{k \in K_1} x_i^k + c \cdot \sum_{k \in K_2} x_i^k$
    如果 $(2\mathcal{L}_i - \mu)(1-2p) > 0$ **则**
      $x_i \leftarrow 1$
    否则如果 $(2\mathcal{L}_i - \mu)(1-2p) < 0$ **则**
      $x_i \leftarrow 0$
    else
      在 $\{0,1\}$ 上均匀采样 x_i
    结束 if
  end for
  计算 $f(x)$
  $\widehat{p} \leftarrow \frac{1}{\mu} \cdot \sum_{k \in K_1} \frac{\|u^k\|}{n} + \frac{c}{\mu} \cdot \sum_{k \in K_2} \frac{\|u^k\|}{n}$
  $p \leftarrow p + \alpha \cdot (\widehat{p} - p)$
结束循环

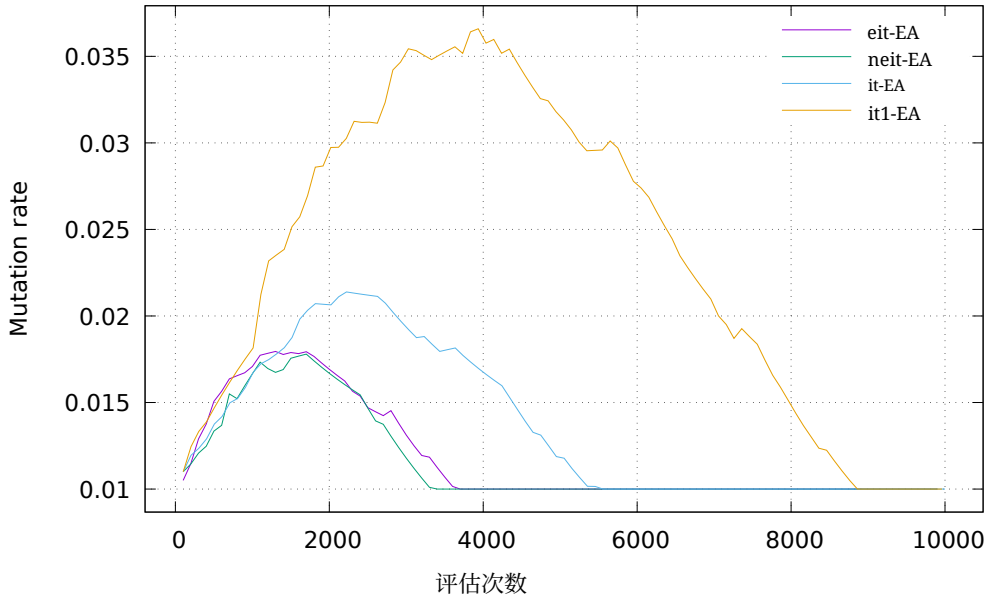

图1：更新规则对变异率演化的影响。it-EA 应用于 OneMax，参数为 $n = 100$、$\lambda = 100$、$\mu = 1$、$p_{\min} = p_0 = 0.01$ 和 $\alpha = 0.05$。

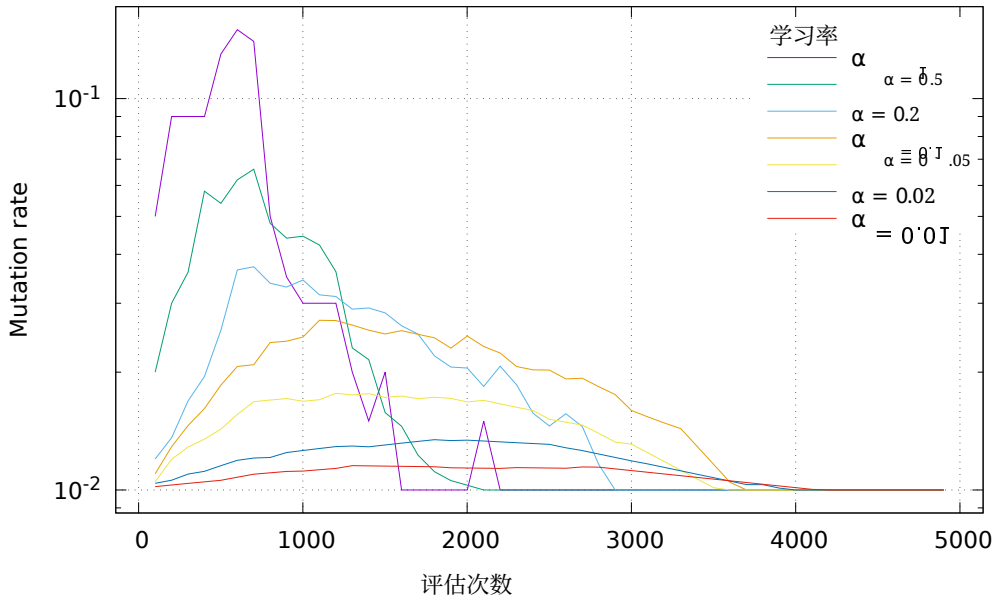

图2：学习率对变异率演化的影响。eit-EA 应用于 OneMax，参数为 $n = 100$、$\lambda = 100$、$\mu = 1$ 和 $p_{\min} = p_0 = 0.01$。纵轴采用对数刻度。

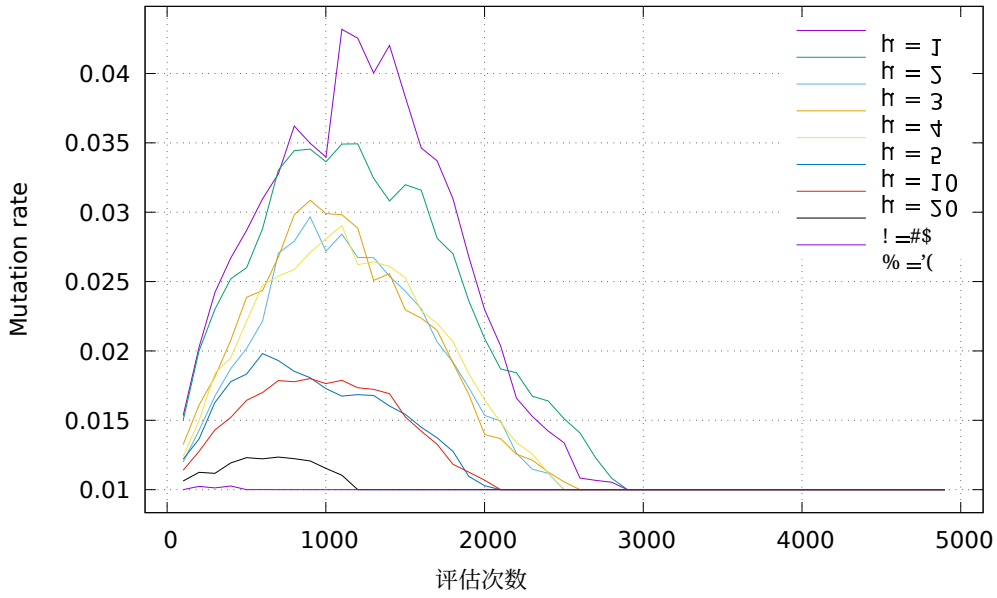

图 3: μ 对变异率演化的影响。将 eit-EA 应用于 OneMax，参数为 $n = 100$、$\lambda = 100$、$p_{\min} = p_0 = 0.01$ 和 $\alpha = 0.2$。

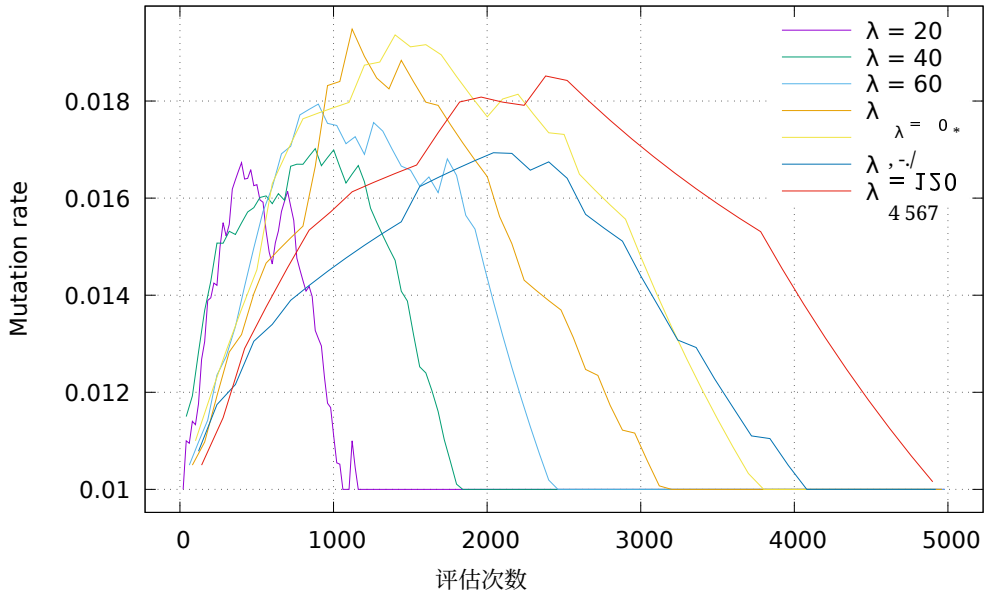

图 4: 种群规模 λ 对变异率演化的影响。将 eit-EA 应用于 OneMax，其中 $n = 100$、$\mu = 1$、$p_{\min} = p_0 =$0.01 和 $\alpha = 0.05$。

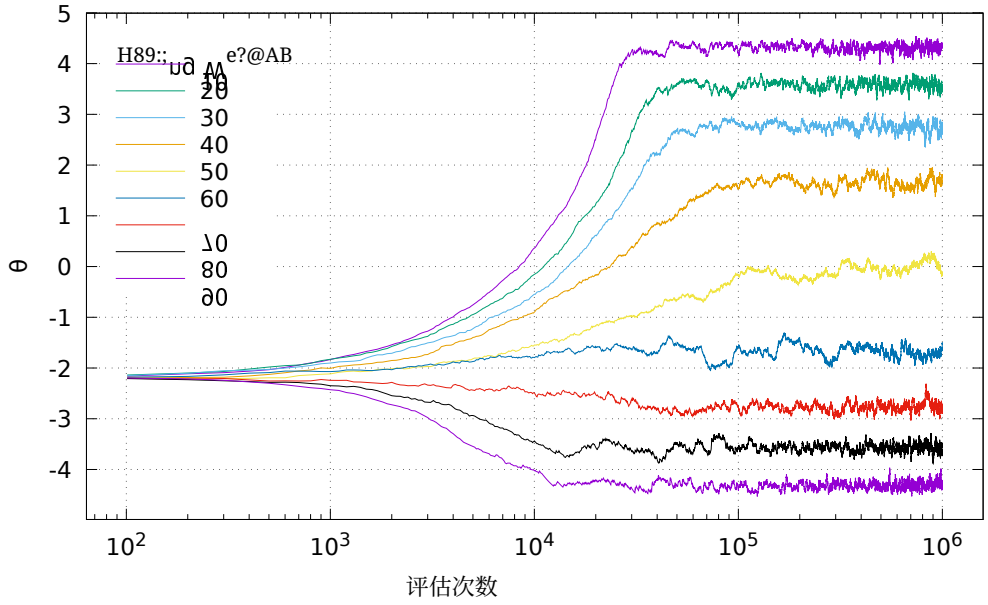

图 5：在从具有不同汉明重量的随机位向量开始的静态搜索中，$\theta = \text{logit}(p)$ 的演化。it-EA 应用于 OneMax，参数为 $n = 100$、$\lambda = 100$、$\mu = 1$、$p_0 = 0.1$、$p_{\min} = 0$、$p_{\max} = 1$ 和 $\alpha = 0.05$。横轴采用对数刻度。

不同之处在于，我们不在循环中更新中心。我们将此静态搜索应用于 OneMax，初始状态为具有不同汉明重量的随机位向量。我们不直接表示变异率 p，而是表示 $\theta = \text{logit}(p)$，以便更好地展示渐近值的范围。图 5 显示，变异率会收敛到与初始位向量的汉明重量密切相关的渐近值。汉明重量越大，渐近变异率越小。特别地，对于汉明重量为 50 的 100 位向量，θ 会收敛到 0，或者等价地，p 会收敛到 $1/2$。汉明重量关于 50 的对称性会映射为 θ 值关于 0 的对称性。

8.2 固定目标分析

在接下来的实验中，我们研究 $(1+\lambda)$ EA、2-rate $(1+\lambda)$ EA [12]，eit-EA 和 neit-EA 的经验运行时间（找到最大值之前的函数评估次数）。it-EA 和 it1-EA 已被证明比 $(1+\lambda)$ EA 慢，因此未纳入研究。对于所有算法，$\lambda = n/10$。对于 eit-EA 和 neit-EA，

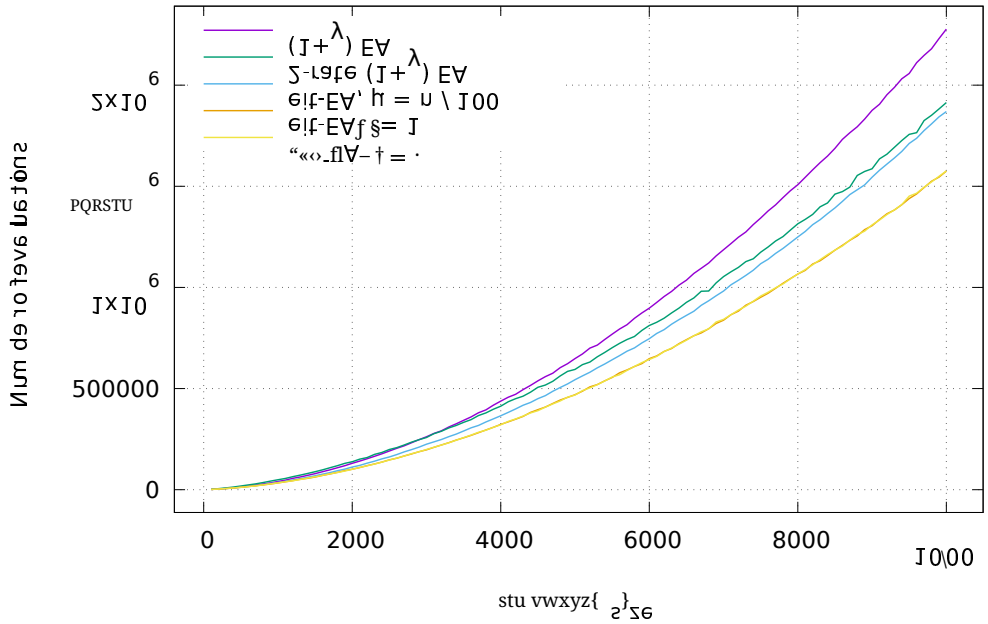

图 6：OneMax 上作为 n 函数的平均运行时间（100 次运行）。

$p_{\min} = p_0 = 1/n$ 和 $\alpha = 0.2$。对于 2-rate $(1+\lambda)$ EA，$p_0 = 1/n$，这对应于 [12] 中的 $r^{\text{init}} = 1$。

图 6 展示了 OneMax 在维度最高达到 $n = 10{,}000$ 时的平均运行时间（运行 100 次）。具有 $\mu = 1$ 的 eit-EA 和 neit-EA 性能相近。二者都比具有 $\mu = n/100$ 的 eit-EA 更快，而后者又比 $(1+\lambda)$ EA 更快。2-rate $(1+\lambda)$ EA 比具有$\mu = n/100$ 的 eit-EA 更慢，直到维度达到 $n = 10{,}000$；但数据表明，在超过某个维度后，它的速度会更快。2-rate $(1+\lambda)$ EA 与具有 $\mu = 1$ 的 neit-EA 的运行时间之比，随着维度 n 的增加而缓慢下降，并且在维度为 $n = 10{,}000$ 时约等于 1.22。具有 $\mu = 1$ 的 eit-EA 或 neit-EA 是否能够达到 2-rate $(1+\lambda)$ EA 的最优界，仍是一个开放性问题。

图 7 展示了 OneMax 上运行时间的标准差。与研究中的其他算法相比，使用 2-rate $(1+\lambda)$ EA 时，该标准差增长得更快。一种可能的解释是，在每次迭代中，2-rate $(1+\lambda)$ EA 都以概率 $1/4$ 将变异率乘以或除以 2。相比之下，在 it-EA 中，式 (8) 所隐含的变异率变化是平滑的。

图 8 展示了维度最高为 n =5,000 时（运行 100 次）在 LeadingOnes 上的平均运行时间。2-rate $(1+\lambda)$ EA 比本研究中的其他算法慢。带有 $\mu = 1$ 的 eit-EA 和 neit-EA 略快于 $(1+\lambda)$ EA。在 LeadingOnes 上，运行时间的标准差增大

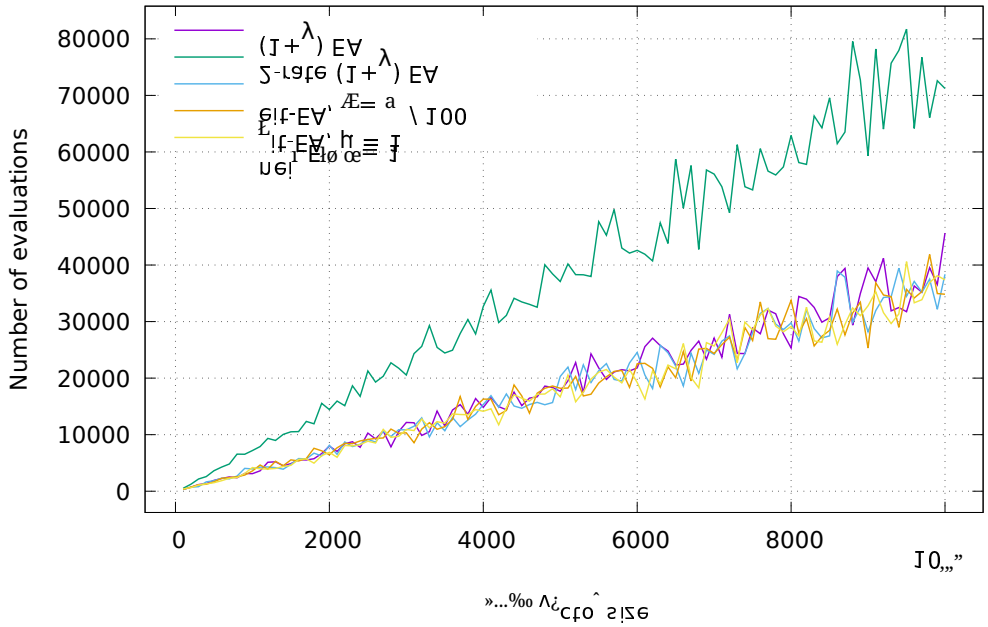

图 7：OneMax 上运行时间的标准差随 n 的变化（100 次运行）。

与本研究中的其他算法相比，2-rate $(1+\lambda)$ EA 的运行速度更快（未展示）。

9 结论

我们提出了一种针对比特向量的新型进化算法，即信息论进化算法（it-EA）。该算法依赖标准位变异和基于排名的选择，并完全以信息论的形式表述。变异率通过信息几何优化来控制。IGO 更新可以从选定个体的变异位频率角度得到清晰的解释。搜索分布的中心通过最大似然原理进行更新。ML 更新可以解释为一种多亲本交叉算子。采用局部 ML 更新的 it1-EA 可视为比特向量上的 CMA-ES 类似算法，尽管其参数更少。我们还考察了用于替换的精英选择（eit-EA）和非精英选择（neit-EA）。

一系列涉及 it-EA 的实验表明，IGO 更新对变异率是有效的。经验运行时间分析表明，在维度最高达 $n = 10{,}000$ 的 OneMax 上，使用 $\mu = 1$ 的 eit-EA 和 neit-EA 比 $(1 + \lambda)$ EA 甚至 2-

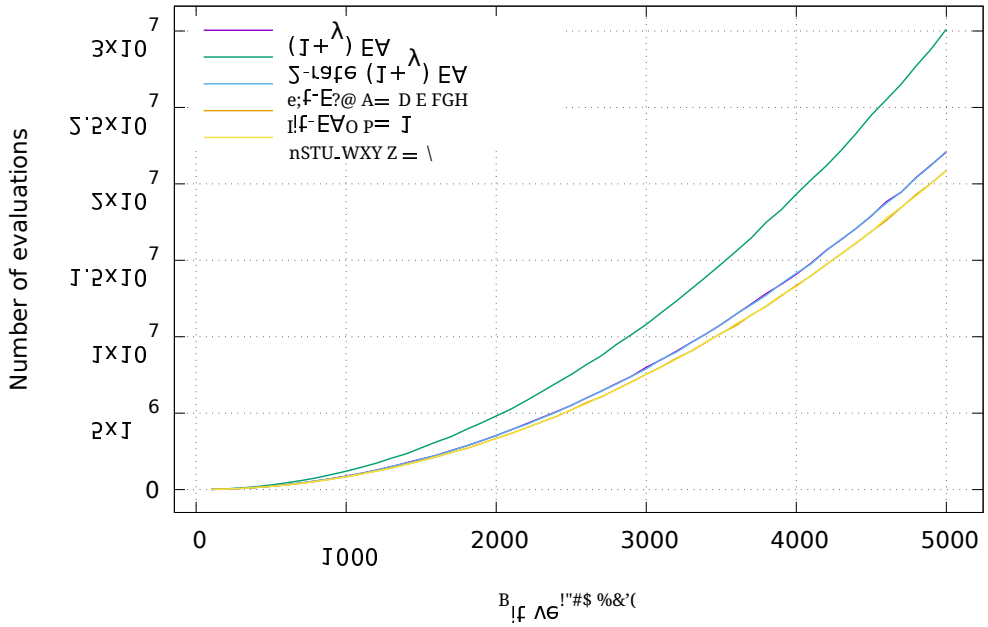

图 8：LeadingOnes 上的平均运行时间随 n 变化的情况（100 次运行）。$(1+\lambda)$ EA 与参数为 $\mu = n/100$ 的 eit-EA 的运行时间大致相同。

速率 $(1+\lambda)$ EA。在维度不超过 $n = 5{,}000$的 LeadingOnes 上，它们比 $(1+\lambda)$ EA 略快。

作为未来的工作，我们计划评估 it-EA 在 OneMax 和 Leading Ones 以外的测试函数上的表现。尤其应研究超参数对性能的影响。eit-EA 和 neit-EA 在 OneMax 上的理论期望运行时间是一个有趣的开放问题。除了 it-EA，IGO 更新（控制变异率）和 ML 更新（多亲本交叉）也可以应用于其他针对位向量的随机搜索启发式算法。更广泛地说，借助信息论，可以进一步深入探讨优化与学习之间的关系。

参考文献

[1] Aldeida Aleti 和 Irene Moser. 进化算法自适应参数控制方法的系统性文献综述。*ACM* 计算调查（*CSUR*），49(3):1–35，2016。

[2] Shun-Ichi Amari. 自然梯度在学习中高效发挥作用。神经计算，10(2):251–276，1998年2月。[3] Thomas Back. 变异率、选择与遗传算法自适应之间的相互作用。载于*1992*年第二届并行问题求解自然方法会议论文集。Elsevier Science Publishers，1992。[4] Shumeet Baluja 和 Rich Caruana. 从标准遗传算法中移除遗传机制。载于 Armand Prieditis 和 Stuart Russell 编，第*12*届机器学习年会论文集，第38–46页。Morgan Kaufmann，1995。[5] Arnaud Berny. 组合优化中的选择与强化学习。载于并行问题求解自然方法国际会议，第601–610页。Springer，2000。[6] J. S. De Bonet、C. L. Isbell 和 P. Viola. MIMIC：通过估计概率密度寻找最优解。载于神经信息处理系统进展，第9卷。MIT Press，丹佛，1996。[7] Luis DaCosta、Alvaro Fialho、Marc Schoenauer 和 Michèle Sebag. 利用动态多臂老虎机进行自适应算子选择。载于第*10*届遗传与进化计算年会论文集，GECCO '08，第913–920页，美国纽约州纽约，2008。美国计算机协会。[8] Pieter-Tjerk De Boer、Dirk P Kroese、Shie Mannor 和 Reuven Y Rubinstein. 交叉熵方法教程。运筹学年刊，134(1):19–67，2005。[9] Benjamin Doerr 和 Carola Doerr. 离散黑箱优化中的参数控制理论：通过动态参数选择获得可证明的性能提升。载于 Benjamin Doerr 和 Frank Neumann 编，进化计算理论：离散优化的最新进展，第271–321页。Springer International Publishing，Cham，2020。[10] Benjamin Doerr、Carola Doerr 和 Johannes Lengler. 具有可证明最优成功规则的自适应变异率。*Algorithmica*，第1–40页，2021。[11] Benjamin Doerr、Carola Doerr 和 Jing Yang. 具有自适应 k 的 k 位变异优于标准位变异。载于 Julia Handl、Emma

Hart、Peter R. Lewis、Manuel López-Ibáñez、Gabriela Ochoa 和 Ben Paechter（编），《自然问题并行求解——*PPSN XIV*》，第 824–834 页，瑞士沙姆，2016 年。Springer International Publishing。

[12] Benjamin Doerr、Christian Gießen、Carsten Witt 和 Jing Yang。带有自适应变异率的 $(1 + \lambda)$ 进化算法。载于《遗传与进化计算大会论文集》，GECCO '17，第 1351–1358 页，美国纽约州纽约，2017 年。美国计算机协会。[13] Nikolaus Hansen 和 Andreas Ostermeier。进化策略中任意正态变异分布的调整：协方差矩阵自适应。载于《*IEEE* 国际进化计算会议论文集》，第 312–317 页。IEEE，1996 年。[14]Nikolaus Hansen 和 Andreas Ostermeier。进化策略中完全去随机化的自适应。《进化计算》，9(2)：159–195，2001 年。[15] Mark Hauschild 和 Martin Pelikan。分布估计算法简介与综述。《群体与进化计算》，1(3)：111–128，2011 年。

[16] HNCO.https://github.com/courros/hnco. v0.22.

[17]Giorgos Karafotias、Agoston Endre Eiben 和 Mark Hoogendoorn。利用强化学习进行通用参数控制。载于*2014* 年遗传与进化计算年度会议论文集，GECCO '14，第 1319–1326 页，纽约，纽约州，美国，2014 年。美国计算机协会。

[18] Giorgos Karafotias、Mark Hoogendoorn 和 A. E. Eiben。进化算法中的参数控制：趋势与挑战。*IEEE* 进化计算汇刊，19(2):167–187，2015 年。

[19] S. Kullback。信息论与统计。Dover，1968 年。

[20] Pedro Larrañaga 和 Jose A Lozano。分布估计算法：进化计算的新工具，第 2 卷。Springer Science & Business Media，2001 年。[21] Luigi Malagò、Matteo Matteucci 和 Bernardo Dal Seno。从信息几何视角看分布估计算法：

边界分析。载于第十届遗传与进化计算年度大会论文集，GECCO ’08，第 2081–2088 页，美国纽约州纽约，2008 年。计算机协会。

[22] Luigi Malagò、Matteo Matteucci 和 Giovanni Pistone。论基于指数族的分布估计算法的几何学。载于第十一届遗传算法基础研讨会论文集，FOGA ’11，第 230–242 页，纽约，纽约州，美国，2011 年。美国计算机协会。[23] Heinz Mühlenbein。选择响应方程及其在预测中的应用。进化计算，5(3):303–346，1997 年。[24]Yann Ollivier、Ludovic Arnold、Anne Auger 和 Nikolaus Hansen。信息几何优化算法：通过不变性原理形成的统一图景。《机器学习研究杂志》，18(1):564–628，2017 年。[25] Ingo Rechenberg。进化策略，problemata 第 15 卷，1973 年。[26] Reuven Rubinstein。用于组合优化和连续优化的交叉熵方法。应用概率中的方法与计算，1(2):127–190，1999 年。[27] Dirk Thierens。用于分配算子概率的自适应追逐策略。载于第七届遗传与进化计算年度会议论文集，第 1539–1546 页，2005 年。[28] Marc Toussaint。关于信息几何与进化过程的札记。*arXiv* 预印本 *nlin/0408040*，2004 年。[29] Daan Wierstra、Tom Schaul、Tobias Glasmachers、Yi Sun、Jan Peters 和 Jürgen Schmidhuber。自然进化策略。《机器学习研究杂志》，15(1):949–980，2014 年。[30] Daan Wierstra、Tom Schaul、Jan Peters 和 Juergen Schmidhuber。自然进化策略。载于*2008* 年 *IEEE* 进化计算大会（*IEEE*计算智能世界大会），第 3381–3387 页，2008 年。