论单调汉明球景观

DOMINIC A. WILSON

美国俄亥俄州芬德利市芬德利大学，dominic.wilson@findlay.edu

本文提出单调汉明球景观（MHSL）：这类二元景观的适应度随其与唯一全局最优解之间的汉明距离增大而不增，而同一汉明球上的点则可任意排序。该类别包括 OneMax、所有具有唯一最优解的非递减单位计数函数，以及权重足够均衡的正线性函数。本文统计了一对一 MHSL（称为汉明球编码（HSE））的总数及其在超立方体对称性下的数量，并证明它们在所有景观中所占比例趋于零。对于精英式（1+1）进化算法，凡是不存在两个球层共享同一适应度值的 MHSL，其优化时间分布都与 OneMax 相同；结合已知结果可知，对于低于二分之一的变异率，这些景观是最容易的。对于采用锦标赛选择且不进行交叉的双个体遗传算法，也证明了相同的等价性和最优性；该算法在这些景观上的命中时间可归约为一个具有二次数量状态的马尔可夫链。随后，针对（1+1）进化算法和双个体遗传算法，在八种变异率、三种交叉算子及两种选择方案下，对全部 40,320 个一对一三位景观进行了评估。变异率低于二分之一时，最容易的对称类恰好是所有 HSE；高于二分之一时，它们则是最难的。HSE 之间的差异很小，源于选择方式以及变异和交叉所保持的超立方体对称性。针对性的五位实验同样发现，最快的景观属于 HSE 类。

CCS 概念：• 计算理论 → 随机搜索启发式理论；• 计算方法 → 遗传算法；
• 计算数学 → 马尔可夫过程。

其他关键词与短语：适应度景观、问题难度、汉明距离、单调函数、OneMax、马尔可夫链、遗传算法、对称性、表示

1 引言

适应度景观为理解进化算法（EAs）所面临的优化问题难度提供了基础框架（Malan 和 Engelbrecht，2013；Malan，2021）。进化计算中的一个核心问题是，哪些景观本质上容易或难以优化，以及原因何在。数十年来，关于崎岖度、欺骗性、中性和上位性的研究提出了许多难度度量；此外，一系列理论研究确定了简单进化算法最容易和最难优化的函数（Doerr、Johannsen 和 Winzen，2012年；Sudholt，2013；He、Chen 和 Yao，2015年）。目前仍缺乏清晰的认识：对于一组固定的适应度值，适应度值在超立方体上的排列如何决定带交叉操作的基于种群的算法所面临的难度。

本文研究**单调汉明球景观（MHSL）**，即适应度按照各点到唯一全局最优解 x* 的汉明距离排序的二元景观。与 x* 距离相同的点构成一个球层（以 x* 为中心的汉明球）。在 MHSL 中，球层上的每个点的适应度至少不低于距离最优解更远的任何球层上的点；该定义不限制同一球层内各点的排序。OneMax 就是一个熟悉的例子：球层上的所有点具有相同的适应度，而 MHSL 则允许在保持球层之间适应度排序的同时，任意安排同一球层内各点的顺序。

审稿中的预印本

当所有适应度值都不同时，MHSL 还通过位串定义了表型值的一种编码。我们将这一子类称为汉明球编码（HSE）。标准二进制编码和格雷编码在相同意义上也属于编码，尽管它们通常不是 HSE（Whitley，1999；Chakraborty 与 Janikow，2003a）。大多数表示研究固定一个表型层函数，并比较不同编码所诱导的景观。我们采取互补的观点：固定超立方体、算法和适应度值集合，考察哪些将值分配给位串的方式能够诱导出最容易的景观。对于本文穷举研究的三位问题，答案是 HSE 类；更大规模的实例则用于检验这一答案能够扩展到多远。

HSE 类的研究动机源于对全部 40,320 个三位景观进行穷举评估。在这些景观中，双个体遗传算法求解速度最快的既不是标准二进制编码，也不是格雷码编码：它们恰好且仅仅是 HSE。本文报告并解释这一观察，区分已有成果与新发现，并检验这一结论的适用范围。我们的贡献如下：

1. 我们区分 MHSL、球面分离 MHSL 和汉明球编码（HSE，即一一对应的情形），并将它们与单调函数和单位数函数联系起来（第 2 节）。 2. 我们枚举 HSE，给出用于计算不同邻域数量的轨道计数论证，并指出各算法分别由哪个对称群支配。同一论证还重新推导了 Chakraborty 和 Janikow（2003b）三位表格的结构（第 4 节）。 3. 我们证明，对于 (1+1) 进化算法，任何不存在两个球层共享同一适应度值的 MHSL，其命中时间分布都与 OneMax 相同。结合已有结果可知，对于低于 0.5 的变异率，这些景观是最容易的。我们还解释了为何变异率高于 0.5 时次序会反转（第 5 节）。 4. 我们证明，对于采用二元锦标赛选择且不进行交叉的双个体遗传算法，每个球面分离 MHSL 同样具有 OneMax 的距离链，并且当 $p < 0.5$ 时是最容易的景观；而采用均匀交叉时，所有 HSE 在 $O(n^3)$ 个状态上共享同一条马尔可夫链（第 5 节）。 5. 我们通过马尔可夫链分析双个体遗传算法 在全部 40,320 个三位景观上的表现。在所有测试设置中，无论采用适应度比例选择还是锦标赛选择、是否进行交叉，变异率低于 0.5 时最容易的类别恰好且仅仅是 HSE；而变异率高于 0.5 时，最难的类别则是（第 7 节）。 6. 我们通过选择机制和算子的对称性解释 HSE 类内部的差异：锦标赛选择消除了数值适应度值造成的差异（命题 3 和 4），均匀交叉保留了超立方体的完整对称性，而单点交叉引入了位置差异，将 6 个类别拆分为 18 个。在仅有变异的情况下，这些差异取决于相邻球层上数值的排列方式；这种影响在最靠近最优解的球层与其余球层之间符号相反（第 7.2 节）。

2 背景与定义

2.1 景观

令 n 为二元变量的数量，因此搜索空间为 $\{0,1\}^n$，包含 2^n 个点；令 $f : \{0,1\}^n \to R$ 为待最大化的适应度函数（不失一般性）。景观是有序对 $(\{0,1\}^n, f)$。它可以表示为 n 维超立方体，其顶点为位串，边连接汉明距离为 1 的位串；$f(x)$ 标记顶点 x。若 2^n 适应度值互不相同，则有 $(2^n)!$ 种分配方式，因此在三个位上共有 $8! = 40,320$ 种景观。全文中，适应度值均为整数 0、1、……、$2^n - 1$，且最优解的值为 $2^n - 1$。

2.2 汉明球与单调性

固定唯一全局最优解 x^*，并令 $d(x) = H(x, x^*)$ 表示 x 到它的汉明距离。距离为 k 的球是 $S_k = \{x : d(x) = k\}$，其中包含 $C(n,k)$ 个点，对于 $0 \le k \le n$。

定义 1（单调汉明球景观）。若适应度函数 f 满足对所有 x 和 y，

$$d(x) < d(y) \Rightarrow f(x) \ge f(y).$$

在强调允许球面间并列时，我们称之为**弱MHSL**。

定义 2（球面分离MHSL）。若一个 MHSL f 允许同一球层内出现适应度并列，但不同球层之间不允许，则称其为球面分离，即：

$$d(x) < d(y) \Rightarrow f(x) > f(y).$$

定义 3（汉明球编码，HSE）。HSE 是一种单射（一一对应）的 MHSL，其适应度值为 $\{0, ..., 2^n - 1\}$；单射性使其球面分离。

2.3 与已知类别的关系

单位数函数（适应度仅取决于 1 的数量）在关于 1^n 的每个球层上都是平坦的，这意味着每个球层上都只有一个适应度值。当 $x^* = 1^n$ 时，具有平坦球层的 MHSL 恰好是关于 1 的数量非递减且具有唯一最优解的单位数函数。这些函数构成 MHSL 的一个真子类。最大值不唯一的非递减单位数函数（例如 $f(x) = \min(|x|, n - 1)$）不是 MHSL。

OneMax 是一个属于 MHSL 的单位数函数示例。它具有球面分离性质，其中 $x^* = 1^n$，且 $f(x) = n - d(x)$，其所有球层都是平坦的。当单调步进函数和汉明距离的阈值函数被定义为具有唯一最优解时，它们属于弱MHSL。大海捞针中，$f(x^*) = 1$，而其他情况下 $f(x) = 0$，它是一个弱MHSL，其中除 S_0 外的每个球层都具有相同的适应度值。

对于 $x^* = 1^n$，每个球面分离MHSL都是严格单调伪布尔函数：如果 y 是通过将 x 中的一个 0 翻转为 1 得到的，那么 $d(y) < d(x)$，因此 $f(y) > f(x)$。反之则不成立，因为单调性只比较 1 位集合关系为嵌套的字符串，而 MHSL 比较的是与最优解距离不同的任意两个字符串。例如，BinVal 是严格单调的，但它赋予 1000 的值为 8，赋予 0111 的值为 7，尽管 0111 与最优解 1111 的距离为 1，而 1000 的距离为 3。MHSL 所施加的条件也多于单峰性。单峰景观只需让每个非最优点都有一个改进邻居，但仍可能包含长度呈指数增长的改进路径（Horn、Goldberg 和 Deb，1994）；而在球面分离MHSL中，任何移向更近球面的移动都会提高适应度，任何移向更远球面的移动都会降低适应度，这使适应度在全局上与距离保持一致，而不仅仅是排除非全局最优的局部最优解。这一区别对于本文中的比较十分重要。对于表型值 0、...、$2^n - 1$，标准二进制编码、反射格雷编码以及每个 HSE 在单比特翻转下都会诱导出只有一个局部最优解的景观：在 HSE 中，每个非最优点在下一个更近的球面上都有一个适应度更高的邻居；在标准二进制编码下，翻转最高位的 0 会提高所表示的值；而在反射格雷编码下，每个非最大值都有一个与其汉明距离为 1 的后继。因此，局部最优解的数量无法区分它们，而它们的期望命中时间却有所不同（第 7.6 节）。

MHSL 也与正线性函数类 $f(x) = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i$ 非平凡地相交，其中 $w_i > 0$。当且仅当对于每个 $k < n$，$k + 1$ 个最小权重之和至少等于 k 个最大权重之和时，这样的函数才是弱MHSL。当这些不等式均为严格不等式时，它是球面分离的。等价地，每个具有 $k + 1$

个 1 位的解，其适应度必须至少与每个具有 k 个 1 位的解相同，并且在球面分离情形下适应度严格更高。由于权重为正，最优解是 1^n。等权重给出 OneMax。

球面分离的一个简单充分条件是，每个权重都小于最小权重的 $n/(n-1)$ 倍，即 $w_{max} < n \cdot w_{min}/(n-1)$：这样，最小的 $k+1$ 个权重之和至少为 $(k+1)w_{min} > k \cdot w_{max}$，从而对每个 $k < n$，都能界定最大的 k 个权重之和。权重 1、1 和 1.5 满足精确条件，但不满足充分条件；而 BinVal 的指数递增权重（当 $n = 3$ 时为 1、2 和 4）在 $k = 1$ 处不满足该条件。

若干标准基准函数并非MHSL。LeadingOnes 仅弱单调，因此给 0111 的适应度低于 1000，尽管 0111 比 1000 更接近最优解 1111。Jump、Cliff 和陷阱函数在构造上就违反球面顺序，而 Trap 是其中违反程度最大的函数（第7节.3）。Lengler 和 Riedi 提出的 Dynamic BinVal 是一种时变线性函数，同样不属于这一类。单调函数已得到深入研究（Doerr、Jansen、Sudholt、Winzen 和 Zarges，2013；Lengler，2020）；MHSL 的独特之处在于球面内部的自由排序，这正是第4节和第7节所研究的对象。

3 相关工作

景观结构与难度。景观隐喻可追溯至 Wright（1932）。在进化计算中，可调节景观（如 NK 模型（Kauffman，1993）和欺骗函数（Goldberg，1987））展示了上位性和误导性梯度如何增加搜索难度，而局部最优网络则描绘了导致这一问题的吸引域（Ochoa、Tomassini、Vérel 和 Darabos，2008）。Jones 和 Forrest（1995）提出了适应度—距离相关性（FDC），即适应度与到最优解的距离之间的相关性，并将其作为预测遗传算法难度的指标。Malan 和 Engelbrecht（2013）以及 Malan（2021）综述了此后提出的多种景观度量。MHSL 是适应度顺序与球面顺序完全一致的景观；FDC 衡量的正是这种一致性的平均程度。第 7.4 节使用其秩版本来衡量一个景观与该类别的差距。

最简单与最困难函数。对于（1+1）进化算法，OneMax 是具有唯一最优解的函数中最容易的（Doerr 等人，2012；Sudholt，2013）。He、Chen 和 Yao（2015）刻画了具有共同最优解的函数类别中，针对精英式（1+1）进化算法的最简单与最困难函数：当函数的适应度顺序与期望命中时间的顺序一致时，该函数最容易；当顺序相反时，该函数最困难，由此得到欺骗性（陷阱型）函数。他们还指出，最容易的函数取决于算法。Kaufmann、Larcher、Lengler 和 Zou（2025）表明，OneMax 在缩短与最优解的距离方面最容易，但在找到适应度改进步骤方面并非如此。单峰性本身并不能使函数变得容易：有些单峰函数需要指数级时间（Droste、Jansen 和 Wegener，2002）。Lehre（2010）的负漂移方法适用于非精英种群，Doerr（2021）对其进行了简化；该方法在变异率、选择和繁殖率满足相关条件时，确立了指数级下界。第 5 节将 MHSL 纳入这一理论，并将最容易函数的结论扩展到采用锦标赛选择的双个体遗传算法；第 7 节则考察该结论未涵盖的设置，包括适应度比例选择和交叉。

马尔可夫模型与表示。简单遗传算法的有限马尔可夫链模型（Nix & Vose，1992；Vose，1999）可通过解析方法确定小规模问题的期望命中时间。Chakraborty 和 Janikow（2003a，2003b）利用这些模型，对全部 40,320 个三位函数中的二进制编码与格雷编码进行了比较，采用双个体种群；结果发现整体差异不大，这与无免费午餐定理对所有函数进行比较时的预测一致（Wolpert & Macready，1997）；Whitley（1999）以及 Rowe、Whitley、Barbulescu 和 Watson（2004）则指出了格雷编码确实占优的函数类别。对小规模问题进行穷举或近乎穷举的马尔可夫链研究，可追溯至 Goldberg 和 Segrest（1987）、De Jong、Spears 和 Gordon（1995），以及 Spears 和 De Jong（1997）；Rana 和 Whitley（1997）则统计了所有小规模函数在二进制邻域和格雷邻域下的局部最优解数量。我们的方法沿用了这些研究。不同之处在于

我们提出的问题是：不再比较两种固定编码在所有函数上的表现，而是考察固定一组适应度值的哪些编码表现最佳。因此，要进行有意义的平均情况表示比较，就必须将研究范围限制在结构化的函数子集上，因为对所有函数进行均匀平均时，各种表示都是等价的（Radcliffe & Surry，1995）。Whitley 和 Rana（1997）以定义邻域中的局部最优解数量为条件，证明格雷编码平均而言产生的局部最优解少于标准二进制编码；而我们的穷举研究发现，适应度顺序与汉明距离之间的一致性，是最容易的编码所共有的结构。

表示等价性。Rowe、Whitley、Barbulescu 和 Watson（2004）将两个编码之间仅相差超立方体的一个自同构称为位等价，并证明位等价性保持邻域结构以及沃尔什系数的大小。第 4 节针对随机搜索对此进行了细化：在均匀初始分布下，能够保证具有相同期望命中时间的编码，是整个转移核所保持的自同构子群的轨道；因此，改变交叉算子会改变同一个超立方体上哪些编码彼此等价。

对称性。Rowe、Vose 和 Wright（2002、2004、2010）描述了交叉和变异何时与作用于搜索空间的群可交换，以及哪些算子能够使进化算法在表示变更下保持不变。第 4.2 节将其应用于期望命中时间，并借此解释三位结果的结构。

4 汉明球编码的枚举与对称性

4.1 计数

命题 1。 n 位上 HSE 的数量为

$$E_n = 2^n \cdot \prod_{k=0..n} C(n,k)!,$$

而在超立方体的对称性下彼此不同的 HSE 数量为 $\prod_k C(n,k)! \,/\, n!$。

证明。 固定 x^* 后，分配给 S_k 的适应度值已确定（即紧邻 S_{k-1} 适应度值之下的 $C(n,k)$ 个值），这些值可在 S_k 内以 $C(n,k)!$ 种方式排列，且各个球之间互不影响。最优解可以放置在任意一个 2^n 顶点上。超立方体的自同构群 B_n（由比特置换与按位异或掩码复合而成）的阶为$2^n \cdot n!$，并将 HSE 映射为 HSE。由于适应度值各不相同，只有恒等变换能够固定一个景观，因此该作用是自由的，每个轨道都包含 $2^n \cdot n!$ 个元素。■

当 $n = 3$ 时，共有 288 个 HSE，构成表1所列的 6 个类别；全部 40,320 个景观中，HSE 占 0.71%。当 $n = 4$ 时，共有 6,635,520 个 HSE，分属 17,280 个类别，占全部 16! 个景观的 3.2×10^{-7}；当 $n = 5$ 时，这一比例为 2.3×10^{-17}。HSE 的数量呈双指数增长（附录 B），但所有景观的数量也同样如此。更有意义的说法是，HSE 在所有景观中所占的比例趋近于零。

表1列出了 $n = 3$ 对应的六种 HSE 类编码：十进制标签为 r 的行给出了赋值为 r 的比特串。为了比较，还展示了标准二进制编码和二进制反射格雷编码（BRGC）。六种编码都将数值 1、2 和 3 分配给含一个 1 的比特串，将数值 4、5 和 6 分配给含两个 1 的比特串；它们的区别仅在于中间球层内部的顺序。

表1：标　准二进制编码、二进制反射格雷码，以及 n = 3 时汉明球编码的 6 个类别。每个类别包含 288 种 HSE 中的 48 种。

十进制标签	标准二进制	Gray（BRGC）	HSE1	HSE2	HSE3	HSE4	HSE5	HSE6
0	000	000	000	000	000	000	000	000
1	001	001	001	001	001	001	001	001
2	010	011	010	010	010	010	010	010
3	011	010	100	100	100	100	100	100
4	100	110	011	101	011	110	101	110
5	101	111	101	011	110	011	110	101
6	110	101	110	110	101	101	011	011
7	111	100	111	111	111	111	111	111

4.2 算法遵循哪些对称性?

上述计数使用了完整的群 B_n，但算法不必将 B_n 中的所有元素一视同仁。令 G 为 $\{0,1\}^n$ 的一个排列群，它通过 $(g\cdot f)(x) = f(g^{-1}x)$ 作用于景观。

引理 1. 假设变异核和交叉核与每个 $g \in G$ 都可交换（例如 $M(gx, gy) = M(x, y)$），选择仅取决于适应度值，且初始种群均匀抽取。那么对于每个 $g \in G$，f 和 $g\cdot f$ 的最优解期望命中时间相同。

证明概要. 对每个个体应用 g，会将 f 的种群映射为 $g\cdot f$ 的种群，将一个马尔可夫链的转移概率对应到另一个链的转移概率，将吸收集（包含 x^* 的种群）映射到 $g\cdot f$ 的吸收集（包含 gx^* 的种群），并保持均匀初始分布。因此，基本矩阵彼此仅相差一个置换。这就是 Rowe 等人（2002, 2010）不变性结果的命中时间形式。■这里有两个重要的群。按位变异和均匀交叉与 B_n 中的所有变换都可交换（阶为 $2^n \cdot n!$，当 $n = 3$ 时为 48）。单点交叉取决于哪些位彼此相邻，因此在位排列中，它仅与恒等变换和位序反转可交换；再结合异或掩码，可得到阶为 2^{n+1} 的子群 H_n（当 $n = 3$ 时为 16）。对于三位情形，在 B_3 的作用下，40,320 个景观形成 840 个轨道；在 H_3, 的作用下形成 2,520 个轨道，而 6 个 HSE 类分裂为 18 个 H_3 类。选择还带来值对称性：基于排名的选择、二元锦标赛和精英式（1+1）进化算法在适应度值的任何保序变换下均保持不变，而适应度比例选择则不然。第 7.2 节通过数值计算验证了这些预测。

4.3 Chakraborty 和 Janikow 的三位表

同样的推理也能解释 Chakraborty 和 Janikow（2003b）的表。他们的表 3 报告称，在二进制邻域和格雷邻域下，具有 1、2、3 和 4 个局部极小值的函数数量相同（8,640、24,480、5,760 和 1,440）。这无需进行实验。双射编码只会对全部 8! 个函数进行排列，而格雷编码会将二进制超立方体映射到格雷超立方体，因此极小值数量分布必定相同。

他们的表 4 根据整数（环）、格雷码和二进制邻域中的局部极小值数量，将函数分为 26 类。我们重新计算了全部 26 类的大小（附录 C，表 10），每一类的大小都能被 16 整除。原因在于存在一个自由作用的 16 阶群。在位置侧，同时构成环、二进制超立方体和格雷超立方体自同构的 $\{0, ..., 7\}$ 的排列组成克莱因四元群 $\{x, x \oplus 3, x \oplus 4, x \oplus 7\}$。在取值侧，交换取值 1 和 2，或 7 和 8，始终不会改变哪些点是局部极小值：1 始终是极小值；2 是极小值，当且仅当它不与 1 相邻；而 7 和 8 永远不可能是极小值。它们的胜场数（格雷码相对于二进制）

只能被 4 整除。他们的遗传算法采用适应度比例选择，该方法取决于实际取值，因此只有位置对称性得以保留。

5 （1+1）进化算法与锦标赛遗传算法的 ONEMAX 等价性及归约

5.1 （1+1）进化算法

考虑以概率 $p \in (0, 1)$ 进行标准位变异的精英式（1+1）进化算法；只要 $f(y) \geq f(x)$，该算法便用子代 y 替换当前点 x。

命题2。对于任意以最优解 x^* 为中心的球面分离MHSL，（1+1）进化算法的距离过程 $D_t = d(X_t)$ 是一条马尔可夫链，其转移概率与 OneMax 上的相同。特别地，从任意具有相同距离的起点出发，优化时间的分布都与 OneMax 上的相同。

证明。设 $d(x) = d$。按位变异在保持 x^* 不变的立方体对称性下具有不变性，因此，子代位于距离 d' 处的概率仅取决于 d 和 d'，并且对所有景观都相同。若 $d' < d$，则子代严格更优，因而会被接受，这与 OneMax 上相同。若 $d' > d$，则子代严格更差，因而会被拒绝，这与 OneMax 上相同。若 $d' = d$，则子代可能被接受，也可能不被接受，但无论如何距离都不变。因此，给定过去的情况，D_{t+1} 的分布仅取决于 D_t，且其转移核与 OneMax 上的相同。■

推论1. 对于 $p < 0.5$，在最优解相同的函数中，每个球面分离MHSL 都是 (1+1) 进化算法下最容易的函数。

证明. 根据命题2，从 x 出发的期望命中时间 G(x) 等于距离 d(x) 处 OneMax 的值 g(d(x))。根据下文的引理2，当 $p < 0.5$ 时，g 严格递增。因此，$G(x) < G(y)$ 意味着 $d(x) < d(y)$，进而意味着 $f(x) > f(y)$，所以 He 等人（2015，定理1）的最容易函数判据适用。■

推论1中的“最容易”指期望优化时间最短，这是 Doerr等人（2012）和 He等人（2015）采用的含义。Kaufmann等人（2025）指出，在另一种含义下，OneMax 并非最容易：对于采用自适应种群规模的 $(1, \lambda)$ 进化算法，关键在于子代提升适应度的概率，而其他函数更容易找到改进解。他们的观察与推论1并不矛盾：在球面分离MHSL上，每次移向更近球面的移动都会提升适应度，每次移向更远球面的移动都会降低适应度，这与 OneMax 一样；不过，球面内部的移动顺序可能有所不同。两种“容易程度”的概念衡量的只是不同方面。

引理2。令 g(d) 表示从距最优解距离为 d 的点出发，在 OneMax 上采用变异率为 p 的（1+1）进化算法的期望优化时间。若 $p < 0.5$，则 $g(0) < g(1) < \ldots < g(n)$。若 $p = 0.5$，则 g 在 $\{1, \ldots, n\}$ 上为常数。当 $p > 0.5$ 时，单调性可能不成立（见表 3 及下文的说明）。

证明。固定 $0 \leq d < n$，令 x 的距离为 d，并令 y 是将 x 中一个正确位 i 翻转后得到的，因此 y 的距离为 $d + 1$。用 W 表示 x 中错误的 d 个位，用 R 表示 x 中除 i 以外的 $n - d - 1$ 个正确位。令 S 为施加于 x 的变异掩码，S' 为施加于 y 的掩码。我们按如下方式将它们耦合：在除 i 以外的每个位上，$S' = S$；在位 i 上，两个掩码至多有一个会翻转 i：S 单独翻转的概率为 p，S' 单独翻转的概率为 p，二者都不翻转的概率为 $1 - 2p$。当且仅当 $p \leq 0.5$ 时，这种耦合有效，并且两个掩码各自具有正确的边际分布。令 $a = |S \cap W|$，$b = |S \cap R|$。选择之前，x 和 y 变异后子代的距离分别为 $d^{prop}(x) = d - a + b + [i \in S]$ 和 $d^{prop}(y) = d + 1 - a + b - [i \in S']$。由于在该耦合下 $[i \in S] + [i \in S'] \leq 1$，我们逐路径有 $d^{prop}(x) \leq d^{prop}(y)$，这说明当 $p \leq 0.5$ 时，无约束变异距离核是随机单调的。在 OneMax 上采用精英选择时，当且仅当子代距离不超过其亲本距离时，该子代才会被接受，因此新距离为 $D_x = \min(d, d^{prop}(x))$ 和 $D_y = \min(d + 1, d^{prop}(y))$。由于 $d \leq d + 1$ 且 $d^{prop}(x) \leq d^{prop}(y)$，可立即推出在所有情况下 $D_x \leq D_y$。因此，精英距离链的一步转移核也是随机单调的：从较大的距离出发

下一距离随机地更大。对于随机单调链，可以将从 d 和从 d + 1 出发的运行耦合，使得在任意时刻，后者都不会比前者更接近 0（Lindvall，1992，第 IV 章）；因此，从 d + 1 到 0 的命中时间逐路径地至少与从 d 出发的命中时间一样长，且 g(d) ≤ g(d + 1)。当 p < 0 .5 时，若要证明严格性，考虑 S 恰好翻转 W 中各位且两个掩码都不翻转 i 这一事件；该事件发生的概率为正。在此事件下，从 d 出发的运行第一步即被吸收，而从 d + 1 出发的运行则不会。在这一事件中，两个首次命中时间严格不同；而在该耦合下，从 d + 1 出发的命中时间绝不会更短；因此，期望命中时间严格不同，故 g(d) < g(d + 1)。当 p = 0.5 时，无论亲本为何，子代都是均匀分布的，因此 g 在 0 以外为常数。当 p > 0.5 时，这种耦合不再存在。■

对于 n ≤ 14 ，数值检验与已证明的单调性一致（p ≤ 0 .5），而在 p = 0.51 时出现了反例（具体来说，n = 3 时）。

以下有三点说明。第一，球面间并列很重要：在球面间存在并列的弱MHSL上，距离更远但适应度相同的子代会被接受，因此 (1+1) 进化算法可能逐渐远离最优解，并且与 OneMax 的等价性不再成立。这正是球面间中性（而非球层内部的自由排序）会使 MHSL 更难的确切含义。第二，当 p > 0.5 时，OneMax 的期望命中时间会随距离增加而减少（对于 n = 5 且 p = 0.65，命中时间从距离为 1 时的 102.5 步降至距离为 5 时的 87.5 步），因为此时变异很可能落在亲本补集附近。于是，He等人的判据发生逆转，而第 7.5 节表明 HSE 成为最难景观。第三，在我们的三位数据中，当 p < 0.5 时，所有非 HSE 景观的速度都严格慢于 HSE，这表明其逆命题：

猜想 1. 对于 p < 0.5，只有当具有唯一最优解的单射景观是汉明球编码时，它才能从每个起始点达到与 OneMax 相同的期望命中时间。

5.2 不使用交叉的锦标赛选择

只要选择仅比较适应度值，该论证就适用于第 6 节中的遗传算法。将种群表示为 (x, y)，并令 D_t 为 (d(x), d(y)) 按递增顺序排列后得到的距离对。二元锦标赛以有放回的方式抽取两个个体，并保留适应度较高者，因此种群中适应度较高的个体被选中的概率为 3/4；若两者适应度相同，则各自被选中的概率为 1/2。

命题 3. 考虑采用二元锦标赛选择和以 p ∈ (0, 1) 为概率进行按位变异的双个体遗传算法。在不进行交叉的情况下，对于每个球面分离MHSL，该过程 D_t（种群的排序距离对）是一个马尔可夫链，其转移概率与 OneMax 上的相同；它有 (n + 1)(n + 2)/2 个状态。对于具有相同约化状态的初始种群，该类中所有景观的期望命中时间均相同；因此，对均匀分布的初始种群取平均时，期望命中时间也相同。

证明。在球面分离MHSL上，d(x) < d(y) 意味着 f(x) > f(y)，因此每次亲本抽取以 3/4 的概率选择距离更近的成员，以 1/4 的概率选择距离更远的成员；当 d(x) = d(y) 时，抽取可能偏向任一成员，但二者的距离相同。变异在保持 x* 不变的立方体对称性下具有不变性，因此突变体的距离仅取决于其亲本的距离，并且两个子代个体独立进行变异。因此，给定过去信息时，D_{t+1} 的分布仅通过 n 和 p 取决于 D_t，而运行恰好在 $\min D_t = 0$ 时停止。最后，在均匀初始种群下，对于具有唯一最优解的每个景观，D0 的分布都相同。■

5.3 均匀交叉

命题 4。考虑采用二元锦标赛选择和均匀交叉的双个体遗传算法，其交叉率为 $p_c > 0$，并以 p ∈ (0, 1) 的速率进行按位变异。在每个 HSE 上，令 C_t 表示三元组 (c11, c10, c01) 在交换 c10 和 c01 下的等价类，并通过取 c10 ≤ c01 进行规范表示，其中 c11 表示两个个体均不同于 x* 的位置数，c10 表示仅第一个个体不同的位置数，c01 表示仅第二个个体不同的位置数。则 C_t 是一个马尔可夫

链，在每个 HSE 上具有相同的转移概率；其状态数至多为 $(n+1)(n+2)(n+3)/6$。对于具有相同约化配置状态的初始种群，其期望命中时间在每个 HSE 上都相同，因此对均匀分布的初始种群取平均时也相同。

证明。 固定 x^* 的比特置换会在具有给定配置的有序对上作传递作用，而均匀交叉和变异与这些置换可交换，因此，两个子代个体的配置等价类仅取决于选定亲本的有序配置；此外，由于均匀交叉和按位变异对两个亲本一视同仁，交换两个亲本也不会改变该等价类。在 HSE 上，不同字符串之间不存在适应度并列，因此，当前种群中适应度较高的个体被选中的概率为 3/4，适应度较低的个体被选中的概率为 1/4；于是，分别以 9/16、6/16 和 1/16 的概率发生较高适应度个体的同质交配、两个个体的异质交配以及较低适应度个体的同质交配。两种有序混合父代对各自出现的概率为 $(3/4)(1/4) = 3/16$，因此，异质交配的总概率为 6/16。以 $1 - p_c$ 的概率不进行交叉，而是直接复制选定亲本，再进行变异；此分支同样仅取决于其规范配置，且交换两个亲本不会改变结果。

在规范表示 $C_t = (c11, c10, c01)$ 中，当 $c10 \le c01$ 时，距离为 $c11 + c10$ 的成员严格更近，因此只要 $c10 < c01$，它的适应度就严格更高；所以三种交配类型对应的规范父代配置分别为 $(c11 + c10, 0, 0)$、C_t 和 $(c11 + c01, 0, 0)$。当 $c10 = c01$ 时，两个成员的距离相同，均为 $d = c11 + c10$；同质交配从任一距离相等的成员产生相同的规范父代配置 $(d, 0, 0)$，而异质交配对应的规范父代配置为 C_t，并且均匀交叉在交换其父代个体时保持不变。因此，尽管不同的 HSE 可能会颠倒同一球面上两个成员的适应度排序，但这种颠倒只是交换“适应度较高”和“适应度较低”的标签，不会改变规范子代配置分布。由此，C_{t+1} 的分布在所有情况下都只取决于 C_t。若不将交换两个成员后相关的配置视为相同，则满足 $c11 + c10 + c01 \le n$ 的非负三元组数量为 $\binom{n+3}{3} = \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{6}$；规范排序只会减少这一数量。最后，在均匀初始种群下，$C0$ 的分布对所有 HSE 都相同。■

命题 3 解释了为什么在不使用交叉的锦标赛选择下，所有球面分离MHSL（包括所有 HSE）都具有相同的约化链命中时间。它也使得对任意 n 都能计算锦标赛遗传算法：完整链有4^n 个状态，命题 3 的约化链有 $O(n^2)$ 个状态，而命题 4 的约化链有 $O(n^3)$ 个状态。当 $p = 1/n$ 时，命题 3 的链在 $n = 5$ 时需要 15.0 代，在 $n = 10$ 时需要 181 代，在 $n = 20$ 时需要 1.6×10^4 代，在 $n = 40$ 时需要 1.3×10^8 代。计算值随 n 快速增长，这与相关非精英种群模型中已知的指数级行为一致（Lehre，2010；Doerr，2021）。

命题 4 不适用于球内并列：出现并列时，混合亲本对出现的概率为 1/2，而非 3/8，因此链会发生变化。这是论文中唯一一个球内并列会影响与 OneMax 比较结果的情形。可能的机制是，交叉可以组合来自同一球层两个成员的正确位，而并列则使此类亲本对被选中的频率更高。在 OneMax 上，每个球层都是一个并列；当 $n = 5$、$p = 0.05$ 且 $p_c = 0.8$ 时，采用均匀交叉的锦标赛遗传算法需要 26.85 代，而在每个 HSE 上需要 27.55 代；采用单点交叉时分别需要 26.93 代和 27.59 代。正如命题 3 所述，不使用交叉时两者则相同。

5.4 球面分离MHSL的最优性

引理 3。 令 $h(d1, d2)$ 表示从 $(d1, d2)$ 出发的期望命中时间；当 $\min(d1, d2) = 0$ 时，$h(d1, d2) = 0$。状态空间由满足 $0 \le d1 \le d2 \le n$ 的有序数对 $(d1, d2)$ 组成。对于 $p \le 0.5$，h 在该状态空间中对每个坐标均为非递减函数。对于每个非吸收态 $d = (d1, d2)$，h 满足一步方程 $h(d) = 1 + E_{MHSL}[h(D_{t+1}) \mid D_t = d]$。

证明。 设 (a1, a2) ≤ (b1, b2) 在状态空间内按逐坐标序排列，并从这两个状态出发，利用耦合随机性运行两条马尔可夫链的副本。每次抽取亲本时，两条副本都使用同一个均匀变量，以决定选择较近还是较远的个体，因此，第二条副本中的每个亲本都至少与第一条副本中对应的亲本一样远。每个子代都通过无约束变异距离核的单调耦合产生；当 $p \le 0.5$ 时该耦合存在，因为该核是随机单调的（如引理2的证明所示；Lindvall，1992），因此第二条副本中的每个子代都至少与第一条副本中对应的子代一样远。排序会保持逐坐标序，并使状态仍处于边界范围内。因此，每一代都保持这一序关系，所以第一条副本达到 $\min D = 0$ 的时间不会晚于第二条副本，且 $h(a1, a2) \le h(b1, b2)$。同样的耦合也可以比较选择强度 $q \le q'$。令 U 在 (0, 1) 上均匀分布，并令 q-马尔可夫链在 $U \le q$ 时选择较近的个体，q'-马尔可夫链在 $U \le q'$ 时选择较近的个体；于是，q'-马尔可夫链选出的亲本与最优解的距离绝不会大于 q-马尔可夫链选出的亲本。再对每对对应的子代分别应用单调变异耦合并进行排序，可保持逐坐标序，因此当 $p \le 0.5$ 时，预期时间随 q 增大而不增。 ■

定理1。设 $p < 0.5$，且 g 是定义在 $\{0, 1\}^n$ 上、具有唯一全局最优解 x* 的任意景观。对于采用二元锦标赛选择且不进行交叉的双个体遗传算法，从任意初始种群 (x, y) 到达 x* 所需的期望代数至少为 h(d(x), d(y))，即在任意球面分离MHSL上、从距离相同的种群出发时所对应的值。由此可得两个结论。在最优解相同的景观中，每个球面分离MHSL都能使从任意初始种群出发的期望命中时间最小化。对于均匀分布的初始种群，排序距离对 D0 在所有具有唯一最优解的景观上具有相同的分布，因此，在所有这类景观中，无论它们的最优解位于何处，每个球面分离MHSL也都能使平均期望命中时间最小化。

证明。设 (X_t, Y_t) 为景观 g 下第 t 代的种群，其滤子为 F_t；设 D_t 为其排序距离对；并令 K(d, ·) 表示亲本距离为 d 的突变体距离的分布律；当 $p < 0.5$ 时，该分布随 d 在随机序意义下递增（引理2）。在景观 g 上，若种群的排序距离为 $d1 \le d2$，且 $d1 < d2$，则亲本抽取以概率 $q \in \{1/4, 1/2, 3/4\}$ 选中距离较近的个体，具体取决于它的适应度较低、相同还是较高。若 $d1 = d2$，则两个候选亲本的突变距离均服从 K(d1, ·)，因此它们的适应度顺序与子代距离分布无关（等价于 $q = 1/2$）。在球面分离MHSL上，只要 $d1 < d2$，便有 $q = 3/4$。在给定 F_t 的条件下，每个子代的距离因此服从 qK(d1,
·) + (1 − q)K(d2, ·)，当 $d1 < d2$ 时关于 q 随机递减，而当 $d1 = d2$ 时与 q 无关。通过其距离分布的一维随机序，将 g 下的每个子代与从 (d1, d2) 出发的 MHSL链中对应的子代进行耦合；在给定 (Xt, Yt) 的条件下，这两个耦合相互独立。于是，g 下的每个子代到最优解的距离至少与其 MHSL 对应子代一样大；排序保持逐坐标序，因此 D_{t+1} 在 g 下按逐坐标序随机支配命题 3 中马尔可夫链的下一状态。由于 h 在整个状态空间（包括吸收态）上逐坐标非递减（引理 3），在事件 $\{T > t\} = \{\min D_t > 0\}$ 上，$E_g[h(D_{t+1}) \mid F_t] \ge h(D_t) - 1$，右侧即为 MHSL链的一步方程。因此，$M_t = h(D_{t \wedge T}) + (t \wedge T)$ 是一个 F_t-次鞅，其中 $T = \inf\{t \ge 0 : \min D_t = 0\}$。在每个非吸收代际中，第一个子代以至少 p^n 的概率等于 x*，因为距离为 d 的亲本生成 x* 的概率为 $p^d(1 - p)^{n-d} \ge p^n$，其中 $p < 1/2$；因此 $P_g(T > t) \le (1 - p^n)^t$ 且 $E_g[T] < \infty$。由于 h 在有限状态空间上有界，$|M_t| \le \max h + T$。由于 M_t 是次鞅，对每个 t 都有 $E_g[M_t] \ge M_0$，并且 $M_t \to M_T = T$；因此由控制收敛可得 $E_g[T] = E_g[M_T] = \lim_{t\to\infty} E_g[M_t] \ge M_0 = h(D_0)$。 ■

定理1是推论1对应的遗传算法版本，其证明是将 He 等人（2015）的判据推广到成对链：引理 3 给出了适应度顺序与时间序一致的条件。根据引理 3 的最后一部分，在 MHSL 上，随着更接近的成员被选中的频率增加，所需时间会缩短：在 $n = 5$ 且 $p = 0.05$ 时，将 3/4 替换为 q 后，对于 $q = 1/2$、0.6、3/4、0.9 和 1，所需代数分别为 83.7、48.6、28.7、21.4 和 19.2。有效选择强度的变化因此是导致适应度比例选择下 HSE 出现差异的一种机制，因为此时 q 取决于数值适应度值（第 7.2 节）。对于

当 $p > 0.5$ 时，该论证在引理 3 处失效：h 不再单调（在 $n = 4$ 为 5 和 8 时，$p = 0.55$ 下就已失效）。在 $n = 4$ 和 5、$p = 0.65$ 的条件下，与 200 个随机景观进行比较时，HSE 在所有情况下都较慢，这与第 7.5 节报告的三位反转一致；我们没有一般性证明。猜想 1 有以下对应的遗传算法版本，该版本得到了第 7.1 节穷举三位结果和第 7.6 节局部搜索的支持。

猜想 2。对于 $p < 0.5$，在具有唯一最优解的单射景观中，期望命中时间的每个全局极小值都是双个体遗传算法在以下情况下的 HSE：(a) 采用带均匀交叉的锦标赛选择；(b) 采用不进行交叉或采用均匀交叉的适应度比例选择。

在情况 (a) 中，根据命题 4，所有 HSE 具有相同的期望命中时间，因此该情况下的猜想表明，极小值恰好是 HSE；在情况 (b) 中，各个 HSE 之间存在差异，而猜想表明每个全局极小景观都属于 HSE 类，并不是说每个 HSE 都是极小值。穷举的 $n = 3$ 结果支持“每个极小值”这一表述，而第 7.6 节中针对更大 n 的搜索只在交换操作的局部最优解中发现了 HSE，这并不能证明全局最优性。情况 (a) 中的单射性限制对于该猜想的当前表述是必要的，因为在我们测试的交叉设置中，OneMax 比所有 HSE 都更快。

命题 3 和定理1解决了无交叉的锦标赛遗传算法。论文其余部分关注它们尚未解决的问题，即适应度比例选择和交叉，在这些情况下必须评估精确马尔可夫链。

6 实验方法

马尔可夫模型。我们采用 Nix 和 Vose（1992）的马尔可夫模型，该模型也被 Chakraborty 和 Janikow（2003a、2003b）使用。该遗传算法的种群包含两个由 n 个位组成的个体。在每一代中，通过选择（有放回）选出两个亲本，以概率 $p_c = 0.8$ 进行交叉以产生两个子代个体，并以概率 p 对每个子代个体逐位进行变异。选择方式或者是适应度比例选择，适应度值为整数 0、.....、$2^n - 1$，或者是二元锦标赛（从有放回抽取的两个个体中，适应度较高者获胜）。交叉方式可以是无交叉（$p_c = 0$）、单点交叉（切点在 n 个− 1 内部位置上均匀选取），或均匀交叉。所有包含最优解的种群均设为吸收态。通过基本矩阵 $(I - Q)^{-1}$ 得到达到吸收态的期望代数，并对所有 2^{2^n} 初始有序种群进行均匀平均；已经包含最优解的种群计为零。对于（1+1）进化算法，我们在单个点上采用相同的构造。

与 Chakraborty 和 Janikow 的差异。他们进行最小化，使用 1，...，8 的适应度值，并在每次交叉后保留一个随机选择的子代个体。我们对 0，...，7 的适应度值进行最大化，并保留两个子代个体。因此，绝对步数有所不同，但第 4 节的对称性论证适用于二者。

轨道约化。根据引理 1，我们对每个轨道评估一个代表：对于（1+1）进化算法、仅变异遗传算法和均匀交叉，共有 840 个 B_3-轨道；对于单点交叉，共有 2,520 个 H_3-轨道。通过根据每个轨道的大小进行加权，在全部 40,320 个一一对应景观上计算斯皮尔曼相关系数。

设置。对于 $n = 3$，我们评估由 56 种设置组成的完整网格：对于七种算法变体中的每一种，分别采用八种变异率 $p \in \{0.02, 0.05, 0.1, 0.2, 1/3, 0.45, 0.55, 0.65\}$；这七种算法变体包括（1+1）进化算法，以及分别搭配两种选择方案和三种交叉选项的遗传算法。这些变异率涵盖了典型的遗传算法设置（0.02 至 0.1）、标准（1+1）进化算法变异率 1/n = 1/3、两个以 0.5 为界的变异率，以及一个明显高于 0.5 的变异率。对于 $n = 4$ 至 6，第 7.6 节报告了四项针对性测试：与其他编码的比较、HSE 扰动、对编码进行局部搜索，以及对称性预测的检验。

可复现性。每张表和每幅图所依据的代码与数据均已存档于 https://doi.org/10.5281/zenodo.24061785：用于 $n = 3$ 结果的 mhse_check.py、group_check.py、grid_n3.py、uniform_check.py、cj_table.py 和 cj_group.py；用于绘图的 make_figures.py；以及 larger_n.py，其中包含 $n = 4$ 至 6 时的所有结果，以及

第 5 节（子命令理论）的数值检验，以及每次运行保存的输出。该存档还包含一个回归测试（larger_n.py check），用于重新计算已保存的数值。

7 结果

7.1 </style}p = 0.5 以下，汉明球编码是最容易的类别

表2列出了采用适应度比例选择的遗传算法在各 HSE 类中的期望命中时间范围，以及其他景观中任一景观所能达到的最佳值。在 $p < 0.5$ 且采用任何交叉选项的所有设置中，最快的类别全部且仅有 HSE 类：最快的 6（或 18）个类别均为 HSE，而 HSE 类之外的最佳景观比最慢的 HSE 还慢。低变异率时差距最大（例如，$p = 0.05$ 且采用单点交叉时，期望代数为 12.004 对 12.662），随着 p 接近 0.5，差距逐渐缩小，此时所有景观都趋近于随机搜索。

表2：采用适应度比例选择的双个体遗传算法达到最优解所需的期望代数，$n = 3$，使用交叉时 $p_c = 0.8$。“HSE”给出所有 HSE 类的范围；“最佳其他值”指非 HSE 景观中最快的景观。* 标记的是某些非 HSE 景观比所有 HSE 都快的设置（$p > 0.5$）；在这些设置下，HSE 是最慢的类别（第7.5节）。

p	无：HSE	无：最佳其他值	单点：HSE	单点：最佳其他值	均匀：HSE	均匀：最佳其他值
0.02	29.477 至 30.172	30.892	26.973 至 27.690	29.054	27.446 至 28.103	29.497
0.05	13.027 至 13.224	13.670	11.792 至 12.004	12.662	12.031 至 12.215	12.924
0.10	7.421 至 7.478	7.806	6.744 至 6.818	7.098	6.887 至 6.941	7.248
0.20	4.568 至 4.578	4.695	4.288 至 4.310	4.412	4.356 至 4.366	4.482
1/3	3.514 至 3.515	3.555	3.440 至 3.447	3.482	3.461 至 3.461	3.503
0.45	3.265 至 3.265	3.275	3.259 至 3.259	3.269	3.261 至 3.261	3.271
0.55	3.327 至 3.327	3.043 *	3.321 至 3.321	3.039 *	3.323 至 3.323	3.041 *
0.65	3.651 至 3.651	2.804 *	3.591 至 3.596	2.772 *	3.607 至 3.608	2.786 *

（1+1）进化算法（表 3）和锦标赛选择也得出相同结论（表 4）。对于（1+1）进化算法，六个 HSE 类所需时间相同，正如命题2所要求的；在 $p = 0.1$ 时，最接近的竞争者慢不到 0.2%。采用锦标赛选择时，HSE 再次占据 0.5 以下的所有顶级类别。

表 3：(1+1) 进化算法，$n = 3$。所有 HSE 的值都相同（命题2）。ρ 是与全部 40,320 个一对一三位景观上的期望命中时间的斯皮尔曼相关系数。

p	HSE 值	最佳其他值	HSE 的位置	ρ（违反数）	ρ（FDC）
0.02	60.234	60.237	840 个中最简单的 6 个	0.80	0.79
0.05	25.307	25.316	840 个中最简单的 6 个	0.80	0.79
0.10	13.775	13.795	840 个中最简单的 6 个	0.80	0.79
0.20	8.275	8.315	840 个中最简单的 6 个	0.81	0.80
1/3	6.597	6.637	840 个中最简单的 6 个	0.82	0.82
0.45	6.645	6.654	840 个中最简单的 6 个	0.83	0.83
0.55	7.610	5.898	840 个中最困难的 6 个	-0.83	-0.83
0.65	10.071	4.849	840 个中最困难的 6 个	-0.81	-0.82

表 4：在八种变异率中的三种下，采用二元锦标赛选择的双个体遗传算法，$n = 3$；其余变异率下的表现相同（当 $p < 0.5$ 时，HSE 最容易；当 $p > 0.5$ 时，HSE 最难）。

p	交叉	HSE 范围	不同的HSE值	最佳其他值	HSE 是
0.05	none	12.925 至 12.925	1	13.125	最容易
0.05	单点	12.221 至 12.235	14	12.396	最容易
0.05	均匀	12.365 至 12.365	1	12.544	最容易
0.10	none	7.559 至 7.559	1	7.693	最容易
0.10	单点	7.147 至 7.158	14	7.267	最容易
0.10	均匀	7.236 至 7.236	1	7.357	最容易
0.65	none	3.421 至 3.421	1	2.839	最难
0.65	单点	3.394 至 3.395	14	2.817	最难
0.65	均匀	3.401 至 3.401	1	2.822	最难

7.2 群内结构由对称性解释

引理 1 预测可能出现多少个不同的命中时间，结果与预测相符（表 5）。仅采用变异时，使用适应度比例选择的遗传算法会产生 840 个不同的值，每个 B_3-轨道对应一个；HSE 则为 6 个。采用单点交叉时，会产生 2,520 个值，每个 H_3-轨道对应一个；HSE 则为 18 个。在一个 B_3-轨道内，当 $p = 0.1$ 时，差异达到 0.71 代；当 $p = 0.02$ 时，达到 6.97 代；而在一个 H_3- 轨道内，差异仅处于舍入误差量级（约为 10^{-13}）。均匀交叉与所有 B_3, 都可交换，因此应能使 HSE 值恢复为 6 个，实际结果也确实如此。

表 5：$n = 3$ 时期望命中时间的轨道结构（适应度比例选择，$p_c = 0.8$）。对于所列群，轨道内的差异处于舍入误差范围内（低于 10^{-10}）。

算法（除非另有说明，$p = 0.1$）	群	预测类别	观测到的不同值	不同的HSE值
(1+1) 进化算法	B3（阶数48）	840	610	1
遗传算法，仅变异	B3（阶数48）	840	840	6
遗传算法，单点交叉	H3（16 阶）	2,520	2,520	18
遗传算法、单点交叉，$p = 0.02$	H3（16 阶）	2,520	2,520	18
遗传算法、均匀交叉	B3（阶数48）	840	840	6

因此，单点交叉在 HSE 之间引入的额外差异并非噪声，而是一种位置（连锁）效应，也是单点交叉唯一能够引入的差异。6 个 B3类之间的差异则来源不同：适应度比例选择取决于数值适应度；在锦标赛选择下，这些差异便会消失。还有两处巧合超出了对称性的范畴。(1+1) 进化算法只取 610 个不同的值，而非 840 个，且所有 HSE 都合并为一类，这正是命题2所述的合并现象。在锦标赛选择下，仅有变异以及均匀交叉时，HSE 都只取一个值，这对应命题 3 和 4；而在单点交叉下，HSE 至多取 14 个值，而非 18 个。

早期关于这一问题的研究发现，HSE 彼此之间的排序会随变异率变化（例如，当 $n = 5$ 时，在 $p = 0.05$ 和 $p = 0.45$ 下表现最佳的是不同的定向 HSE）。表2显示，这些排序依据的差异很小（$n = 3$ 时为 1% 至 3%），且有两个来源：适应度比例选择会区分 B_(n)类，而单点交叉则会根据比特顺序进一步细分每个类别。第一个来源本身具有一种结构，我们将在下文考察。

相邻球层的对齐。仅有变异时，预期时间在 B_n-轨道上为常数，因此，能够区分 HSE 的因素必定是景观中任何比特置换和任何异或掩码都能保留的性质。相对

位置就是这样一种性质。对于最优解周围相邻的球层 S_j 和 S_{j+1}，取超立方体中连接它们的每一条边，并计算这些边两端的相关性：一端位于 S_j 时（在 S_j的取值中）f 的秩，与另一端位于 S_{j+1}时 f 的秩之间的相关性。将结果称为对齐度 $a_{j,\ j+1}$。若一个球层上的最优点与下一个球层上的最优点相邻，则该值为正；若它们与最差点相邻，则该值为负。对于 $j = 1 \ldots, n - 2$，该值都有定义，因为 S_0 和 S_n 是单个点。对于附录 A 中的定向 HSE，对齐度极端：沿同一数值方向填充的两个球层，在 $n = 5$时，对齐度为 $a_{j,\ j+1} = +0.59$ 或 $+0.66$；而沿相反方向填充的两个球层，其对齐度则为相反数。

表6给出了在 $n = 5$ 时，仅采用适应度比例选择和变异的 GA 在随机抽取的 400 个 HSE 上，预期时间与各项对齐的相关性，以及用三个对齐项拟合线性模型的结果。可以看出两种规律。首先，相关性的符号只取决于与最优解的距离：最靠近最优解的两个球层之间的对齐（$a_{1,2}$）会缩短时间，而所有距离更远的球层对齐都会延长时间。其次，哪一对球层起作用取决于变异率。当 $p = 0.02$ 时，最近的一对几乎解释了全部影响（$r = -0.81$）；当 $p \geq 0.2$ 时，最远的一对则起主要作用（$r = +0.83$ 至 $+0.91$）。这就是最佳定向 HSE 会随变异率变化的原因：在低变异率下，表现最佳的 HSE 会对齐最靠近最优解的两个球层，并在其他位置交替对齐（$p = 0.05$ 时为 a/d/a/a 及其镜像 d/a/d/d）；表现最差的 HSE 则恰好相反（所有低于 0.5 的变异率下均为 a/a/a/d 和 d/d/d/a）。线性模型解释了类内方差的 69% 至 87%；剩余部分体现了更细微的结构，因为 a/d/a/a 和 d/a/d/d 这样的镜像对虽然对齐方式相同，预期时间却相差 0.003 代。在 $n = 4$ 时也存在相同规律；加入均匀交叉后，该规律依然成立（$n = 5$ 时，$p = 0.05$ 和 0.2 下的 R 分别为 $^2 = 0.75$ 和 0.86）；先变异两个成员再进行选择时，规律同样成立。在不使用交叉的锦标赛选择下，对齐方式无关紧要，因为所有 HSE 所需时间都相同（命题 3）。

按阶汇总的沃尔什能量无法体现对齐效应。超立方体等价编码的沃尔什系数幅值相同（Rowe 等人，2004），因此在 $n = 5$ 时，定向 HSE a/a/a/d 和 d/a/a/a 的各阶能量（每阶系数平方和）也完全相同；然而，相对于 a/a/a/a，前者在所有低于 0.5 的速率下都更慢，后者则更快。在 $p = 0.05$、采用适应度比例选择且仅进行变异（如表6所示）的条件下，对 300 个随机五位 HSE 进行分析发现，基于第 1 至第 4 阶能量建立的线性模型只能解释预期时间方差的 11%，而针对同一样本的三个对齐指标则能解释 68%。

表6：400 个随机五位 HSE 在不同相邻球面对齐条件下的预期时间 T（遗传算法、适应度比例选择、仅变异）。r 为皮尔逊相关系数，R^2 表示基于全部三个对齐指标的线性模型的决定系数。最后一列列出 16 种定向 HSE 中最快的一种，方向依据权重为1至4的球面上使用的数值方向确定（a 表示升序，d 表示降序）。

p	$r(T, a_{1,2})$	$r(T, a_{2,3})$	$r(T, a_{3,4})$	R^2	最佳定向 HSE
0.02	−0.81	+0.09	+0.08	0.69	d/a/a/a
0.05	−0.55	+0.44	+0.35	0.69	a/d/a/a
0.10	−0.29	+0.49	+0.62	0.80	a/d/a/a
0.20	−0.13	+0.33	+0.83	0.87	d/a/d/d
1/3	−0.07	+0.15	+0.90	0.86	d/a/d/d
0.45	−0.05	+0.02	+0.91	0.84	d/a/a/a

其作用机制可以从基本矩阵中看出。在定向 HSE a/a/a/a 中翻转一个球层的方向，恰好会改变一个对齐，因此预期时间的变化可以按照两个个体分别位于 S_i 和 S_j中的状态 (i, j) 进行分解。翻转 S_1（得到 a/a/a/d，使 S_1 和 S_2反对齐）在 $p = 0.02$ 时会增加 0.64 代的耗时，但这部分代价并非发生在 S_1中：额外时间消耗在两个个体都处于 S_2 (+0.34) 或 S_3 (+0.15) 时。S_1中发生变化的是个体离开该球层的风险。现在，S_1 的强点与 S_2, 的弱点相邻，S_1 中的个体会面对相对更强的对手，因此每代种群离开 S_1 的概率从 0.0743 上升至 0.0753。在一次运行中，这相当于额外损失 0.03 次；每次损失后，在 $p = 0.02$ 时都要花约 20 代才能重新到达 S_1。最优解附近的对齐

因此是通过固定前向步发挥作用的。翻转 S_4（得到 d/a/a/a，使 S_3 和 S_4反对齐）可以减少后向步之后状态 (3, 4) 和 (2, 4) 中的耗时：一个从 S_3 跌落到 S_4 的个体，在下一代被淘汰的概率为 0.635，而非 0.597；代价是两个个体都处于 S_4, 中的时间略有增加，因为从 S_4 迈出的前向步现在会落在弱点上，因此较少被固定。远离最优解时，反对齐的作用是消除后向步。因此，对每一对球层而言，这两种效应都存在；接近最优解时，固定前向步才是关键，因为下一步就是吸收，而远离最优解时，关键在于消除后向步。表6中的速率依赖性由此可见：远处的效应绝对值几乎恒定（在 $p = 0.02$ 至 0.2 时为 0.03 至 0.05 代），而失去 S_1 的代价会从 $p = 0.02$ 时约 20 代降至 $p = 0.2$ 时约 5 代，近处的效应也随之从 0.64 代降至 0.013 代。后向步的频率并非原因；在 $p = 0.02$、0.05、0.2 和 0.45 时，一次运行中分别出现 3.6、3.3、3.3 和 4.4 次后向步。

7.3 最佳与最差景观

图1展示了采用均匀交叉、$p = 0.05$ 时，GA 的速度最快的 16 个 B_3-类别，并将它们画成立方体，最优解（值为 7）位于后上方右侧。之所以选择均匀交叉，是因为它与所有立方体对称性都可交换，因此每幅图都代表一个单独的类别。类别 #1 至 #6 是表1中的六个 HSE 类（$v = 0$，其中 v 是第7.4节定义的球体顺序违规数）。类别 #7 至 #16 都只有一处违规：第一球中的一个值与第二球中的一个值互换了位置。

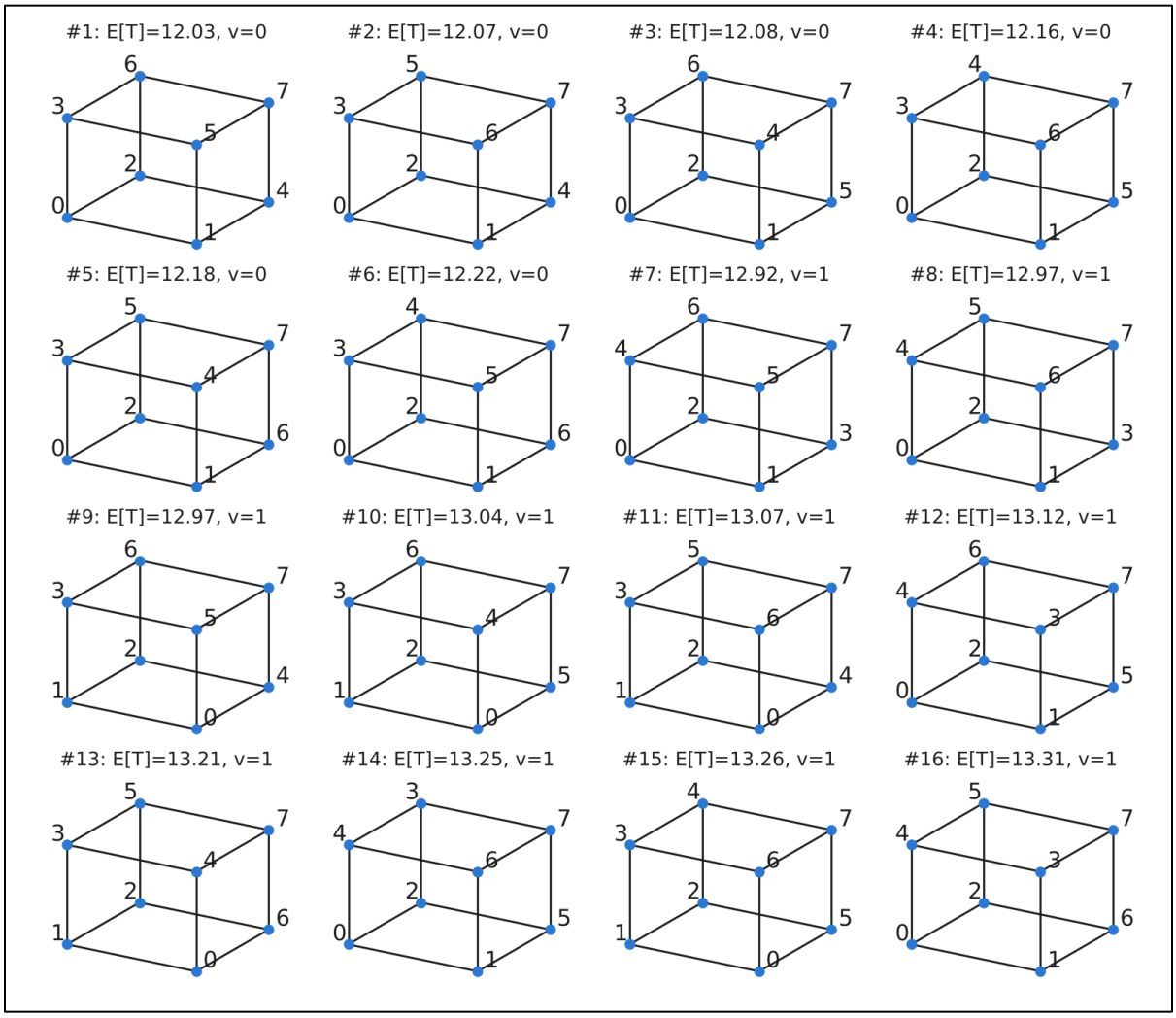

图 1 16 。= 0 8, = 。三位景观中速度最快的类别（双个体 0 05 7 [ ] 遗传算法、适应度比例选择、均匀交叉 p . p . ）。顶点标签表示适应度值；表示最优解。#k 标记第 k 快的类别。ET 表示期望代数；v 表示球体顺序违规的数量。

图 2展示了速度最慢的 16 个类别，其 v 值介于 13 和 15 之间（当 n = 3 时，15 为最大值）。在这 16 个类别中，最优解的三个邻点都取三个最低值；而在最慢的六个类别中，次优值（6）也位于对跖点 000。这些是陷阱函数：除最优解附近外，景观都是以 x* 的补集为中心的 MHSL。这正是 He 等人（2015）指出对 (1+1) EA 最难的欺骗性结构，它对球面顺序构成最大程度的违规，而非轻微违规。

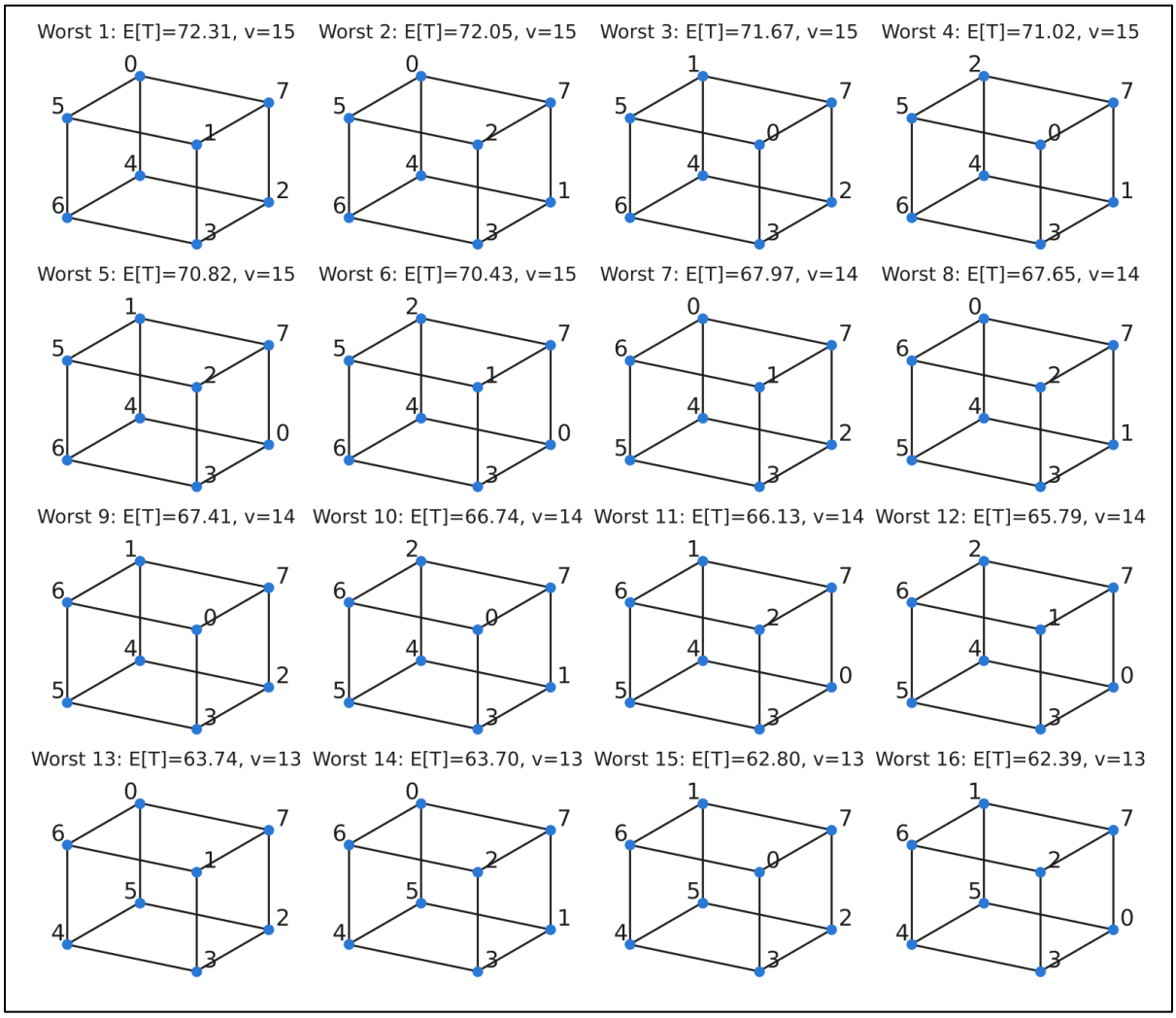

图 2. 与图1中相同的遗传算法中最慢的 16 个类别，按耗时从慢到快排列（最差 1）。

7.4 球面顺序违例计数

对于最优解为 x^* 的景观 f，令

$$v(f) = |\{(x, y) : d(x) < d(y) \text{ and } f(x) < f(y)\}|,$$

秩序与球面顺序相矛盾的配对数。对于本文研究的一一对应景观，当且仅当 f 是 HSE 时，$v = 0$；因此，v 衡量景观偏离该类别的程度；图 2 中的陷阱达到最大值。这项统计量并非新指标：v 统计的是适应度与距离之间的不一致对，因此对于固定的 n，f 与 d 之间的肯德尔τ_b 等于 $(2v - P)/\sqrt{(NP)}$，其中 P 是到 x^* 距离不同的配对数，$N = 2^n(2^n - 1)/2$ 是所有配对的数量。因此，两者对景观的排序完全相同。与 FDC 一样，v 需要知道最优解，因此它是用于分析最优解已知或已估计的景观的统计量，而不是预测未见问题的工具；He 等人（2015 年）指出，目前不存在

高效的通用预测工具。图3(a)绘出了全部840个类别的期望命中时间与 v 的关系；随着 v 增大，命中时间稳步上升，且几乎单调递增。表 7 给出了斯皮尔曼相关系数：当 p = 0.5 时，相关系数介于 0.92 和 0.99 之间；当 p 高于 0.5 时，相关系数则改变符号，这与第 7.5 节的结论一致。FDC，即 f 与 d 之间的皮尔逊相关系数（Jones与Forrest，1995年），给出的数值几乎相同；这正如预期，因为这两种统计量都衡量适应度与距离之间的一致性。在 n = 5 时也有相同情况：当 p = 0.5 时，两种相关系数均介于 0.88 和 0.94 之间（第 7.6 节）。

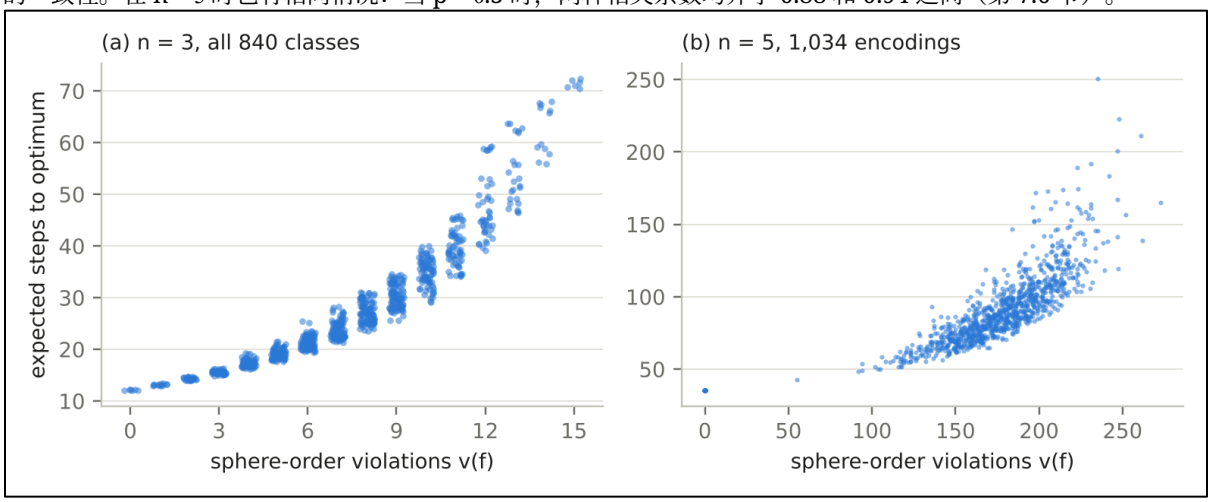

图3. 到达最优解的期望步数与球体顺序违规数 v(f) 的关系。(a) 全部 840 个三位类别，使用与图1相同的遗传算法（点在水平方向上略作抖动）。(b) 表 8 中的 1,034 种五位编码，p = 0.05（第 7.6 节）。

表 7：在全部 40,320 个一对一三位景观中，期望命中时间与违反计数 v / FDC 的斯皮尔曼相关系数（遗传算法、适应度比例选择）。由于容易景观的 FDC 为负值，因此对两列数据的方向都进行了调整，使正值表示该度量对景观难度的排序方向一致。

p	None	单点	均匀
0.02	0.97 / 0.95	0.97 / 0.96	0.97 / 0.96
0.05	0.98 / 0.97	0.98 / 0.98	0.98 / 0.98
0.10	0.99 / 0.98	0.98 / 0.98	0.98 / 0.98
0.20	0.97 / 0.96	0.96 / 0.96	0.96 / 0.96
1/3	0.94 / 0.94	0.93 / 0.93	0.93 / 0.93
0.45	0.92 / 0.92	0.92 / 0.92	0.92 / 0.92
0.55	-0.91 / -0.92	-0.91 / -0.92	-0.91 / -0.92
0.65	-0.91 / -0.93	-0.90 / -0.92	-0.90 / -0.92

7.5 高于二分之一的变异率

当 p = 0.55 和 p = 0.65 时，结果完全反转：在所有测试设置中（(1+1) 进化算法、两种选择方案和全部三种交叉选项），HSE 类是最慢的类别，表 7 中的相关系数也变为负值。第 5 节解释了 (1+1) 进化算法出现这种现象的原因。当 p 高于 0.5 时，变异会翻转大多数位，因此子代往往落在亲本的补集附近，而远离最优解的点会成为最佳起点。遗传算法则从其变异算子继承了这一行为。因此，本文的论断针对的是 p < 0.5，这包含了位串进化算法通常采用的变异率。尽管很少研究高于 0.5 的变异率，但 Kelley（2026）表明，对于每个常数变异率（包括高于 0.5 的变异率），都存在一个函数，使该变异率对 (1+1) 进化算法而言是最优的；本文报告的反转现象是与之互补的观察：高于 0.5 时，在低于 0.5 时最容易的景观会变成最难的景观。

这也是 He 等人（2015）一项结果的自然实例。他们通过构造一个人工变异算子证明，对于一个精英式 (1+1) 进化算法而言最容易的函数，对另一个算法而言可能是最难的；这里，第二个算法使用相同的算子，只是 p 高于 0.5。我们纳入这些变异率，仅为说明推论1中的条件 $p < 0.5$ 是紧的。

7.6 更大的 n

目前，穷举评估在 $n = 3$ 之后已不切实际（此时有 $16! \approx 2.1 \times 10^{13}$ 个景观，或约 5.4×10^{10} 个类别，$n = 4$）。因此，对于 $n = 4$ 到 6，我们使用进化算法的第 4 节中介绍的 GA 进行四项针对性测试（除非另有说明，采用适应度比例选择，$p_c = 0.8$）：与其他编码进行比较、对 HSE 进行扰动、对所有编码进行局部搜索，以及检验第 4 节的对称性预测。

与其他编码进行比较。对于 $n = 5$，我们在 $p = 0.05$、0.45 和 0.65 时，使用均匀交叉评估了 1,034 种编码：附录 A 中的 16 种定向 HSE、随机抽取的 16 种 HSE（随机最优解、每个球内顺序随机）、标准二进制编码、二进制反射格雷码，以及 1,000 种随机排列（表 8）。结果与 $n = 3$ 的情况一致。当 $p = 0.05$ 和 0.45 时，32 种 HSE 是速度最快的 32 种编码；而当 $p = 0.65$ 时，它们则是速度最慢的 32 种。在 0.5 以下，类别之外表现最好的编码是标准二进制编码；在 $p = 0.05$ 时，它比最慢的 HSE 慢 20%（42.66 代，对比 35.55 代）。在 0.5 以下，违反计数与命中时间的相关系数为 $\rho = 0.89$ 和 0.93；在 $p = 0.65$ 时，相关系数为 -0.82。

表 8：五次二 进制结果，共 1,034 种编码（遗传算法、适应度比例选择、均匀交叉，$p_c = 0.8$）。相关系数的方向 ted 与表 7 相同。

p	32 个 HSE	最佳非 HSE	1,034 种编码中的 HSE 位置	ρ (v)
0.05	35.28 至 35.55	42.66（标准二进制编码）	1 至 32	0.89
0.45	14.568 至 14.569	14.77（标准二进制编码）	1 至 32	0.93
0.65	18.47 至 18.48	13.82（随机排列）	1,003 至 1,034	−0.82

HSE扰动。为了测试类别边界有多陡峭，我们通过交换位于不同球层的两个点的适应度值来扰动每个定向 HSE，同时绝不移动最优解。对于 $n = 5$（均匀交叉，$p = 0.05$），16 个定向 HSE 各有 355 种此类单次交换；此外，我们还对每个 HSE 抽样进行了 200 次双重交换，且这些交换不会恢复球面顺序。所有 5,680 次单次交换和 3,200 次双重交换的速度都慢于其来源 HSE，因此，在这些变换下，每个定向 HSE 都是命中时间的严格局部最优解。不过，差距很小。每个 HSE 中最快的单次交换只比其基础 HSE 慢 0.024 至 0.053 代，而各定向 HSE 之间的跨度为 0.28 代（35.28 至 35.55）。因此，一些扰动景观比某些 HSE 更快：总体上最快的单次交换（35.303）胜过 16 个定向 HSE 中的 14 个。与 $n = 3$ 时不同，在 $n = 5$ 时，并非每个 HSE 都胜过其他所有景观。

在 $n = 4$ 且 $p = 0.05$ 时，采用交叉时边界依然清晰。使用单点交叉、均匀交叉，或锦标赛选择（搭配均匀交叉）时，每个定向 HSE 的所有单次交换和抽样得到的双次交换，都比全部八种定向 HSE 更慢。不使用交叉时，每种交换仍比其自身的基准更慢，但有些交换胜过其他 HSE，如 $n = 5$ 时所示。

局部搜索。我们在由随机排列生成的编码上运行爬山算法，使用采用首次改进的交换操作，直到没有任何交换操作能够改善预期时间为止。在 $n = 5$（均匀交叉，$p = 0.05$）时，全部 10 次运行（每次进行了 2,094 至 4,078 次评估）都以一个 HSE 结束。10 个终点对应的 HSE 各不相同，时间介于 35.2705 和 35.2746 之间，且每一个都快于最佳定向 HSE（35.2772）。在 $n = 4$ 且 $p = 0.05$ 时，对于以下五个变体中的每一个，全部 10 次运行都以一个 HSE 结束：仅变异、单点交叉、均匀交叉、锦标赛选择以及（1+1）进化算法。在使用均匀交叉且 $p = 0.2$ 时，结果同样如此。在 $p = 0.65$ 时，没有任何一次运行以 HSE 结束。全部五次运行都达到了相同的时间（6.29），所处的景观中，

最优解的四个邻点具有四个最低值，这正是图 2 所示的陷阱结构。从任意景观出发，搜索因此能够在我们测试的低于 0.5 的两个比率下都找到 HSE。这支持但不能证明这样的论断：在 $n = 4$ 和 5 时，最快的景观是 HSE；同时也表明，附录 A 中的定向 HSE 并不是最佳 HSE。

对称性。 对于 $n = 4$ 时三个随机 HSE，我们评估了它们各自在 B_4 下的全部 384 个映像。无交叉或采用均匀交叉时，所有映像的预期时间都相同；采用单点交叉时，恰有 12 个不同的值，即 $|B_4|/|H_4| = 384/32$，这是引理 1 所允许的最大值。采用锦标赛选择时，得到的计数相同。**六位**。 对于 $n = 6$ 时的 32 个定向 HSE（$p = 0.02$，$p_c = 0.8$），采用单点交叉时，预期时间介于 132.38 至 133.22 代之间；采用均匀交叉时，介于 131.08 至 131.95 代之间。这两个范围分别为 0.6% 和 0.7%，与 $n = 3$ 时类内差异较小的结果一致。

8 讨论

为何关注球层。 对于基于变异的搜索，一个点的重要属性是它到最优解的距离：按位变异在球层之间移动，其概率只取决于相关距离。若某个景观使每个更近的球层都比每个更远的球层适应度更高，那么搜索就绝不会拒绝使距离缩短的移动，也绝不会接受使距离增大的移动，因此选择总会推动搜索朝正确方向前进。命题 2 为（1+1）进化算法确立了这种等价关系；命题 3 和定理 1 则将其连同最优性一并推广到采用锦标赛选择且不进行交叉的双个体遗传算法。采用适应度比例选择或交叉时，这种等价关系并不成立，因为此时选择取决于数值，而交叉所依赖的信息也不止距离。尽管如此，三位结果表明，这种关系以排序形式依然成立：球面顺序决定哪些景观最容易，而其余细节只会改变同类景观内部的排序。两种选择方案的对比揭示了序数结构与基数结构的区别：锦标赛选择只看景观所诱导的顺序，这使得命题 3 成立；再结合 HSE 的单射性与均匀交叉的对称性，便可得到命题 4。相比之下，适应度比例选择还会考虑数值间距，这正是第 7.2 节中 HSE 之间产生差异的原因。

交叉带来的作用。交叉有两方面的作用：它会改变算法所遵循的对称性，也能组合不同个体携带的正确位（第 5 节）。均匀交叉遵循超立方体的所有对称性，不会区分变异视为相同的 HSE。当 $n = 3$ 时，单点交叉取决于位的相邻关系，会以较小幅度将它们区分开来。这些影响比与非 HSE 景观之间的差距小一个数量级。而当 $n = 5$ 时，情况并非如此：定向 HSE 之间的差异，超过了 HSE 与其最近扰动之间的差距（第 7.6 节）。

中性。球层内部的自由排序不会让（1+1）进化算法变慢。跨球层的并列则可能导致变慢，因为它们会允许适应度相同、但远离最优解的移动。这进一步阐明了最初将 MHSL 作为分层问题模型的动机：层本身无害，连接不同层的平台才会增加耗时。在测试的双个体锦标赛遗传算法中，如果存在交叉，同一层内的并列甚至会带来帮助：在报告的设置下，OneMax 的速度快于所有 HSE（第 5 节）。

最难景观。 最慢的三位景观是陷阱，这与 He 等人（2015年）的结论一致。它们是对球面顺序的最大程度违反，而非轻微违反。

局限性。 穷举结果针对 $n = 3$ 以及双个体种群。适应度比例选择使绝对时间取决于数值适应度，但锦标赛结果表明，主要结论并不受此影响。双个体遗传算法是非精英式的，其命中时间会随着 n 增大而迅速增长（第 5 节）；精英遗传算法或较大种群的表现会有所不同。针对较大 n 的证据是有针对性的，而非穷举性的。当 $n = 5$ 时，每个定向

HSE 都是值交换下的局部最优解，且每次局部搜索都会以一个 HSE 结束，但某些扰动景观比某些 HSE 更快，因此，关于三个比特的陈述——每个 HSE 都优于其他所有景观——不能原样推广。

扩展。尽管我们的 MHSL 定义要求存在唯一最优解，但放宽这一限制以允许平坦峰，将会纳入更多阈值函数和平台型单元计数函数；刻画由此产生的各向同性类是一个自然的延伸方向。其他未解决的问题包括证明猜想1和猜想2；后者将定理1扩展到交叉以及适应度比例选择；开展较大种群和两点交叉实验（两点交叉遵循 B_n 的另一个子群）；以及寻找一种比沃尔什谱更能刻画第 7.2 节类内差异的景观度量。Rowe 等人（2004）提出的格雷码移位等动态表示方法，也会通过改变表型值到位串的赋值，将诱导景观移动到不同位置；由此产生的球体顺序违规变化是否能够预测某次移位何时有益，值得进行测试。

9 结论

单调汉明球景观是按到唯一最优解的距离排序的二元景观，构成一个包含 OneMax 的小型类别，其规模也已得到确定。对于精英式（1+1）进化算法，每个球面分离MHSL都与 OneMax 具有相同的优化时间分布；已知理论进一步表明，在低于 0.5 的变异率下，这些景观是最容易的。对于采用锦标赛选择且不进行交叉的双个体遗传算法，我们也证明了相同结论：每个球面分离MHSL都具有 OneMax 的距离链，并且在低于 0.5 的变异率下是最容易的景观。对于其余设置，对所有三位景观进行的穷举马尔可夫链分析显示了相同的图景：在低于 0.5 的变异率下，最容易的类别全部且仅包括汉明球编码；而在高于 0.5 时，最难的类别也是如此。类内差异很小，来源于选择方案以及算子所遵循的立方体对称性。球体顺序违规的数量衡量景观偏离该类别的程度，并且在三位和五位情况下都与命中时间高度相关。总之，这些结果表明，与标准二进制编码或格雷编码不同，使二元景观在通常变异率下易于进行进化搜索的属性是球面顺序。

参考文献

Chakraborty, U. K., & Janikow, C. Z. (2003a). 遗传搜索中格雷编码与二进制编码的分析。*Information Sciences, 156*, 253–269. https://doi.org/10.1016/S0020-0255(03)00178-6 Chakraborty, U. K., & Janikow, C. Z. (2003b). 单变量边际分布算法、遗传算法和随机爬山中的二进制编码与格雷编码。载于表示与算子分析和设计研讨会，遗传与进化计算会议（*GECCO 2003*）。De Jong, K. A., Spears, W. M., & Gordon, D. F. (1995). 用马尔可夫链分析遗传算法适应度函数。载于 L. D. Whitley & M. D. Vose (编), 遗传算法基础*3* (页 115–137)。Morgan Kaufmann. Doerr, B. (2021). 通过负乘法漂移获得非精英进化算法的下界。*Evolutionary Computation, 29*(2), 305–329. https://doi.org/10.1162/evco_a_00283Doerr, B., Jansen, T., Sudholt, D., Winzen, C., & Zarges, C. (2013). 即使优化单调函数，变异率也很重要。*Evolutionary Computation, 21*(1), 1–27. https://doi.org/10.1162/EVCO_a_00055Doerr, B., Johannsen, D., & Winzen, C. (2012). 乘法漂移分析。*Algorithmica, 64*(4), 673–697. https://doi.org/10.1007/s00453-012-9622-x Droste, S., Jansen, T., & Wegener, I. (2002). 关于 (1+1) 进化算法的分析。*Theoretical Computer Science, 276*(1–2), 51–81. https://doi.org/10.1016/S0304-3975(01)00182-7 Goldberg, D. E. (1987). 简单遗传算法与最小欺骗问题。载于 L. Davis (编), 遗传算法与模拟退火 (页 74–88)。Pitman. Goldberg, D. E., & Segrest, P. (1987). 遗传算法的有限马尔可夫链分析。载于第二届国际遗传算法会议论文集 (页 1–8)。Lawrence Erlbaum. He, J., Chen, T., & Yao, X. (2015). 关于最容易和最难的适应度函数。*IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 19*(2), 295–305. https://doi.org/10.1109/TEVC.2014.2318025

Horn, J., Goldberg, D. E., & Deb, K. (1994). 长路径问题。载于自然界并行问题求解，*PPSN III* (LNCS 866, 页 149–158)。Springer. Jones, T., & Forrest, S. (1995). 适应度距离相关性作为遗传算法问题难度的度量。载于第六届国际遗传算法会议论文集 (页 184–192)。Morgan Kaufmann. Kauffman, S. A. (1993). 秩序的起源：进化中的自组织与选择。牛津大学出版社。Kaufmann, M., Larcher, M., Lengler, J., & Zou, X. (2025). OneMax 并非适应度改进方面最容易的函数。*Evolutionary Computation, 33*(1), 27–54. Kelley, A. J. (2026). (1+1) 进化算法的所有恒定变异率。arXiv:2602.18989. Lehre, P. K. (2010). 种群中的负漂移。载于 R. Schaefer, C. Cotta, J. Kołodziej, & G. Rudolph (编), 自然界并行问题求解，*PPSN XI* (LNCS 6238, 页 244–253)。Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-642-15844-5_25Lengler, J. (2020). 单调函数上的进化算法的一般二分性。*IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 24*(6), 995– 1009. https://doi.org/10.1109/TEVC.2019.2917014 Lengler, J., & Riedi, S. (2022). (μ+1)-EA 在动态 BinVal 函数上的运行时间分析。*SN* 计算机科学 , *3*, 文章 324。https://doi.org/10.1007/s42979-022-01203-z Lindvall, T. (1992). 耦合法讲义。Wiley. Malan, K. M. (2021). 优化领域景观分析进展综述。算法, *14*(2), 40. https://doi.org/10.3390/a14020040 Malan, K. M., & Engelbrecht, A. P. (2013). 适应度景观表征技术综述及若干可能的后续方向。*Information Sciences, 241*, 148–163. https://doi.org/10.1016/j.ins.2013.04.015 Nix, A. E., & Vose, M. D. (1992). 用马尔可夫链建模遗传算法。数学与人工智能年刊, *5*, 79–88. https://doi.org/10.1007/BF01530781 Ochoa, G., Tomassini, M., Vérel, S., & Darabos, C. (2008). NK景观的吸引域与局部最优网络研究。载于*GECCO 2008*论文集 (页 555–562)。ACM. https://doi.org/10.1145/1389095.1389204 Radcliffe, N. J., & Surry, P. D. (1995). 搜索算法的根本局限：从进化计算的视角审视。载于 J. van Leeuwen (编), 今日计算机科学 (LNCS 1000, 页 275–291)。Springer. https://doi.org/10.1007/BFb0015249 Rana, S., & Whitley, D. (1997). 别具一格的比特表示。载于第七届国际遗传算法会议论文集 (页 188–195)。Morgan Kaufmann. Rowe, J. E., Vose, M. D., & Wright, A. H. (2002). 交叉与变异的群性质。*Evolutionary Computation, 10*(2), 151–184. https://doi.org/10.1162/106365602320169839 Rowe, J. E., Vose, M. D., & Wright, A. H. (2004). 结构化搜索空间与遗传算子。*Evolutionary Computation, 12*(4), 461–493. https://doi.org/10.1162/1063656043138941 Rowe, J. E., Vose, M. D., & Wright, A. H. (2010). 表示不变遗传算子。*Evolutionary Computation, 18*(4), 635–660. https://doi.org/10.1162/EVCO_a_00007Rowe, J. E., Whitley, D., Barbulescu, L., & Watson, J.-P. (2004). 格雷码与二进制表示的性质。*Evolutionary Computation, 12*(1), 47–76. Spears, W. M., & De Jong, K. A. (1997). 使用具有语义顺序和聚合状态的马尔可夫模型分析遗传算法。载于遗传算法基础*4* (页 85–100)。Morgan Kaufmann. Sudholt, D. (2013). 一种求进化算法运行时间下界的新方法。*IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 17*(3), 418–435. https://doi.org/10.1109/TEVC.2012.2202241 Vose, M. D. (1999). 简单遗传算法：基础与理论。麻省理工学院出版社。Whitley, D. (1999). 格雷编码与二进制编码的一个免费午餐证明。载于遗传与进化计算会议论文集（*GECCO- 1999*） (页 726–733)。Morgan Kaufmann. Whitley, D., & Rana, S. (1997). 表示、搜索与遗传算法。载于第十四届全国人工智能会议（*AAAI-97*）论文集 (页 497–502)。AAAI出版社。Wolpert, D. H., & Macready, W. G. (1997). 优化的无免费午餐定理。*IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 1*(1), 67–82. https://doi.org/10.1109/4235.585893 Wright, S. (1932). 变异、近亲繁殖、杂交和选择在进化中的作用。载于第六届国际遗传学大会论文集 (第 1 卷，页 356–366)。

附录 A：定向汉明球编码的枚举

以下过程通过按数值递增或递减的顺序遍历每种汉明重量的字符串（每个球层所选的方向），并依次分配连续值来生成 HSE。对于 2^{n-1} 个方向向量，它会生成第 7.2 节和第 7.6 节中使用的定向 HSE（n 为 = 3 时是 4，n 为 = 6 时是 32）；随附代码中的函数 randomize_layers 会对球层内的值进行置换，以抽样生成其他 HSE。这里最优解为 1^n，x 的适应度值为 positions[x]。**符号说明**。位数是位的数量；k 是 1 的数量；positions[] 存储每个字符串的适应度值；directions[] 给出每种重量的枚举方向；next_number(n) 和 previous_number(n) 分别返回具有相同 1 数量的下一个更大和更小的整数；n_choose_k(n, k) 是二项式系数。过程 next_number(n)

---

c ← n AND (−n) ▷ n 的最右置位 r ← n + c ▷ 翻转最右侧非尾随零位 return (((r XOR n) >> 2) / c) OR r end procedure procedure previous_number(n) y ← (NOT n) AND (−(NOT n)) ▷ n 的最低零位 n ← n AND NOT (y − 1) ▷ 重置 y 以下的位 z ← n AND (−n) ▷ 重置后最低的置位 n ← n AND NOT z ▷ 清除位 z n ← n OR (z − z / (2 × y)) ▷ 重新填充 z 以下的位 return n end procedure procedure enumerate_by_hamming_weight(bitsize, directions[]) positions[0 ... 2^位数 − 1] ← 0计数器 ← 1for k from 1 to bitsize do count ← n_choose_k(bitsize, k) value ← (1 << k) − 1方向 ← directions[min(k − 1, bitsize − 2)]if dir = 为降序 then value ← value << (bitsize − k) for step from 1 to count do positions[value] ← 计数器; counter ← counter + 1if dir = 为降序 then value ← previous_number(value) else value ← next_number(value) if value ≥ 2^bitsize or value = 0 then exit loop end for end for return positions end procedure procedure main()

对每个方向[]，在 {ascend, descend}^（位数 − 1）中
执行：打印按_汉明_权重（位数，方向）枚举_。结束过程

附录 B：汉明球编码数量的增长

取对数　命题 1 中的算术运算并对每个因子应用斯特林近似 log m! ≈ m log m − m，可得　s

$$\log E_n \approx n \log 2 + \Sigma_k\, C(n,k) \log C(n,k) - 2^n.$$

写作 $C(n,k) = 2^n\, \pi_k$，其中 π_k 是具有熵 $h_n = -\Sigma\, \pi_k \log \pi_k \approx 1/2 \log(\pi e n/2)$ 的二项分布（n，1/2）概率，中间项等于 $2^n(n \log 2 - h_n)$。因此

$$\log E_n \approx 2^n\, (n \log 2 - \tfrac{1}{2} \log(\pi e n/2) - 1) + n \log 2,$$

因此 E_n 的增长速度类似于 $\exp(2^n\, n \log 2\, (1 + o(1)))$，这关于 n 是双指数级的。所有景观的数量满足 $\log (2^n)! \approx 2^n(n \log 2 - 1)$，因此景观中属于 HSE 的比例大致按 $\exp(-2^{n-1} \log(\pi e n/2))$ 衰减。数值见表 9。

表 9：汉明球编码的数量。

n	HSE (E_n)	截至 B_n 的类别	所有景观 (2^n)!	比例
2	8	1	24	0.33
3	288	6	40,320	7.1×10^{-3}
4	6,635,520	17,280	2.09×10^{13}	3.2×10^{-7}
5	6.07×10^{18}	1.58×10^{15}	2.63×10^{35}	2.3×10^{-17}
6	1.38×10^{50}	3.00×10^{45}	1.27×10^{89}	1.1×10^{-39}

附录 C：按局部极小值划分的三位函数类别

表 10 列出了所有定义在三位上的 40,320 个函数中，在整数（环）、格雷码和二进制邻域下，具有给定数量局部极小值的函数数量；这些数量由脚本 cj_table.py 重新计算得出。分组方式与 Chakraborty 和 Janikow（2003b，表 4）采用的方式相同；各组大小也与他们的结果一致。最后一列显示，每个类别的大小都是 16 的倍数，而 16 是第 4.3 节所述群的阶。

表1　0：三位函数在三种邻域下按局部极小值数量的分类。每个规模均为 16 × 个整数　　er.

整数	Gray	二进制	函数	函数 / 16
1	1	1	64	4
1	1	2	384	24
1	1	3	64	4
2	1	1	768	48
2	1	2	5,248	328
2	1	3	128	8
2	2	1	2,288	143
2	2	2	4,784	299
2	2	3	1,232	77
2	2	4	144	9
3	1	1	224	14
3	1	2	1,568	98
3	1	3	192	12
3	2	1	2,016	126
3	2	2	9,024	564
3	2	3	3,664	229
3	2	4	1,296	81
3	3	1	1,872	117
3	3	2	2,704	169
3	3	3	480	30
4	2	1	16	1
4	2	2	16	1
4	3	1	432	27
4	3	2	272	17
4	4	1	960	60
4	4	2	480	30