

多目标进化算法及其应用

郑金华 著

科学出版社

北京

内 容 简 介

近年来,多目标进化算法(MOEA)的研究进入了快速发展阶段,越来越多的人开始从事 MOEA 的设计与实现,MOEA 的应用也日益广泛。

本书比较全面地综述了 MOEA 的国际研究现状和发展,讨论了 MOEA 的基本概念和基本原理,介绍了目前国际上比较典型的 MOEA,论述了 MOEA 的性能评价方法,阐述了构造 Pareto 最优解集的方法,刻画了保持进化群体分布性的方法和策略,详述了 MOEA 的测试方法。同时,对 MOEA 的收敛性及应用进行了讨论和分析。

本书可作为计算机、自动控制和其它相关专业高年级本科生和研究生,以及 MOEA 爱好者研究、学习的教材或参考书。

图书在版编目(CIP)数据

多目标进化算法及其应用/郑金华著.—北京:科学出版社,2007

ISBN 978-7-03-018489-4

I. 多… II. 郑… III. 多目标(数学)-算法 IV. TP301.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 012467 号

责任编辑:赵卫江/责任校对:柏连海

责任印制:吕春珉/封面设计:耕者设计工作室

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双青印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2007年2月第一版 开本: B5(720×1000)

2007年2月第一次印刷 印张: 18

印数: 1—2 000 字数: 345 000

定价: 38.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈新欣〉)

销售部电话 010-62136131 编辑部电话 010-62138017 (BI01)

本研究得到国家自然科学基金(69974043)、教育部留学回国人员科研启动基金(教外司留[2005]546号)、湖南省自然科学基金(01JJY2060、05JJ30125)、湖南省教育厅重点科研项目(06A074)、湖南省重点学科建设项目,以及湘潭大学学术出版基金的资助。

谨以此书纪念我的父亲郑石铭（1935～1998），父亲9岁时爷爷抗日阵亡，从此与奶奶相依为命；他曾经是一名优秀的小学教师，1963年响应国家号召主动申请支援农村建设，并成为了一位出色的农民；他朴实、勤劳、善良，种出的庄稼总是最好的。

前 言

20 世纪 80 年代末期，国际上对多目标进化算法 MOEA (multi-objective evolutionary optimization) 的研究进入了兴旺时期，从 1994 年到 2001 年的 8 年，国际上所出版的论文是过去 10 年 (1984~1993) 的 3 倍之多。最近几年的发展速度比过去 8 年又有提高，一方面，从 2001 年以来，每两年召开一次有关多目标进化的国际会议 EMO (Evolutionary Multi-Criterion Optimization)；另一方面，从在国际刊物“IEEE Transactions on Evolutionary Computation” (1997 年创刊)、“Evolutionary Computation” (1993 年创刊) 和“Genetic Programming and Evolvable Machines” (1999 年创刊)，以及各类国际进化计算的会议 (如 Congress on Evolutionary Computation、Genetic and Evolutionary Computation Conference 等) 上所发表的有关多目标进化的论文比过去有较大幅度的增加。这标志着 MOEA 的研究进入了快速发展阶段。

MOEA 研究之所以有今天这么好的势头，主要是因为它具有广泛的应用领域和应用前景。一方面，现实世界中的许多实际问题，都是多个目标的同时优化；另一方面，这些问题通常又是高度复杂的，非线性的。MOEA 非常适合于求解这类问题。事实上，比较早期的向量评估遗传算法 (VEGA) 就是为了解决机器学习中的有关问题而提出的，MOEA 发展到今天，已经在许多领域得到了成功应用，如优化控制，数据挖掘，机械设计，移动网络规划，证券组合投资、仿人机器人中枢神经运动控制器的设计，固体火箭发动机的优化设计，QoS 路由，物流配送，逻辑电路设计，多传感器多目标跟踪数据关联，水下机器人运动规划，导弹自动驾驶仪设计，柔性制造系统流程规划，森林规划优化，车间调度等。

作者积多年的研究心得和研究结果，结合国内外 MOEA 研究的最新成果写成本书，供 MOEA 爱好者参考，希望起到抛砖引玉的作用。

全书共分 8 章。第 1 章讨论了 MOEA 的基本概念，同时比较全面地综述了 MOEA 的国际研究现状和发展。第 2 章阐述了目前国际上比较典型的 MOEA，并给出了部分比较实验结果。第 3 章论述了 MOEA 的评价方法，对 MOEA 设计具有指导作用。第 4 章刻画了构造 Pareto 最优解集的方法，并给出了部分比较实验结果。第 5 章叙述了保持进化群体分布性的方法和策略。第 6 章对 MOEA 的收敛性进行了讨论和分析。第 7 章介绍了 MOEA 的测试方法，同时给出了大量的测试用例。第 8 章给出了几个具体的 MOEA 应用实例。

本书适合作为高年级本科生、硕士研究生、博士研究生和 MOEA 爱好者研

究和学习的教材或参考书。为此，作者在叙述上力求通俗易懂、深入浅出。

本书是笔者在博士后研究的基础上写成的，感谢史忠植教授的精心指导和关心。参加本书部分章节撰写的有：吴佳英（第2章第3节和第4节），李旭勇和薛娟（第3章），吴茜（第2章第8节，第7章），刘敏（第8章第2节和第3节），宋武（第2章第7节），彭琰（第2章第10节）。还有谢勇、邝达、蒋浩、肖桂霞、李丽荣、陈良军、谢炯亮、李密青、田小梅等做了大量的实验工作和文字工作。

我还要感谢蔡自兴教授对我多年的教导和关心，感谢 Charles X Ling 教授对我研究工作的指导和支持。感谢王勇对全书修改所提出的宝贵建议，感谢赵卫江对全书文字修饰所付出的辛勤劳动。感谢刘任任教授、高协平教授对本书出版的支持和鼓励。感谢国家自然科学基金，特别是湖南省自然科学基金对我多年研究的资助。感谢我的妻子对我工作的支持，是她的辛勤持家，我才有更多的时间从事科研与写作。同时，感谢所有支持我、关心我的朋友和同事。

由于作者水平有限，不足之处敬请专家和读者批评指正！作者 E-mail: jhzheng@xtu.edu.cn。

郑金华

2006年6月

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 多目标优化问题	1
1.2 基于 Pareto 的多目标最优解集	2
1.2.1 Pareto 最优解	2
1.2.2 Pareto 最优边界	4
1.2.3 凸空间和凹空间	5
1.3 多目标进化个体之间的支配关系	6
1.4 多目标进化算法	8
1.5 多目标进化算法研究的历史与现状	9
1.5.1 MOEA 的分类	9
1.5.2 MOEA 理论研究	14
1.5.3 MOEA 应用研究	16
1.6 有待进一步研究的课题	16
第 2 章 多目标进化算法	20
2.1 Schaffer 和 Fonseca 等的工作	20
2.2 NSGA-II	21
2.2.1 非支配集的构造方法	22
2.2.2 保持解群体分布性和多样性的方法	23
2.2.3 Deb 的 MOEA	24
2.3 NPGA	26
2.3.1 基于 Pareto 支配的选择	26
2.3.2 解群体多样性	27
2.4 SPEA2	28
2.4.1 SPEA	28
2.4.2 SPEA2	29
2.5 PESA	32
2.6 PAES	33
2.7 MGAMOO	34
2.8 MOMGA	36
2.8.1 messy GA	37
2.8.2 multiobjective mGA	39

2.8.3	MOMGA-2	40
2.9	基于密度的多目标进化算法	41
2.9.1	DMOEA 的一般框架	41
2.9.2	个体适应度计算	43
2.10	mBOA	46
2.10.1	贝叶斯优化算法	46
2.10.2	多目标贝叶斯优化算法	50
2.11	实验结果	51
2.11.1	比较 DMOEA 与 SPEA2、NSGA-II 及 PESA 的收敛性	51
2.11.2	比较 DMOEA 与 SPEA2、NSGA-II 及 PESA 的分布性	52
2.11.3	比较 DMOEA 与 SPEA2、NSGA-II 及 PESA 的运行效率	55
第 3 章	MOEA 性能评价	61
3.1	概述	61
3.2	实验设计与分析	62
3.2.1	实验目的	62
3.2.2	MOEA 评价工具的选取	63
3.2.3	实验参数设置	64
3.2.4	实验结果分析	64
3.3	MOEA 性能评价方法	65
3.3.1	评价方法概述	65
3.3.2	收敛性评价方法	65
3.3.3	分布度评价方法	69
第 4 章	多目标 Pareto 最优解集	78
4.1	构造 Pareto 最优解的简单方法	78
4.1.1	Deb 的非支配排序方法	78
4.1.2	用排除法构造非支配集	79
4.2	用庄家法则构造 Pareto 最优解集	81
4.2.1	用庄家法则构造非支配集的方法	81
4.2.2	正确性论证	82
4.2.3	时间复杂度分析	84
4.2.4	实例分析	85
4.2.5	实验结果	86
4.3	用擂台赛法则构造 Pareto 最优解集	89
4.3.1	用擂台赛法则构造非支配集的方法	89
4.3.2	正确性论证及时间复杂度分析	91
4.3.3	实例分析	93

4.3.4	实验结果	94
4.4	用递归方法构造 Pareto 最优解集	98
4.5	用快速排序方法构造 Pareto 最优解集	101
4.5.1	个体之间的关系	101
4.5.2	用快速排序方法构造非支配集	106
4.6	用改进的快速排序方法构造 Pareto 最优解集	109
4.6.1	改进的快速排序算法	109
4.6.2	实验结果	112
第 5 章	多目标进化群体的分布性	118
5.1	用小生境技术保持进化群体的分布性	118
5.2	用信息熵保持进化群体的分布性	120
5.3	用聚集密度方法保持进化群体的分布性	121
5.4	用网格保持进化群体的分布性	124
5.4.1	网格边界	124
5.4.2	个体在网格中的定位	125
5.4.3	自适应网格	125
5.5	用聚类方法保持进化群体的分布性	126
5.5.1	聚类分析中的编码及其相似度计算	127
5.5.2	聚类分析	131
5.5.3	极点分析与处理	135
第 6 章	MOEA 收敛性	137
6.1	多目标进化模型及其收敛性分析	137
6.1.1	多目标进化简单模型	137
6.1.2	reduce 函数	138
6.1.3	收敛性分析	141
6.2	自适应网格算法及其收敛性	142
6.2.1	有关定义	142
6.2.2	自适应网格算法	144
6.2.3	AGA 收敛性分析	145
6.2.4	AGA 的收敛条件	150
6.3	MOEA 的收敛性分析	152
6.3.1	Pareto 最优解集的特征	152
6.3.2	MOEA 的收敛性	154
第 7 章	MOEA 测试函数	157
7.1	概述	157
7.2	MOEA 测试函数集	157

7.3	MOP 问题分类	160
7.3.1	非偏约束的数值 MOEA 测试函数集	163
7.3.2	带偏约束的数值 MOEA 测试函数集	168
7.4	构造 MOP 测试函数的方法	172
7.4.1	从数值上构造 MOP	174
7.4.2	规模可变的多元目标测试函数的构造方法	179
7.4.3	自底向上地构造规模可变的多元目标测试函数	181
7.4.4	对曲面进行约束构造规模可变的多元目标测试函数	187
7.5	DTLZ 测试函数系列	190
7.5.1	DTLZ1	190
7.5.2	DTLZ2	191
7.5.3	DTLZ3	192
7.5.4	DTLZ4	193
7.5.5	DTLZ5	194
7.5.6	DTLZ6	195
7.5.7	DTLZ7	196
7.5.8	DTLZ8	196
7.5.9	DTLZ9	197
7.6	组合优化类 MOEA 测试函数	198
第 8 章	MOEA 应用	200
8.1	MOEA 应用概述	200
8.1.1	MOEA 在环境与资源配置方面的应用	200
8.1.2	MOEA 在电子与电气工程方面的应用	201
8.1.3	MOEA 在通信与网络优化方面的应用	203
8.1.4	MOEA 在机器人方面的应用	204
8.1.5	MOEA 在航空航天方面的应用	205
8.1.6	MOEA 在市政建设方面的应用	207
8.1.7	MOEA 在交通运输方面的应用	208
8.1.8	MOEA 在机械设计与制造方面的应用	209
8.1.9	MOEA 在管理工程方面的应用	210
8.1.10	MOEA 在金融方面的应用	211
8.1.11	MOEA 在科学研究中的应用	212
8.2	MOEA 在车辆路径问题中的应用	216
8.2.1	带时间窗的车辆路径问题	216
8.2.2	求解 VRPTW 问题的 MOEA	218
8.2.3	可变概率的 λ -interchange 局部搜索法	219

8.2.4	实验与分析	222
8.3	MOEA 在供水系统中的应用	226
8.3.1	水泵调度问题	227
8.3.2	求解方法	229
8.3.3	实验结果分析	230
附录 A	符号及缩写索引	233
附录 B	MOPs 测试函数	234
附录 C	表 B.1 测试函数的 P_{true} 图和 PF_{true} 图	239
附录 D	表 B.2 测试函数的 P_{true} 图和 PF_{true} 图	246
	参考文献	251

第 1 章 绪 论

进化算法(evolutionary algorithm, EA)是一类模拟生物自然选择与自然进化的随机搜索算法,因其适用于求解高度复杂的非线性问题而得到了非常广泛的应用,同时它又具有较好的通用性。在解决只有单个目标的复杂系统优化问题时,进化算法的优势得到了充分展现。然而,现实世界中的优化问题通常是多属性的,一般是对多个目标的同时优化。如一个国家的最优良性发展,涉及到经济的快速增长、社会秩序的稳定、环境的保护和改善等多个方面。在这里,经济快速增长和社会秩序稳定这两个优化目标是相辅相成的,互相促进的,通常称之为一致的。在多数情况下,被同时优化的多个目标之间是相互冲突的,如在企业生产活动中,产品质量与生产成本是两个相互冲突的目标。为了达到总目标的最优化,通常需要对相互冲突的子目标进行综合考虑,即对各子目标进行折衷(tradeoffs)。由此,针对多目标的优化问题,出现了多目标进化算法(multi-objective evolutionary algorithm, MOEA)。值得说明的是,在国内外诸多文献中,在称谓上可能有比较大的差异,如多目标遗传算法(multi-objective genetic algorithm, MOGA)、进化多目标优化(evolutionary multi-objective optimization, EMOO)等。

1.1 多目标优化问题

无论是科学研究还是在工程应用上,多目标优化都是非常重要的研究课题。这不仅是因为许多现实世界中的优化问题涉及到多个目标的同时优化,还有一些与多目标优化有关的问题也是难以回答的,如最优解,它不同于单目标的优化,通常有多个最优解,对于多个最优解,究竟哪个是我们要找的呢?与此同时,如何构造一个多目标优化问题的最优解集?如何评价由不同的 MOEA 所构造的最优解集的优劣?等等。

为了回答这些问题,我们首先给出有关多目标优化问题的一般描述。

给定决策向量 $X=(x_1, x_2, \dots, x_n)$, 它满足下列约束:

$$g_i(X) \geq 0 (i = 1, 2, \dots, k) \quad (1.1)$$

$$h_i(X) = 0 (i = 1, 2, \dots, l) \quad (1.2)$$

设有 r 个优化目标,且这 r 个优化目标是相互冲突的,优化目标可表示为

$$f(X) = (f_1(X), f_2(X), \dots, f_r(X)) \quad (1.3)$$

寻求 $X^*=(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$, 使 $f(X^*)$ 在满足约束(1.1)和(1.2)的同时达到最优。

在多目标优化中,对于不同的子目标函数可能有不同的优化目标,有的可能是最大化目标函数,也有的可能是最小化目标函数,归纳起来,不外乎下列 3 种可能的情况:

- 最小化所有的子目标函数;
- 最大化所有的子目标函数;
- 最小化部分子目标函数,而最大化其它子目标函数。

为了处理方便,一般来说,可以把各子目标优化函数统一转换为最小化或最大化。如将最大化转换为最小化,可以简单地用下列形式表示:

$$\max f_i(X) = -\min(-f_i(X)) \quad (1.4)$$

类似地,不等式约束

$$g_i(X) \leq 0 (i = 1, 2, \dots, k) \quad (1.5)$$

可以按下列方式方便地转换为式(1.1)的形式:

$$-g_i(X) \geq 0 (i = 1, 2, \dots, k) \quad (1.6)$$

这样一来,任何不同表达形式的多目标优化问题都可以转换成统一的表达形式。本书如没有特别说明,统一为求总目标的最小化,即

$$\min \mathbf{f}(X) = (f_1(X), f_2(X), \dots, f_r(X)) \quad (1.7)$$

接下来讨论多目标优化问题最优解的有关概念。

1.2 基于 Pareto 的多目标最优解集

在多目标优化中,由于是对多个子目标的同时优化,而这些被同时优化的子目标之间往往又是相互冲突的,照顾了一个子目标的“利益”,同时必然导致其它至少一个子目标的“利益”受到损失。由此可以想象,针对一个多目标优化问题,没有绝对的或者说是唯一的最好解。

1.2.1 Pareto 最优解

多目标优化中的最优解通常称为 Pareto 最优解,它是由 Vilfredo Pareto 在 1896 年提出的,因此被命名为 Pareto 最优解(Pareto optimal solution)。一般地,可以描述如下。

定义 1.1 给定一个多目标优化问题 $\mathbf{f}(X)$,它的最优解 X^* 定义为

$$\mathbf{f}(X^*) = \underset{X \in \Omega}{\text{opt}} \mathbf{f}(X) \quad (1.8)$$

其中,

$$\mathbf{f}: \Omega \rightarrow \mathbf{R}^r \quad (1.9)$$

这里 Ω 为满足式(1.1)和式(1.2)的可行解集,即

$$\Omega = \{X \in \mathbf{R}^n \mid g_i(X) \geq 0, h_j(X) = 0; (i = 1, 2, \dots, k; j = 1, 2, \dots, l)\}$$

称 Ω 为决策变量空间(简称决策空间), 向量函数 $f(X)$ 将 $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ 映射到集合 $\Pi \subseteq \mathbb{R}^r$, Π 是目标函数空间(简称目标空间)。

定义 1.1 是从理论上对 Pareto 最优解的一个最一般的描述, 在多目标进化算法的有关文献中, 还有多种更具体的定义, 这些定义一方面有助于更好地理解 Pareto 最优解的含义, 同时对设计算法具有重要指导意义。比较有代表性的定义有下列几个。

定义 1.2 给定一个多目标优化问题 $\min f(X)$, 称 $X^* \in \Omega$ 是最优解(即 Pareto optimal solution), 若 $\forall X \in \Omega$, 满足下列条件:

或者

$$\bigwedge_{i \in I} (f_i(X) = f_i(X^*)) \quad (1.10)$$

或者至少存在一个 $j \in I, I = \{1, 2, \dots, r\}$, 使

$$f_j(X) > f_j(X^*) \quad (1.11)$$

其中 Ω 是满足式(1.1)和式(1.2)的可行解集, 其意义同定义 1.1。

定义 1.3 给定一个多目标优化问题 $\min f(X)$, 若 $X^* \in \Omega$, 且不存在其它的 $\bar{X} \in \Omega$ 使得 $f_j(X^*) \geq f_j(\bar{X}^*) (j=1, 2, \dots, r)$ 成立, 且其中至少一个是严格不等式, 则称 X^* 是 $\min f(X)$ 的 Pareto 最优解。其中 Ω 是满足式(1.1)和式(1.2)的可行解集, 其意义同定义 1.1。

定义 1.4 给定一个多目标优化问题 $\min f(X)$, 设 $X_1, X_2 \in \Omega$ 。

如果 $f(X_1) \leq f(X_2)$, 则称 X_1 比 X_2 优越;

如果 $f(X_1) < f(X_2)$, 则称 X_1 比 X_2 更优越。

定义 $X^* \in \Omega$:

若比 X^* 更优越的 $X \in \Omega$ 不存在, 则称 X^* 为弱 Pareto 最优解;

若 X^* 比任何 $X \in \Omega$ 都优越, 则称 X^* 为完全 Pareto 最优解;

若比 X^* 优越的 $X \in \Omega$ 不存在, 则称 X^* 为强 Pareto 最优解。

其中 Ω 是满足式(1.1)和式(1.2)的可行解集, 其意义同定义 1.1。

由以上定义可以看出, 满足 Pareto 最优解条件的往往不止一个, 而是一个最优解集(Pareto optimal set), 这里用 $\{X^*\}$ 表示。 $\{X^*\}$ 定义如下。

定义 1.5 给定一个多目标优化问题 $\min f(X)$, 它的最优解集定义为

$$P^* = \{X^*\} = \{X \in \Omega \mid \neg \exists X' \in \Omega, f_j(X') \leq f_j(X), (j=1, 2, \dots, r)\}$$

多目标进化算法的优化过程是, 针对每一代进化群体, 寻找出其当前最优个体(即当前最优解), 称一个进化群体的当前最优解为非支配解(non-dominated solution), 或称为非劣解(non-inferior solution); 所有非支配解的集合称为当前进化群体的非支配集(non-dominated solutions, NDS), 并使非支配集不断逼近真正的最优解集, 最终达到最优, 即使 $NDS_{Set}^* \subseteq \{X^*\}$, NDS_{Set}^* 为算法运行结束时所求得的非支配集。

1.2.2 Pareto 最优边界

为了更好地理解 Pareto 最优解,下面讨论它在目标函数空间中的表现形式。简单地说,一个多目标优化问题的 Pareto 最优解集在其目标函数空间中的表现形式就是它的 Pareto 最优边界(Pareto front)。Pareto 最优边界 PF^* 或 PF_{true} (true Pareto front)定义如下。

定义 1.6 给定一个多目标优化问题 $\min f(X)$ 和它的最优解集 $\{X^*\}$,它的 Pareto 最优边界定义为

$$PF^* = \{f(X) = (f_1(X), f_2(X), \dots, f_r(X)) \mid X \in \{X^*\}\}$$

注意 Pareto 最优解集和 Pareto 最优边界之间的联系与区别。大家知道,多目标优化是从决策空间 $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ 到目标空间 $\Pi \subseteq \mathbb{R}^r$ 的一个映射。Pareto 最优解集 P^* 是决策向量空间的一个子集,即有 $P^* \subseteq \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$;而 Pareto 最优边界则是目标函数空间的一个子集,即有 $PF^* \subseteq \Pi \subseteq \mathbb{R}^r$ 。

一个多目标问题的最优解 $X^* \in P^*$,或 $Y^* = \min f(X^*) \in PF^*$,前者属于决策向量空间,后者属于目标函数空间,要注意区分。如图 1.1 所示,最优边界上的点(或个体) A, B, C, D, E, F 是 Pareto 最优解,它们属于目标空间。

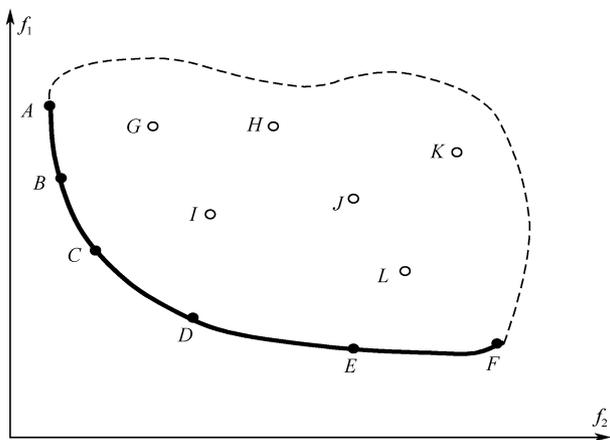


图 1.1 两个目标的最优边界

在目标空间中,最优解是目标函数的切点,它总是落在搜索区域的边界线(面)上。如图 1.1 所示,粗线段表示两个优化目标的最优边界。3 个优化目标的最优边界构成一个曲面,3 个以上的最优边界则构成超曲面。在图 1.1 中,实心点 A, B, C, D, E, F 均处在最优边界上,它们都是最优解(Pareto points),是非支配的

(non-dominated); 空心点 G, H, I, J, K, L 落在搜索区域内, 但不在最优边界上, 不是最优解, 是被支配的 (dominated), 它们直接或间接受最优边界上的最优解支配。读者可用定义 1.2 和定义 1.3 来验证图 1.1 中粗线段上的点是否均为最优解。有关支配和非支配的概念可参见本书 1.3 节。

多目标遗传算法在优化过程中, 初始时随机产生一个进化群体 Pop_0 , 然后按照某种策略构造 Pop_0 的非支配集 $NDSet_0$, 此时的 $NDSet_0$ 可能距离 $\{X^*\}$ 比较远。按照某种方法或策略产生一些个体, 这些个体可以是被当前非支配集 $NDSet_0$ 中的个体所支配的, 也可以是随机新产生的, 连同 $NDSet_0$ 中的个体一起构成新的进化群体 Pop_1 , 对新进化群体 Pop_1 执行进化操作后, 再构造新的非支配集 $NDSet_1$ 。由于 $NDSet_1$ 是在 $NDSet_0$ 的基础上产生的, 因此 $NDSet_1$ 比 $NDSet_0$ 更接近 $\{X^*\}$ 。如此继续下去, 从理论上说, 必能构造出 $NDSet_i$, 使得当 $i \rightarrow \infty$ 时, $NDSet_i$ 为 Pareto 最优解集, 即 $\lim_{i \rightarrow \infty} NDSet_i = NDSet^*$, 使 $NDSet^* \subseteq \{X^*\}$ 。

1.2.3 凸空间和凹空间

在讨论与评价一个 MOEA 的搜索性能的时候, 常涉及到凸空间 (convexity) 和凹空间 (concavity 或 non-convexity) 的概念。如某些 MOEA 在搜索空间呈凹状时, 难以找到最优解。凸空间和凹空间也叫凸集和凹集。

定义 1.7 称 S 是一个凸集, 若 $X_1, X_2 \in S$, 则 $X \in S$, 其中 $X = \theta X_1 + (1 - \theta) X_2$, $0 \leq \theta \leq 1$ 。

也就是说, 如果一个集合中任意两点的连线上的点仍在该集合中, 则该集合为凸集, 否则为凹集。图 1.2 和图 1.3 所示分别为凸集和凹集。

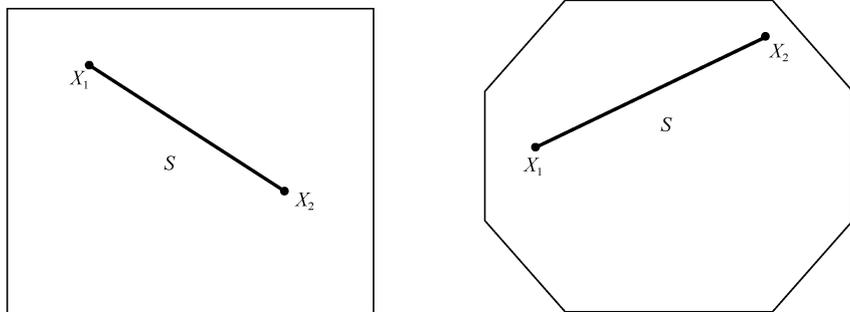


图 1.2 两个凸集示例

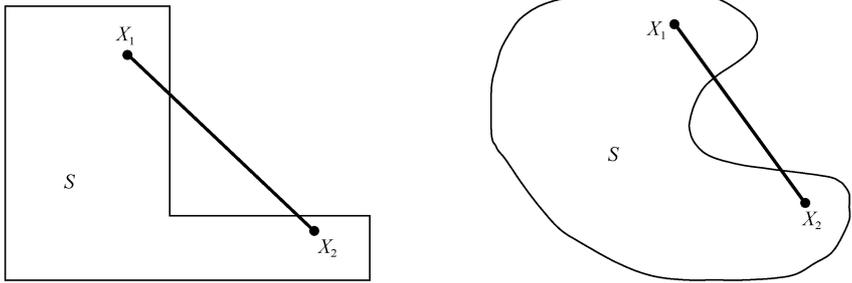


图 1.3 两个凹集示例

1.3 多目标进化个体之间的支配关系

对两个量之间的大小关系进行比较时,在单目标情况下,如常量 5 和 8,显然有 5 比 8 小或 8 比 5 大两种情况;对两个变量(个体) x 和 y 进行比较时,可能存在三种关系: x 大于 y 、 x 等于 y 、 x 小于 y 。在多目标情况下,由于每个个体有多个属性,比较两个个体之间的关系不能使用简单的大小关系。如两个目标的个体(2, 6)和(3, 5),在第一个目标上有 2 小于 3,而在第二个目标上又有 6 大于 5,那么在这种情况下个体(2, 6)和(3, 5)之间的关系是什么呢? 另一种情况,如个体(2, 6)和(3, 8),它们之间的关系又是什么呢? 当目标数大于 2 时,又如何确定不同个体之间的关系呢?

为此,接下来就讨论多目标个体之间非常重要的一种关系,叫做支配关系。

定义 1.8(个体之间的支配关系) 设 p 和 q 是进化群体 Pop 中的任意两个不同的个体,称 p 支配(dominate) q ,则必须满足下列两个条件:

- ① 对所有的子目标, p 不比 q 差,即 $f_k(p) \leq f_k(q), (k=1, 2, \dots, r)$ 。
- ② 至少存在一个子目标,使 p 比 q 好。即 $\exists l \in \{1, 2, \dots, r\}$, 使 $f_l(p) < f_l(q)$ 。

其中 r 为子目标的数量。

此时称 p 为非支配的, q 为被支配的,表示为 $p > q$,其中“ $>$ ”是支配关系(dominate relation)。

值得说明的是,这里所定义的支配关系是“小”个体支配“大”个体,也可以按照完全相反的方式来定义支配关系,这取决于所求解的问题。此外,本书在表述上将“ p 支配 q ”表示为“ $p > q$ ”,而在有些文献上则刚好相反,将“ p 支配 q ”表示为“ $p < q$ ”。

定义 1.8 所定义的支配关系是针对决策空间的,类似地,可以在目标空间中定义支配关系,如定义 1.9 所示。

定义 1.9(目标空间中的支配关系) 设 $U=(u_1, u_2, \dots, u_r)$ 和 $V=(v_1, v_2, \dots, v_r)$ 是目标空间中的两个向量, 称 U 支配 V (表示为 $U > V$), 当且仅当 $u_k \leq v_k (k=1, 2, \dots, r)$ 且 $\exists l \in \{1, 2, \dots, r\}$, 使 $u_l < v_l$ 。

根据定义 1.9, 可以得出结论: (2, 6) 支配 (3, 8), (2, 6) 和 (3, 5) 之间互不支配。

值得说明的是, 决策空间中的支配关系与目标空间中的支配关系是一致的, 这一点由定义 1.8 可以看出, 因为决策空间中的支配关系实质上是由目标空间中的支配关系决定的。此外, 个体之间的支配关系还有程度上的差异, 参见定义 1.10 和定义 1.11。

定义 1.10(弱非支配: weak nondominance) 若不存在 $X \in \Omega$, 使 $f_k(X) < f_k(X^*) (k=1, 2, \dots, r)$ 成立, 则称 $X^* \in \Omega$ 为弱非支配解 (a weakly nondominated solution)。

定义 1.11(强非支配: strong nondominance) 若不存在 $X \in \Omega$, 使 $f_k(X) \leq f_k(X^*) (k=1, 2, \dots, r)$ 成立, 且至少存在一个 $i \in \{1, 2, \dots, r\}$, 使 $f_i(X) < f_i(X^*)$, 则称 $X^* \in \Omega$ 为强非支配解 (a strongly nondominated solution)。

由以上定义可以看出, 如果 X^* 是强非支配的, 则 X^* 也是弱非支配的, 反之则不然。对于两个目标的情况, 如图 1.4 所示, 在目标空间中强非支配解均落在粗曲线上, 弱非支配解则落在细直线上。

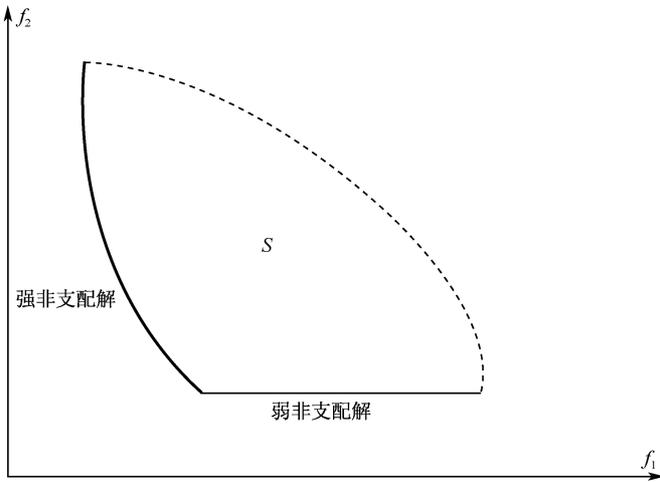


图 1.4 强非支配解和弱非支配解示例

为了进一步说明强非支配解和弱非支配解, 下面来看一个例子。设一个三目标优化问题为 $\min f(X) = (f_1(X), f_2(X), f_3(X))$, 有 3 个可行解 X_1, X_2 和 X_3 , 它们对应的目标向量值为: $f(X_1) = (3, 8, 6)$, $f(X_2) = (5, 8, 12)$ 和 $f(X_3) = (7, 9,$

8), 显然有 X_1 支配 X_2 和 X_3 。 X_1 和 X_2 比较时, 因为在第二个目标值上均为 8, 故 X_1 是一个弱非支配解。 X_1 和 X_3 比较时, 因为 X_1 所对应的目标函数值的每一个分量均小于 X_3 所对应的值, 故 X_1 是一个强非支配解。

1.4 多目标进化算法

多目标进化算法的基础是进化算法, 它的处理对象则是多目标优化问题 (multi-objective problem, MOP)。由于 MOEA 种类较多, 所采用的方法和技术有较大的差异, 难以用一般框架来刻画。为了便于理解, 这里给出一类基于 Pareto 的多目标进化算法的一般流程, 如图 1.5 所示。首先产生一个初始种群 P , 接着选择某个进化算法 (如遗传算法) 对 P 执行进化操作 (如交叉、变异和选择), 得到新的进化群体 R 。然后采用某种策略构造 $P \cup R$ 的非支配集 $NDSet$, 一般情况下在设计算法时已设置了非支配集的大小 (如 N), 若当前非支配集 $NDSet$ 的大小大于或小于 N 时, 需要按照某种策略对 $NDSet$ 进行调整, 调整时一方面使 $NDSet$ 满足大小要求, 同时也必须使 $NDSet$ 满足分布性要求。之后判断是否满足终止条件, 若满足终止条件, 则结束, 否则将 $NDSet$ 中的个体复制到 P 中并继续下一轮进化。在设计多目标进化算法时, 一般用进化代数来控制算法的运行。

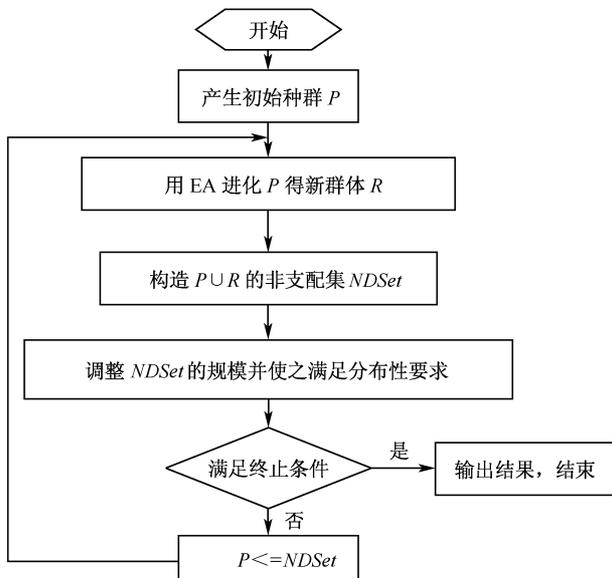


图 1.5 一类 MOEA 基本的框架

在 MOEA 中, 保留上一代非支配集, 并使之参入新一代的多目标进化操作是非常重要的, 这类似于进化算法中保留上一代的最优个体, 从而使新一代的非支配

集不比上一代差,这也是算法收敛的必要条件。这样,一代一代地进化下去,进化群体的非支配集不断地逼近真正的最优边界(true Pareto optimal front),最终得到满意的解集(不一定是最优解集)。

就一个具体的 MOEA 来说,如何选择构造非支配集的方法,采用什么样的策略来调整非支配集的大小,如何保持非支配集的分布性,是决定一个 MOEA 性能的重要内容。这些内容也是当前 MOEA 研究的热点。

1.5 多目标进化算法研究的历史与现状

早在 1967 年 Rosenberg 就建议采用基于进化的搜索来处理多目标优化问题(Rosenberg 1967),但他没有具体实现。1984 年,David Schaffer 首次在机器学习中实现了向量评估遗传算法(vector evaluated genetic algorithm, VEGA)(Schaffer 1984)。1989 年,David Goldberg 在其著作《Genetic algorithms for search, optimization, and machine learning》中,提出了用进化算法实现多目标的优化技术(Goldberg 1989),对多目标进化算法的研究具有重要的方向性的指导意义。近年来,多目标进化算法引起了许多研究者的广泛关注,并涌现出了大量的研究成果。

从 1994 年到 2001 年的 8 年,国际上所出版的关于 MOEA 的论文是过去 10 年(1984~1993)的 3 倍多(Coello Coello et al. 2002)。最近几年的发展速度比过去 8 年又有提高,一方面从 2001 年以来,每两年召开一次有关多目标进化的国际会议(evolutionary multi-criterion optimization, EMO);另一方面,在国际刊物“IEEE Transactions on Evolutionary Computation”(1997 年创刊)、“Evolutionary Computation”(1993 年创刊)和“Genetic Programming and Evolvable Machines”(1999 年创刊),以及各类国际进化计算的会议(如 Congress on Evolutionary Computation、Genetic and Evolutionary Computation Conference 等)上所发表的有关多目标进化的论文比过去有较大幅度的增加。Coello Coello 建立了一个有关 MOEA 的信息库,收集了大多数最新研究结果,其中许多论文是可以直接下载的,有兴趣的读者可访问网址 <http://delda.cs.cinvestav.mx/~ccoello/EMOO>,或 <http://www.lania.mx/~ccoello/EMOO/>。

1.5.1 MOEA 的分类

MOEA 种类较多,根据不同的需要也有多种分类方法。本节只讨论按不同的选择机制和不同的决策方式对 MOEA 进行分类。

1. 按不同的选择机制分类

按选择机制的不同(Coello Coello et al. 2004),MOEA 可以分为以下几类:

- 聚集函数(aggregating functions);
- 基于群体的方法(population-based approaches);
- 基于 Pareto 的方法(Pareto-based approaches)。

(1) 聚集函数(Hajela et al. 1992)

在处理多目标优化问题时,最直接的方法,也是较早所使用的方法就是聚集函数方法。这种方法是将被优化的所有子目标组合(combine)或聚集(aggregate)为单个目标,从而将多目标优化问题转换为单目标的优化问题。

例如,设有 r 个子目标,对 r 个子目标的优化问题可以转化为

$$\min \sum_{i=1}^r w_i \times f_i(X) \quad (i = 1, 2, \dots, r) \quad (1.12)$$

这里 $w_i \geq 0$ 为第 i 个子目标的权重系数,且一般有

$$\sum_{i=1}^r w_i = 1 \quad (1.13)$$

聚集函数可以是线性的,也可以是非线性的。当聚集函数呈线性时,无论如何调整权重系数,都难以搜索到非凸解(Das et al. 1997, Brian et al. 1994, Richardson et al. 1989)。但当聚集函数呈非线性时,可以很好地解决以上问题(Coello Coello et al. 2002, Jaskiewicz 2002)。

(2) 基于群体的方法

基于群体的方法主要靠群体的进化来实现分布搜索,在选择机制中没有用到 Pareto 支配。这类方法的典型代表是 VEGA(Schaffer 1984, 1985)。每一代进化时,依次针对每个子目标利用比例选择法产生 r 个子群体,每个子群体的大小为 N/r ,这里 r 为目标数, N 为进化群体大小。各子群体独立地执行进化操作,然后,再将 r 个子群体合并为一个群体大小为 N 的总群体,并执行进化操作。整个进化过程即是不断地迭代执行各子群体的进化和总群体的进化操作。在 VEGA 中,比较突出的一个问题是选择机制与 Pareto 支配之间是一对矛盾。如一个好的折衷解(即 Pareto 最优解),考虑了所有的子目标,它对于单个子目标来说就不是最优解,这样的解在选择操作时就可能会被“丢弃”。此外,“物种形成(speciation)”也是一个不容忽视的问题,如在群体中可能存在着在某些方面表现突出的物种,因为在选择操作时只考虑了一个目标而忽视了其它的目标。Schaffer 建议使用启发式方法弥补上述缺陷。

(3) 基于 Pareto 的方法

基于 Pareto 方法的主要特征是在选择机制中融入了 Pareto 最优(Pareto optimality)的概念。如 Deb 提出的 NSGA(the nondominated sorting genetic algorithm),将进化群体按支配关系分为若干层,第一层为进化群体的非支配个体集合,第二层为在进化群体中去掉第一层个体后所求得的非支配个体集合,第三层为在进化群体去掉第一层和第二层个体后所求得的非支配个体集合,以此类推。选

择操作首先考虑第一层非支配集,按照某种策略从第一层中选取个体;然后再考虑在第二层非支配个体集合中选择个体,以此类推,直至满足新进化群体的大小要求。

近年的研究主要集中于这类方法,比较具有代表性的算法有:

① Fonseca 和 Fleming 提出的 MOGA(Fonseca et al. 1993)。

② Srinivas 和 Deb 等提出的 NSGA(Srinivas et al. 1993, 1994),以及 Deb 等提出的 NSGA-II(Deb et al. 2002)。

③ Horn 和 Nafpliotis 等提出的 NPGA(niched Pareto genetic algorithm)(Horn et al. 1994)。

④ Zitzler 和 Thiele 提出的 SPEA(strength Pareto evolutionary algorithm)(Zitzler et al. 1999),以及 SPEA2(Zitzler et al. 2001)。

⑤ Van Veldhuizen 通过扩充 mGA(a messy genetic algorithm)(Deb et al. 1991),提出了 MOMGA(multi-objective messy genetic algorithm)(Van Veldhuizen 1999a),后来 Zydallis 在 MOMGA 的基础上提出了 MOMGA-II(Zydallis 2003)。

⑥ Pelikan 等提出的 BOA(Bayesian optimization algorithm)(Pelikan et al. 2000),Khan 通过扩充 BOA 提出了 mBOA(multiple-objective Bayesian optimization algorithm)(Khan 2003)。

⑦ Knowles 等提出的 PAES(Pareto archived evolution strategy)(Knowles et al. 2000)。

⑧ Corne 等提出的 PESA(the Pareto envelope-based selection algorithm for multi-objective optimization)(Corne et al. 2000, 2001)。

⑨ Coello Coello 等提出的 MGAMOO(a micro-genetic algorithm for multi-objective optimization)(Coello Coello et al. 2001, 2001a)。

⑩ Knarr 等提出的 GENMOP(general multi-objective program)(Knarr et al. 2003)。

⑪ 曾三友等提出的 OMOEA(orthogonal multi-objective evolutionary algorithm)(Zeng et al. 2004, 曾三友等 2005)。

⑫ 郑金华提出的 DMOEA(density based multi-objective evolutionary algorithm)(郑金华 2005)。

2. 按不同的决策方式分类

按决策方式的不同,Coello Coello 等将多目标进化算法分为三大类(Coello Coello et al. 2002):

- 前决策技术(priori technique);
- 交互决策技术(progressive technique);

- 后决策技术(*posteriori technique*)。

MOEA 前决策技术在 MOEA 搜索之前就输入决策信息,然后通过 MOEA 运行产生一个解提供给决策者;而 MOEA 后决策技术则通过运行 MOEA 产生一组解供决策者选择;MOEA 交互决策技术则是通过决策者与 MOEA 搜索过程的不断交互实现的。统计到 2001 年(Coello Coello et al. 2002),在论文引用方面,有关后决策技术的论文是前决策技术和交互决策技术二者之和的 4 倍。

(1)前决策技术

前决策技术主要有下列方法:*lexicographic*, *linear fitness combination* 和 *non-linear fitness combination*。*lexicographic* 方法首先将目标按重要性排序,然后依次选择目标进行优化;也可以在每一代进化中随机地选择一个目标进行优化(Fourman 1985)。*linear fitness combination* 方法将多目标优化问题中的多个目标进行线性组合,并对各个子目标赋予不同的权值,将其转化为单目标问题的优化。*nonlinear fitness combination* 方法又有 3 类方法,即 *multiplicative fitness combination* 方法(将不同的目标值通过乘法运算组合起来)、*target vector fitness combination* 方法(将一个目标与其期望的目标之间的距离作为组合适应度)和 *minimax fitness combination* 方法(最小化各目标与决策者指定的目标之间的最大差异)。前决策技术的主要优点是简单,易于实现,同时具有较高的效率;最大的不足是限制了搜索空间,从而不能找出所有的可能解。

(2)后决策技术

后决策技术主要有下列方法:*independent sampling*、*criterion selection*、*aggregation selection* 和 *Pareto sampling*。

① *independent sampling* 方法是一类采用单目标搜索策略实现多目标优化的方法,每个目标赋予不同的权值,每次运行时对权值进行调整。其优点是简单并且具有较高的效率;不足之处是由于每次运行时需要调整权值,这样,当目标数目比较大时,运行次数就会很大。

② VEGA(Schaffer 1985)是 *criterion selection* 方法的典型代表,将一个规模为 M 的群体分成 k 个子群体并分别针对不同的子目标进行进化,每个子群体规模为 M/k (k 为目标数),然后将 k 个子群体混合到一起进化。其优点是简单,易于实现,一次运行可以产生多个解;不足之处是当 Pareto 最优边界呈非凸时难以找到最优解。

③ *aggregation selection* 方法是一类采用 *fitness combination* 方法(线性或非线性的),对所求取的个体适应度进行选择操作的方法,每次运行时产生一组解。不足之处是因为采用了带权组合法求个体的适应度,因此,将会丢失一些属于最优边界上的解。

④ *Pareto sampling* 方法的基本思路是利用基于 Pareto 的适应度分配策略,从当前进化群体中找出所有非支配个体,这种方法最早是由 Goldberg 提出来的

(Goldberg 1989)。主要有以下几类: Pareto-based selection、Pareto deme-based selection、Pareto elitist-based selection 和 Pareto rank-and niche-based selection。

- Pareto-based selection 方法引入了 Pareto 排序机制来实现选择操作,但不是用 Niching、Crowding 或 Fitness Sharing 等机制来维持解群体的分布性 (Kita et al. 1996, Brown and Thomas 1998),而是采用别的方法来维持解群体的分布性和多样性,如在 TDGA(thermodynamical genetic algorithm) (Kita et al. 1996)中通过调节温度 T 来控制解群体的分布性和多样性。
- Pareto deme-based selection 将 Pareto 排序机制引入到各子群体中实现选择操作 (Marvin et al. 1999, Kim et al. 2001),通过各子群体的并行进化来维持解群体的分布性和多样性。自然地,由于各子群体之间的信息交换而增加了通信开销。
- Pareto elitist-based selection 将当前进化群体中一部分优秀个体直接复制到下一代,而不对它们执行任何进化操作。最典型的代表是 PESA (Corne et al. 2001),它设置了一个内部群体 IP(internal population) 和一个外部群体 EP(external population)。进化时将 IP 中的非支配个体并入到 EP 中,当一个新个体进入 EP 时,同时要在 EP 中淘汰一个个体。具体方法是在 EP 中寻找挤压系数(squeeze factor)最大的个体并将它清除掉,如果同时存在多个个体具有相同的挤压系数,则随机地清除一个。挤压系数被看成选择操作的适应度,当采用锦标赛选择方法,从 EP 中随机地选取两个个体时,具有较低的挤压系数的个体将被选中。在这里,一个个体的挤压系数是指该个体所对应的网格(hyper-box)中所聚集个体的总数目,而整个个体(显型)空间被划分为若干个这样的网格,这样做的目的主要是为了维持解群体的分布性或多样性。类似于 PESA,网格(hyper-grid)也被 PAES 采用 (Knowles et al. 2000)。只是选择操作有所不同,因为 PAES 事实上是一个用于局部搜索的爬山算法,选择操作只在当前解与变异个体二者之中进行。IS-PAES (inverted-shrinkable PAES) (Arturo et al. 2004)对 PAES 进行了改进,采用缩减搜索空间的策略,在一定程度上提高了算法的效率。值得说明的是,这里提到的 hyper-grid(或 hyper-box)指的是一块区域,统称为“网格”,在强调高维时,也可称之为“超网格”。在后续其它章节中,网格的含义与此相同。
- Pareto rank- and niche-based selection 方法是目前最热门的方法,发表的论文比其它方法多得多,它对不同层次的非支配个体赋予不同的 rank 值,采用 niche 共享机制来维持解群体的分布性和多样性。最具代表性的算法有:Fonseca 和 Fleming 的 MOGA、Horn 和 Nafpliotis 的 NPGA、Zitzler 和 Thiele 的 SPEA、Srinivas 和 Deb 的 NSGA。

Fonseca 和 Fleming 在 MOGA 中提出了一种方法 (Fonseca et al. 1993,

1995),对每个个体分别计算其分类序号(rank),所有非支配个体的分类序号定义为1,其它个体的分类序号为支配它的个体数目加1。具有相同分类序号者用目标函数共享机制进行选择。MOGA的主要优点是运行效率高,同时比较易于实现(Van Veldhuizen et al. 1999)。它的不足与其它 Pareto 排序分类方法一样,过于依赖共享参数的选择,同时可能产生较大的选择压力,从而导致非成熟收敛(Goldberg et al. 1991)。此外,当多个不同的 Pareto 最优解对应于相同的目标函数值时,MOGA 难以找出多个解(Deb 1999)。

Horn 和 Nafpliotis 等基于 Pareto 支配关系提出了 NPGA (Horn et al. 1994)。随机地从进化群体中选择两个个体,再随机地从进化群体中选取一个比较集 CS,如果其中一个个体不受 CS 的支配,则这个个体将被选中参与下一代进化,否则采用小生境技术(niche)实现共享来选取其中之一参与下一代进化(Horn et al. 1994)。NPGA 的主要优点是运行效率比较高,且能获得较好的 Pareto 最优边界。不足之处是小生境半径的选取与调整比较困难。

Zitzler 和 Thiele 于 1999 年提出了 SPEA (Zitzler et al. 1999),SPEA 中个体的适应度又称为强度(strength),非支配集中个体的适应度定义为其所支配的个体总数在群体中所占的比重,其它个体的适应度定义为支配它的个体总数加1,约定适应度低的个体对应着高的复制概率。这种方法的特点是简单,但一次迭代计算适应度的时间复杂度为 $O(kN^3)$ (这里 k 为目标数, N 为群体规模),因此运行效率比较低。SPEA2(Zitzler et al. 2001)是对 SPEA 的改进,其一次迭代计算适应度的时间复杂度已降低为 $O(kN^2 \log N)$ 。

Srinivas 和 Deb 等基于个体的多层次分类,提出了 NSGA (Srinivas et al. 1993)。通过一个二重循环计算每个个体的 n_i 和 s_i ,其中 n_i 记录支配个体 i 的个体数, s_i 记录被个体 i 支配的个体的集合。按方法 $P_k = \{ \text{所有个体 } i | n_i - k + 1 = 0 \}$ 求支配集和非支配集,其中 P_1 为非支配集(即当 $n_i = 0$ 时,个体 i 是非支配的),其它的为支配集。NSGA 构造非支配集的时间复杂度为 $O(kN^2)$,NSGA-II(Deb et al. 2002)是对 NSGA 的改进,构造非支配集的效率有所提高(但仍为 $O(kN^2)$),NSGA-II 的不足是难以找到孤立点(Coello Coello et al. 2002)。

(3)交互决策技术

交互决策技术是决策与搜索或搜索与决策的交互过程,在此过程中既可能用到前决策技术,也可能用到交互决策技术。不足之处是难以定义决策偏好,同时效率比较低。

1.5.2 MOEA 理论研究

有关 MOEA 理论方面的研究结果比较少,大约只有 1% 的论文涉及到 MOEA 的理论分析,如收敛性分析、Pareto 最优解集的构造方法、不同 MOEA 的性能评

价、MOEA 的测试及测试函数的构造方法等。

在 MOEA 收敛性方面,崔逊学(崔逊学 2003)、Van Veldhuizen 等(Van Veldhuizen et al. 1999)、Rudolph(Rudolph 2001)、Hanne(Hanne 1999)、Knowles 等(Knowles et al. 2003)和 Zhang 等(Zhang et al. 2004)做出了重要的贡献,证明了 MOEA 满足约定条件下的收敛性。Knowles 等(Knowles et al. 2003)讨论了自适应网格算法(AGA),当 Pareto 最优解的最大上边界就是可行解集的最大上边界时,可以在有限步内收敛;其它多数都是讨论时间趋向于无穷大时 MOEA 的收敛性。因此,Coello Coello 等认为,至今还没有证据表明 MOEA 是否真的收敛到了 PF_{true} ,已有的理论结果也只是做一些简单的假设,从而得出有限的理论结果(Coello Coello et al. 2002)。

对 Pareto 最优解集的构造方法,Rudolph 做了一系列的研究(Rudolph 1998a, 2001, 2001a),Deb 等(Deb et al. 2002)、Jensen(Jensen 2003)也提出了构造 MOEA 最优解集的方法,郑金华等(郑金华等 2004, 2005)通过对进化个体之间关系的研究,提出了多种构造 Pareto 最优解集的有效方法。曾三友等提出了一种快速算法求解非支配集(非劣集合)(曾三友等 2004),主要特点是:不直接求原集合的非劣集合而是转化成求一个整型集合的非劣集合;它制定一个总体上非劣元素在前、劣元素在后的检查序列,并以尽可能少的比较次数检查一个元素的非劣性,一旦发现后面的元素全劣则终止搜索。当非支配集较大时,该算法具有较高的效率。

在算法性能评价方面,Zitzler 等提出了 MOEA 性能评价的一般准则(Zitzler et al. 2000),Deb 等提出了具体的评价方法(Deb et al. 2002);Esbense 等提出了用加权和的方法来评价 MOEA 的性能(Esbense et al. 1996);Zitzler 等提出了用覆盖空间大小(size of space covered)来评价算法的性能(Zitzler et al. 1999a),同时提出了多种其它性能评价方法(Zitzler et al. 2000);Wu 等提出了用超区域覆盖差(hyperarea difference)来评价最优解集的质量(Wu et al. 2001);Van Veldhuizen 提出了最大 Pareto 解边界误差(maximum Pareto front error)、代际距离(generational distance)和间距(spacing)等方法(Van Veldhuizen et al. 1999a);Ali Farhang-Mehr 等从信息论的角度出发(Ali Farhang-Mehr et al. 2002, 2003),提出了一种基于信息论的性能评价方法——解集的熵,用于评价近似解面的多样性,熵越大的解集,它在目标向量空间可行域上的分布就越均匀,说明该解集的覆盖性能也越好。Zitzler 等通过严格的数学证明指出(Zitzler et al. 2002),有限个一元性能评价方法的组合无法给出两个近似解集之间的优劣关系,也可以说,确定一个近似解集好坏的准则在数目上是无限的,即仅仅根据近似解边界到 Pareto 最优解边界的距离和近似解面的多样性无法唯一确定一个解集的优劣。

在 MOEA 的测试及测试函数的构造方法方面,Whitley 等提出了测试函数的设计准则(Whitley et al. 1996);Deb 等研究了测试函数的构造方法(Deb et al.

1999, 2001, 2002a, 2005), 并提出了多种测试函数; Simon Huband 等提出的测试工具集具有较好的代表性 (Huband et al. 2005); Van Veldhuizen 指出 (Van Veldhuizen 1999a), 多目标优化问题的测试函数集应当包含 Pareto 最优解集和 Pareto 最优解边界的所有可能的性质。

总的来说, 有关 MOEA 的理论研究结果比较少, 远远落后于 MOEA 的实现和应用。

1.5.3 MOEA 应用研究

MOEA 应用研究是目前最为热门的主题之一, 大约有 50% 的论文着眼于解决实际问题, 这就是 MOEA 具有生命力的一个重要原因。事实上, 比较早期的向量评估遗传算法 (VEGA) 就是为了解决机器学习中的有关问题而提出的。MOEA 发展到今天, 已经在许多领域得到了成功应用, 如优化控制 (马清亮等 2004a)、数据挖掘 (Oliveira et al. 2005, Iglesia et al. 2005)、机械设计 (Chiba et al. 2005)、移动网络规划 (李满林等 2003)、证券组合投资 (林丹 2002)、仿人机器人中枢神经运动控制器的设计 (姜山等 2001)、固体火箭发动机的优化设计 (杨青等 2002)、QoS 路由 (杨云等 2004)、物流配送 (张潜等 2003, Jourdan et al. 2005, Mariano-Romero et al. 2005)、逻辑电路设计 (赵曙光等 2004)、多主体自动协商 (Zheng et al. 2004)、多传感器多目标跟踪数据关联 (朱力立等 2003)、水下机器人运动规划 (张铭钧等 2001)、导弹自动驾驶仪设计 (Blume et al. 2000)、柔性制造系统流程规划 (Chen et al. 2001)、森林规划优化 (Ducheyne et al. 2001) 和车间调度问题 (Esquivel et al. 2002, Mark et al. 2005) 等。

总之, 有关 MOEA 应用的文献很多, 涉及的领域也很广。本书第 8 章将会对 MOEA 的应用做比较详细的讨论。

1.6 有待进一步研究的课题

目前国内外有关 MOEA 的研究进入了快速发展阶段, 并取得了许多可喜成果。但由于 MOEA 是比较年轻的学科领域, 值得进一步研究的课题还有很多, 这里罗列一些以供读者学习和研究时参考。

(1) 更一般的、更通用的、更接近于自然进化的 MOEA 模型

已有的 MOEA 研究, 主要是模仿生物自身的进化过程, 没有 (或很少) 考虑进化环境对进化的作用, 实际上进化环境对进化个体的影响也是非常重要的, 正是因为大自然中环境和生物体之间奇妙的相互作用, 才使得生命体有今天这样完美的结构。此外, 已有的 MOEA 都与所求解的问题密切相关, 即过分地依赖于所求解的问题, 应用一个 MOEA 去求解不同的优化问题时, 一般要对 MOEA 做一定的

修改。第三,已有的 MOEA,所采用的进化策略、个体适应度的分配机制、解群体的分布性保持方法等大多各不相同,各有其特点和不足,没有一个比较一致的模式来规范 MOEA 的设计。第四,应用者,特别是不怎么熟悉 MOEA 的应用者,一方面难以选取合适的 MOEA,更为突出的是不知道怎么修改 MOEA 使之适合求解自己的问题。因此,建立一个更为一般的、具有通用性的、便于一般应用者使用的 MOEA 框架和模型,具有十分重要的理论价值和应用价值。

(2) 基于进化环境的多目标进化模型

基于进化环境的 MOEA (evolutionary environment based MOEA , EEMOEA),借鉴自然界生物进化环境的特征(如环境对个体的约束和规范),在传统 MOEA 的进化模式上,充分考虑进化个体与进化环境的相互影响和相互作用,从而使 EEMOEA 具有像生物自然进化一样的进化能力和功效,这种研究方法更加符合自然进化的一般规律。进化环境与所求解的问题密切相关,是基于进化环境的 MOEA 的一个重要组成部分,但它又具有独立性。它对进化个体起“约束、促进和导向”作用。EEMOEA 由两部分构成,一部分为进化环境(evolutionary environment, EE),另一部分为进化操作(evolutionary operation, EO)。EE 由依赖于问题的约束条件(包括分布性要求)、归档集(用于保存当前最优解个体)、最优解集与最优解个体在进化环境中的评价机制、促进和引导群体逼近优化目标的机制,以及环境选择机制等组成。这样,进化便分为两个阶段:个体进化和受环境约束的进化,EO 作用于进化群体使个体进化,EE 作用于归档集即为受环境约束的进化。

(3) MOEA 在有限时间内的收敛性

目前的主要研究集中于 MOEA 在理论上的收敛性,已论证了当时间趋向于无穷大时,MOEA 在约定条件下是收敛的。Knowles 等论证了当 Pareto 最优解的最大上边界就是可行解集的最大上边界时,自适应网格算法(AGA)可以在有限步内收敛(Knowles et al. 2003)。而对于一般的 MOEA,没有证据表明在有限时间内收敛(Coello Coello et al. 2002)。为了使 MOEA 得到更好的应用,对其在有限时间内的收敛性进行研究是非常有价值的。

(4) 构造多目标最优解集的最少时间复杂度

目前对构造 Pareto 最优解集的研究结果较少,对于已提出的几类算法,时间复杂度也不同。而 MOEA 在每一次迭代时都要构造 Pareto 最优解集,因此构造 Pareto 最优解集的效率对 MOEA 的运行效率有很大的影响。因此,非常有必要从理论上论证,对于一个有 k 个目标的优化问题,构造其 Pareto 最优解集的最少时间复杂度。

(5) 进化过程中,个体循环地进入归档集问题

在多目标进化过程中,可能重复产生相同的解个体,这些解个体因为边界条件的要求或是分布性的要求,而进入归档集中;与此同时,当进化过程中产生了比这些个体更优秀的个体时,它们又将被从归档集中删除。有的时候,以上过程会交替

地、循环地发生,从而导致算法不收敛。需要研究可行的方法来有效处理这类问题。

(6) MOEA 在采用不同参数时的比较研究

针对同一个 MOEA,采用不同的参数来研究算法的各项性能变化,如收敛性、鲁棒性等。参数主要有 3 类,一是测试问题参数,如不同的测试问题一般具有不同的问题特征,同一个测试问题在不同规模时也会对 MOEA 的性能具有很大的影响;二是 MOEA 自身的参数,如进化操作(交叉算子、选择机制、变异算子)、群体规模、共享机制等;三是环境参数,主要指 MOEA 运行的软硬件环境。

(7) MOEA 进化过程中,非支配集变化规律的研究

当所采用的进化策略不同,以及待优化的多目标问题不同时,MOEA 在进化过程的不同阶段,其非支配集的规模大小可能存在着较大的差异。如果能找出一般的规律,则有利于深入研究 MOEA 的进化机理。

(8) MOEA 运行的统一框架

目前的 MOEA 各有其特点和不足,它们适合于求解不同的问题。如果有一个一般的 MOEA 运行框架或环境,能让不同的 MOEA 在该环境下运行,并允许使用不同的进化机制,这对 MOEA 的研究和应用具有重要价值。

(9) 不确定多目标优化问题

传统 MOEA 主要是针对确定的多目标优化问题而设计的,而在现实世界中,许多多目标优化问题是不确定的,如何处理这类问题可参考有关文献(Teich 2001, Hughes, 2001, 2001a)。

(10) 比较并研究不同的保持进化群体分布性的方法

在已有的 MOEA 中,所采用的保持进化群体分布性的方法大多不相同,但各有其特点和不足。从本质上比较与研究它们之间的共同点、不同点,以及它们对 MOEA 收敛特性的影响是非常有意义的。

(11) MOEA 并行实现的研究

目前这方面的研究结果比较少,但因为 EA 所具有的隐并行性,并行 MOEA 的研究具有重要意义。

(12) MOEA 在异位显性(epistasis)问题中的应用

所谓异位显性问题(problems with epistasis or high epistasis)是指某个目标函数依赖于其它的决策变量之值。有兴趣的读者可参考有关文献(Tiwari et al. 2001)。

(13) 在 MOEA 中引入其它生物激励机制

EA 或 MOEA 本身就是模仿生物自然进化过程而设计的算法,可否在 MOEA 中引入其它的生物激励机制或概念(biologically-inspired concept),如成熟分裂(meiosis)、拉马克生物进化学(Lamarckism)、鲍尔温效应(Baldwin effect)等。有兴趣的读者可参考有关文献(Kadrovach et al. 2001, 2002)。

(14) 非支配向量的数据结构

Habenicht 提出了采用 quad tree 作为非支配向量的数据结构 (Habenicht et al. 1982), 一方面可以高效地在 quad tree 中查找到一个非支配向量, 另一方面可以比较快速地判断一个向量是否被 quad tree 上的非支配向量所支配。Chuan Shi 等 (Shi et al. 2003) 和 Xianming Chen (Chen 2001) 也分别提出了采用树作为非支配向量的数据结构, 这样可以使构造非支配集的方法具有很高的效率。总的来说, 这方面的研究结果很少。

(15) 用多目标优化方法处理单目标优化问题

一些学者提出了用多目标优化方法来处理某些单目标优化问题, 这样会使问题处理起来更加方便和容易。如在文献 (Knowles et al. 2001) 中, 将旅行商问题转化为多目标优化问题来处理。但并非所有的单目标优化问题都可以转化为多目标优化问题, 有的时候也没有任何意义。进一步的研究可以从哪些问题能转化、哪些问题不能转化, 以及这种转化的优缺点等方面展开。

(16) MOEA 测试问题的构造方法

MOEA 的性能测试是非常重要的工作, 已有 MOEA 测试问题主要是针对静态环境的, 而对动态环境的测试也很重要, 因此, 这方面的研究具有重要意义。

(17) MOEA 性能评价

主要从 3 个方面来评价 MOEA, 一是 MOEA 的收敛性, 二是 MOEA 所求解集的分布性, 三是 MOEA 的鲁棒性。目前已有不少评价方法, 有待进一步研究的课题有不同评价方法的优缺点、不同评价方法的适用范围, 以及新的评价方法等。

(18) MOEA 的应用

研究 MOEA 的目的, 就是为了应用 MOEA 去更好地解决实际问题。因此, MOEA 在各个领域的应用研究是最具有意义和价值的。

作为本章的结束语, 这里要特别介绍一位国际知名的进化计算领域的专家——姚新 (Xin Yao) 教授, 他现任英国伯明翰大学计算机系教授, 是 IEEE 进化计算杂志《IEEE Transactions on Evolutionary Computation》的主编, IEEE 院士 (IEEE Fellow)。姚新教授在进化计算领域做出了许多具有重要意义的贡献, 如: 提出了新颖的 EPNet 系统应用于人工神经网络 (权重和结构) 进化, 赢得了极负盛名的 IEEE Donald G. Fink 论文奖; 证明了两个关于 $N(N > 2)$ 个选手迭代囚犯困境的进化稳定策略的定理; 开拓性地将柯西变异应用于进化规划中, 并在理论和实验上分析了为什么带有柯西变异的进化规划在不同的搜索环境中具有不同行为表现; 针对约束优化问题, 提出了一种新颖的约束处理技术, 如随机排序, 等等。他在进化计算领域的许多思想, 对国际上该领域的研究起着重要的导向作用, 他的主页是: <http://www.cs.bham.ac.uk/~xin/>。