

控制与决策

Control and Decision

基于R2指标的昂贵多目标进化算法

刘建昌, 赵阳杰, 李飞, 宋悦熙

引用本文:

刘建昌, 赵阳杰, 李飞, 等. 基于R2指标的昂贵多目标进化算法[J]. 控制与决策, 2020, 35(4): 823–832.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2018.0597>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

求解区间柔性作业车间调度的多目标进化算法

Multi-objective evolutionary algorithm to solve interval flexible job shop scheduling problem

控制与决策. 2019, 34(5): 908–916 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2017.1492>

基于融合多策略改进的多目标粒子群优化算法

Improved multi-objective particle swarm optimization algorithm based on integrating multiply strategies

控制与决策. 2018, 33(2): 226–234 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2016.1451>

一种基于群体分布特征的自适应多目标粒子群优化算法

A self-adaptive multi-objective particle swarm optimization algorithm based on swarm distribution characteristic

控制与决策. 2017, 32(8): 1386–1394 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2016.0631>

基于共轭增强策略的差分进化算法

Differential evolution algorithm with conjugate enhancement strategy

控制与决策. 2017, 32(7): 1313–1318 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2016.0697>

一种基于数据场的多目标引力搜索算法

A multi-objective gravitational search algorithm based on data field

控制与决策. 2017, 32(1): 47–54 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2015.1243>

基于NSGA-II的具有多目标子学科的协同优化方法

Multi-objective collaborative optimization method based on NSGA-II for MDO problems with multi-objective subsystem

控制与决策. 2015, 30(8): 1497–1503 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2014.0888>

基于混合策略的双种群约束优化算法

Dual population constrained optimization algorithm with hybrid strategy

控制与决策. 2015(4): 715–720 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2014.0223>

基于区间多目标量子文化算法的无线传感器网络覆盖能效优化

Energy-efficient coverage optimization of wireless sensor networks based on interval multi-objective quantum-inspired cultural algorithm

控制与决策. 2015(3): 425–432 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2013.1398>

基于 $R2$ 指标的昂贵多目标进化算法

刘建昌^{1†}, 赵阳杰¹, 李飞², 宋悦熙¹

(1. 东北大学 信息科学与工程学院, 沈阳 110004;

2. 安徽工业大学 电气与信息工程学院, 安徽 马鞍山 243032)

摘要: 提出一种基于 $R2$ 指标的昂贵多目标进化 ($R2$ -EMO) 算法. 为了解决精确数学模型难以获得以及评估实验成本高昂的昂贵多目标优化问题, $R2$ -EMO 算法采用高斯过程取代真实模型来评估个体在每个目标上的性能, 并设计一种新的 $R2$ 指标的效用函数, 该效用函数根据高斯过程的输出计算个体的 $R2$ 指标. 带有新的效用函数的 $R2$ 指标在选择评估点时, 既考虑了种群个体的收敛性和多样性, 还考虑了个体的预测期望值和预测均方误差, 增强了种群个体对目标空间的勘探能力. 同时, 提出双层档案管理策略, 采用两个档案分别存放评估过的非支配个体和建立代理模型的个体, 并在每次迭代中对两个档案进行更新. 实验结果表明, 与已有的 4 种算法相比, $R2$ -EMO 算法在处理昂贵多目标进化算法时, 收敛性和多样性均优于其他算法, 并能以较快的速度收敛到 Pareto 前沿.

关键词: 昂贵多目标进化算法; $R2$ 指标; 高斯过程; 双层档案管理策略

中图分类号: TP273

文献标志码: A

Expensive multi-objective optimization algorithm based on $R2$ indicator

LIU Jian-chang^{1†}, ZHAO Yang-jie¹, LI Fei², SONG Yue-xi¹

(1. College of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang 110004, China; 2. School of Electrical and Information Engineering, Anhui University Technology, Maanshan 243032, China)

Abstract: In order to solve the expensive multi-objective optimization problems, whose accurate mathematical models are difficult to obtain and which have high experimental cost in evaluation experiments, an expensive multi-objective evolutionary algorithm based on the $R2$ indicator ($R2$ -EMO) is proposed, which uses the Gaussian process to replace the real model to evaluate the performance of the individual by calculating the $R2$ indicator. In selecting the evaluation points, the $R2$ indicator considers the convergence and the diversity of population. And it takes the expectation and mean square error into account, which strengthens the ability of exploration. Meanwhile, a double-archive management strategy is carried out and updated in each iteration. One is used to store the non-dominated individuals and the other is used to build the surrogate process. Compared with the ParEGO, KRVEA, MOEAD and NSGAIII, $R2$ -EMO algorithm has achieved a better performance and can converge to the Pareto front rapidly in dealing with expensive multi-objective optimization problems.

Keywords: expensive multi-objective evolutionary algorithm; $R2$ indicator; Gaussian process; double-archive management strategy

0 引言

在经济领域、科学研究和工程实践中, 很多问题都是多目标优化问题 (multi-objective optimization problems, MOPs)^[1]. 多目标优化问题的各个目标之间往往是相互冲突的, 一个目标的改善可能会导致另外一个或多个目标性能的降低, 各个目标难以同时达到最优值. 因此, 多目标优化问题通常不存在单一最优解, 而是一个由多个 Pareto 最优解组成的 Pareto 最优解集. 受自然界各种物理现象的启发, 学者们提出采用进化算法解决多目标优化问题的方法. 由于进

化算法具有较好的全局搜索能力且一次运行可以得到多个解, 在求解多目标优化问题时表现出良好的性能^[2]. 但是, 进化算法求解多目标优化问题时通常需要数以万计的评价次数. 在一些实际优化问题中, 每一次的评价都需要耗费高昂的时间和经济代价^[3], 例如在机翼的机动性能评估实验中, 一次求解就需要数小时甚至几天的仿真计算; 在碰撞优化实验中, 模拟一次实验所造成的经济损失是巨大的, 这类问题被称作昂贵多目标优化问题^[4]. 在实际应用中, 数以万计的评价次数是难以承受的, 这极大地限制了进化算

收稿日期: 2018-05-07; 修回日期: 2018-12-27.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (61773106); 安徽省高校自然科学基金项目 (KJ2019A0051).

[†]通讯作者. E-mail: liujianchang@ise.neu.edu.cn.

法在这类问题中的应用. 为了克服优化过程中计算费时、效率低等问题, 学者们提出采用代理模型的方法模拟耗时的仿真计算或者耗费高昂经济代价的真实实验. 代理模型的计算量比精确模型小得多, 采用代理模型可以提高工程优化设计的效率. 常用的代理模型有: 多项式模型、RBF模型、高斯模型(也称为Kriging模型)以及SVM(support vector machine)模型. 文献[4]详细讨论了这些模型的优劣. 高斯模型^[5]在训练样本处具有无偏估计特性和良好的非线性近似能力, 已在工程设计领域得到了广泛的应用.

目前, 人们提出了一些基于代理模型的昂贵多目标进化算法. 文献[6]提出的ParEGO算法, 将EGO(efficient global optimization)算法^[7]与随机选择聚合函数策略相结合, 从搜索空间中选择一个点进行真实函数(即耗费高昂的时间或经济代价的真实仿真或真实实验)评估. 实验表明, ParEGO算法可以得到较好的解集, 但该算法采用单点填充策略, 即在每次迭代中只随机选择一个权重采样, 不能一次选择多个解进行评估, 算法的复杂度较高. 文献[8]提出的SMS-EGO算法是将EGO算法与hypervolume指标相结合, 通过协方差矩阵(CMS-ES)适应算法优化hypervolume指标, 决定选择哪个点进行评估. 但是hypervolume指标计算复杂度过高, 使得SMS-EGO算法效率较低. 文献[9]提出了MOEA/D-EGO算法, 该算法将MOEA/D算法与EGO算法相结合, 将多目标函数转化为多个具有不同权重的单目标函数, 最大化每个权重向量的期望提升值(expected improvement, EI), 并采用模糊聚类的方式从候选解中选择多个点进行真实函数评估. MOEA/D-EGO算法的效果相当于将多个ParEGO算法进行并行计算, 从而极大地降低了建模和计算成本. 文献[10]提出的KRVEA算法在RVEA算法的基础上采用高斯模型为代理模型, 并提出了新的模型管理方案. 文献[11]提出用EI矩阵来选择评估解, 对于每个个体, 计算其在每个目标函数上的EI值, 并通过计算欧氏距离的方式将所有目标的EI值求和, 得到每个个体的EIM值. 文献[12]定义了EPBII(expected PBI improvement)值, 并用EPBII值代替EI值计算每个个体的期望提升值.

R2指标是一种通过给定权值向量和效用函数来评价候选解综合性能的评价指标. 为了在求解昂贵多目标优化问题时得到更贴近Pareto前沿的解, 本文提出一种基于R2指标的昂贵多目标进化(expensive multi-objective optimization based on R2 indicator, R2-

EMO)算法. 由于R2指标可以综合权衡种群的收敛性和多样性, 而EI值可以反映个体的好坏和搜索潜力, 将EI值作为R2指标中的效用函数. R2指标不仅可以平衡种群的收敛性和多样性, 而且可以平衡模型的精度和不确定性. R2-EMO算法根据本文提出的R2指标进行环境选择. 此外, 本文采用双层档案维护策略, A_1 档案存放作为最终种群输出的全体非支配解, A_2 档案存放用于建立代理模型的个体, 为了降低计算成本, K 均值聚类策略被用于 A_2 档案的维护. 实验结果表明, R2-EMO算法在处理昂贵多目标优化问题时, 无论是在效率上还是解的质量上, 都有很好的效果.

1 基础知识

本节介绍多目标优化问题的相关定义以及高斯过程和R2指标.

1.1 多目标优化问题

不失一般性, 以最小化为例, 多目标优化问题可以描述成

$$\min F(x) = [f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)]. \quad (1)$$

其中: $x = (x_1, x_2, \dots, x_D) \in \Omega$ 是决策变量, Ω 是决策变量空间; $F(x) : \Omega \rightarrow R^m$ 是 m 个相互冲突的目标函数, R^m 是目标空间.

对于给定的两个决策变量 x 和 y , 当且仅当 $\forall i = 1, 2, \dots, n, x_i \leq y_i \wedge \exists j = 1, 2, \dots, n, x_j < y_j$ 成立时, 称 x Pareto 支配 y , 或 y 被 x Pareto 支配, 记作 $x \prec y$.

当一个解 x^* 满足 $\neg \exists x \in \Omega \subseteq R^n : x \prec x^*$ 时, 称为 Pareto 最优解, x^* 称为 Pareto 最优解. 所有 Pareto 最优解构成的集合称为 Pareto 最优解集 (Pareto-optimal set, PS), 而 Pareto 最优解对应的目标函数值所构成的集合称为 Pareto 最优前沿 (Pareto-optimal front, PF).

1.2 高斯过程

高斯过程也称为Kriging模型^[5], 由于其对非线性问题近似时, 表现出较高精度和鲁棒性, 能较容易获取理想的近似效果, 并且高斯过程可以为每个解提供近似的确定信息, 在模型管理上起很大的作用, Kriging模型被广泛地用作代理模型. Kriging模型假设昂贵多目标优化问题的目标函数 $y(x)$ 为

$$y(x) = \mu(x) + \epsilon(x). \quad (2)$$

其中: $\epsilon(x)$ 是均值为零、方差为 σ^2 的统计过程, 表示全局近似的局部偏差; $y(x)$ 的先验分布是一个均值为 μ 、方差为 σ^2 的高斯分布.

对于任意的 $x^i, x^j \in R^n$, 两个变量之间的误差统计项 $\epsilon(x^i)$ 与 $\epsilon(x^j)$ 之间的相关性 $c(x^i, x^j)$ 的具体表达

式为

$$c(x^i, x^j) = \exp[-d(x^i, x^j)]. \quad (3)$$

其中 $d(x^i, x^j)$ 为变量 x^i 与 x^j 之间的距离, 即

$$d(x^i, x^j) = \sum_{h=1}^K \theta_h |x_h^i - x_h^j|^{p_h}. \quad (4)$$

由以上假设可知, Kriging 模型的未知参数有 $\mu, \sigma, \theta_1, \dots, \theta_K, p_1, \dots, p_K$, 共 $2K + 2$ 个参数, 称为超参数. 这些参数的值可以通过极大似然估计法来估计, 似然函数为

$$\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} (\sigma^2)^{\frac{n}{2}} \sqrt{\det(3)}} \exp\left[-\frac{(y - \mathbf{1}\mu)' C^{-1} (y - \mathbf{1}\mu)}{2\sigma^2}\right]. \quad (5)$$

在假设 $\theta_h, p_h (h = 1, \dots, K)$ 已知的情况下, 可以推导出 μ 和 σ^2 的值分别为

$$\hat{\mu} = \frac{\mathbf{1}^T C^{-1} y}{\mathbf{1}^T C^{-1} \mathbf{1}}, \quad (6)$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(y - \mathbf{1}\hat{\mu})^T C^{-1} (y - \mathbf{1}\hat{\mu})}{K}. \quad (7)$$

将式(6)和(7)代入(5)中, 似然函数将只取决于 θ_h 和 $p_h (h = 1, \dots, K)$, 之后再最大化似然函数(5), 得到超参数的值.

获得超参数, 即模型参数值后, 利用模型对未评估的点进行预测. 对于任意测试点 x^* , 可以对其函数值 $f(x^*)$ 进行预测. $y(x^*)$ 的预测均值和预测均方误差如下所示:

$$\hat{y}(x^*) = \hat{\mu}(x) + r(x)^T C^{-1} (f - \hat{\mu}), \quad (8)$$

$$s^2(x^*) = \hat{\sigma}^2 \left[\mathbf{1} - r(x)^T + \frac{(\mathbf{1} - \mathbf{1}^T C^{-1} r(x))^2}{\mathbf{1}^T C^{-1} \mathbf{1}} \right]. \quad (9)$$

其中: $\hat{\mu}(x)$ 是 $\mu(x)$ 的估计值; $r(x)$ 是 n 维向量, 它的第 i 个元素是 $C(\epsilon(x^i), \epsilon(x^j))$; $f(x)$ 的预测分布是以 $\hat{y}(x^*)$ 为期望、 $s^2(x^*)$ 为均方差的正态分布 $N(\hat{y}(x^*), s^2(x^*))$.

1.3 R2 指标

R2 指标^[13] 通过构建适当的效用函数来定量区分候选解的优劣, 选择效用较大的候选解. 由于 R2 指标可以综合评价种群的收敛性和多样性, 并可以通过快速计算产生均匀分布的解集, 已被应用于求解多目标优化问题, 也被应用于求解高维多目标优化问题^[14]. R2 指标的相关定义如下.

定义 1 对于一个常量参考解集, R2 指标可以被定义成一元指标

$$R2(A, U) = -\frac{1}{|U|} \sum_{a \in U} \max\{u(a)\}. \quad (10)$$

定义 2 如果效应函数集中每个函数由不同的

权重向量确定, W 为权重向量集合, 则个体 $a \in A$ 的 R2 贡献值定义如下:

$$C_{R2}(a, A, W) = R2(A, W) - R2(A \setminus \{a\}, W). \quad (11)$$

通过式(11)中的 R2 贡献值可以对种群中的个体进行全排序, 个体之间可以进行相互比较, 优秀的个体会被保留到下一代种群.

2 基于 R2 指标的昂贵多目标进化算法及复杂度分析

本文提出一种基于 R2 指标的昂贵多目标进化算法, 记为 R2-EMO 算法.

算法 1 R2-EMO 算法.

输入: 最大评估次数 FE_{\max} , 种群规模 N .

- 1) 初始化 N 个参考权重向量 W ;
- 2) 采用拉丁方采样, 生成规模为 N 的初始种群, 并采用真实函数评估;
- 3) 将初始种群分别放入档案 A_1 和档案 A_2 ;
- 4) 设定评估次数 $FE = N$;
- 5) while $FE \leq FE_{\max}$
- 6) 用档案 A_2 中的个体建立每个目标函数的高斯模型;
- 7) 利用高斯模型和父代种群产生子代评估种群 $P(\text{gen} + 1)$;
- 8) 选择 $P(\text{gen} + 1)$ 中的第 1 层 Q 个个体进行真实函数评估;
- 9) 更新 $FE = FE + Q$;
- 10) 更新档案 A_1 和档案 A_2 ;
- 11) end while
- 12) 输出: A_1 档案.

算法 1 中, R2-EMO 算法在初始化阶段首先会在目标空间生成 N 个均匀分布的参考权重向量 W ; 然后采用拉丁超立方采样技术, 在决策空间产生 N 个个体, 进行真实函数评估, 并将它们放入档案 A_1 和档案 A_2 . 采用拉丁方采样技术可以产生均匀分布的采样点, 保证初始种群的分布性. 在主循环中, 首先利用档案 A_2 中的个体建立每个目标函数的高斯模型; 然后, 由进化算法产生子代种群, 并根据建立的高斯模型计算种群的 R2 指标的预测值和预测精度; 利用该预测值和预测精度对种群进行环境选择, 多次迭代后输出子代评估种群; 之后, 利用 R2 排序选择第 1 层个体进行真实函数评估; 最后更新档案 A_1 和档案 A_2 . 重复上述过程, 直到满足终止条件.

2.1 种群的产生和选择

在进化算法中, 种群的产生和选择是关键操作. 种群中的个体不仅要未知空间有勘探能力, 而

且还要尽可能地均匀分布在目标空间,即要综合考虑种群个体的收敛性和多样性.此外,本文采用代理模型预测种群个体目标值,为了从种群中选出综合性能更好的个体参与真实函数评估,需要将种群个体的期望值和均方误差考虑进去.在R2-EMO算法中,种群的产生和选择如算法2所示.

算法2 种群的产生和选择.

gen = 1.

1) while gen ≤ gen_{max}

2) 父代种群 P_{gen} 通过SBX和PM操作产生子代种群 Q_{gen} ;

3) 根据代理模型预测子代种群 Q_{gen} 中每个个体的每个目标的预测均值和预测均方误差MSE;

4) 合并子代种群 Q_{gen} 与父代种群 P_{gen} ;

5) 计算每个个体的R2指标贡献值,并选择前 N 个个体作为下一代的父代种群 $P_{\text{gen}+1}$;

6) gen = gen + 1;

7) end while

8) 输出种群 $P_{\text{gen}+1}$.

在算法2中,首先采用遗传算法的模拟二项式交叉(simulated binary crossover, SBX)和多项式变异(polynomial mutation, PM)操作,由父代种群 P_{gen} 产生子代种群 Q_{gen} ,并利用建立的高斯模型计算每个子代个体每个目标的预测均值和预测均方误差;将父代种群与子代种群合并,形成联合种群;计算联合种群中每个个体的R2指标值,进行R2排序,并从中选择 N 个个体进入下次迭代;直到达到最大迭代次数,输出最后的种群.

在算法2的第5)步中,本文利用新定义的效用函数计算种群个体的R2指标值.因为在利用R2指标确定评估点时,不仅要考虑种群的收敛性和多样性,而且要考虑种群个体是否适合进行真实函数评估,而这部分信息由高斯模型提供.

在文献[13]中,将切比雪夫函数作为R2指标的效用函数,可以得到收敛性和多样性都很好的Pareto前沿.所以本文将该效用函数与高斯模型提供的函数期望值和均方误差融合,形成新的效用函数.当新效用函数的期望值小于当前最小的新效用函数时,会将搜索重点放在当前最小值附近,强化局部搜索能力;当均方误差较小及期望值与当前最小值接近时,会重点搜索均方误差较小即预测精度较差的区域,强化全局搜索能力.所以利用新定义的效用函数的R2指标可以对种群个体进行较好的选择.

下面将推导切比雪夫函数如何与高斯模型信息

相融合.

本文采用的高斯模型预测出的每个目标函数均符合高斯分布^[14],即

$$f_i(x) \sim N(\hat{y}_i(x), \hat{s}_i^2(x)), \quad (12)$$

$$\lambda_i(f_i(x) - z_i^*) \sim N(\lambda_i(\hat{y}_i(x) - z_i^*), [\lambda_i \hat{s}_i(x)]^2). \quad (13)$$

采用加权切比雪夫方法将多个目标函数整合成单一目标函数.由文献[15]可知,当 $m = 2$ 时,切比雪夫函数如下面式(14)所示,而两个高斯分布的切比雪夫函数的均值和方差分别如下面式(15)和式(24)所示,计算过程如下:

$$g^{\text{te}}(x|\lambda) = \max\{\lambda_1(\hat{y}_1(x) - z_1^*), \lambda_2(\hat{y}_2(x) - z_2^*)\}, \quad (14)$$

$$E[g^{\text{te}}(x|\lambda)] = \mu_1\Phi(\alpha) + \mu_2\Phi(-\alpha) + \tau\phi(\alpha), \quad (15)$$

$$E([g^{\text{te}}(x|\lambda)]^2) = (\mu_1^2 + \sigma_1^2)\Phi(\alpha) + (\mu_2^2 + \sigma_2^2)\Phi(-\alpha) + (\mu_1 + \mu_2)\phi(\alpha). \quad (16)$$

其中

$$\sigma_i^2 = [\lambda_i \hat{s}_i(x)]^2, \quad i = 1, 2, \dots, m; \quad (17)$$

$$\mu_i = \lambda_i(\hat{y}_i(x) - z_i^*), \quad i = 1, 2, \dots, m; \quad (18)$$

$$\tau = \sqrt{[\lambda_1 \hat{s}_1(x)]^2 + [\lambda_2 \hat{s}_2(x)]^2}; \quad (19)$$

$$\alpha = (\mu_1 - \mu_2)/\tau; \quad (20)$$

$$\phi(t) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-t^2/2); \quad (21)$$

$$\Phi(t) = \int_{-\infty}^t \phi(\theta) d\theta; \quad (22)$$

$$\hat{y}^{\text{te}} = E[g^{\text{te}}(x|\lambda)]; \quad (23)$$

$$(\hat{s}^{\text{te}})^2 = E([g^{\text{te}}(x|\lambda)]^2) - (\hat{y}^{\text{te}})^2. \quad (24)$$

采用式(14)作为效用函数,并计算R2指标,有

$$R2(A, G) = -\frac{1}{|G|} \sum_{g^{\text{te}} \in G} \max_{a \in A} \{g^{\text{te}}(a)\}. \quad (25)$$

个体 $a \in A$ 的新的R2贡献值定义如下:

$$C_{R2}(a, A, G) = R2(A, G) - R2(A \setminus \{a\}, G). \quad (26)$$

2.2 双档案维护策略

为了增强算法的收敛性,提高模型质量,在每次迭代中对档案 A_1 和档案 A_2 进行更新.

档案 A_1 的更新:档案 A_1 存放所有评估个体的非支配解,作为最终的种群输出.对于新产生的评估个体,具体操作如下:

1) 如果被 A_1 中的个体支配,则跳过该个体;

2) 如果 A_1 中的个体被该个体支配, 则删除 A_1 中被该个体支配的所有个体, 并将新产生的个体插入档案 A_1 ;

3) 如果与 A_1 中的所有个体互不支配, 则直接将该个体加入档案 A_1 .

档案 A_2 的更新: 档案 A_2 中的个体的数目会对所建立的高斯模型的质量产生很大影响. 一般为了提高模型精度, 会将真实模型评估后的个体全部放入档案 A_2 中, 用于建立代理模型. 但是, 如果档案 A_2 中个体过多, 则训练高斯模型的时间会大大增加, 时间代价过高. 本文将档案 A_2 的规模设置为 N . 当档案 A_1 中的个体数量大于 N 时, 需要舍弃一些个体. 本文采用文献[16]中介绍的 K 均值聚类算法维护档案 A_2 的规模, 得到 N 个聚类中心, 并找到每个类中离聚类中心最近的个体加入档案 A_2 .

2.3 算法复杂度分析

本节分析 $R2$ -EMO 算法的复杂度, 该算法主要的计算成本来自代理模型的建立和算法 1 中双层档案的个体选择. 在代理模型建立的过程中, 时间复杂度为 $o(m|N|)$, 其中 m 是目标个数, N 是候选解集大小. 双层档案的个体选择过程需要计算每个个体的 $R2$ 指标, 时间复杂度为 $o(|N||V|(\log|N| + m))$, $|V|$ 是切比雪夫的权重个数. 所以 $R2$ -EMO 算法的整体复杂度为 $o(|N||V|(\log|N| + m))$.

3 仿真实验及结果分析

通过与其他算法的仿真实验来验证 $R2$ -EMO 算法在求解昂贵多目标问题时的综合性能. 首先给出 ZDT 和 DTLZ 系列测试问题参数设置以及性能评价指标, 然后通过对比 $R2$ -EMO 算法和其他算法验证所提出算法在求解昂贵多目标问题时的优势, 最后通过实验结果分析 $R2$ -EMO 算法的内在机制.

3.1 测试问题参数设置以及性能评价指标

本文选取 ZDT 和 DTLZ 系列测试函数代替昂贵多目标优化问题的真实函数, 其中 ZDT 系列测试函数的目标个数设置为 2, DTLZ 系列测试函数的目标个数设置为 3, 所有问题的决策变量数目均为 10, 种群规模为 100. 针对每个测试问题, 每个算法独立运行 20 次, 评价次数均设为 1000, $R2$ -EMO 算法和对比算法采用置信度 $\sigma = 0.5$ 的 Wilcoxon 秩和检验方法进行评判. $R2$ -EMO 算法在统计上优于对比算法时用“+”表示, $R2$ -EMO 算法在统计上劣于对比算法时用“-”表示, “=”表示 $R2$ -EMO 算法与对比算法在统计上没有差别. 因为 ZDT1、ZDT3、DTLZ1、DTLZ2 和 DTLZ7 测试问题具有多前沿、不连续等特点, 可以很

好地验证算法的收敛性和多样性, 所以选择这些测试问题进行具体实验.

为了定量评价不同多目标优化算法的性能, 本文选用 3 个指标 GD、SP 和 IGD 评价算法的性能.

1) GD 指标.

GD 指标用来表示 PF_{true} 与算法搜索得到的 Pareto 最优前沿 PF_{know} 之间的距离, 其函数定义为

$$GD = \frac{\left(\sum_{i=1}^N d_i^2\right)^{\frac{1}{2}}}{n}. \quad (27)$$

其中: n 是 PF_{know} 中的个体数, d_i 是目标空间上个体的每一个函数值与 PF_{true} 中最近个体之间的欧氏距离. GD 值越小, 说明解集收敛性效果越好.

2) SP 指标.

SP 指标通过计算最近邻距离的方差评估算法的多样性, 计算公式为

$$SP = \sqrt{\frac{\sum_{i \in PF_a} k^2}{|PF_{know}|}}. \quad (28)$$

其中: d_i 表示解集中两个相邻个体的欧氏距离, \bar{d} 表示 d_i 的均值. SP 值越小, 说明解集分布性效果越好.

3) IGD 指标.

IGD 指标可以用来综合评价算法的收敛性和多样性. IGD 的函数定义为

$$IGD = \frac{\left(\sum_{i=1}^n \bar{d}_i\right)}{\bar{n}}. \quad (29)$$

其中: \bar{d}_i 是目标空间上每一个个体与 PF_{true} 中最近个体之间的欧氏距离, \bar{n} 是目标空间中个体数. IGD 越小, 意味着找到的解集收敛性和分布性整体效果越好.

3.2 仿真实验及结果分析

通过仿真实验对比 $R2$ -EMO 算法与其他 4 种算法: MOEAD^[17]、NSGAIII^[16]、ParEGO^[6] 和 KRVEA^[10] 在求解 ZDT 和 DTLZ 系列测试问题上的性能差异. 首先采用 GD、SP 和 IGD 指标以及指标的变化趋势评价各个算法在求解昂贵多目标问题的综合性能; 其次采用算法的运行时间评价各个算法的真实时间消耗; 最后采用对 Pareto 真实前沿的逼近效果评价各个算法的收敛性能.

3.2.1 GD、SP 和 IGD 指标对比实验及分析

$R2$ -EMO 算法和 4 种对比算法所得到的 GD、SP 和 IGD 指标均值及标准差如表 1、表 2 和表 3 所示. 由表 1 和表 2 可以看出, $R2$ -EMO 算法在处理 DTLZ 和

表1 R2-EMO、NSGAIII、MOEA/D、KRVEA、ParEGO算法GD性能指标的平均值和标准差

测试问题	M	算法				
		R2-eMO	NSGAIII	MOEA/D	KRVEA	ParEGO
ZDT1	2	5.28e-5(4.21e-5)	+ 4.41e+0(9.68e-1)	+ 9.74e-1(5.42e-1)	+ 7.33e-2(1.13e-1)	+ 8.63e+0(1.50e+0)
ZDT2	2	1.82e-5(1.36e-5)	+ 5.40e+0(1.05e+0)	+ 1.07e+0(8.80e-1)	+ 4.19e-1(4.43e-1)	+ 9.88e+0(1.17e+0)
ZDT3	2	5.51e-5(7.55e-5)	+ 4.34e+0(7.95e-1)	+ 7.69e-1(6.79e-1)	+ 1.69e-1(1.81e-1)	+ 8.35e+0(1.77e+0)
ZDT4	2	1.55e+1(4.78e+0)	+ 2.72e+1(6.71e+0)	- 4.40e+0(2.14e+0)	- 1.05e+1(3.41e+0)	+ 3.53e+1(6.28e+0)
ZDT6	2	1.29e+0(5.36e-1)	+ 3.84e+0(5.35e-1)	= 2.10e+0(3.35e-1)	= 1.22e+0(6.84e-1)	+ 4.19e+0(7.62e-1)
DTLZ1	3	3.12e+1(4.72e+0)	= 2.53e+1(4.78e+0)	- 3.49e+0(8.60e-1)	+ 5.75e+1(6.15e+0)	+ 4.21e+1(7.25e+0)
DTLZ2	3	1.99e-3(1.01e-3)	+ 1.70e-2(2.52e-3)	+ 1.14e-2(5.07e-3)	+ 2.48e-2(6.97e-3)	+ 5.71e-2(5.13e-3)
DTLZ3	3	5.76e+1(4.33e+0)	= 6.33e+1(7.62e+0)	- 9.06e+0(2.31e+0)	+ 1.50e+2(1.91e+1)	+ 1.02e+2(1.07e+1)
DTLZ4	3	2.88e-2(1.86e-2)	= 3.24e-2(7.40e-3)	- 1.26e-3(2.05e-3)	= 4.27e-2(1.06e-2)	+ 7.53e-2(2.12e-2)
DTLZ5	3	2.68e-3(2.55e-3)	+ 1.99e-2(5.76e-3)	= 7.62e-3(5.06e-3)	+ 5.40e-2(1.45e-2)	+ 7.03e-2(7.03e-3)
DTLZ6	3	3.89e-1(6.34e-2)	+ 6.88e-1(3.77e-2)	+ 6.41e-1(8.97e-2)	+ 8.85e-1(8.40e-2)	+ 6.32e-1(2.54e-2)
DTLZ7	3	5.57e-4(4.92e-5)	+ 7.41e-1(1.97e-1)	+ 7.72e-2(4.81e-2)	+ 2.81e-1(2.83e-1)	+ 1.51e+0(1.76e-1)
与对比算法的优劣统计			9+/3=/0-	6+/2=/4-	9+/2=/1-	12+/0=/0-

表2 R2-EMO、NSGAIII、MOEA/D、KRVEA、ParEGO算法SP性能指标的平均值和标准差

测试问题	M	算法				
		R2-EMO	NSGAIII	MOEA/D	KRVEA	ParEGO
ZDT1	2	4.04e-3(1.18e-3)	+ 1.19e+0(7.52e-1)	+ 8.13e-2(9.75e-2)	+ 2.59e-1(2.87e-1)	+ 1.02e+0(8.20e-1)
ZDT2	2	1.80e-3(7.51e-4)	+ 1.23e+0(6.18e-1)	= 4.82e-1(7.97e-1)	+ 1.33e+0(1.39e+0)	+ 2.12e+0(1.55e+0)
ZDT3	2	5.48e-3(1.58e-3)	+ 1.02e+0(6.79e-1)	= 1.51e-1(3.25e-1)	= 5.09e-1(4.89e-1)	+ 1.62e+0(1.04e+0)
ZDT4	2	1.58e+0(1.17e+0)	+ 5.98e+0(4.70e+0)	- 1.32e-1(2.17e-1)	= 2.06e+0(4.28e+0)	+ 8.33e+0(4.18e+0)
ZDT6	2	5.45e-1(5.06e-1)	= 2.52e-1(1.19e-1)	= 1.42e-1(2.34e-1)	= 7.98e-1(1.27e+0)	= 3.02e-1(2.59e-1)
DTLZ1	3	2.25e+1(4.91e+0)	= 2.01e+1(8.69e+0)	- 1.64e+0(8.55e-1)	+ 3.51e+1(8.06e+0)	+ 3.53e+1(4.94e+0)
DTLZ2	3	4.20e-2(9.75e-3)	+ 8.21e-2(1.00e-2)	+ 8.77e-2(1.00e-2)	+ 1.12e-1(2.71e-2)	+ 1.34e-1(2.61e-2)
DTLZ3	3	3.36e+1(2.11e+1)	= 5.45e+1(1.39e+1)	- 5.18e+0(7.19e+0)	+ 1.22e+2(4.32e+1)	= 8.54e+1(2.18e+1)
DTLZ4	3	9.67e-2(5.05e-2)	= 1.26e-1(4.53e-2)	- 1.90e-2(3.12e-2)	= 1.35e-1(2.90e-2)	= 1.68e-1(5.30e-2)
DTLZ5	3	3.09e-2(2.20e-2)	= 5.39e-2(1.90e-2)	= 4.12e-2(1.75e-2)	+ 9.61e-2(3.63e-2)	+ 1.07e-1(2.92e-2)
DTLZ6	3	3.34e-1(3.87e-2)	+ 5.56e-1(3.03e-2)	+ 5.59e-1(1.43e-1)	+ 6.59e-1(1.46e-1)	+ 4.92e-1(5.60e-2)
DTLZ7	3	3.72e-2(2.10e-3)	+ 3.40e-1(9.68e-2)	+ 1.17e-1(3.79e-2)	+ 1.06e+0(9.99e-1)	+ 4.03e-1(2.55e-1)
与对比算法的优劣统计			7+/5=/0-	4+/4=/4-	9+/3=/2-	9+/3=/0-

表3 R2-EMO、NSGAIII、MOEA/D、KRVEA、ParEGO算法IGD性能指标的平均值和标准差

测试问题	M	算法				
		R2-EMO	NSGAIII	MOEA/D	KRVEA	ParEGO
ZDT1	2	4.11e-3(2.56e-3)	+ 7.27e+0(1.24e+0)	+ 1.70e+0(1.52e+0)	+ 5.25e-2(8.76e-3)	+ 1.73e+1(1.49e+0)
ZDT2	2	1.35e-1(1.14e-1)	+ 8.56e+0(1.62e+0)	+ 1.79e+0(1.14e+0)	= 6.96e-2(1.43e-2)	+ 1.90e+1(2.90e+0)
ZDT3	2	3.53e-3(1.10e-3)	+ 7.45e+0(6.49e-1)	+ 1.50e+0(1.44e+0)	+ 7.00e-2(1.42e-2)	+ 1.69e+1(2.43e+0)
ZDT4	2	2.77e+1(6.79e+0)	= 3.94e+1(6.81e+0)	= 1.87e+1(8.76e+0)	= 2.46e+1(1.06e+1)	+ 7.25e+1(1.05e+1)
ZDT6	2	1.63e+0(9.55e-1)	+ 9.19e+0(5.33e-1)	+ 7.67e+0(1.68e+0)	- 9.08e-1(2.20e-1)	+ 1.13e+1(2.59e-1)
DTLZ1	3	5.38e+1(7.41e+0)	= 4.64e+1(7.34e+0)	- 1.94e+1(5.52e+0)	= 7.95e+1(1.88e+1)	+ 1.01e+2(1.37e+1)
DTLZ2	3	9.19e-2(2.91e-2)	+ 1.43e-1(1.56e-2)	= 1.28e-1(2.88e-2)	= 1.14e-1(7.92e-3)	+ 3.58e-1(2.25e-2)
DTLZ3	3	1.50e+2(2.24e+1)	= 1.34e+2(3.94e+1)	- 5.27e+1(1.03e+1)	= 2.19e+2(4.56e+1)	+ 2.63e+2(4.06e+1)
DTLZ4	3	3.75e-1(1.61e-1)	= 4.25e-1(1.49e-1)	= 6.98e-1(3.42e-1)	- 1.26e-1(2.35e-2)	= 5.38e-1(6.47e-2)
DTLZ5	3	1.39e-2(5.24e-3)	+ 9.20e-2(1.49e-2)	+ 4.90e-2(1.46e-2)	+ 9.48e-2(1.08e-2)	+ 2.72e-1(2.18e-2)
DTLZ6	3	1.07e+0(1.86e-1)	+ 4.80e+0(3.85e-1)	+ 4.15e+0(5.20e-1)	+ 2.14e+0(5.76e-1)	+ 6.02e+0(1.76e-1)
DTLZ7	3	6.73e-2(3.96e-3)	+ 1.99e+0(5.45e-1)	+ 6.63e-1(1.01e-1)	+ 1.54e-1(1.06e-2)	+ 6.34e+0(7.53e-1)
与对比算法的优劣统计			8+/4=/0-	7+/2=/3-	5+/5=/2-	11+/1=/0-

ZDT测试问题时, GD和SP指标比其他算法好,说明R2-EMO算法得到的解集收敛性和多样性较好. 只有在DTLZ1、DTLZ3、DTLZ4和ZDT6问题上稍逊于MOEAD算法. 由于这些问题对解的分布性有较高要求,而MOEAD算法的权重机制保证了解的分布性,使得MOEAD算法有较好的GD和SP指标. 由表3可以看出,R2-EMO算法在DTLZ2、DTLZ5、DTLZ6、DTLZ7、ZDT1和ZDT3上的IGD指标较好,说明算法的综合性能较强.

R2-EMO算法和4种对比算法在求解DTLZ2、DTLZ7和ZDT1问题时的GD和IGD性能指标变化趋势如图1和图2所示. 在处理DTLZ2问题前期,R2-

EMO算法的IGD指标值没有KRVEA算法的小;但随着评估次数的增加,KRVEA算法的IGD值基本不再变化,而R2-EMO算法一直以较平稳的趋势下降,并在评估后期小于KRVEA算法的IGD指标值. 在DTLZ7和ZDT1问题上,R2-EMO算法处理效果要比其他算法好得多,GD和IGD指标以较快且较平滑的趋势下降,而KRVEA算法的GD和IGD指标跳动太大,不够稳定,且在达到一定的评价次数后,陷入局部最优. NSGAIII、MOEA/D、ParEGO算法的GD和IGD指标效果明显不如R2-EMO和KRVEA算法. 所以,从指标的角度来看,基于R2指标的昂贵多目标进化算法的改进是合理且有效的.

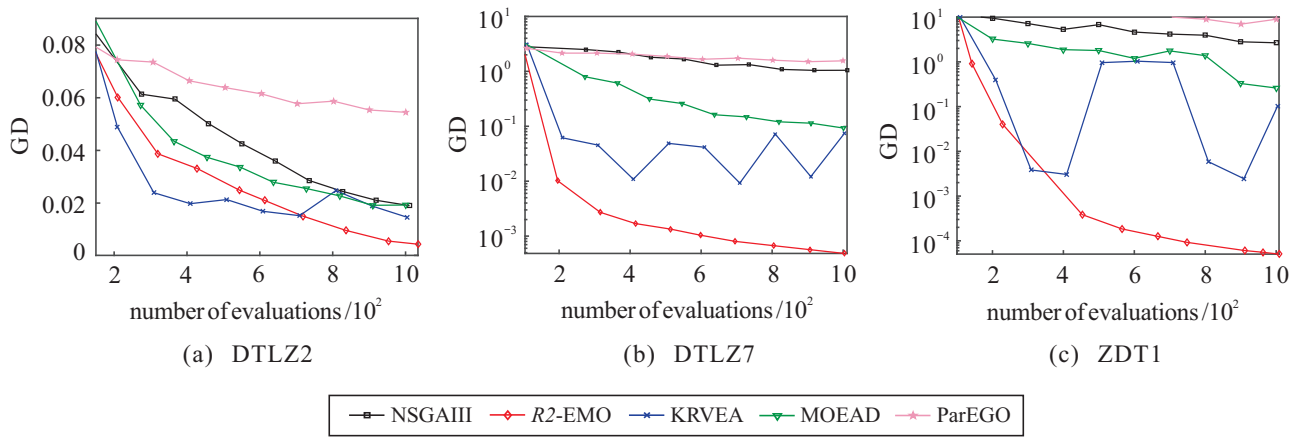


图1 R2-EMO算法和4种对比算法求解DTLZ2、DTLZ7、ZDT1问题时GD指标变化趋势

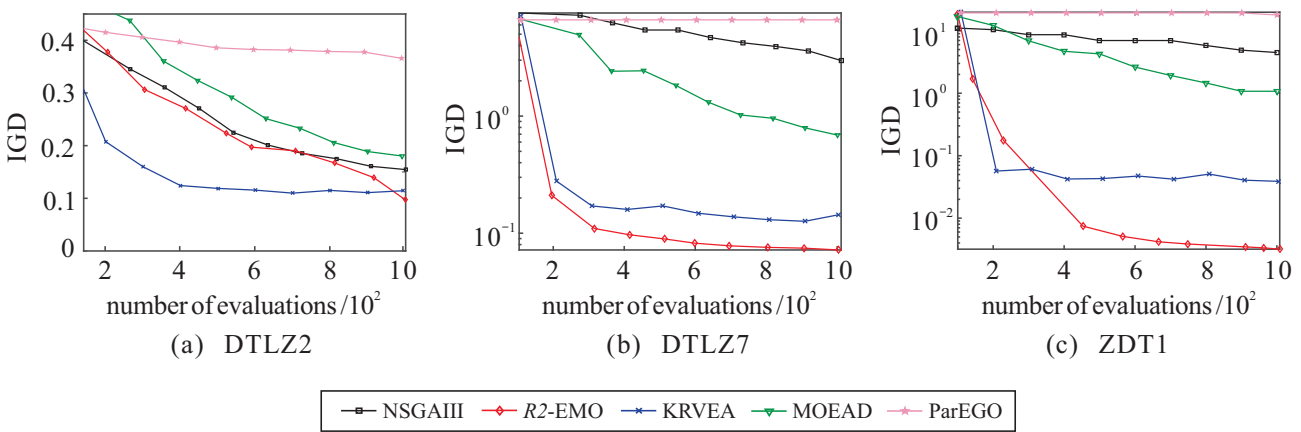


图2 R2-EMO算法和4种对比算法求解DTLZ2、DTLZ7、ZDT1问题时IGD指标变化趋势

3.2.2 算法运行时间对比实验及分析

利用5种算法分别求解具有5、10、15个决策变量的ZDT3和DTLZ1测试问题所需的平均运行时间如图3所示. 可以看出,R2-EMO算法的平均运行时间小于ParEGO和KRVEA的平均运行时间. R2-EMO算法运行一次可以通过R2指标自适应地选择多个解参与真实函数评估,而ParEGO和KRVEA算

法只能产生一个解参与真实函数评估. 所以在相同的评估次数下,R2-EMO算法花费的时间较短. 虽然NSGAIII和MOEAD算法的平均运行时间更短,但从图4、图5、图6的近似Pareto前沿分析可知,在相同的评估次数下,NSGAIII和MOEAD不能收敛到真实Pareto前沿,因为它们没有用代理模型为子代的产生作向导,不适合解决昂贵问题.

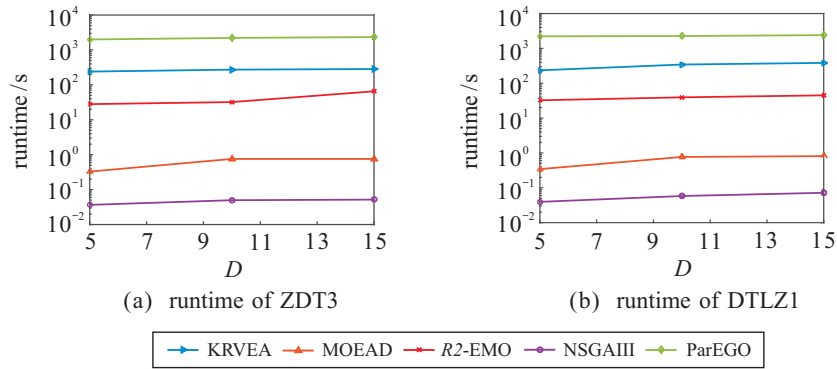


图3 R2-EMO算法和4种对比算法求解ZDT3和DTLZ1问题时运行时间

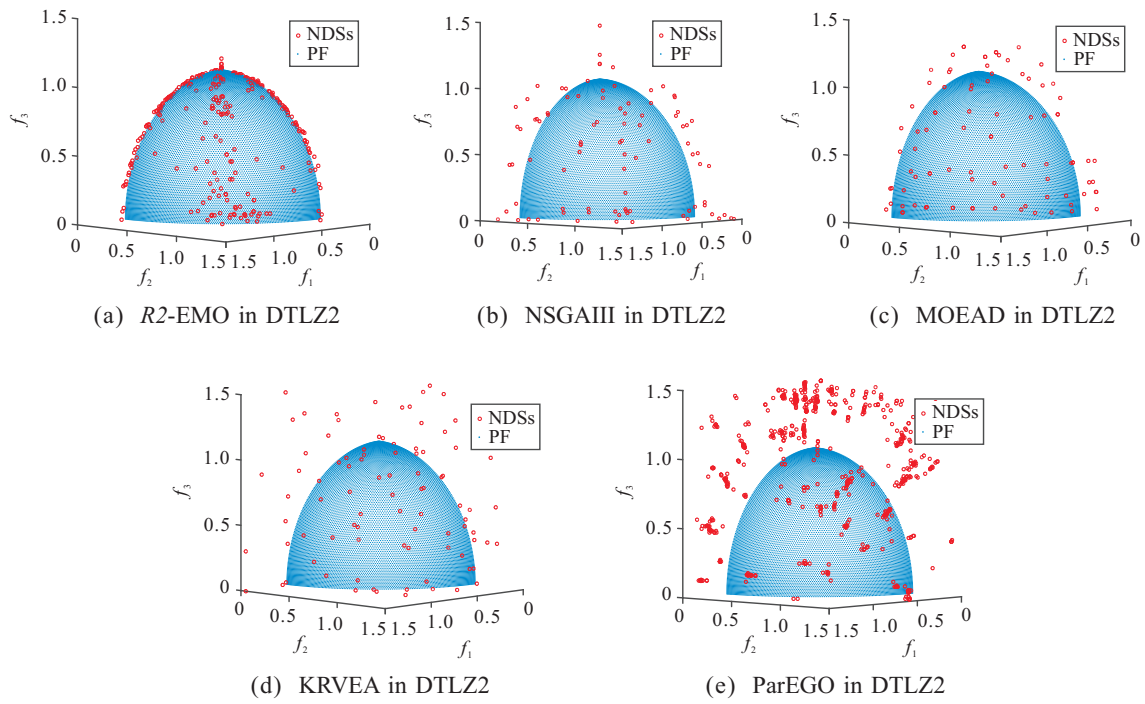


图4 R2-EMO算法和4种对比算法求解DTLZ2问题时获得的近似Pareto前沿

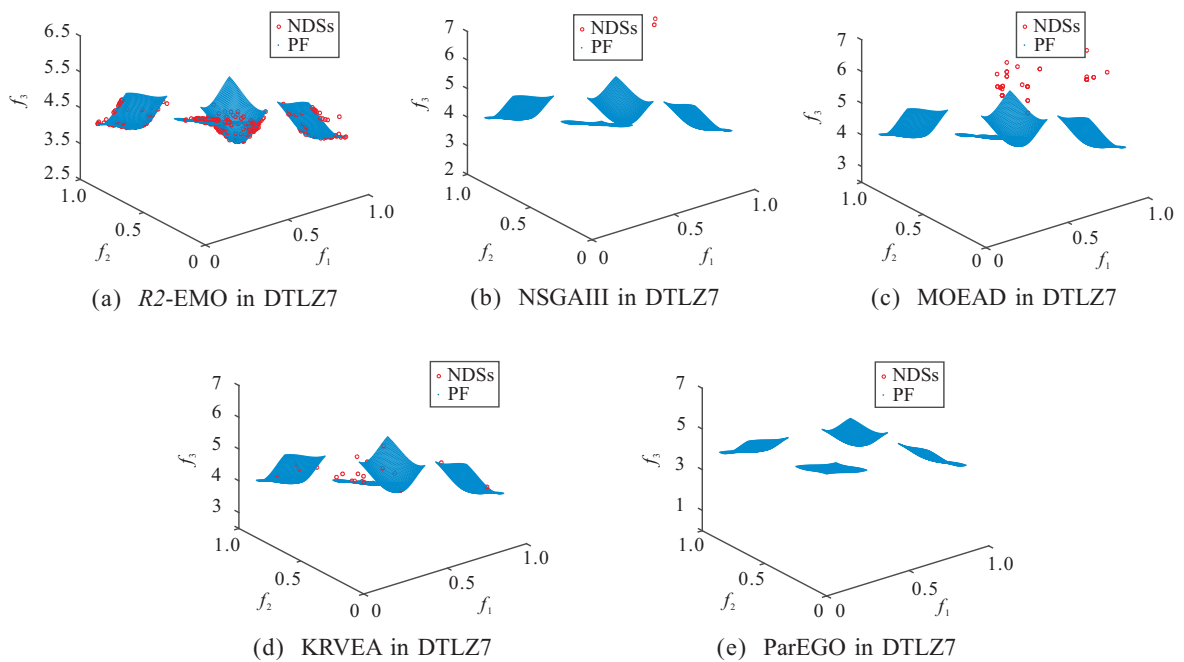


图5 R2-EMO算法和4种对比算法求解DTLZ7问题时获得的近似Pareto前沿

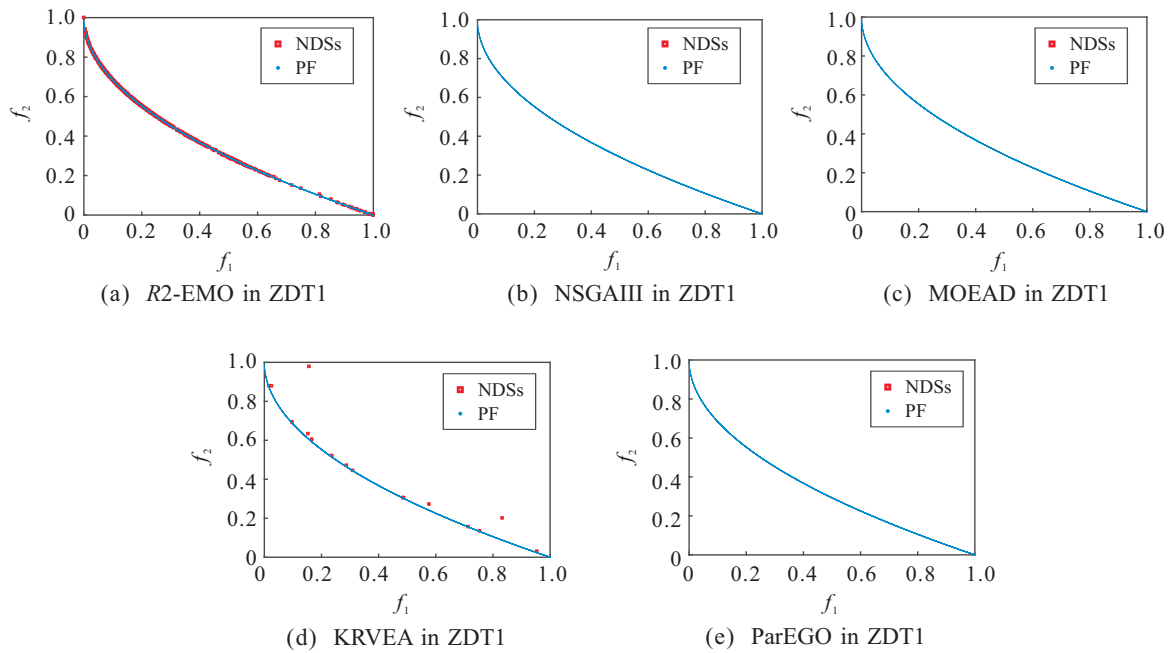


图6 R2-EMO算法和4种对比算法求解ZDT1问题时获得的近似Pareto前沿

3.2.3 Pareto前沿对比实验及分析

利用5种算法在求解DTLZ2、DTLZ7和ZDT1问题时,对真实Pareto前沿的逼近效果如图4、图5和图6所示。由图6可知,R2-EMO算法对真实前沿的逼近效果最好,得到的解大部分都收敛到真实Pareto前沿上。而其他4种对比算法得到的解只有很少部分收敛到Pareto前沿,这说明R2-EMO算法的收敛性对比算法好。

以上指标的变化趋势、算法运行时间和对真实Pareto前沿的逼近效果均可推广到其他具体测试问题中。综上所述,无论是定量地比较GD、SP、IGD指标的值,还是定性地比较GD、SP、IGD指标的变化趋势以及得到的解集在Pareto前沿上的分布,R2-EMO算法在DTLZ和ZDT测试问题上的收敛性和多样性都比KRVEA、MOEA/D、NSGAIII和ParEGO算法的好。

3.2.4 R2-EMO算法内在机制分析

分析以上实验结果以及R2-EMO算法的改进之处可知:R2-EMO算法通过建立高斯模型并多次利用高斯模型提供的信息,产生了多个优秀的子代;同时,用含有新的效用函数的R2指标自适应地选择多个优秀个体参与真实函数评估,由图3可知,大大缩短了算法的平均运行时间。该R2指标融合了个体的收敛性和多样性以及个体是否适合进行真实函数评估的信息,使选择的解更有可能接近真实Pareto前沿。最后利用双层档案策略,一层存放所有真实函数评估过的Pareto最优解,用于产生优秀子代;另一层

存放建模个体,使高斯模型能更好地提供子代个体的预测均值和不确定性。由图4、图5、图6中可以看出,R2-EMO算法得到的近似Pareto前沿能更好地逼近真实Pareto前沿。与同样用代理模型的ParEGO和KRVEA算法相比,R2-EMO算法不仅运行时间较短,而且得到的解集也能更好地收敛到Pareto前沿上。

4 结论

本文提出了一种基于R2指标的昂贵多目标进化(R2-EMO)算法,该算法用带有新的效用函数的R2指标选择个体,使选择的评估个体不仅考虑了种群个体的收敛性和多样性,而且考虑了预测均值和预测均方误差。同时采用双层档案管理策略,对存放非支配评估个体的档案A1和建模档案A2进行管理,使更优秀的解能够被发掘并保留下来,加快种群收敛,提高模型质量。仿真实验结果表明,R2-EMO算法在处理昂贵多目标优化问题时得到解集的收敛性和分布性优于其他算法。本文研究结果为后续求解昂贵高维多目标优化问题和约束问题奠定了基础。

参考文献(References)

[1] Min A T W, Ong Y S, Gupta A, et al. Multi-problem surrogates: Transfer evolutionary multiobjective optimization of computationally expensive problems[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2019, 23(1): 15-28.

[2] Coello C A C, Lechuga M S. MOPSO: A proposal for multiple objective particle swarm optimization[C]. Washington DC: IEEE Computer Society, 2002:

- 1051-1056.
- [3] Chen Q, Long B, Zhang Q. Black-box expensive multiobjective optimization with adaptive in-fill rules[C]. Evolutionary Computation. Vancouver: IEEE, 2016: 4770-4774.
- [4] 姚垒. 基于非分解的昂贵多目标优化算法的改进研究[D]. 武汉: 中国地质大学计算机学院, 2013.
(Yao L. A study on the improvement of expensive multi-objective algorithm based on the non-decomposition principle[D]. Wuhan: Computer Science and Technology, China University of Geosciences, 2013.)
- [5] Luo J, Gupta A, Ong Y S, et al. Evolutionary optimization of expensive multiobjective problems with Co-Sub-Pareto front gaussian process surrogates[J]. IEEE Transactions on Cybernetics, 2019, 49(5): 1708-1721.
- [6] Knowles J. ParEGO: A hybrid algorithm with on-line landscape approximation for expensive multiobjective optimization problems[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2006, 10(1): 50-66.
- [7] Jones D R, Schonlau M, Welch W J. Efficient global optimization of expensive black-box functions[J]. Journal of Global Optimization, 1998, 13(4): 455-492.
- [8] Ponweiser W, Wagner T, Biermann D, et al. Multiobjective optimization on a limited budget of evaluations using model-assisted S-metric selection[C]. Parallel Problem Solving from Nature — PPSN X. Berlin: Springer, 2008: 784-794.
- [9] Zhang Q, Liu W, Tsang E, et al. Expensive multiobjective optimization by MOEA/D with gaussian process model[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2010, 14(3): 456-474.
- [10] Chugh T, Jin Y, Miettinen K, et al. A surrogate-assisted reference vector guided evolutionary algorithm for computationally expensive many-objective optimization[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2016, 22(1): 129-142.
- [11] Zhan D, Cheng Y, Liu J. Expected improvement matrix-based infill criteria for expensive multiobjective optimization[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2017, 21(6): 956-975.
- [12] Namura N, Shimoyama K, Obayashi S. Expected improvement of penalty-based boundary intersection for expensive multiobjective optimization[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2017, 21(6): 898-913.
- [13] Brockhoff D, Wagner T, Trautmann H. R_2 indicator-based multiobjective search[J]. Evolutionary Computation, 2015, 23(3): 369-395.
- [14] 刘建昌, 李飞, 王洪海, 等. 进化高维多目标优化算法研究综述[J]. 控制与决策, 2018, 33(5): 879-887.
(Liu J C, Li F, Wang H H, et al. Survey on evolutionary many-objective optimization algorithms[J]. Control and Decision, 2018, 33(5): 879-887.)
- [15] Clark C E. The greatest of a finite set of random variables[J]. Operations Research, 1961, 9(2): 145-162.
- [16] Deb K, Jain H. An evolutionary many-objective optimization algorithm using reference-point-based nondominated sorting approach, Part I: Solving problems with box constraints[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2014, 18(4): 577-601.
- [17] Zhang Q, Li H. MOEA/D: A multiobjective evolutionary algorithm based on decomposition[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2007, 11(6): 712-731.
- [18] Huang Z. Extensions to the k -means algorithm for clustering large data sets with categorical values[J]. Data Mining Knowledge Discovery, 1998, 2(3): 283-304.

作者简介

刘建昌(1960—), 男, 教授, 博士生导师, 从事复杂工业过程建模控制与优化等研究, E-mail: liujianchang@ise.neu.edu.cn;

赵阳杰(1993—), 女, 硕士生, 从事昂贵多目标优化算法的研究, E-mail: zhaoyangjie54@163.com;

李飞(1988—), 男, 讲师, 博士, 从事多目标优化算法的研究, E-mail: lanceleneu@126.com;

宋悦熙(1995—), 女, 硕士生, 从事多目标优化算法的研究, E-mail: 772810600@qq.com.

(责任编辑: 李君玲)