多目标优化的演化算法

谢 涛[1)] 陈火旺[1)] 康立山[2)]

[1)](国防科学技术大学计算机学院 长沙 410073)

[2)](武汉大学软件工程国家重点实验室 武汉 430072)

摘 要 近年来,多目标优化问题求解已成为演化计算的一个重要研究方向,而基于Pareto最优概念的多目标演化算法则是当前演化计算的研究热点.多目标演化算法的研究目标是使算法种群快速收敛并均匀分布于问题的非劣最优域.该文在比较与分析多目标优化的演化算法发展的历史基础上,介绍基于Pareto最优概念的多目标演化算法中的一些主要技术与理论结果,并具体以多目标遗传算法为代表,详细介绍了基于偏好的个体排序、适应值赋值以及共享函数与小生境等技术.此外,指出并阐释了值得进一步研究的相关问题.

关键词 多目标优化;演化计算;Pareto最优

中图法分类号 TP301

Evolutionary Algorithms of Multi-Objective Optimization Problems

XIE Tao[1)] CHEN Huo-Wang[1)] KANG Li-Shan[2)]

[1)](*College of Computer Science, National University of Defense Technology, Changsha* 410073)

[2)](*National Laboratory of Software Engineering, Wuhan University, Wuhan* 430072)

Abstract Multi-objective optimization (MOO) has become an important research area of evolutionary computations in recent years, and the current research work focuses on the Pareto optimal-based MOO evolutionary approaches. The evolutionary MOO techniques are used to find the non-dominated set of solutions and distribute them uniformly in the Pareto front. After comparing and analyzing the developing history of evolutionary MOO techniques, this paper takes the multi-objective genetic algorithm as an example and introduces the main techniques and theoretical results for the Pareto optimal-based evolutionary approaches, mainly focusing on the preference based-individual ordering, fitness assignment, fitness sharing and niche size setting etc.. In addition, some problems that deserve further studying are also addressed.

Keywords multi-objective optimization; evolutionary computation; pareto optimal

1 引 言

一般说来,科学研究与工程实践中许多优化问题大都是多目标优化问题.多目标优化问题中各目标之间通过决策变量相互制约,对其中一个目标优化必须以其它目标作为代价,而且各目标的单位又往往不一致,因此很难客观地评价多目标问题解的优劣性.与单目标优化问题的本质区别在于,多目标优化问题的解不是唯一的,而是存在一个最优解集合,集合中元素称为Pareto最优或非劣最优(non-dominated)[1].所谓Pareto最优就是,不存在比其中至少一个目标好而其它目标不劣的更好的解,也就是不可能通过优化其中部分目标而其它目标不至劣

收稿日期:2001-04-02;修改稿收到日期:2003-02-10.谢 涛,男,1966年生,博士,副教授,主要研究方向为软计算、组合数学、网络信息安全、复杂性与复杂科学.E-mail:taoxie@nudt.edu.cn.陈火旺,男,1936年生,教授,博士生导师,中国工程院院士,主要研究方向为软件工程、人工智能等.康立山,男,1934年生,教授,博士生导师,主要研究方向为计算机科学理论、演化计算、并行计算.

化. Pareto 最优解集中的元素就所有目标而言是彼此不可比较的.

演化算法具有求解多目标优化问题的优点. 早在 1967 年, Rosenberg 在其博士学位论文中曾提到可用遗传搜索算法来求解多目标的优化问题[2], 但直到 1985 年才出现基于向量评估的 VEGA 算法[3], 这是第一个多目标演化算法, 但 VEGA 算法本质上仍然是加权和方法. 真正引起演化计算界足够重视的是 1990 年后, 相继提出了不同的多目标演化算法, 特别是近 6 年内(1994 ~ 1999 年), 多目标演化算法的文献发表数量几乎是前十年(1985 ~ 1994 年)的 3 倍还多[4]. 例如, 1993 年, Fonseca 和 Fleming 提出了 MOGA 算法[5], Srinivas 和 Deb 提出了 NSGA 算法[6], Horn 和 Nafpliotis 也提出了 NPGA 算法[7]. MOGA 算法对种群每一个体的排序数是基于 Pareto 最优概念的当前群体中优于该个体解的其它个体数, 并采用一种基于排序数的适应值赋值方法; 同时, 采用自适应的小生境技术与受限杂交技术来提高种群多样度, 防止解群的过早收敛. MOGA 算法的主要优点是算法执行相对容易且效率高, 缺点是算法易受小生境大小影响, 但值得一提的是 Fonseca 与 Fleming 已经从理论上解决了小生境的大小的计算问题. NSGA 算法是基于对多目标解群体进行逐层分类的方法, 每代选种配对之前先按解个体的非劣性进行排序, 并引进基于决策向量空间的共赏函数法, 优点是优化目标个数任选, 非劣最优解分布均匀, 允许存在多个不同等效解, 缺点是计算效率较低, 计算复杂度为 $O(MN^3)$ (其中 M 为目标数量, N 为种群大小), 未采用精英保留策略(elitism), 共享参数 σ_{share} 需要预先确定. 最近, Deb 与 Pratap 等[8] 通过引进计算复杂度为 $O(MN^2)$ 的快速非劣性排序和新的多样性保护方法, 提出了第二代 NSGA, 简称 NSGA-II, NSGA-II 克服了 NSGA 的缺点. NPGA 算法采用基于 Pareto 最优概念的锦标赛选择机制, 与基于两个个体之间的直接比较方案不同的是, NPGA 算法还额外地从种群中选取一定数量(一般为 10 个)的其它个体参与非劣最优解的比较. 因为该算法的非劣最优解选择是基于种群的部分而非全体, 因此其优点是能很快找到一些好的非劣最优解域, 并能维持一个较长的种群更新期, 缺点是除需要设置共赏参数外, 还需要选择一个适当的锦标赛规模, 限制了该算法的实际应用效果. Zitzler 与 Thiele 提出了一种采用精英保留策略的多目标演化算法 SPEA[9], 每代维持一个用来保存从初始种群开始业已发现的非劣解的外部种群, 外部种群参与所有遗传操作. 如果采用好的簿记方法, SPEA 的计算复杂度可由 $O(MN^3)$ 降至 $O(MN^2)$. Knowles 与 Corne 提出一种类似 $(1+1)-ES$ 的演化策略的多目标演化算法 PAES[10], 只采用一个亲本与一个子代个体, 算法维持一个用来保存业已发现的非劣解的档案, 算法计算复杂度为 $O(aMN)$, 其中 a 为档案长度. 此外, 还有一些基于决策者预期目标的目标向量方法, 如目标规划[11, 12]、目标实现[13] 以及最小最大方法[14~16] 等, 其优点是计算效率高, 缺点是各优化指标的预期目标难以确定, 而且对非凸搜索空间不适用[17].

本文首先以 Fonseca 和 Fleming 提出的多目标遗传算法 MOGA 为代表, 比较详细地介绍了 Pareto 最优概念、基于 Pareto 最优概念的个体排序方法、基于个体排序的适应值赋值、多目标优化遗传算法中种群的自适应小生境技术以及基于小生境的受限杂交技术等. 其次, 指出并阐释了一些值得进一步研究的相关问题, 诸如测试函数设计与算法性能比较标准、算法收敛性分析、算法的终止条件、算法的实际工程应用等. 最后是全文的结论.

2　多目标优化问题的数学描述

最小化与最大化问题可以相互转化, 因此, 仅以最小化多目标问题为研究对象.

一个多目标问题可以表示如下, 其中决策向量 $\boldsymbol{x} \in R^m$, 目标向量 $\boldsymbol{y} \in R^n$:

$$\mathrm{Min}\ \boldsymbol{y} = f(\boldsymbol{x}) = (f_1(\boldsymbol{x}), f_2(\boldsymbol{x}), \cdots, f_n(\boldsymbol{x})).$$

定义 1(优劣性, Dominance/Inferiority). 称目标向量解 $\boldsymbol{u} = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n)$ 优于 $\boldsymbol{v} = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n)$, 记为 $\boldsymbol{u}\ p< \boldsymbol{v}$, 如果 $\boldsymbol{u}$ 部分小于 $\boldsymbol{v}$, 也就是: $\forall i \in \{1, 2, \cdots, n\}$, $u_i \le v_i \wedge \exists i \in \{1, 2, \cdots, n\}$, $u_i < v_i$. 反过来, 称目标向量解 $\boldsymbol{v}$ 劣于 $\boldsymbol{u}$, 记为 $\boldsymbol{v}\ p> \boldsymbol{u}$.

定义 2(非劣最优解, Pareto Optimal). 决策变量 $\boldsymbol{x}_{u \in R^n}$ 称为多目标问题的非劣最优解, 当且仅当不存在决策变量 $\boldsymbol{x}_{v \in R^n}$, 使得相应的目标向量 $\boldsymbol{v} = f(\boldsymbol{x}_{v \in R^n}) = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n)$ 优于 $\boldsymbol{u} = f(\boldsymbol{x}_{u \in R^n}) = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n)$, 即 $\boldsymbol{v}\ p< \boldsymbol{u}$.

由所有非劣最优解组成的集合称为多目标优化问题的最优解集, 也称为可接受解集或有效解集, 记为 P_{true}; 相应非劣最优解的目标向量称为非支配的(non-dominated), 由所有非支配的目标向量构成多

目标问题的非劣最优目标域(Pareto Front)，记为 PF_{true}. P_{true}与 PF_{true}由具体的多目标优化问题中各目标函数所决定，是一个确定的不变集合.由优化算法所发现的非劣最优解组成的集合记为 P_{known}与 PF_{known}，使用演化算法求解多目标优化问题时，隐含下列假设之一在某些赋范空间(如欧氏空间、RMS 赋范空间等)中成立：$P_{\text{known}}=P_{\text{true}}$，$P_{\text{known}}\subset P_{\text{true}}$或 $PF_{\text{known}}\in\left[PF_{\text{true}}, PF_{\text{true}}+\varepsilon\right]$.

3　基于 Pareto 最优概念的多目标优化的演化算法

基于 Pareto 最优概念的多目标优化的演化算法中最有代表性的是 Fonseca 与 Fleming 提出的多目标优化遗传算法(MOGA)，MOGA 同时也是同类算法中理论性较强的一种算法，其主要内容包括：按目标的优先顺序与期望目标值进行向量解的优劣比较，基于排序的适应值赋值策略，共赏函数与小生境技术，约束杂交技术.简言之，MOGA 算法首先定义了按目标优先顺序与期望目标值进行向量解的优劣比较原则，然后规定种群中每一向量解的排序由当前种群中(基于 Pareto 优劣定义)优于该解的其它解的个数来决定，而当前种群中所有非劣最优解都置为同一排序 1(或 0).适应值赋值策略是根据排序先后按线性或非线性插值方法给不同的排序个体赋以不同的适应值，具有同一排序号的向量解共赏适应值.共赏函数与小生境技术主要通过非劣最优解域 PF_{true}的大小与种群规模来确定共赏半径或小生境的大小 σ_{share}. 约束杂交限制目标空间杂交半径 σ_{mate}.

3.1　基于目标优先顺序与目标期望值的 Pareto 最优性比较

考虑决策向量为 $\boldsymbol{x}\in R^m$ 的 n 维向量函数 $f\left(\boldsymbol{x}\right)$，$\boldsymbol{u}=f\left(\boldsymbol{x}_u\right)$ 与 $\boldsymbol{v}=f\left(\boldsymbol{x}_v\right)$ 分别为相对决策向量 $\boldsymbol{x}_u$与 $\boldsymbol{x}_v$ 的目标向量；$\boldsymbol{g}=\left[\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2, \cdots, \boldsymbol{g}_p\right]=[(g_{1,1}, \cdots, g_{1,n_1}), (g_{2,1}, \cdots, g_{2,n_2}), \cdots, (g_{p,1}, \cdots, g_{p,n_p})]$ 为预定目标优先顺序向量；其中 $n_i\in\left\{0, 1, \cdots, n\right\}$，$i=1, 2, \cdots, p$，$\sum_{i=1}^{p} n_i=n$. g_{ij}定义为优先顺序为 i 的目标子集中的第 j 个目标.如同向量 $\boldsymbol{g}$ 一样，$\boldsymbol{u}=[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p]=[(u_{1,1}, \cdots, u_{1,n_1}), (u_{2,1}, \cdots, u_{2,n_2}), \cdots, (u_{p,1}, \cdots, u_{p,n_p})]$；$\boldsymbol{v}$ 与 $\boldsymbol{f}$ 都可以如此展开.假设子向量目标 $\boldsymbol{u}_i$ 中只有 $k_i\in\left\{0, 1, \cdots, n_i\right\}$ 个目标已经得到满足，不失一般性，子向量目标 $\boldsymbol{u}_i$可如下分成两部分.

$$\forall i=1, 2, \cdots, p,\ \exists k_i\in\left\{0, \cdots, n_i\right\} \mid \forall l\in\left\{1, \cdots, k_i\right\},$$
$$\forall m\in\left\{k_i+1, \cdots, n_i\right\}, \left(u_{i,l}\leqslant g_{i,l}\right)\wedge\left(u_{i,m}>g_{i,m}\right);$$

分别定义子目标向量 $\boldsymbol{u}_i$, $\boldsymbol{v}_i$与 $\boldsymbol{g}_i$的前 k_i个元素集合为 $\boldsymbol{u}_i^{\hat{u}}$, $\boldsymbol{v}_i^{\hat{u}}$与 $\boldsymbol{g}_i^{\hat{u}}$，相应的后$\left(n_i-k_i\right)$个元素集合分别定义为 $\boldsymbol{u}_i^{\check{u}}$, $\boldsymbol{v}_i^{\check{u}}$与 $\boldsymbol{g}_i^{\check{u}}$. 符号 $\hat{\boldsymbol{u}}$与 $\check{\boldsymbol{u}}$分别表示子目标向量 $\boldsymbol{u}_i$中满足与不满足目标期望值的目标元素. Fonseca 与 Fleming 给出了如下目标向量排序优先性定义.

定义 **3**(优先性，Preferability).　给定目标优先顺序向量 $\boldsymbol{g}=\left[\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2, \cdots, \boldsymbol{g}_p\right]$，定义目标向量 $\boldsymbol{u}=\left[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p\right]$，优先目标向量 $\boldsymbol{v}=\left[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_p\right]$，记为 $\boldsymbol{u}\underset{g}{\prec}\boldsymbol{v}$，如果下列逻辑为真：

$$p=1\Rightarrow\left(\boldsymbol{u}_p^{\check{u}}\,p<\boldsymbol{v}_p^{\check{u}}\right)\vee\left\{\left(\boldsymbol{u}_p^{\check{u}}=\boldsymbol{v}_p^{\check{u}}\right)\wedge\left[\left(\boldsymbol{v}_p^{\hat{u}}>\boldsymbol{g}_p^{\hat{u}}\right)\vee\left(\boldsymbol{u}_p^{\hat{u}}\,p<\boldsymbol{v}_p^{\hat{u}}\right)\right]\right\},$$

$$p>1\Rightarrow\left(\boldsymbol{u}_p^{\check{u}}\,p<\boldsymbol{v}_p^{\check{u}}\right)\vee\left\{\left(\boldsymbol{u}_p^{\check{u}}=\boldsymbol{v}_p^{\check{u}}\right)\wedge\left[\left(\boldsymbol{v}_p^{\hat{u}}>\boldsymbol{g}_p^{\hat{u}}\right)\vee\left(\boldsymbol{u}_{1,\cdots,p-1}^{\hat{u}}\underset{g_{1,\cdots,p-1}}{\prec}\boldsymbol{v}_{1,\cdots,p-1}^{\hat{u}}\right)\right]\right\},$$

其中 $\boldsymbol{u}_{1,\cdots,p-1}=\left\lfloor\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_{p-1}\right\rfloor$，$\boldsymbol{v}$ 与 $\boldsymbol{g}$ 可类似定义.

简单地说，目标向量之间的比较先从优先级最高的子目标向量开始，每一级子目标向量的优劣性比较则首先从目标未满足的子目标元素部分 $\boldsymbol{u}_i^{\check{u}}$开始.第 i 等级的子目标向量 $\boldsymbol{u}_i$优于 $\boldsymbol{v}_i$的条件是：或者 $\boldsymbol{u}_i^{\check{u}}\,p<\boldsymbol{v}_i^{\check{u}}$满足，或者 $\boldsymbol{u}_i^{\check{u}}=\boldsymbol{v}_i^{\check{u}}$存在但 $\boldsymbol{v}_i^{\hat{u}}$不能全部满足目标期望值；只有当 $\boldsymbol{u}_i^{\check{u}}=\boldsymbol{v}_i^{\check{u}}$，且 $\boldsymbol{v}_i^{\hat{u}}$满足目标期望值时(此时，称该级子目标不可比较，即等价)，才必须继续下一优先等级(第 $i-1$ 级)子目标向量的比较，如此重复直到最低优先级(第 1 级)的比较.第 1 级优先级子目标向量必须对其全部目标元素进行比较(即 Pareto 比较方式)，也就是即使当 $\boldsymbol{u}_1^{\check{u}}=\boldsymbol{v}_1^{\check{u}}$，且 $\boldsymbol{v}_1^{\hat{u}}$满足目标期望值时，还必须比较 $\boldsymbol{u}_1^{\hat{u}}$与 $\boldsymbol{v}_1^{\hat{u}}$之间的优劣.

满足目标期望值的较高优先级子目标向量中的目标元素(即 $\boldsymbol{u}_{i>1}^{\hat{u}}$)无须参与比较，因此，除了满足期望值的目标之外而其余目标皆等价的二目标向量 $\boldsymbol{u}$ 与 $\boldsymbol{v}$ 是不可比较或等价的，并有以下等价性定义.

定义 **4**(等价性，Equivalence).　给定目标优先顺序向量 $\boldsymbol{g}=\left[\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2, \cdots, \boldsymbol{g}_p\right]$，定义目标向量 $\boldsymbol{u}=\left[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p\right]$与目标向量 $\boldsymbol{v}=\left[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_p\right]$等价，记为 $\boldsymbol{u}\underset{g}{\equiv}\boldsymbol{v}$，如果下列逻辑为真：

$\left(\boldsymbol{u}^{\check{u}}=\boldsymbol{v}^{\check{u}}\right) \wedge \left(\boldsymbol{u}_1^{\hat{u}}=\boldsymbol{v}_1^{\hat{u}}\right) \wedge \left(\boldsymbol{v}_{2,\cdots,p}^{\hat{u}} \leq \boldsymbol{g}_{2,\cdots,p}^{\hat{u}}\right)$.

目标向量之间优先性与优劣性具有直接的关系,Fonseca 与 Fleming 给出并证明了如下命题.

引理 1(优先性与优劣性关系)[18]. 给定目标优先顺序向量 $\boldsymbol{g}=[\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2, \cdots, \boldsymbol{g}_p]$,如果 $\boldsymbol{u}\ p\!\prec \boldsymbol{v}$,则目标向量 $\boldsymbol{u}$ 要么优先目标向量 $\boldsymbol{v}$,要么 $\boldsymbol{u}$ 等价于 $\boldsymbol{v}$.

目标向量之间的优先性关系具有传递性.

引理 2(传递性,Transitivity)[18]. 给定任一目标优先顺序向量 $\boldsymbol{g}=[\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2, \cdots, \boldsymbol{g}_p]$,目标向量之间优先关系具有传递性,即给定三个目标向量 $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ 与 $\boldsymbol{w}$, $\boldsymbol{u} \underset{g}{\prec} \boldsymbol{v} \underset{g}{\prec} \boldsymbol{w} \Rightarrow \boldsymbol{u} \underset{g}{\prec} \boldsymbol{w}$.

3.2 基于种群个体排序的适应值赋值

与单目标问题不同的是,由于优劣性与优先性并非定义目标向量之间的整体有序关系,而只是给出部分有序关系,因此多目标优化问题中种群的排序不具有唯一性. 考虑第 t 代种群中的个体 $\boldsymbol{x}_u$,其相应的目标向量为 $\boldsymbol{u}$,定义 $r_{\boldsymbol{u}}^{(t)}$ 为当前种群中优先目标向量 $\boldsymbol{u}$ 的个体数, $\boldsymbol{x}_u$ 在第 t 代种群个体排序中的位置设为 $rank(\boldsymbol{x}_u, t)$,取 $rank(\boldsymbol{x}_u, t)=r_{\boldsymbol{u}}^{(t)}$. 因此,所有当前种群中非劣最优个体的排序皆预定为 0.

假定种群规模 N 足够大且分布均匀,个体标准化的排序数 $rank^*(\boldsymbol{x}_u, t)=\dfrac{r_{\boldsymbol{u}}^{(t)}}{N}$. 可以认为标准排序数 $rank^*(\boldsymbol{x}_u, t)$ 反映了解搜索空间中优于 $\boldsymbol{x}_u$ 的空间的比例,也反映了基于纯随机搜索方法改进 $\boldsymbol{x}_u$ 所需的代价,并且与各目标的尺度无关. 一般地,如果种群分布不均匀, $rank^*(\boldsymbol{x}_u, t)$ 即成为搜索代价的有偏估计,但种群个体之间的排序仍有如下严格的关系成立.

引理 3[18]. 如果目标向量 $\boldsymbol{u}=f(\boldsymbol{x}_u)$ 优先目标向量 $\boldsymbol{v}=f(\boldsymbol{x}_v)$,且决策向量 $\boldsymbol{x}_u$ 与 $\boldsymbol{x}_v$ 属于同一种群,则 $rank^*(\boldsymbol{x}_u, t) < rank^*(\boldsymbol{x}_v, t)$;反过来,如果 $rank^*(\boldsymbol{x}_u, t) \geq rank^*(\boldsymbol{x}_v, t)$,则目标向量 $\boldsymbol{u}$ 不优先 $\boldsymbol{v}$.

基于排序的适应值赋值步骤:

第一步:基于 $rank(\boldsymbol{x}_u, t)$ 值将种群排序;

第二步:利用线性或非线性的插值方法在最低序号(非劣最优个体)与最高序号($\leq N$)之间进行插值;

第三步:具有相同序号的个体的适应值共赏,即通过除以相同序号的个体数得到新的适应值;可以给不同序号的个体分配固定不变的适应值.

3.3 Niche 参数的确定

如同单目标优化一样,为了提高种群多样度,演化多目标优化算法中已经提出多种小生境与共赏技术,使得在一个种群内可以形成在多目标问题的 PF_{true} 中分布均匀的非劣最优解集 PF_{known}. 因此,具有同一 Pareto 序号的解共赏适应值后(见 3.2 节),还必须按解的目标向量之间的空间距离进行小生境规模调整. 当两个解的目标向量之间的空间距离小于某一预定值 σ_{share} 时,相应解的小生境大小就必须进行调整. NSGA 也采用了类似的小生境共赏技术,所不同的是前者基于目标向量空间距离进行共赏,而 NSGA 则是基于决策向量空间距离进行共赏. 有人也采用 NSGA 的非劣最优分层排序方案,但基于目标向量空间距离进行共赏[19]. NPGA 基于非劣最优性比较的锦标赛选择机制,当两个体之间不可直接比较时,则从种群中随机选取一定数量的其它个体进行局部的 Niche 规模比较,在目标向量空间中具有较小 Niche 规模(即邻域)的解将获胜. 此外,还有同时基于决策向量空间与目标向量空间的混合共赏技术以及与排序无关的适应值共赏技术. 共赏技术中关键问题是如何确定共赏参数 σ_{share}(或称 Niche 半径), σ_{share} 的选择将会影响算法的性能,而适应值共赏效果则共同取决于 σ_{share} 的选择与种群的大小. Fonseca 与 Fleming 给出了确定 σ_{share} 的选择范围的准则,该准则与种群大小、目标尺度以及每一目标的最大与最小值有关.

以下假定所有目标均具有同一优先等级. 定义 S 为决策向量的权衡集(trade-off set), $f(S)$ 为目标向量空间的权衡集, $\boldsymbol{y}=(\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_n)$,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{m} &= \left(\min_{y\in f(S)} \boldsymbol{y}_1, \min_{y\in f(S)} \boldsymbol{y}_2, \cdots, \min_{y\in f(S)} \boldsymbol{y}_n\right)\\ &= (\boldsymbol{m}_1, \boldsymbol{m}_2, \cdots, \boldsymbol{m}_n),\\ \boldsymbol{M} &= \left(\max_{y\in f(S)} \boldsymbol{y}_1, \max_{y\in f(S)} \boldsymbol{y}_2, \cdots, \max_{y\in f(S)} \boldsymbol{y}_n\right)\\ &= (\boldsymbol{M}_1, \boldsymbol{M}_2, \cdots, \boldsymbol{M}_n).\end{aligned}$$

平行任何一条坐标轴的直线与 $f(S)$ 至多只有一个交点,也就是每一个目标都是其它目标的单值函数,这是由非劣最优域的特性所决定的. 由 $f(S)$ 构成的超曲面相对每一坐标轴的最大投影面积由 $\boldsymbol{M}$ 与 $\boldsymbol{m}$ 来决定,因此由 $f(S)$ 构成的超曲面的总面积不超过以下定义的最大投影面积之和.

$$A=\sum_{i=1}^{n}\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}\Delta_j,\quad \Delta_j=\boldsymbol{M}_j-\boldsymbol{m}_j;$$

假定各目标都已经过适当标准化处理,使得每一目标具有相同的共赏参数值 σ_{share}. 设 N 是能对面积为 A 的区域实现均匀采样而不至相互叠合的最大采样点个数, N 即为可覆盖面积为 A 的体积为 σ_{share}^n 的超立方体的最少个数. N 可以通过两个边长

分别为$\left(M_i - m_i + \sigma_i\right)$与$\left(M_i - m_i\right)$的超平行多面体的体积之差除以$\sigma_{\text{share}}^n$得到,即

$$N = \frac{\prod_{i=1}^{n}\left(M_i - m_i + \sigma_{\text{share}}\right) - \prod_{i=1}^{n}\left(M_i - m_i\right)}{\sigma_{\text{share}}^n}.$$

相反,如果先给定采样点个数 N,则能通过求解以下多项式方程得到相应的共赏参数 σ_{share}(>0),即

$$N\sigma_{\text{share}}^{n-1} - \frac{\prod_{i=1}^{n}\left(M_i - m_i + \sigma_{\text{share}}\right) - \prod_{i=1}^{n}\left(M_i - m_i\right)}{\sigma_{\text{share}}} = 0.$$

3.4 约束杂交

染色体越相近的个体之间的杂交后代的适应值越高.为了保护小生境中的 Pareto 最优解不被破坏,Fonseca 与 Fleming 采用受限的杂交配对方案,定义了类似共赏参数 σ_{share}的杂交限制参数 σ_{mating},只有当个体之间的目标距离小于 σ_{mating} 时才允许杂交.杂交配对是这样实现的,当随机选取一个体后,在距离该个体的 σ_{mating} 范围内选取另一配对个体;否则(如果找不到配对个体),随机任取一配对个体进行杂交.σ_{mating}的确定与 σ_{share}类似.

4 值得进一步研究的相关问题

4.1 多目标优化演化算法中的测试函数

“没有免费午餐”的理论[20]意味着不包含问题领域知识的算法不一定有效,但包含过多的问题领域知识也会导致算法对其它问题的脆弱性.因此,演化多目标优化/决策算法研究的一个首要问题,就是如何定义实际多目标问题的共同特性,并把这些共同的特性作为算法所要解决的特殊问题.实际问题是丰富多样的,但并不是每一个实际的多目标优化问题都包括了多目标问题的所有特征.因此,为了提高算法研究与比较的效率,必须设计一些能反映实际多目标优化问题基本特征的标准测试函数集,这一类标准函数集合包含了多目标问题领域的基本知识.Whitley 等曾对多目标优化/决策问题的测试函数设计提出以下几点准则[21]:

(1)测试问题必须是简单搜索策略所不易解决的;

(2)测试函数中应包括非线性耦合以及非对称问题;

(3)测试问题中应包括问题规模可伸缩的问题;

(4)一些测试问题的评估代价应具有可伸缩性;

(5)测试问题应有规范的表达形式.

目前已经积累了为数不少的多目标优化测试函数.文献[4]列出了一个比较详尽的多目标优化问题测试函数表,并最终归纳成三类数值测试问题,即 MOP1,MOP2,MOP3.已有测试函数中未考虑约束条件或仅考虑较简单的决策变量范围,而实际多目标优化问题中往往存在复杂的约束条件,因此必须设计一些具有各种约束条件的测试函数[22].

此外,多目标优化演化算法的性能比较研究必须建立可对 Pareto 最优解的质量进行度量的标准.已有的性能比较方法有绝对评估方法[23]、统计分布方法[6]与非劣最优区域占有率方法等[9].对于任何一个多目标优化问题,都不易得到类似 MOP1 完整的非劣最优解的集合表达形式,因此,很难对 MOEA 的有效性作绝对评估.不过,对于比较简单的多目标数值优化问题(目标个数与决策变量个数),可以在一定精度内对决策变量进行离散化处理,转化为一个有穷离散空间的多目标优化问题,通过穷尽枚举法计算所有可能的决策变量组合,得到问题的近似 P_{true}和 PF_{true},作为对 MOEA 进行绝对评估的依据.统计分布方法以已知的 PF_{known}在 PF_{true}中统计分布的均匀性来评估算法对 Pareto 最优解的搜索能力,区域占有率方法采用 PF_{known}在 PF_{true}中所占的区域比例来反映算法的搜索广度,或以一种算法得到的 PF_{known}与另一种算法所得到的 PF_{known}之间的交集来反映其相对性能.

4.2 算法收敛行为分析

多目标与单目标优化问题的解的本质区别是,前者一般是一组或多组连续解的集合,而后者只是单个解或一组不连续的解,因此,得到一个解集合的近似解集比得到单个解的近似解难得多.实际的多目标优化问题往往需要从所得到的近似解集中选择唯一解作为最佳方案,而近似解集中的解都是Pareto 最优的,因而客观上是不可比较的.因此,实际唯一解的选择最终是与问题领域有关的一个本质主观的决策问题.已有的演化多目标优化算法的各种改进方法都是为了尽快地使解群体收敛并均匀分布于非劣最优解域,对一般多目标优化问题收敛行为的理论分析有助于改进现有算法的收敛性.理论上,多目标优化问题的演化算法缺乏与单目标优化问题演化算法相类似的收敛性理论,目前还未出现描述多目标问题演化算法中代与代之间的动态行为的理论分析结果.Rudolph[24]对由两个目标组成的简单多目标优化问题的演化算法的收敛行为进行了分析,以集合之间的距离定义解的收敛性,说明具有比例步

长均匀变异算子的$\left(1+1\right)-EA$(演化策略)能以概率1收敛到问题的非劣最优域.但是,Rudolph的分析过程比较复杂,而且中间过程不太清晰,似有问题,且不能推广至一般多目标优化问题.因此,有必要为多目标演化算法开辟新的理论分析途径.

4.3 多目标优化演化算法的应用研究

多目标优化演化算法已用于燃气涡轮泵控制器设计[25]、航空器结构设计[26,27]以及汽车发动机优化设计[28]等等.设计对象越复杂,设计目标与约束条件越多,设计过程中的主观因素就可能越多.多目标优化技术可以通过对所有设计目标同时进行优化,来寻找各种满足设计目标与约束条件的设计方案.优化设计中的各种不等式约束条件可以转化为具有期望目标值与最高优先级的优化目标,参与对向量解的排序,避免直接将各种约束条件作为对解的可行性的定性判断准则,可以大大提高算法的搜索效率.设计过程中的主观因素来源于设计者已有设计知识与对问题领域认识的局限性,设计专家对各设计目标的偏重程度往往只能定性地说明,如设计专家A认为设计目标1偏重设计目标2,而设计专家B也许刚好相反,设计专家C则认为设计目标1与设计目标2应同等看待.这些对各设计目标的定性偏重程度可用于对种群的排序,如果设计目标过多,也可用来计算其相应的加权值[29].另外,设计过程中的主观因素也表现在设计者对设计变量与各设计目标之间的某些约束关系上.例如,设计者希望设计目标$y_1\in[0,5]$,但如果不可能达到,则希望$y_1+y_3>100$等等,类似这样的设计约束选择是多种多样的,而且也有偏重程度,过去常常作为约束条件处理,降低了算法的效率.如果把这些设计者的主观设计自由度作为决策者(DM)加入多目标优化的演化设计算法中,就构成了具有反馈的演化工程设计系统.对各设计约束项的满足程度将对设计方案适应值作相应修改,只要设计适当的人机交互界面,设计专家的设计知识与思想就能与演化算法的强大搜索功能有机结合,大大提高设计效率,并降低设计风险.

4.4 其它问题

演化计算的时间复杂度主要由目标函数的计算复杂性决定.因为多目标演化算法中的各目标值可以彼此独立地并行计算,因此,开发各目标计算的并行性可以大大提高算法的计算效率.此外,还可以采用单目标演化计算并行实现中的岛屿模型,提高对多目标问题非劣最优域搜索的广度.多目标演化算法终止条件的确定也是一个值得研究的问题.现有的终止条件是,或采用固定的种群代数,或每隔一定代数对所得P_{known}所对应的PF_{known}的几何图形进行分析,以确定算法是否已取得足够完整且均匀的非劣最优解集,但这些方法仅适用于三个目标以下的优化问题.

5 结 论

多目标优化演化算法可分为两大类,即基于Pareto概念与不基于Pareto概念的演化算法.基于Pareto最优概念的演化算法是一条求解多目标问题非劣最优解的有效途径.本文在比较与分析多目标演化算法的发展历史基础上,具体以多目标遗传算法为代表,详细介绍了个体的比较与排序、适应值赋值以及共享函数与小生境等技术,最后指出并阐释了值得进一步研究的相关问题.

多目标优化问题的演化算法中待研究的问题还很多,如非劣最优解的质量评估、选种配对机制、多目标演化种群动力学行为及其稳定性分析、非劣最优解域收敛性分析、种群更新终止条件以及实际多目标问题求解等等,这些都是目前的研究热点.

参 考 文 献

1 Pareto V. Cours D' Economie Politique, volume I and II. F. Rouge, Lausanne, 1896

2 Rosenberg R S. Simulation of genetic populations with biochemical properties[Ph D dissertation]. University of Michigan, Ann Harbor, Michigan, 1967

3 Schaffer J D. Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms. In: Proceedings of the 1st International Conference on Genetic Algorithms, Lawrence Erlbaum, 1985. 93~100

4 Veldhuizen D A V, Lamont G B. Multiobjective evolutionary algorithm research: A history and analysis. Department of Electrical and Computer Engineering, Graduate School of Engineering, Air Force Institute of Technology, Wright Patterson AFB, OH, USA: Technical Report TR-98-03, 1998

5 Fonseca C M, Fleming P J. Genetic algorithms for multiobjective optimization: formulation, discussion and generation. In: Proceedings of the 5th International Conference on Genetic Algorithms, San Mateo, California, 1993. 416~423

6 Srinivas N, Deb K. Multiobjective optimization using nondominated sorting in genetic algorithms. Evolutionary Computation, 1994, 2(3): 221~248

7 Horn J, Nafpliotis N. Multiobjective optimization using the niched

Pareto genetic algorithm. University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, Illinois, USA: Technical Report, IlliGAL Report 93005, 1993
8 Deb K, Pratap A, Agarwal S, Meyarivan T. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2002, 6(2): 182～197
9 Zitzler E, Thiele L. Multiobjective optimization using evolutionary algorithms-a comparative case study. In: Eiben A E, B¨ck T, Schoenauer M, Schwefel H P eds. Parallel Problem Solving from Nature, Berlin, Germany: Springer, 1998. 292～301
10 Knowles J, Corne D. The Pareto archived evolution strategy: A new baseline algorithm for multiobjective optimization. In: Proceedings of the 1999 Congress on Evolutionary Computation, Washington DC, 1999. 98～105
11 Charnes A, Cooper W W. Management Models and Industrial Applications of Linear Programming, Volume 1. New York: John Wiley, 1961
12 Ijiri Y. Management Goals and Accounting for Control. Amsterdan: North-Holland, 1965
13 Hajela P, Lin C Y. Genetic search strategies in multicriterion optimal design. Structural Optimization, 1992, 4: 99～107
14 Chen Y L, Liu C C. Multiobjective VAR planning using the goal-attainment method. IEE Proceedings on Generation, Transmission and Distribution, 1994, 141(3): 227～232
15 Coello C A C, Christiansen A D, Aguirre A H. Using a new GA-based multiobjective optimization technique for the design of robot arms. Robotica, 1998, 16: 401～414
16 Coello C A C, Christiansen A D. Two new GA_based methods for multiobjective optimization. Civil Engineering Systems, 1998, 15(3): 207～243
17 Coello C A C. An Updated survey of evolutionary multiobjective optimization techniques: State of the art and future trends. In: Proceedings of the 1999 Congress on Evolutionary Computation, Washington DC, 1999. 3～13
18 Fonseca C M, Fleming P J. Multiobjective optimization and multiple constrains handling with evolutionary algorithms- part I: A unified formulation, and part II: Application example. IEEE Transactions on Systems, Man & Cybernetics-Part A: Systems and Humans, 1998, 28(1): 26～47
19 Michielssen E, Daniel S W. Design of lightweight, broad band microwave absorbers using genetic algorithms. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 1993, 41(6/7): 1024～1031
20 Wolpert D H, William G M. No free lunch theorems for optimization. IEEE Transaction on Evolutionary Computation, 1997, 1(1): 67～82
21 Whitley D *et al*. Evaluating evolutionary algorithms. Artificial Intelligence, 1996, 85: 245～276
22 Deb K, Pratap A, Meyarivan T. Constrained test problems for multi-objective evolutionary optimization. In: Proceedings of the 1st International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization, Zurich, Switzerland, 2001. 284～298
23 Veldhuizen D A V, Lamont G B. Evolutionary computation and convergence to a Pareto front. Late Breaking Papers at the Genetic Programming 1998 Conference, Stanford, 1998. 221～228
24 Rudolph G. On a Multi-objective evolutionary algorithm and its convergence to the Pareto set. In: Proceedings of the 1998 IEEE Conference on Evolutionary Computation, Alaska, USA, 1998. 511～516
25 Chipperfield A J, Fleming P J. Gas turbine engine controller design using multiobjective genetic algorithms. In: Proceedings of the 1st IEE/IEEE International Conference on Genetic Algorithms in Engineering Systems: Innovations and Applications, University of Sheffield, UK, 1995. 214～219
26 Vicini A, Quagliarella D. Inverse and direct airfoil design using a multiobjective genetic algorithm. AIAA Journal, 1997, 35(9): 1499～1505
27 Jones B R, Crossley W A, Lyrintzis A S. Aerodynamic and aeroacoustic optimization of airfoils via a parallel genetic algorithm. In: Proceedings of the 7th AIAA/USAF/NASA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, St. Louis, MO, 1998. AIAA-98-4811
28 Fujita K, Hirokawa N, Akagi S, Kitamura S, Yokohata H. Multi-objective optimal design of automotive engine using genetic algorithm. In: Proceedings of DETC'98——ASME Design Engineering Technical Conferences, 1998
29 Cvetkovic D, Parmee I C. Genetic algorithm-based multi-objective optimization and conceptual engineering design, Washington DC, 1999. 29～36

XIE Tao, born in 1966, Ph. D. and associate professor. His main research interests include soft computations, combinatorial mathematics, network information security, complexity and complex adaptive systems.

CHEN Huo-Wang, born in 1936, professor, Ph. D. supervisor, member of Chinese Academy of Engineering. His research area are in software engineering, artificial intelligence.

KANG Li-Shan, born in 1934, professor, Ph. D. supervisor. His research interests include computing theory, evolutionary computing and parallel computing.