Vol. 22(2002)
No. 4

数 学 杂 志
J. of Math. (PRC)

基于神经网络的多目标演化优化方法*

钟守楠 钟 良 蔡晓芬
(武汉大学数学与统计学院,武汉 430072)

摘要：本文考虑在决策者偏好不明确的条件下,使系统获得最优的思想,提出了多目标决策系统最优解的概念.把前馈神经网络与演化算法相结合,用于多目标决策系统最优解的选取.给出了有关定理的证明和示例.

关键词：神经网络；演化优化；系统最优解
MR(2000)主题分类号：90C30 中图法分类号：O224
文献标识码： A 文章编号： 0255-7797(2002)04-0453-06

1 问题的提出

多目标决策在没有绝对最优解的情况下,大多数只能求得偏好解.然而,在决策者偏好不明确的情况下,如何求出其最优解,这是一类极需解决的问题.为了解决这一问题,本文运用使决策系统获得整体最优的思想,提出多目标系统最优解的概念,应用具有优良的逼近、分类和自学习功能的前馈神经网络和基于自然竞争法则的演化优化方法相结合,建立多目标神经演化优化算法.证明了算法的收敛性,给出了示例.

2 多目标系统最优解的概念及性质

由于多目标决策问题的目标函数的多样性,造成其最优解概念的复杂化.为了讨论的方便,本节在简单地阐述多目标决策问题解的概念及性质的基础上,考虑使所有目标均值最优的有效解能使多目标问题获得总体最优的原则,提出多目标系统最优解的概念,并给出有关的证明.

设多目标决策问题的数学模型为:

$$(VP)\quad \min_{x\in D} F(x) = (f_1(x), f_2(x), \cdots, f_m(x))^T \tag{1}$$

其中 $D = \{x \in R^n | g_i(x) \geqslant 0, i = 1,2,\cdots,p;\ h_j(x) = 0, j = 1,2,\cdots q\}$,对于 $\forall\, x \in D$, $f_i(x)(i = 1,2,\cdots m)$ 单调连续有界.

定义 1 设 $x^* \in D$,若对于 $\forall\, x \in D$ 及 $i = 1,2,\cdots,m$,都有 $f_i(x^*) \leqslant f_i(x)$ 成立,则称 x^* 为问题(1)的绝对最优解,所有绝对最优解的集合称绝对最优解集,记 $I^*(F,D)$.

定义 2 设 $x^* \in D$,若不存在 $x \in D$,使得 $F(x) \leqslant F(x^*)$,则称 x^* 为问题(1)的有效解,所有有效解的集合称有效解集,记 $P(F,D)$.由有效解定义知,若 x^* 是问题(1)的有效

* 收稿日期：2001-06-20. 接受日期：2001-09-27
基金项目：国家自然科学基金资助项目(70171016)；亚太运筹中心资助项目；中国科学院管理决策与信息系统开放研究室资助项目.

解，则在可行域 D 中找不到一个 $x \in D$，使 $f_i(x) \leqslant f_i(x^*)$，$i = 1,2,\cdots,m$；并且至少有一个 $k \in \{1,2,\cdots,m\}$ 使 $f_k(x) < f_k(x^*)$ 成立.

定义 3 设 $x^* \in D$，若不存在 $x \in D$，使得 $F(x) < F(x^*)$，则称 x^* 为问题(1) 的弱有效解；所有弱有效解的集合称为弱有效解集，记 $P_w(F,D)$.

由弱有效解定义知，若 x^* 是弱有效解，则在可行域中找不到一个 $x \in D$，使得 $f_i(x) < f_i(x^*)$，$i = 1,2,\cdots,m$.（定义 1 ~ 3，见参考文献[1].）

定理 1[1] 绝对最优解必是有效解.

定理 2[1] 有效解必是弱有效解.

定理 3[1] 各分量目标函数在 D 上的最优解必是弱有效解.

作变换 $\hat{f}_i(x) = \exp(f_i(x))$，$\forall\, x \in D, i = 1,2,\cdots m$ (2)

于是 $\hat{f}_i(x) > 0, \forall\, x \in D, i = 1,2,\cdots,m$.

定义 4 设 $x^* \in D$，若对 $\forall\, x \in D, x \neq x^*$，不等式 $\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\hat{f}_i(x^*) < \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\hat{f}_i(x)$ 恒成立，则称 x^* 为问题(1) 的系统最优解.

定理 4 设 $x^* \in D$ 是问题(1) 的系统最优解，则 x^* 必是问题(1) 的有效解.

证 若 x^* 是问题(1) 的系统最优解，由系统最优解定义知，$\forall\, x \in D, x \neq x^*$，不等式 $\frac{1}{m}\hat{f}_i(x^*) < \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\hat{f}_i(x)$ 成立，于是有 $\hat{f}_i(x^*) \leqslant \hat{f}_i(x)$，$i = 1,2,\cdots,m$，立；且至少有一个 $k \in \{1,2,\cdots,m\}$，使 $\hat{f}_k(x^*) < \hat{f}_k(x)$ 成立.

结合式(2) 知 $f_i(x^*) \leqslant f_i(x)$，$i = 1,2,\cdots m$，且至少有一个 $k \in \{1,2,\cdots,m\}$ 使不等式 $f_k(x^*) < f_k(x)$ 恒成立. 由于 $x \in D$ 的任意性及有效解定义知，$x^* \in D$ 为问题(1) 的有效解.

定理 5 若 $x^* \in D$ 是问题(1) 的系统最优解，则 x^* 是问题(1)的弱有效解.

证 由定理 4 结合定理 2 知，定理显然成立.

3 多目标演化优化基础

3.1 向量函数的神经逼近原理

定义 5[2] 设 $x \in R^n, y \in R^m$，D 是一个给定的约束集合，如果对于每一个 $x \in D$，变量 y 按照给定样本训练好的神经网络软件描述的法则，通过计算机运算总有确定向量和它对应，则称 y 是 x 的智能函数. 一个三层前馈网络描述的智能函数可用式(3)表示，即

$$y = \sum_{i=1}^{N} c_i \psi\left(\sum_{j=1}^{n} w_{ij} x_j - \theta_i\right) \tag{3}$$

若所有的 c_i, w_{ij} 和 θ_i 已由给定的样本对网络训练后确定，其相应的神经网络软件是描述所给样本函数关系的智能函数. 显然它具有容错性、自学习性和函数逼近功能. 关于其函数逼近功能有如下结果：

定理 6[2] 设 $\psi(x)$ 为 D 上有界单调递增连续函数，D 为 R^n 的紧致子集，对于任何连续函数 $F: D \subset R^n \to R^m$，存在一个层数为 $k(\geqslant 3)$，隐层单元输出函数为 $\psi(x)$，输入输出层单元的输出函数是线性的神经网络描述的智能函数一致逼近 $F(x)$，其中 $\psi(x) = (1 + e^{-x})^{-1}$.

定理 7[2] 设 D 为 R^n 的紧致子集，$Q(x): D \subset R^n \to [a,b]^m$，$(0 < a < b < 1)$ 为 D 上连续有界实值函数，对任意给定的 $\varepsilon > 0$，存在一个 3 层 BP 神经网络，其隐层及输出层单元以 $f(u) = (1 + e^{-u})^{-1}$ 为输出函数，输入层单元的输出函数是线性的，该神经网络软件描述的智能函数任意逼近 $Q(x)$.

3.2 有效解的自动生成

3.2.1 有效解的自动生成原理

根据智能函数的逼近功能和多目标决策问题有效解集的定义建立多目标拟优化模型[2,3]，自动生成有效解集. 多目标拟优化模型的结构如图 1 所示，它由两级网络组成，其中一级网络由两个结构及神经元输出函数相同的 3 层子网络 A，B 组成，其各层输入输出关系

如下：

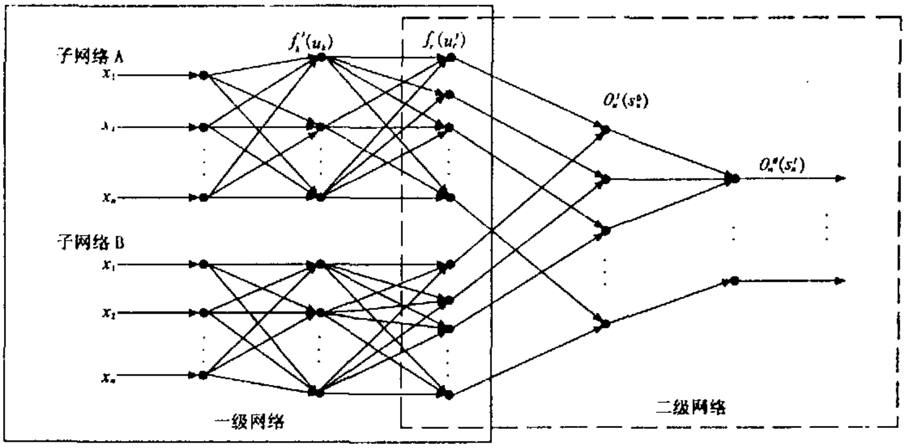

图 1　拟优化模型结构示意图

其中，$u_k=\sum\limits_{i=0}^{n}w_{ik}x_i, k=1,2,\cdots,n.\quad x_n=-1, w_{nk}=\theta_k.$

$f'_k(u_k)=(1+e^{-u_k})^{-1}, k=1,2,\cdots,n_1.$

$u'_r=\sum\limits_{k=1}^{n_1}w_{kr}f'_k,\ r=1,2,\cdots m.$ 其中　$f'_{n1}=-1,\ w'_{n_1r}=\theta'_r$

$f_r(u'_r)=(1+e^{-u'_r})^{-1}, r=1,2,\cdots,m.$

一级子网络的功能是完成 $F:D\subset R^n\to\Omega\subset R^m$ 的映射.

二级网络是一个虚拟神经网络，它描述了有效解选择准则的网络结构. 二级网络的输入层是一级子网络的输出层，其隐层各单元的输入输出关系分别为：

$$S_\mu^0=f_\mu(x^i)-f_\mu(x^j),\ \mu=1,2,\cdots,m.$$

$$O'_\mu(S_\mu^0)=\begin{cases}1, s_\mu^0>0,\\ -1, s_\mu^0<0, \mu=1,2,\cdots,m.\end{cases}$$

二级网络输出层各单元的输入关系为：

$$s'_\eta=\sum_{\mu=3\eta-2}^{\min(3\eta,m)}O'_\mu(S_\mu^0), \eta=1,2,\cdots,[(m+2)/3]$$

输出层各单元输出结果有下列几种情况：

(1) 当 m mod3=0 时，输出层含[m/3]个单元，各单元输出函数为：

$$O'_\eta(S'_\eta)=\begin{cases}1, s'_\eta=3\\ 0, s'_\eta=\pm 1\\ -1, S'_\eta=-3,\ \eta=1,2,\cdots,[(m+2)/3]\end{cases}$$

(2) 当 m mod3=1 时，输出层各单元的输出函数显然与情况(1)相同.

(3) 当 m mod3=2 时，相应输出函数为：

$$Q'_\eta(S'_\eta)=\begin{cases}1, S'_\eta=3,2\\ 0, S'_\eta=\pm 1, 0\qquad ,\ \eta=1,2,\cdots,[(m+2)/3]\\ -1, S'_\eta=-3,\ -2\end{cases}$$

按上述方法设计的虚拟网络，其相应的软件构成多目标软优化准则，其功能是完成从目标函数空间的可行像点集中选出有效像点集，从而得到相应的有效解集.

3.2.3 有效解集自动生成的步骤

Step 1 根据给定的(VP)建立多目标拟优化模型.

Step 2 选取初始有效解 x^{j0}.

Step 3 把给定(VP)的可行解集 D 按某一种方法离散为 D_k,(为叙述方便,不妨假设 D_k 中含有 N 个可行点.)

Step 4 $\forall\ x^i \in D_k$,从子网络 A 输入,x^{j0}从子网络 B 输入.

Step 5 判定

(1) 若至少有一个 $\eta \in \{1,2,\cdots,[(m+2)/3]\}$,使 $O_\eta^*(S_\eta^*)=0$,则 x^i 输入集合 D_{k+1},否则输入集合 NE,令 $i:=i+1$ 转 $Step4$.

(2) 若 $i=N$,停止,D_{k+1}即为所求的有效解集.

3.2.4 有效解集自动生成数学基础

从上述拟优化模型的结构,性能和有效解集的生成步骤知,一级网络软件描述的智能函数完成映射功能的数学基础已由定理 6,定理 7 给出. 定理 8,9 给出了有效解集自动生成的数学基础.

定理 8[2] 设 $F(x)=(f_1(x),f_2(x),\cdots,f_m(x))^T$,其中 $f_i(x),(i=1,2,\cdots m)$,在 D 上单调连续. Ω 为 $D_k \subset D$ 的像点集,x^{j0} 是初始有效解,应用多目标拟优化模型把 x^{j0} 从一级子网络 B 输入,任取 $x^i \in D_k,(i=1,2,\cdots,N)$,从一级子网络 A 输入,若拟优化模型输出层至少有一个 $\eta,\eta \in \{1,2,\cdots,[\frac{m+2}{3}]\}$,使得 $O_\eta^*(S_\eta^*)=0$ 成立,则 x^i 为(VP)的有效解.

定理 9[3] 应用拟优化模型,按有效解集自动生成方法,当循环变量 $K\to\infty$ 时,D_{k+1} 为多目标优化问题(1)的有效解集.

上述定理说明应用多目标拟优化模型,按算法 3.2.3 步骤,能把有效解从可行集中分离出来,生成(VP)的有效解集.

3.3 多目标演化优化中的适应值及选择策略

由于多目标决策模型的特殊性,在演化优化的过程中对于个体的适应值,每一代的最优个体和选择策略作如下规定:

定义 6 设个体 $x^k \in D$,$\widetilde{F}(x^k)=1/\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\widetilde{f}_i(x^k)$,则称 $\widetilde{F}(x^k)$ 为个体 x^k的适应值,其中

$$\widetilde{f}_i(x)=\begin{cases}\hat{f}_i(x), & \text{当 } x\in\{x\,|\,|\sum_{i=1}^{q}(h_i(x))^2+\sum_{j=1}^{p}(\min(0,g_j(x))^2|\leqslant\varepsilon\},\\ \infty, & \text{其它.}\end{cases}$$

由定义 6 知,若 $x\in\{x\,|\,|\sum_{i=1}^{q}(h_i(x))^2+\sum_{j=1}^{p}(\min(0,g_j(x))^2|\leqslant\varepsilon\}$,当 $\varepsilon=0$ 时等价于 $x\in D$. 显然$\forall\ x\in D$ 时,$\widetilde{F}(x)>0$;$\forall\ x\notin D$ 则 $\widetilde{F}(x^k)=0$. 为了计算的方便. 通常可以根据实际需要给出允许误差 $\varepsilon\geqslant 0$.

定义 7 x_{best}^t是演化优化第 t 代的最优解,当且仅当

$x_{best}^t=\{x^k|\max\limits_k(\widetilde{F}(x^k)),x^k\in p(t),k=1,2,\cdots,N\}$,其中 $p(t)$是第 t 代群体.

选择策略 采用基于共享率的最优保存选择策略[4]. 首先在当前群体 $p(t)$中,把具有最优适应值的个体取出,直接放入下一代 $p(t+1)$中,然后计算其它个体的分享率,依据个体的分享率按比例选取个体进入 $p(t+1)$. 记个体 $x^k\in p(t)$的分享率 $F_s(x^k)$,其计算公式如下:

$$F_s(x^k)=\widetilde{F}(x^k)/\sum_{j=1}^{N}S(x^k,x^j),$$

其中 $$S(x^k,x^j)=\begin{cases}1-[d(x^k,x^j)/d_{\max}], & d(x^k,x^j)<d_{\max},\\ 0, & d(x^k,x^j)\geqslant d_{\max}.\end{cases}$$

这里 $d(x^k,x^j)$表示个体 x^k 与 x^j 的距离. 若采用二进制编码,$d(x^k,x^j)$为 Hamming 距离;若采用实数编码,$d(x^k,x^j)$为 Euclidean 距离. $d_{\max}>0$,参数. 当 $d(x^k,x^j)\geqslant d_{\max}$时,表示两个个

体完全不相似，此时 $S(x^k,x^j)=0$.

4 神经演化算法步骤

对于给定的问题(1)，假定相应的拟优化模型已经建立，群体规模为 N，交叉率 $P_c\in(0,1)$，变异率 $P_m\in(0,1)$，选择方法采用基于共享函数的最优保持选择策略，多目标神经演化算法按下列步骤进行：

Step 1 把问题(1)的可行域 D 按某一规则离散成 $D_k\subset D$，随机选择初始群体 $P(t)$，$t:=0$，$P(0)\subset D_k$，给定 $\varepsilon\geqslant0$，$\varepsilon_1\geqslant0$.

Step 2 对于 $P(t)$，按 3.2.3 有效解的生成步骤执行，得有效解集 $SP(t)$ 和非有效解集 $NE(t)$.

Step 3 对于每个 $x^{(t)}\in SP(t)$，计算其适应值，求出 $x^{(t)}_{best}$.

Step 4 停止准则. 若 $x^{(t)}_{best}$ 满足下列条件：

(i) $x^{(t)}_{best}\in SP(t)$

(ii) $|\tilde{F}(x^{(t)}_{best})-\tilde{F}(x^{(t-1)}_{best})|\leqslant\varepsilon_1$

则 $x^{(t)}_{best}$ 是问题(1)的最优解，$x^*:=x^{(t)}_{best}$ 停止. 否则转入 *Step*5.

Step 5 分别对 $SP(t)$ 和 $NE(t)$ 执行遗传操作(即进行交叉、变异、选择操作)，得 $\overline{SP}(t)$ 和 $\overline{NE}(t)$.

Step 6 令 $P(t+1):=\overline{SP}(t)\cup\overline{NE}(t)$，$t:=t+1$ 转 *Step*2.

5 神经演化算法的收敛性

定理 10[5] 设 $Z_t=\max\{\tilde{F}(x^t_k),k=1,2,\cdots,N.\}$ 是一个随机变量序列，该变量代表在时间步 t 状态中的最佳适应度，遗传算法收敛到全局最优值，当且仅当

$$\lim_{t\to\infty}P\{Z_t=F^*\}=1$$

其中 $F^*=\max\{\tilde{F}(b)\,|\,b\in IB^l|\}$ 即全局最优值.

定理 11[5] 如果变异概率 $P_m\in(0,1)$，交叉概率 $P_c\in(0,1)$，采用比例选择，同时在选择前保留当前最优解，则遗传算法收敛到全局最优解.

定理 12 设 x^t_{best} 是神经演化算法第 t 代的最优解，则 x^t_{best} 是问题(1)的系统最优解.

证 由假设知 x^t_{best} 是神经演化算法第 t 代的最优解，根据算法的停止准则，结合定义 6，7 知 $\forall\ x^k\in P(t),k\in(1,2,\cdots,N),x^k\neq x^t_{best}$，不等式 $\tilde{F}(x^t_{best})>\tilde{F}(x^k)$，恒成立，于是下述不等式恒成立

$$1/\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\tilde{f}_i(x^t_{best})>1/\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\tilde{f}_i(x^k),\qquad 即\qquad \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\tilde{f}_i(x^k)>\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\tilde{f}_i(x^t_{best}).\tag{4}$$

因为 $x^k\in P(t)$，即 $x^k\in D_k\subseteq D$，则

$$x^k\in\{x\,|\,|\sum_{i=1}^{q}(h_i(x))^2+\sum_{j=1}^{p}(\min(0,g_j(x)))^2|\leqslant\varepsilon\},$$

于是 $\tilde{f}_i(x^k)=\hat{f}_i(x^k)$，$i=1,2,\cdots,m$. 不等式(4)变为不等式(5)

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\hat{f}_i(x^k)>\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\hat{f}_i(x^t_{best})\tag{5}$$

由定义(4)知，x^t_{best} 是问题(1)的系统最优解.

6 应用示例

采用本文前述的多目标神经演化优化方法，求下列问题的最优解

$$\min_{x\in D}(f_1(x),f_2(x),f_3(x))^T$$

其中，$D=\{x\in R^2\,|\,x_1+x_2\leqslant2,-x_1+x_2\leqslant1,x_1,x_2\geqslant0\}$，

$f_1(x)=-x_1+x_2^2$，　$f_2(x)=-\exp(-x_1)$，　$f_3(x)=3x_1-x_2$.

网络参数为：

一级子网络，输入层神经元个数 2， 二级网络，输入层神经元个数 $3\times2=6$，

隐层神经元个数 10， 隐层神经元个数 3，

输出层神经元个数 3， 输出层神经元个数 1，

演化的主要参数：$ECA(N,P_c,P_m)=ECA(40,0.5,0.002)$，$\varepsilon=0$，$\varepsilon_1=10^{-6}$.

经计算机运算后，得到系统最优解：$x^*=(0.033000,0.371500)^T$

最优目标向量：$f^*=(0.117875,-0.954839,-0.299989)^T$

7 结束语

本文提出了多目标极小化问题系统最优解的新概念，并证明了该最优解是有效解．事实上，文中提出的多目标问题的系统最优解，其本质是在决策人没有明确偏好条件下使系统达到或接近最优的有效解．如果把系统最优视为一个目标，多目标系统最优解的概念与标量优化问题最优解的概念一致．它为科学评价多目标优化问题有效解的优劣创造了有利条件，为客观地选取使系统接近或达到最优提供了理论依据，多目标神经优化算法与传统算法相比，至少有下列优点：

（1）在应用多目标神经演化算法求解多目标优化问题的系统最优解的全过程中，不涉及函数的可微性，仅涉及函数值的计算，因此是解决不可微多目标优化问题的有效算法．

（2）在求解具有连续约束集的多目标优化问题时，尽管初始有效解集中，选取的有效点是不足于代表整个有效解集，但随着演化代数的增加，被评价的有效解不断增多，当$t\to\infty$时，所有有效解被评价，从中选取最优有效解．因此，使用上述算法求得的系统最优解，具有全局最优性．若约束集为有限点集，求得的最优解显然是全局最优解．

（3）本算法及其数学模型均是由计算机软件描述，并在计算机上求解，对于不同的问题，只需选取不同样本，通过学习得到不同数学模型，然后求解，因此是一类智能优化算法．

本算法尽管具有上述优良特性，也存在不尽人意的地方，那就是当问题相当复杂时，计算工作量大，计算时间较长．虽然可以采用高速且性能优良的计算机解决这一问题，算法本身也有待于进一步改善；但其学术价值和潜在应用前景是值得我们进一步探索．

参考文献：

[1] 解可新、韩立兴、杜友联．最优化方法[M]．天津：天津大学出版社，1997，218～276.
[2] 钟守楠、蔡 伟．多目标拟神经优化方法[J]．武汉水利电力大学学报，2000，33(5)：102～106.
[3] 钟守楠．有效解集的自动生成方法[J]．运筹与管理，2000，9(4)：1～8.
[4] 钟守楠．基于互补算子自适应遗传算法[C]．中国运筹学会第六届学术交流会论文集，Hong Kong：Global—Link Publishing，2000，10：71～77.
[5] 陈国良、王煦法、庄镇泉、王东生．遗传算法及其应用[M]．北京：人民邮电出版社，1999，88～97.

MULTIOBJECTIVE EVOLUTIONARY OPTIMIZATION METHOD BASED ON NEURAL NETWORKS

ZHONG Shou-nan（钟守楠） ZHONG Liang（钟 良） CAI Xiao-fen（蔡晓芬）
(School of Math. and Statistics, Wuhan University, Wuhan 430072)

Abstract: In this paper, when decider's favours do not understand clearly, we consider the decision system obtains optimization, so that a system optimization solution concept of the multiobjective problem is presented. To make choice of system optimization solution, a neural evolutionary algorithm by means of feed forward neural networks and combining with evolutionary algorithm is presented. The theorenis are proved, and an example is shown.

Keywords: neural network; evolutionary optimization; system optimization solution
2000 MR Subject Classification: 90C30