

A Comparative Visual Analytics Framework for Evaluating Evolutionary Processes in Multi-objective Optimization

Yansong Huang, Zherui Zhang, Ao Jiao, Yuxin Ma, and Ran Cheng

摘要

进化多目标优化(EMO)算法已被证明在解决多目标决策问题方面是有效的。在实际应用中,分析人员通常同时使用几种算法并比较它们的解集,深入了解不同算法的特征,并探索更广泛的可行解。然而,很难对EMO算法内部的进化过程进行详细分析和比较。受可视分析工具在可解释人工智能中的成功应用的启发,本文作者认为交互式可视化可以显著提高多个EMO算法之间的比较分析。因此,该论文提出了一个可视化分析框架,该框架能够探索和比较EMO算法中的进化过程,并建立了多个方面的可视化设计以支持进化中间代和解集的比较分析。最后,通过基准测试和现实世界的多目标优化问题的案例研究展示了该框架的有效性,并阐明了如何利用框架来比较不同的EMO算法。

关键词: 可视分析; 进化多目标优化

1 引言

在现实世界的优化问题中经常要在多个目标下做出决策。与只满足一个目标的单方面决策任务不同,应该考虑多个方面来获得最优解,并在不同但往往冲突的目标直接进行权衡。为了解决这类问题,近几十年来开发了各种类型的多目标优化算法。这些算法的潜在机制是搜索出一个解集,其中的每个解都不能支配其他解(即在所有目标上都更优)。由于解集中的非支配性质,决策者能够在各种可行解间进行选择以满足传入的需求。

在已有的方法中,进化多目标优化(EMO)算法是寻找最优解集最有效的方法之一。通过适当地设计进化策略,EMO算法可以得到具有多样性和准确性的解,为用户提供广泛的决策选择。尽管EMO算法在许多问题中得到了广泛的应用,但评估EMO算法的一个关键挑战是对不同算法的结果进行比较分析。传统方法利用数值质量指标,如反向世代距离(IGD)和超体积(HV),来量化算法的性能。然而这不足以从收敛性、多样性和均匀性等多个方面表征EMO算法

受可视分析方法应用在可解释AI中的启发,这项工作提出了一个可视化分析框架来比较和分析多个EMO算法,该框架由多方面的可视化支持,分析人员可以从整体性能到单个代比较EMO算法的不同粒度级别。为了深入了解进化过程,还提出了一种基于最近邻的视觉设计来揭示来自多个算法生成的代之间的关系,有利于理解算法的潜在进化行为。

2 相关工作

本文提出的框架侧重于解释和比较EMO算法中的进化过程。相关工作有应用在多目标优化和算法模型中的可视化和可视分析相关技术。

2.1 多目标优化的可视化

可视化已经成为分析解集的有效方法。鉴于决策空间和目标空间的多维性质，可视化高维数据的常用技术被广泛采用，包括投影和平行坐标图(PCP)等。Tusar和Filipic [2] 建立了4-D目标空间的可视化问题，其投影结果保留目标向量的形状、范围和分布。为了解决PCPs的可读性问题，Li [3] 等人对PCPs如何揭示解集的分布和质量进行了研究。Cibulski [4] 等人对可视化帕累托前沿如何帮助决策进行了设计研究，提出了一种称为PAVED的交互系统，采用平行坐标图来支持探索优化算法生成的可行解。

2.2 可解释AI

随着可解释人工智能的进展，已有大量的研究解决了解释和对比算法模型的问题，论文主要调查了与可视化算法或模型的执行过程以及模型比较相关的工作。PIVE [5] 提出了机器学习和优化中迭代算法每次迭代的可视化框架，与本论文的工作精神上最为接近。将该框架适应EMO算法分析需要额外的努力来解决多目标优化中的特定领域需求，包括每一代解集的多方面度量，并支持理解算法、进化和解集之间的关系。

3 本文方法

基于分析任务，本文开发的可视分析框架的工作流程主要由相似性建模和可视探索两个阶段组成。

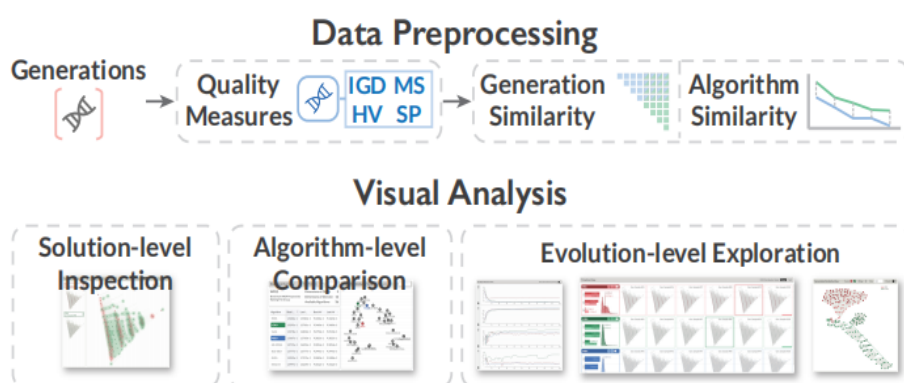


图 1. 可视分析框架概述

3.1 相似性建模

数据预处理阶段将应用于一个测试问题的各种候选算法的进化过程的日志加载到框架中。随后计算算法和代间相似性以及解集上的质量度量。算法的进化过程可以看作是一个世代序列，每个世代都与解集相关联。

该框架首先利用四种不同的质量指标先从整体上评估算法的关键性能。如反向世代距离(IGD)可以评估收敛性,其值代表每个真实参考点 r_i 到其最近的解的平均距离,较低的IGD值意味着较好的收敛到参考集。给定一个解集 $S = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 和参考集 $P^* = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_m\}$, IGD的计算公式如下:

$$IGD(P^*, \Omega) = \frac{\sum_{i=1}^m \min_{\mathbf{x} \in S} \text{dist}(\mathbf{r}_i, \mathbf{x})}{m} \quad (1)$$

其中, $\text{dist}(\mathbf{r}_i, \mathbf{x})$ 是从 \mathbf{r}_i 到 \mathbf{x} 的欧几里得距离。超体积(HV)、间距(SP)和最大传播(MS)等则是可以评价解的均匀性和扩散程度。

为了更彻底的比较,分别对算法的世代和进化过程两个层面的相似度进行建模。评估世代相似度的目的是为了量化目标空间中解集分布之间的相似度,这里利用Wasserstein距离揭示分布之间的相似性。为了分析算法之间的相似性,将算法中的代序列视为时间序列。每个时间步的属性值可以指定为IGD或者HV值,然后利用动态时间扭曲(DTW)距离和欧几里得距离来确定这些时间序列之间的相似性。

3.2 可视分析

在可视化方面,该方法设计了三个模块分别从算法、进化过程和解集三个层面比较不同算法。

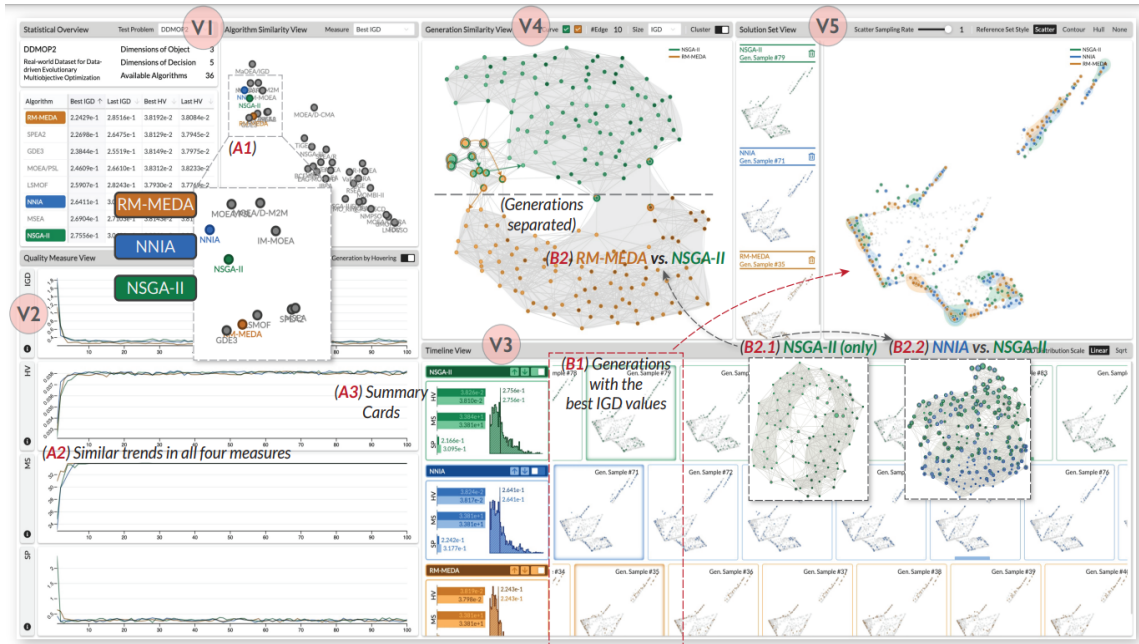


图 2. 可视分析界面

算法比较模块通过利用数据预处理阶段计算的质量指标和相似性对不同算法之间关系的进行粗粒度分析。如图2(V1)所示,左侧介绍了工作空间的基本信息,下方提供了一个质量度量表,它列出了每种算法的最佳和最终几代解集的各项指标。右侧是算法相似性视图,用t-SNE投影方法显示算法之间的距离,算法之间的相对距离反映在点的相对位置上。

在进化过程分析模块中,提出了一组可视化以阐明进化过程世代的演变。图2(V2)为质量指标视图,旨在说明进化过程中质量指标的随时间的整体变化。时间线视图(图2(V3))以

并列的方式显示了所有世代的目标向量，每行代表一个选中的算法。每个散点图呈现目标空间中解集的分布，当目标空间的维度超过2时，则采用PCA方法将目标向量投影到二维平面上。世代相似性视图(图2(V4))旨在揭示世代之间的相似性，以帮助分析人员识别不同的进化行为。对选定的多种算法构建K-最邻近图(KNN)描述它们的接近度。该图包括对应于所选算法的世代节点，每个节点的最近邻是基于代相似性得到的，即目标空间中相应解集之间的Wasserstein距离。图构建过程包括所有选定算法的世代，使得能够捕获内部和算法间的相互关系。

为了对特定世代间进行细微的比较分析，设计了解集视图(图2(V5))用于直接比较目标空间中的解集。分析人员可以在时间线视图选择几个特定的世代，相应的散点图会被放大显示在解集视图右侧。同时，参考集中的参考解也在散点图中可视化，以对比解集与参考集的差异。

4 复现细节

4.1 与已有开源代码对比

本论文已开源了代码，代码基本来源于论文源码，稍作改动后在本地跑通代码，搭建起前文介绍的可视分析框架。

4.2 环境搭建

该框架遵循浏览器-服务器架构，并依靠PlatEMO平台运行EMO算法生成世代日志。

后端环境：

Flask==2.3.2

Flask_Cors==4.0.0

hdbscan==0.8.30

networkx==3.1

numpy==1.25.1

scikit_learn==1.3.0

前端环境：

@fontsource/lato:4.5.10

@vicons/fa:0.12.0

d3:7.8.2

html-to-image:1.11.11

hull.js:1.0.3

lodash:4.17.21

vue:3.2.45

4.3 运行界面

运行得到的界面如图3所示(图中已导入在测试问题上各种算法的运行结果，并选择了一些算法可视化)。

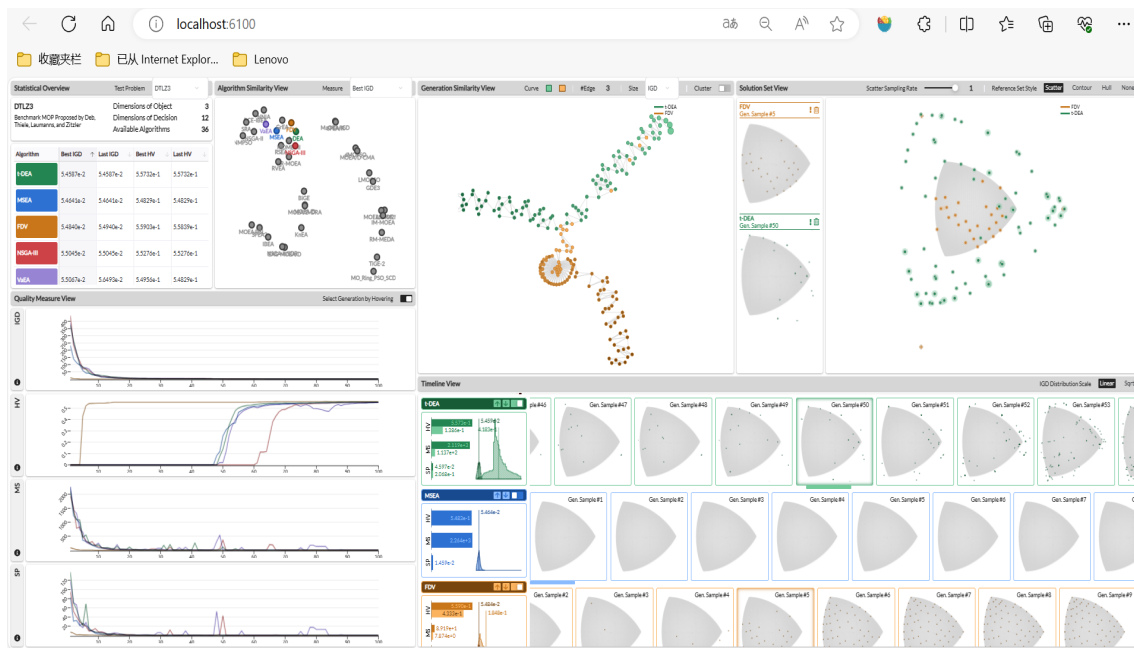
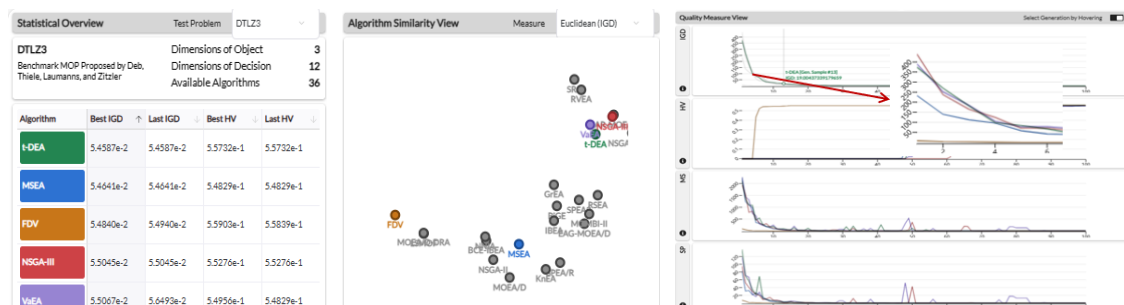


图 3. 可视分析界面

5 案例研究

本节介绍使用运行得到的界面对EMO算法在一个测试问题上进行对比和分析。DTLZ(Deb-Thiele-Laumanns-Zitzler)是一系列多目标优化问题，广泛用于评估EMO算法的性能。在每个问题中都提供了参考集，能够评估从各种EMO算法获得的解集的准确性和多样性。这里选择DTLZ3问题，其涉及三个目标函数和一个12维决策空间。每种算法都运行500代，然后均匀采样到100代作为其进化过程。

将数据加载到框架后，首先根据每种算法中IGD值最好的代进行排序，可以看出t-DEA, MSEA, FDV, NSGA-3和VaEA是表现最佳的算法，激活这五种算法的视图进行探索。在算法相似度视图中切换到最佳IGD度量时，可以看到它们的投影点很接近，而切换到世代IGD值序列的欧几里得距离时，发现FDV和MSEA与其他三种算法距离较远，这意味着它们在进化过程中呈现出不同的行为。下方的IGD折线图也证实了这一观察结果。



(a) 质量指标

(b) 算法相似性

(c) 时间线视图

图 4. 算法级分析

在代间相似度分析中，利用不同视图之间的相互作用来分析这五种算法的进化过程。选

择IGD值表现最好的t-DEA作为标准，与其他算法分别进行比较。

从t-DEA与FDV获得的世代构建的kNN图中，可以观察到两种算法都表现了从左上角到左下角的进化趋势(图5(a))，它们之间的交叉点很少，意味着两种算法被设计了不同的进化策略。其次，在相交趋于，FDV的世代是处于早期(5到7代)，t-DEA处于50代左右，这表明FDV的收敛速度较快(图5(c))。t-DEA与MSEA的kNN图表现出严重的重叠直到进化过程的一半(图5(b))，在早期阶段，两种算法的解集都远离参考集。进化到约50代之后，后代形成两个不同的分支，比较后续代可以明显观察到t-DEA的解集与覆盖参考集更加均匀，而MSEA在中心区域显示出较差的一致性(图5(d))。

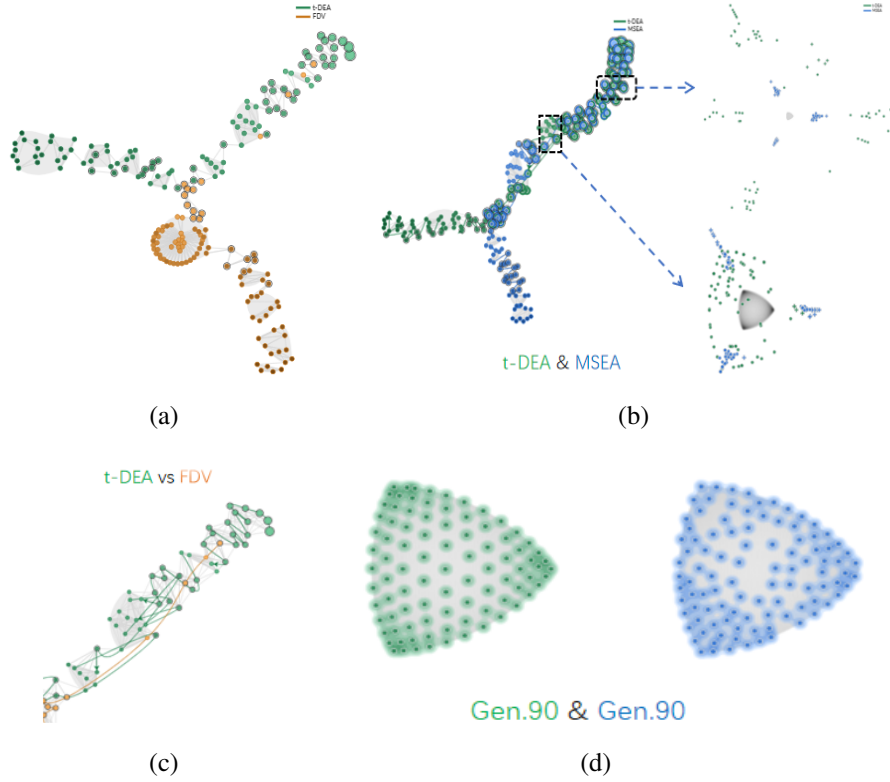


图 5. 进化过程分析

其他算法的配对比较也以上述形式进行。在这五种算法中，FDV明显表现出更快的收敛。通过这样的观察，EMO算法研究人员可以进一步研究确定这种现象是FDV的固有优势还是FDV的进化策略与测试问题之间的目标函数之间匹配，这对于设计不是针对特定测试问题的算法至关重要。其次，VaEA的行为表现与它的进化策略一致，即可以在进化过程中启动“新颖性探索”。尽管这些行为已经被认知，但运用可视化能够直观地观察到这些现象，这有助于优化变异策略以产生更好的解集。

6 总结

本篇论文提出了一个可视分析框架来比较分析多个进化多目标优化(EMO)算法。该框架允许从多个层面进行综合比较，包括算法级评估、进化级比较和解集比较，允许直观地感知各种进化过程的特征，如算法收敛的速度以及意外的探索进化。我的复现主要是使用论文提

供的代码搭建可视化界面，并对测试问题进行了案例研究，缺少一些创新性想法并且没有独立实现代码，应加强学习和锻炼。

参考文献

- [1] Y. Huang, Z. Zhang, A. Jiao, Y. Ma and R. Cheng, "A Comparative Visual Analytics Framework for Evaluating Evolutionary Processes in Multi-Objective Optimization," in IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, vol. 30, no. 1, pp. 661-671, Jan. 2024, doi: 10.1109/TVCG.2023.3326921.
- [2] Tušar, Tea, and Bogdan Filipič. "Visualization of Pareto front approximations in evolutionary multiobjective optimization: A critical review and the prosecution method." IEEE Transactions on Evolutionary Computation 19.2 (2014): 225-245.
- [3] Li, Miqing, Liangli Zhen, and Xin Yao. "How to read many-objective solution sets in parallel coordinates [educational forum]." IEEE Computational Intelligence Magazine 12.4 (2017): 88-100.
- [4] Cibulski, Lena, et al. "Paved: Pareto front visualization for engineering design." Computer Graphics Forum. Vol. 39. No. 3. 2020.
- [5] Kim, Hannah, et al. "PIVE: Per-iteration visualization environment for real-time interactions with dimension reduction and clustering." Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Vol. 31. No. 1. 2017.