

进化多目标优化算法研究^{*}

公茂果^{1,2+}, 焦李成^{1,2}, 杨咚咚^{1,2}, 马文萍^{1,2}

¹(西安电子科技大学 智能信息处理研究所, 陕西 西安 710071)

²(西安电子科技大学 智能感知与图像理解教育部重点实验室, 陕西 西安 710071)

Evolutionary Multi-Objective Optimization Algorithms

GONG Mao-Guo^{1,2+}, JIAO Li-Cheng^{1,2}, YANG Dong-Dong^{1,2}, MA Wen-Ping^{1,2}

¹(Institute of Intelligent Information Processing, Xidian University, Xi'an 710071, China)

²(Key Laboratory of Intelligent Perception and Image Understanding for the Ministry of Education, Xidian University, Xi'an 710071, China)

+ Corresponding author: E-mail: gong@ieee.org

Gong MG, Jiao LC, Yang DD, Ma WP. Evolutionary multi-objective optimization algorithms. *Journal of Software*, 2009,20(2):271–289. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/3483.htm>

Abstract: Evolutionary multi-objective optimization (EMO), whose main task is to deal with multi-objective optimization problems by evolutionary computation, has become a hot topic in evolutionary computation community. After summarizing the EMO algorithms before 2003 briefly, the recent advances in EMO are discussed in details. The current research directions are concluded. On the one hand, more new evolutionary paradigms have been introduced into EMO community, such as particle swarm optimization, artificial immune systems, and estimation distribution algorithms. On the other hand, in order to deal with many-objective optimization problems, many new dominance schemes different from traditional Pareto-dominance come forth. Furthermore, the essential characteristics of multi-objective optimization problems are deeply investigated. This paper also gives experimental comparison of several representative algorithms. Finally, several viewpoints for the future research of EMO are proposed.

Key words: multi-objective optimization; evolutionary algorithm; Pareto-dominance; particle swarm optimization; artificial immune system; estimation of distribution algorithm

摘 要: 进化多目标优化主要研究如何利用进化计算方法求解多目标优化问题,已经成为进化计算领域的研究热点之一.在简要总结 2003 年以前的主要算法后,着重对进化多目标优化的最新进展进行了详细讨论.归纳出当前多目标优化的研究趋势,一方面,粒子群优化、人工免疫系统、分布估计算法等越来越多的进化范例被引入

* Supported by the National Natural Science Foundation of China under Grant No.60703107 (国家自然科学基金); the National High-Tech Research and Development Plan of China under Grant No.2006AA01Z107 (国家高技术研究发展计划(863)); the National Basic Research Program of China under Grant No.2006CB705700 (国家重点基础研究发展计划(973)); the Program for New Century Excellent Talents in University (新世纪优秀人才支持计划); the Program for Cheung Kong Scholars and Innovative Research Team in University of China under Grant No.IRT0645 (长江学者和创新团队支持计划)

Received 2008-07-22; Accepted 2008-10-09

多目标优化领域,一些新颖的受自然系统启发的多目标优化算法相继提出;另一方面,为了更有效的求解高维多目标优化问题,一些区别于传统 Pareto 占优的新型占优机制相继涌现;同时,对多目标优化问题本身性质的研究也在逐步深入.对公认的代表性算法进行了实验对比.最后,对进化多目标优化的进一步发展提出了自己的看法.

关键词: 多目标优化;进化算法;Pareto 占优;粒子群优化;人工免疫系统;分布估计算法

中图法分类号: TP18

文献标识码: A

进化算法作为一类启发式搜索算法,已被成功应用于多目标优化领域,发展成为一个相对较热的研究方向——进化多目标优化(evolutionary multi-objective optimization,简称 EMO).在进化计算的权威期刊《IEEE Transactions on Evolutionary Computation》从 1997 年创刊至 2007 年底发表的文章中,被 SCI 引用次数最多的两篇文章都是关于 EMO 的研究成果^[1,2].2001 年至今,进化多目标优化的专题国际会议 EMO 每两年举办一次,成为进化计算领域的主流会议之一.2007 年 9 月在新加坡召开的进化计算领域的年度盛会 IEEE Congress on Evolutionary Conference 上,关于 EMO 的分会最多,达到了 4 个,2008 年增加到 5 个.在专著方面,Deb 等人 2001 年出版的《Multi-Objective Optimization Using Evolutionary Algorithms》^[3]一书目前已被引用 2 300 余次.Coello Coello 等人 2002 年出版的《Evolutionary Algorithms For Solving Multi-Objective Problems》^[4]一书也已被引用近千次,并于 2007 年在原书的基础上增加了 2002 年以后的研究成果,出版了该书的第 2 版^[5].2008 年,Knowles, Corne,Deb 组织 EMO 领域的知名学者编写了《Multiobjective Problem Solving from Nature》^[6].同时,Tan^[7],Jin^[8]等 EMO 领域的其他知名学者也陆续组织编写了各自的专著.截至目前,国际上出版的 EMO 专著在 15 部以上.这些现象表明,EMO 已成为进化计算领域的主流研究方向之一.

最优化问题是工程实践和科学研究中主要的问题形式之一,其中,仅有 1 个目标函数的最优化问题称为单目标优化问题,目标函数超过 1 个并且需要同时处理的最优化问题称为多目标优化问题(multi-objective optimization problems,简称 MOPs).对于多目标优化问题,一个解对于某个目标来说可能是较好的,而对于其他目标来讲可能是较差的,因此,存在一个折衷解的集合,称为 Pareto 最优解集(Pareto-optimal set)或非支配解集(nondominated set)^[3].起初,多目标优化问题往往通过加权等方式转化为单目标问题,然后用数学规划的方法来求解,每次只能得到一种权值情况下的最优解.同时,由于多目标优化问题的目标函数和约束函数可能是非线性、不可微或不连续的,传统的数学规划方法往往效率较低,且它们对于权重值或目标给定的次序较敏感.

进化算法通过在代与代之间维持由潜在解组成的种群来实现全局搜索,这种从种群到种群的方法对于搜索多目标优化问题的 Pareto 最优解集是很有用的.早在 1985 年,Schaffer^[9]就提出了矢量评价遗传算法(vector-evaluated genetic algorithms,简称 VEGA),被看作是进化算法求解多目标优化问题的开创性工作.20 世纪 90 年代以后,各国学者相继提出了不同的进化多目标优化算法.1993 年,Fonseca 和 Fleming 提出了 Multiobjective Genetic Algorithm(MOGA)^[10],Srinivas 和 Deb 提出了 Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm(NSGA)^[11],Horn 和 Nafpliotis 提出了 Niched Pareto Genetic Algorithm(NPGA)^[12],这些算法习惯上被称为第一代进化多目标优化算法.第一代进化多目标优化算法的特点是采用基于 Pareto 等级的个体选择方法和基于适应度共享机制的种群多样性保持策略.从 1999 年到 2002 年,以精英保留机制为特征的第二代进化多目标优化算法相继被提出:1999 年,Zitzler 和 Thiele 提出了 Strength Pareto Evolutionary Algorithm(SPEA)^[2],3 年之后,他们提出了 SPEA 的改进版本 SPEA2^[13];2000 年,Knowles 和 Corne 提出了 Pareto Archived Evolution Strategy(PAES)^[14],很快,他们也提出了改进的版本 Pareto Envelope-Based Selection Algorithm(PESA)^[15]和 PESA-II^[16];2001 年,Erichson, Mayer 和 Horn 提出了 NPGA 的改进版本 NPGA2^[17];Coello Coello 和 Pulido 提出了 Micro-Genetic Algorithm(Micro-GA)^[18];2002 年,Deb 等学者通过对 NSGA 进行改进,提出了非常经典的算法:NSGA-II^[1].

从 2003 年至今,进化多目标优化前沿领域的研究呈现出新的特点,为了更有效地求解高维多目标优化问题,一些区别于传统 Pareto 占优的新型占优机制相继涌现.Laumanns 和 Deb 等学者提出了 ϵ 占优的概念^[19],Brockhoff 和 Zitzler 等学者研究了部分占优^[20],Alfredo 和 Coello Coello 等学者提出了 Pareto 自适应 ϵ 占优^[21],Deb 和 Saxena 用主分量分析^[22]、相关熵主分量分析^[23]等方法结合进化计算来解决高维多目标问题.而且,对多目标

优化问题本身的研究也在逐步深入,不同性质的多目标优化测试问题被提出来.同时,一些新的进化机制也被引入进化多目标优化领域,如 Coello Coello 等人基于粒子群优化提出的 Multi-objective Particle Swarm Optimization(MOPSO)^[24],Gong 和 Jiao 等人基于免疫算法提出的 Nondominated Neighbor Immune Algorithm (NNIA)^[25],Zhang 和 Zhou 等人基于分布估计算法提出的 Regularity Model Based Multi-Objective Estimation of Distribution Algorithm(RM-MEDA)^[26,27],Zhang 和 Li 将传统的数学规划方法与进化算法结合起来提出的 Multi-Objective Evolutionary Algorithm Based on Decomposition(MOEA/D)^[28].

纵观国内外该领域的研究情况,国外 Coello Coello^[29-33]等学者从 1999 年开始一直在写该领域的综述,但他们的综述主要针对 2003 年以前的第一代和第二代进化多目标优化算法,对当代进化多目标优化的讨论很少,也没有给出经典算法的实验比较.而国内在该领域的综述类文章很少^[34-36],主要也是偏重于 2003 年以前的研究成果.鉴于近些年进化多目标优化的迅猛发展,我们认为有必要对该领域作一个全面的介绍,并对一些经典算法的性能进行实验对比和总结.

本文第 1 节给出多目标优化问题的数学描述.第 2 节简要总结第一代和第二代的主要算法及各阶段的特点.第 3 节对当前进化多目标优化的研究热点进行详细讨论.第 4 节对典型的多目标优化算法进行实验对比.第 5 节对全文进行总结并对进化多目标优化的进一步发展提出自己的看法.

1 多目标优化问题的数学描述

多目标优化问题又称为多标准优化问题.不失一般性,一个具有 n 个决策变量, m 个目标变量的多目标优化问题^[3]可表述为

$$\begin{cases} \min & \mathbf{y} = \mathbf{F}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x}))^T \\ \text{s.t.} & g_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, q \\ & h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, p \end{cases} \quad (1)$$

其中, $\mathbf{x}=(x_1, \dots, x_n) \in X \subset R^n$ 为 n 维的决策矢量, X 为 n 维的决策空间, $\mathbf{y}=(y_1, \dots, y_m) \in Y \subset R^m$ 为 m 维的目标矢量, Y 为 m 维的目标空间.目标函数 $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ 定义了 m 个由决策空间向目标空间的映射函数; $g_i(\mathbf{x}) \leq 0 (i=1, 2, \dots, q)$ 定义了 q 个不等式约束; $h_j(\mathbf{x}) \leq 0 (j=1, 2, \dots, p)$ 定义了 p 个等式约束.在此基础上,给出以下几个重要的定义.

定义 1(可行解). 对于某个 $\mathbf{x} \in X$, 如果 \mathbf{x} 满足(1)中的约束条件 $g_i(\mathbf{x}) \leq 0 (i=1, 2, \dots, q)$ 和 $h_j(\mathbf{x}) \leq 0 (j=1, 2, \dots, p)$, 则称 \mathbf{x} 为可行解.

定义 2(可行解集合). 由 X 中的所有的可行解组成的集合称为可行解集合, 记为 X_f , 且 $X_f \subseteq X$.

定义 3(Pareto 占优). 假设 $\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_B \in X_f$ 是式(1)所示多目标优化问题的两个可行解, 则称与 \mathbf{x}_B 相比, \mathbf{x}_A 是 Pareto 占优的, 当且仅当

$$\forall i = 1, 2, \dots, m, \quad f_i(\mathbf{x}_A) \leq f_i(\mathbf{x}_B) \wedge \exists j = 1, 2, \dots, m, \quad f_j(\mathbf{x}_A) < f_j(\mathbf{x}_B) \quad (2)$$

记作 $\mathbf{x}_A \succ \mathbf{x}_B$, 也称为 \mathbf{x}_A 支配 \mathbf{x}_B .

定义 4(Pareto 最优解). 一个解 $\mathbf{x}^* \in X_f$ 被称为 Pareto 最优解(或非支配解), 当且仅当满足如下条件:

$$\neg \exists \mathbf{x} \in X_f : \mathbf{x} \succ \mathbf{x}^* \quad (3)$$

定义 5(Pareto 最优解集). Pareto 最优解集是所有 Pareto 最优解的集合, 定义如下:

$$P^* \triangleq \{\mathbf{x}^* \mid \neg \exists \mathbf{x} \in X_f : \mathbf{x} \succ \mathbf{x}^*\} \quad (4)$$

定义 6(Pareto 前沿面). Pareto 最优解集 P^* 中的所有 Pareto 最优解对应的目标矢量组成的曲面称为 Pareto 前沿面 PF^* :

$$PF^* \triangleq \left\{ \mathbf{F}(\mathbf{x}^*) = (f_1(\mathbf{x}^*), f_2(\mathbf{x}^*), \dots, f_m(\mathbf{x}^*))^T \mid \mathbf{x}^* \in P^* \right\} \quad (5)$$

2 进化多目标优化的主要算法

1967年,Rosenberg^[37]就建议采用基于进化的搜索来处理多目标优化问题,但没有具体实现.1975年,Holland^[38]提出了遗传算法.10年后,Schaffer^[9]提出了矢量评价遗传算法,第一次实现了遗传算法与多目标优化问题的结合.1989年,Goldberg在其著作《Genetic Algorithms for Search, Optimization, and Machine Learning》^[39]中,提出了将经济学中的Pareto理论与进化算法结合起来求解多目标优化问题的新思路,对于后续进化多目标优化算法的研究具有重要的指导意义.随后,进化多目标优化算法引起了很多学者的广泛关注,并且涌现了大量的研究成果.据我们统计,在进化计算的权威期刊《IEEE Transactions on Evolutionary Computation》从1997年创刊至2007年底发表的文章中,被SCI引用次数最多的两篇文章都是关于EMO的研究成果,分别是Deb等人的NSGA-II^[1](被引用321次)和Zitzler等人的SPEA^[2](被引用320次).可以看出,进化多目标优化在进化计算领域是一个非常热门的研究方向.下面,我们按照Coello Coello的总结方式^[29-33]讨论进化多目标优化领域的一些主要算法.

2.1 第一代进化多目标优化算法

第一代进化多目标优化算法以Goldberg的建议^[39]为萌芽.1989年,Goldberg建议用非支配排序和小生境技术来解决多目标优化问题.非支配排序的过程为:对当前种群中的非支配个体分配等级1,并将其从竞争中移去;然后从当前种群中选出非支配个体,并对其分配等级2,该过程持续到种群中所有个体都分配到次序后结束.小生境技术用来保持种群多样性,防止早熟.Goldberg虽然没有把他的思想具体实施到进化多目标优化中,但是其思想对以后的学者来说,具有启发意义.随后,一些学者基于这种思想提出了MOGA^[10],NSGA^[11]和NPGA^[12].

(1) MOGA^[10]

Fonseca和Fleming在1993年提出了MOGA.该方法对每个个体划分等级(rank),所有非支配个体的等级定义为1,其他个体的等级为支配它的个体数目加1.具有相同等级的个体用适应度共享机制进行选择.其适应度分配方式按如下方式执行:首先,种群按照等级排序,然后,对所有个体分配适应度,方法是用Goldberg提出的线性或非线性插值的方法来分配,具有相同等级个体的适应度值是一样的.通过适应度共享机制采用随机采样进行选择.MOGA过于依赖共享函数的选择,而且可能产生较大的选择压力,从而导致未成熟收敛.

(2) NSGA^[11]

NSGA也是基于Goldberg的非支配排序的思想设计的.非支配解首先被确定,然后被分配一个很大的虚拟适应度值.为了保持种群的多样性,这些非支配解用它们的虚拟适应度值进行共享.这些非支配个体暂时不予考虑.从余下的种群中确定第2批非支配个体,然后它们被分配一个比先前非支配个体共享后最小适应度值还要小的虚拟适应度值.这些非支配个体也暂时不予考虑,从余下的种群中确定第3批非支配个体.该过程一直持续到整个种群都被划分为若干等级为止.NSGA采用比例选择来复制出新一代.NSGA的计算复杂度为 $O(mN^3)$,其中, m 是目标个数, N 是种群大小.其计算复杂度较高,而且需要预先确定共享参数.

(3) NPGA^[12]

NPGA设计了基于Pareto支配关系的锦标赛选择机制.具体思想如下:随机地从进化种群中选择两个个体,再随机地从进化群体中选取一个比较集,如果只有其中1个个体不受比较集的支配,则这个个体将被选中进入下一代;当它们全部支配或全部被支配于该比较集时,采用小生境技术实现共享来选取其中之一进入下一代.算法选取共享适应值大的个体进入下一代.该算法中,小生境半径的选取和调整比较困难,还要选择一个合适的比较集的规模.

第一代进化多目标优化算法以基于非支配排序的选择和基于共享函数的多样性保持为其主要特点.在第一代进化多目标优化的发展期间,一些亟需解决的问题也凸显出来.首先,能否找到替代小生境(共享函数)的方法来保持种群的多样性.适应度共享是由Goldberg和Richardson^[40]针对多峰函数优化提出来的,通常需要关于有限峰数量的先验知识和解空间小生境均匀分布的假设.对于多目标优化问题,同样需要确定共享半径的先验信息,其计算复杂度为种群大小的平方.

2.2 第二代进化多目标优化算法

从 20 世纪末期开始,进化多目标优化领域的研究趋势发生了巨大的变化,1999 年,Zitzler 等人提出了 SPEA^[2],该方法使精英保留机制在进化多目标优化领域流行起来.第二代进化多目标优化算法的诞生就是以精英保留策略的引入为标志.在进化多目标优化领域,精英保留策略指的是采用一个外部种群(相对于原来个体种群而言)来保留非支配个体.随后诞生了一些经典的进化多目标优化算法,它们大多数都采用精英保留策略.2000 年,Knowles 和 Corne 提出了 PAES^[14],随后又提出了改进的版本 PESA^[15]和 PESA-II^[16],2001 年,Zitzler 等学者提出 SPEA 的改进版本 SPEA2^[13],Deb 等学者提出了 NSGA 的改进算法 NSGA-II^[1],Erickson 等学者提出了 NPGA 的改进算法 NPGA2^[17].Coello Coello 一直致力于进化多目标优化的研究,2001 年,他提出了 Micro-GA^[18],还建立了一个关于 EMO 的网络信息库(<http://lania.mx/~ccoello/EMOO/>),收集了 EMO 领域的大多数研究结果.下面,我们讨论一些经典的第二代进化多目标优化算法.

(1) SPEA^[2]和 SPEA2^[13]

SPEA 是 Zitzler 和 Thiele 在 1999 年提出来的算法.在该算法中,个体的适应度又称为 Pareto 强度,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,其他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较高的选择概率.除了进化种群以外,还设置了一个保存当前非支配个体的外部种群,当外部种群的个体数目超过约定值时,则用聚类技术来删减个体.采用锦标赛选择从进化群体和外部种群中选择个体进入交配池,进行交叉、变异操作.该算法的计算复杂度高达种群大小的立方.

SEPA2 是 Zitzler 和 Thiele 在 2001 年提出的对 SPEA 的改进版本.他们在适应度分配策略、个体分布性的评估方法以及非支配解集的更新 3 个方面进行了改进.在 SPEA2 中,个体的适应度函数为 $F(i)=R(i)+D(i)$,其中, $R(i)$ 同时考虑到个体 i 在外部种群和进化种群中的个体支配信息, $D(i)$ 是由个体 i 到它的第 k 个邻近个体的距离决定的拥挤度度量.在构造新群体时,首先进行环境选择,然后进行交配选择.在进行环境选择时,首先选择适应度小于 1 的个体进入外部种群,当这些个体数目小于外部种群的大小时,选择进化种群中适应度较低的个体;当这些个体数目大于外部种群的大小时,则运用环境选择进行删减.在交配选择中,运用锦标赛机制选择个体进入交配池.SPEA2 引入了基于近邻规则的环境选择,简化了 SPEA 中基于聚类的外部种群更新方法.虽然其计算复杂度仍为种群规模的立方,但是,基于近邻规则的环境选择得出的解分布的均匀性是很多其他方法无法超越的.

(2) PAES^[14],PESA^[15]和 PESA-II^[16]

PAES 采用(1+1)进化策略对当前一个解进行变异操作,然后对变异后的个体进行评价,比较它与变异前个体的支配关系,采用精英保留策略保留其中较好的.该算法的经典之处在于引进了空间超格的机制来保持种群的多样性,每一个个体分配进一个格子.该算法的时间复杂度为 $O(N \times \bar{N})$,其中, N 为进化种群的大小, \bar{N} 为外部种群的大小.该算法的空间超格的策略被以后许多进化多目标算法所采用.随后,Corne 等人基于这种空间超格的思想提出了 PESA.PESA 设置了一个内部种群和一个外部种群,进化时将内部种群的非支配个体并入到外部种群中,当一个新个体进入外部种群时,同时要在外部种群中淘汰一个个体,具体的方法是在外部种群中寻找拥挤系数最大的个体并将其删除,如果同时存在多个个体具有相同的拥挤系数,则随机地删除一个.一个个体的拥挤系数是指该个体所对应的超格中所聚集个体的数目.Corne 等人在 2001 年对 PESA 作了进一步改进,称为 PESA-II,提出了基于区域选择的概念,与基于个体选择的 PESA 相比,PESA-II 用网格选择代替个体选择,在一定程度上提高了算法的效率.

(3) NSGA-II^[1]

NSGA-II 是 2002 年 Deb 等人对其算法 NSGA 的改进,它是迄今为止最优秀的进化多目标优化算法之一,提出该算法的文献[1]在进化多目标优化领域被 SCI 引用的次数最多.相对于 NSGA 而言,NSGA-II 具有以下优点:① 新的基于分级的快速非支配解排序方法将计算复杂度由 $O(mN^3)$ 降到 $O(mN^2)$,其中, m 表示目标函数的数目、 N 表示种群中个体的数目.② 为了标定快速非支配排序后同级中不同元素的适应度值,同时使当前 Pareto 前沿面中的个体能够扩展到整个 Pareto 前沿面,并尽可能地均匀遍布.该算法提出了拥挤距离的概念,采用拥挤距离比较算子代替 NSGA 中的适值度共享方法,拥挤距离的时间复杂度为 $O(m(2N)\log(2N))$.③ 引入了精英保

留机制,经选择后参加繁殖的个体所产生的后代与其父代个体共同竞争来产生下一代种群,因此有利于保持优良的个体,提高种群的整体进化水平。

NSGA-II, SPEA2 和 PESA-II 是第二代进化多目标优化的主要经典算法,这一时期,还有许多其他进化算法被提出来,以解决多目标优化问题,如 Veldhuizen 等人提出的 Multi-Objective Messy Genetic Algorithm (MOMGA)^[41], Coello Coello 等人提出的 Micro-GA^[18]等。该时期的算法以精英保留策略为主要特征,并且大多数算法不再以适应度共享的小生境技术作为保持种群多样性的手段,一些更好的策略被提出来,比如基于聚类的方法、基于拥挤距离的方法、基于空间超格的方法等。

3 当前进化多目标优化算法的研究热点

2003 年以来,进化多目标优化前沿领域的研究呈现出新的特点。首先,一些新的进化范例被引进多目标优化领域。其次,如何解决高维多目标优化问题(一般指目标个数大于 5 的多目标优化问题)成为进化多目标领域当前一段时期内面临的难题。有些学者提出了新的占优机制,如 Laumanns 和 Deb^[19]提出了 ε -占优, Brockhoff 和 Zitzler^[20]提出了部分占优, Alfredo 和 Coello Coello 等学者提出了 Pareto 自适应 ε 占优^[21]。同时,对多目标优化问题本身性质的研究也在逐步深入,不同性质的测试问题相继被提出来。

3.1 求解多目标优化的新型进化范例研究

近年来,粒子群优化、蚁群算法、人工免疫系统、分布估计算法、协同进化算法、密母算法、文化进化算法等一些新的进化范例陆续被用于求解多目标优化问题。本文选取其中 4 类比较典型的算法进行讨论,这些算法都是近两年在进化计算领域的顶级期刊《IEEE Transactions on Evolutionary Computation》或《Evolutionary Computation》上发表的成果,代表着当今进化多目标优化的发展潮流和趋势。

(1) 基于粒子群优化的多目标优化

粒子群优化(particle swarm optimization,简称 PSO)算法是 1995 年由 Kennedy 和 Eberhart 提出的群智能优化算法。它将种群中每个个体看成搜索空间中的一个没有体积和质量的粒子。这些粒子在搜索空间中以一定的速度飞行,其速度根据其本身的飞行经验和整个种群的飞行经验进行动态调整。PSO 的优点在于流程简单易实现,算法参数简洁,无需复杂的调整,因此,从提出至今,已被迅速用于遗传算法原有的一些应用领域。近年来,基于粒子群优化的进化多目标算法也是一个研究热点, Li^[42]等人把粒子群优化与 NSGA-II 结合起来,其算法性能优于 NSGA-II。 Fieldsend 和 Singh^[43]等人为了求解多目标优化问题在 PSO 中采用没有固定大小的外部种群集合,把局部搜索算子定义为外部种群和内部种群的相互作用,并引入了一个扰动算子以保持多样性。 Coello Coello 等人提出了 MOPSO^[24]。该算法引入了自适应网格机制的外部种群,不仅对群体的粒子进行变异,而且对粒子的取值范围也进行变异,且变异尺度与种群进化的代数成比例。 Sierra 和 Coello Coello 等人提出了基于拥挤距离和 ε 占优机制的粒子群多目标算法^[44]。 Abido 等人提出了两阶段非占优多目标粒子群进化算法^[45],在当前 Pareto 前沿面执行两阶段的局部搜索和全局搜索。 Koduru 等人提出了结合粒子群和模糊 ε 占优的混合算法^[46]。在这些算法中, Coello Coello 提出的 MOPSO 算法是用粒子群优化解决多目标优化问题的非常经典的算法。

MOPSO 的创新主要有两点:一是采用了自适应网格的机制来保存外部种群,当外部种群中个体的数目超过规定的大小时,这些个体的目标函数空间被均匀地划分为间隔相等的网格,然后,统计每个网格中个体的数目,那些位于较少个体的网格中的个体在参与锦标赛选择时赋予较高的被选中的概率;二是 Coello Coello 认为,基于粒子群优化的算法具有很快的收敛速率,但是对于多目标优化问题,不仅要考虑解的收敛性,还要考虑解分布的均匀性和宽广性,所以,为了保证最终解的多样性,引入了新的变异策略,对粒子分布的区域进行变异,且变异概率随着进化代数的增加而逐渐减小。

(2) 基于人工免疫系统的多目标优化

人工免疫系统(artificial immune systems,简称 AIS)是受免疫学启发,模拟免疫学功能、原理和模型来解决复杂问题的自适应系统,已被成功用于异常检测、计算机安全、数据挖掘、优化等领域^[47]。近几年,将 AIS 用于求解多目标优化问题的研究引起了很多学者的兴趣,一些用 AIS 求解多目标优化问题的算法相继出现。如, Coello

Coello 等人提出的 Multi-Objective immune system algorithm(MISA)^[48],Cutello 等人^[49]基于免疫操作对 PAES 进行改进提出的 I-PAES,Freschi 等人提出的 Vector artificial immune system(VAIS)^[50],Jiao 和 Gong 等人提出的免疫优势克隆多目标算法(IDCMA)^[51]和非支配邻域免疫算法(NNIA)^[25].在这些免疫多目标优化算法中,NNIA 是其中比较有代表性的算法.

NNIA 模拟了免疫响应中多样性抗体共生、少数抗体激活的现象,通过一种基于非支配邻域的个体选择方法,只选择少数相对孤立的非支配个体作为活性抗体,根据活性抗体的拥挤程度进行比例克隆复制,对克隆后的抗体群采用了有别于 GA 的重组操作和变异操作,以此加强对当前 Pareto 前沿面中较稀疏区域的搜索.与 NSGA-II,SPEA2,PESA-II 这 3 种代表 EMO 发展水平的算法及 Coello Coello 等人提出的 MISA 的对比实验说明 NNIA 是一种非常有效的 EMO 算法.值得一提的是,当目标个数达到 9 时,对于较困难的 DTLZ 问题,NNIA 仍能得到较为令人满意的性能,而 NSGA-II,SPEA2,PESA-II 等却无能为力,显示了该方法在求解高维多目标优化问题时具有很大的优势.

(3) 基于分布估计算法的多目标优化

分布估计算法是进化计算领域新兴的分支,它是进化算法和统计学习的有机结合.这类算法用统计学习的手段构建解空间内个体分布的概率模型,然后运用进化的思想进化该模型.该算法没有传统的交叉、变异操作,是一种新的进化模式.随着分布估计算法的发展以及该算法在解决一些问题时所表现出来的优越性能,一些基于分布估计思想的多目标优化算法相继被提出来.Khan^[52]等学者将 NSGA-II 中的选择策略和贝叶斯优化算法(BOA)结合起来,提出了多目标贝叶斯优化算法(mBOA),取得了比 NSGA-II 更好的效果.Laumanns^[53]等学者把 SPEA2 和 BOA 结合起来,用于解决多目标背包问题.Zhang 和 Zhou 等学者提出了 RM-MEDA^[26,27],该算法是比较经典的用分布估计算法求解多目标优化问题的算法.

Zhang 和 Zhou 等学者通过分析决策空间解分布的特点后认为,对于连续多目标优化问题,决策空间解分布的形式是分段连续的 $(m-1)$ 维流形分布(m 是目标的个数).基于这个结论,设计了 10 个变量之间有链接关系的连续多目标优化问题,并运用局部主分量分析来聚类决策空间中的解,然后对每个类运用主分量分析构建概率模型,再采样该概率模型,产生新的解,并采用了 NSGA-II 中的快速非支配排序和精英选择.该算法对于变量之间有关联的多目标优化问题的整体效果比 NSGA-II 要好.

(4) 基于分解的多目标进化算法

将多目标优化问题转换为单目标优化问题是用数学规划方法求解多目标优化问题的基本策略,典型的转换方法包括权重和法、柴贝彻夫法(Tchebycheff approach)、边界交集法等.近两年,Zhang 和 Li 将这种传统的多目标求解策略与进化算法相结合构造了一种新颖的基于分解的多目标进化算法(MOEAD)^[28].该算法将逼近整个 Pareto 前沿面的问题分解为一定数量的单目标优化问题,然后用进化算法同时求解这些单目标优化问题.算法维持一个由每个子问题的当前最优解组成的种群,子问题之间的近邻关系定义为子问题权重向量之间的距离,每个子问题的优化过程通过与其近邻子问题之间的进化操作来完成.该算法成功地将数学规划中常用的分解方法引入到进化多目标领域,而且可以直接采用进化算法求解单目标优化问题时的适应度分配和多样性保持策略.文献[54]又将差分进化操作成功地引入 MOEA/D.文献[28,54]的仿真实验结果表明,将数学规划方法与进化算法相结合是求解多目标优化问题的一种有效方法,为进化多目标优化提供了一种新思路.

3.2 新型占优机制研究

对传统 Pareto 占优机制的改进是当前进化多目标优化的研究热点之一.2002 年,Laumanns 和 Deb^[19]等学者提出了 ε 占优的概念,对传统 Pareto 占优机制发起了挑战. ε 占优机制基于空间超格思想.每个格子内只允许存在 1 个解,决策者可以动态调节格子的数目或者大小.这样,原来的基于个体的占优机制就成为基于格子的占优机制.同时,Brockhoff 和 Zitzler 等人^[20]研究了利用局部占优结构来进行高维多目标的降维,这种占优结构是在最小允许误差下的占优关系,首先用一种贪婪搜索算法找到最小集合误差,以及在该误差下的最小占优关系目标集合,实验结果表明,目标的维数越高,降维的幅度就越大.Koduru^[46]等人提出了模糊占优的概念.该方法类似于聚合函数和 SPEA 的适应度分配的结合,用模糊支配函数为每个占优目标加权,所有的目标加权后求和就是这个个

体的模糊占优程度.2007年,Alfredo 和 Coello Coello 等人^[21]对 ε 占优机制进行了进一步改进,提出了 Pareto 自适应 ε 占优机制.

Alfredo 和 Coello Coello 等人分析了 Laumanns 和 Deb 的 ε 占优以后认为,如果决策者不考虑 Pareto 前沿面分布的几何特点,则 ε 占优机制会丢失许多有效解,这一情况出现在 Pareto 前沿面分布几乎接近垂直和水平时.为了解决该问题,他们提出了 Pareto 自适应 ε 占优机制.它对应于每维目标的 ε 是一个矢量,该矢量的长度是格子的数目,矢量中元素的取值与 Pareto 前沿面的几何形状有关.考虑到了 Pareto 前沿面不同部分的占优强度信息,自适应地来调节 ε 矢量中元素的值,这样,那些 Pareto 前沿面分布几乎接近垂直和水平的区域所对应的超格矢量中的元素值就相对较小,也就是说,这些区域所分配的格子数目较多.

3.3 高维多目标优化研究

如何有效地求解高维多目标优化问题,也是当今进化多目标优化领域所面临的难题之一.对于维数较高的多目标优化问题,要想找到一组有代表性的 Pareto 最优解是十分困难的,一些处理低维数目标时不会遇到的问题凸显出来.当目标空间的维数增加时,Pareto 前沿面的维数也会增加,同时,种群中非支配解的比例增加,由于多数进化多目标优化算法强调种群中的非支配解,如果种群中解的选择压力还是像处理低维目标一样,那么种群进化将会减慢,甚至停滞.另外,如果两维 Pareto 前沿面需要用 N 个非支配解来表示,那么对于 m 维目标优化问题,就需要 $O(N^{m-1})$ 个非支配解来表示 m 维 Pareto 前沿面,这无论对于空间复杂度,还是时间复杂度而言都是一个挑战.最后,对于高维多目标优化问题,Pareto 前沿面的可视化也是一个问题,研究者们相继提出了用决策图^[55]、测地线图^[56]、并行坐标图^[20]、分散图矩阵^[57]等方法来可视化高维 Pareto 前沿面.

为了解决高维多目标优化问题,一些学者对原来的经典算法在高维多目标情况下的性能进行了实验对比研究.2003年,Khare,Yao,Deb^[58]比较了当目标维数是2~8时,SPEA2,NSGA-II,PESA等算法的性能.总体来说,这3种算法对于高维多目标优化问题都表现出一定的不足.为此,一些学者提出了专门针对高维多目标优化问题的算法.

Hughes^[59]等人在2003年提出了基于聚集函数的方法,该方法起初并没有用来解决高维多目标优化问题,随后,Wagner等人^[60]将该算法用来解决高维多目标优化问题.在该算法中,Hughes建议使用加权的最小最大法,以及结合对偶优化的权角距离度量的方法.这种方法并行处理所有的目标,决策者需要为每一个目标选择一个权矢量.加权的最小最大法与解的收敛性有关,权角距离度量与解分布的方向有关.该算法没有用到 Pareto 支配的概念,实验结果表明,该算法在求解高维多目标优化问题时表现出一定的优势,但是对于低维目标优化问题,其效果不如 NSGA-II 和 SPEA.

2005年,Deb等学者指出^[22],对于有些高维多目标优化问题,并不是所有的目标之间都是互相冲突的,也就是说,有冗余目标的存在,真正的 Pareto 最优前沿面的维数要小于目标空间的维数.通过运用主分量分析,他们得出如下结论:如果第 i 主分量中第 j 元素为正,则表明第 j 个目标对于该主分量的贡献为正,也就是说,该目标是趋于该主分量的;如果第 j 元素为负,则表明第 j 个目标对于该主分量的贡献为负,也就是说,该目标是背离该主分量的.通过提取主分量中负值最多的元素和正值最多的元素,可以提取冲突的目标,从而把冗余目标抛弃.基于这种思想,Deb提出了基于主分量分析的 NSGA-II 改进算法,并分别测试30维目标和20维目标的 DTLZ5 问题,得出了不错的结果,确实达到了降维的目的.2007年,Saxena 和 Deb^[23]又对该算法进行了改进.他们认为,主分量分析产生了一个低维线性空间,通过最小均方误差准则,该空间能够在一定误差下表示原始数据.但是,当原始数据点本身位于非线性的流形空间上,或者原始数据点本身是非高斯分布时,主分量分析无法揭示数据的内在维数.非线性降维的方法在模式识别领域也是一个研究热点,有等度规映射(ISOMAP)、局部线性嵌入(LLE)、Laplace 特征映射、核主分量分析(KPCA)等方法.Deb等人根据多目标优化问题的特点,分别将相关熵主分量分析和最大变化伸展主分量分析与 NSGA-II 结合,提出了两种求解高维多目标优化问题的算法.他们用这两种算法测试了50维的 DTLZ5 问题,取得了预期的效果.但是,对于上述3种算法,他们处理的问题本身是有很多冗余目标的,也就是说,他们所处理的50维的多目标优化问题,其实际 Pareto 最优前沿面的维数只有几维.而当目标之间是互相冲突的,不存在冗余目标时,Deb所提出的这3种方法是无效的.

3.4 多目标优化测试问题研究

多目标优化测试问题的构造与分析是多目标优化领域的另一个研究热点.由于多目标进化算法很难从理论上分析出其性能参数,研究者只能通过仿真实验来验证算法的性能^[61],因此,有效的多目标优化测试问题对该领域非常重要.随着越来越高效的多目标优化算法的出现,已有的多目标优化测试问题已经显得过于简单,不能很好地检验算法的性能,也无法真实地反映现实世界中多目标优化问题的复杂性.为此,Zitzler,Deb 等人陆续构造了著名的 ZDT 问题^[62]和 DTLZ 问题^[63],并被学者广泛采用.ZDT 问题由 6 个具有不同性质的两目标优化问题组成,其 Pareto 前沿面已知,是目前采用得最多的测试问题之一.DTLZ 问题能够扩展到任意多个目标,从而能够很好地扩展为高维多目标优化问题,也是目前采用得最多的测试问题之一.但是,ZDT 问题和 DTLZ 问题也具有明显的缺点^[61],如目标函数缺乏平坦区域(flat region)、缺少连续空间上的骗问题、Pareto 前沿面和定义域空间过于简单等等.

华人学者 Li 和 Zhang 等人^[54,64]先后构造了具有不同性质的多目标优化测试问题.在文献[64]中, Li 和 Zhang 提出了一组变量之间有关联且 Pareto 前沿面复杂的连续测试问题,并在文献[27]中用于新算法的性能测试与比较.实验结果表明,复杂的 Pareto 前沿面能够为多目标进化算法带来较大的寻优困难.但是,这些测试问题的 Pareto 前沿面均为线性或二次曲面,还不能体现现实世界中多目标优化问题的复杂性.为此,他们在文献[54]中提出了一类 Pareto 前沿面具有任意复杂性的测试问题,并用于 MOEA/D-DE 和 NSGA-II 性能的比较.

文献[5]对目前常用的多目标函数优化问题进行了搜集整理.主要包括 2000 年以前比较常用的低维多目标优化问题、Zitzler 等人提出的 ZDT 问题^[62]、Deb 等人提出的 DTLZ 问题^[63],并给出了它们的 Pareto 最优解集和理想 Pareto 前沿面,这些测试问题可以从 <http://www.cs.cinvestav.mx/~emoobook/> 下载.另外,Zitzler 等人整理了 12 个多目标背包问题及常用的多目标函数优化问题,并给出其理想 Pareto 前沿面,这些测试问题可以从 <http://www.tik.ee.ethz.ch/sop/download/supplementary/testProblemSuite/> 下载. Li 和 Zhang 提出的复杂变量联结的多目标优化测试问题^[54,64]可以从 <http://cswww.essex.ac.uk/staff/qzhang/moptestproblem/testsuite.htm> 下载.此外,对多目标优化算法性能评价测度的研究也一直是研究人员关注的热点和难点,Zitzler 等人在文献[65]中分析了常用评价测度的优缺点,本文就该主题不再展开评述.

通过上面的分析可知,目前进化多目标优化呈现出多样性的特点,新的进化范例被引进多目标优化领域,一些性能很好的算法相继被提出来.我们认为,只有把多目标优化问题本身的特点与这些进化范例有机地结合起来,才能设计出更好的算法.同时,目前对多目标优化问题的认识是具有历史局限性的,如何引入新的占优机制和如何高效地解决高维多目标优化问题,是目前进化多目标优化领域研究的热点和难点.

4 几种典型的进化多目标优化算法的性能比较

在这一节,我们通过实验来比较 NSGA-II^[11],SPEA2^[2],PESA-II^[16]和 NNIA^[25]的性能.前文我们已经提到,为了解决多目标优化问题,许多进化多目标优化算法相继被提出来.其中,NSGA-II,SPEA2 和 PESA-II 是进化多目标优化算法中最具代表性的,所以,我们选择了这 3 种经典的进化多目标优化算法.而 NNIA 是我们提出的算法,已在进化计算领域的权威期刊《Evolutionary Computation》上发表,本文选择它作为当前 EMO 算法的代表.测试函数包括 3 个著名的两目标问题: SCH^[9],DEB^[65]和 KUR^[66];4 个 ZDT 问题^[62];5 个 DTLZ 问题^[63].它们是当今国际上 EMO 领域被广泛采用的测试函数.实验是在 P-IV 3.2G CPU 和 2G RAM 的个人 PC 上完成的.

4.1 实验设置

表 1 给出了实验中用到的 12 个测试函数的数学定义.前 3 个两目标测试函数 SCH,DEB 和 KUR 分别由 Schaffer^[9],Deb^[66]和 Kursawe^[67]提出来.ZDT 问题由 Zitzler,Deb 和 Thiele 在 2000 年提出^[62].DTLZ 问题由 Deb,Thiele,Laumanns 和 Zitzler 在 2002 年提出^[63].前 3 个问题比较简单,不可扩展,其决策变量的数目不超过 3 个;ZDT1~ZDT3 有 30 个决策变量,ZDT4 有 10 个决策变量;5 个 DTLZ 问题的决策变量和目标维数可以扩展到任何数目,本文中,对 k 和 $|\mathbf{x}_k|$ 的取值,我们采用文献[63]的做法,即对于 DTLZ1, $k=3,|\mathbf{x}_k|=5$;对于 DTLZ2,DTLZ3 和 DTLZ4, $k=3,|\mathbf{x}_k|=10$;对于 DTLZ6, $k=3,|\mathbf{x}_k|=20$.图 1 是这 12 个问题的 Pareto 前沿面上均匀分布的 200 个采样点.

Table 1 Test problems used in this study**表 1** 本文用到的测试函数

Problems	Dimension n	Variable domain	Objective functions (minimized)
SCH	1	$[-5,10]$	$f_1(\mathbf{x}) = \begin{cases} -x, & \text{if } x \leq 1 \\ -2+x, & \text{if } 1 < x < 3 \\ 4-x, & \text{if } 3 < x \leq 4 \\ -4+x, & \text{if } x > 4 \end{cases}, f_2(\mathbf{x}) = (x-5)^2$
DEB	2	$[0,1]$	$f_1(\mathbf{x}) = x_1, f_2(\mathbf{x}) = (1+10x_2) \times \left[1 - \left(\frac{x_1}{1+10x_2} \right)^2 - \frac{x_1}{1+10x_2} \sin(8\pi x_1) \right]$
KUR	3	$[-5,5]$	$f_1(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n-1} \left(-10e^{(-0.2)\sqrt{x_i^2+x_{i+1}^2}} \right), f_2(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \left(x_i ^{0.8} + 5\sin(x_i)^3 \right)$
ZDT1	30	$[0,1]$	$f_1(\mathbf{x}) = x_1, f_2(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \left[1 - \sqrt{x_1/g(\mathbf{x})} \right]$ $g(\mathbf{x}) = 1 + 9 \left(\sum_{i=2}^n x_i \right) / (n-1)$
ZDT2	30	$[0,1]$	$f_1(\mathbf{x}) = x_1, f_2(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \left[1 - (x_1/g(\mathbf{x}))^2 \right]$ $g(\mathbf{x}) = 1 + 9 \left(\sum_{i=2}^n x_i \right) / (n-1)$
ZDT3	30	$[0,1]$	$f_1(\mathbf{x}) = x_1, f_2(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \left[1 - \sqrt{x_1/g(\mathbf{x})} - \frac{x_1}{g(\mathbf{x})} \sin(10\pi x_1) \right]$ $g(\mathbf{x}) = 1 + 9 \left(\sum_{i=2}^n x_i \right) / (n-1)$
ZDT4	10	$x_1 \in [0,1]$ $x_i \in [-5,5]$ $i=2, \dots, n$	$f_1(\mathbf{x}) = x_1, f_2(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \left[1 - \sqrt{x_1/g(\mathbf{x})} \right]$ $g(\mathbf{x}) = 1 + 10(n-1) + \sum_{i=2}^n [x_i^2 - 10\cos(4\pi x_i)]$
DTLZ1	$k+ \mathbf{x}_k -1$	$[0,1]$	$f_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} x_1 x_2 \dots x_{k-1} (1 + g(\mathbf{x}_k))$ $f_2(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} x_1 x_2 \dots (1 - x_{k-1}) (1 + g(\mathbf{x}_k))$ \vdots $f_{k-1}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} x_1 (1 - x_2) (1 + g(\mathbf{x}_k))$ $f_k(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (1 - x_1) (1 + g(\mathbf{x}_k))$ where $g(\mathbf{x}_k) = 100 \left[\mathbf{x}_k + \sum_{x_i \in \mathbf{x}_k} ((x_i - 0.5)^2 - \cos(20\pi(x_i - 0.5))) \right]$
DTLZ2	$k+ \mathbf{x}_k -1$	$[0,1]$	$f_1(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \cos(x_1\pi/2) \cos(x_2\pi/2) \dots \cos(x_{k-2}\pi/2) \cos(x_{k-1}\pi/2)$ $f_1(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \cos(x_1\pi/2) \cos(x_2\pi/2) \dots \cos(x_{k-2}\pi/2) \sin(x_{k-1}\pi/2)$ \vdots $f_{M-1}(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \cos(x_1\pi/2) \sin(x_2\pi/2)$ $f_M(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \sin(x_1\pi/2)$ where $g(\mathbf{x}_k) = \sum_{x_i \in \mathbf{x}_k} (x_i - 0.5)^2$
DTLZ3	$k+ \mathbf{x}_k -1$	$[0,1]$	$f_1(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \cos(x_1\pi/2) \cos(x_2\pi/2) \dots \cos(x_{k-2}\pi/2) \cos(x_{k-1}\pi/2)$ $f_1(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \cos(x_1\pi/2) \cos(x_2\pi/2) \dots \cos(x_{k-2}\pi/2) \sin(x_{k-1}\pi/2)$ \vdots $f_{k-1}(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \cos(x_1\pi/2) \sin(x_2\pi/2)$ $f_k(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \sin(x_1\pi/2)$ where $g(\mathbf{x}_k) = 100 \left[\mathbf{x}_k + \sum_{x_i \in \mathbf{x}_k} ((x_i - 0.5)^2 - \cos(20\pi(x_i - 0.5))) \right]$

Table 1 (Continued)

续表 1

Problems	Dimension n	Variable domain	Objective functions (minimized)
DTLZ4	$k+ \mathbf{x}_k -1$	$[0,1]$	$f_1(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \cos(x_1^\alpha \pi / 2) \cos(x_2^\alpha \pi / 2) \dots \cos(x_{k-2}^\alpha \pi / 2) \cos(x_{k-1}^\alpha \pi / 2)$ $f_i(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \cos(x_1^\alpha \pi / 2) \cos(x_2^\alpha \pi / 2) \dots \cos(x_{k-2}^\alpha \pi / 2) \sin(x_{k-1}^\alpha \pi / 2)$ \vdots $f_{k-1}(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \cos(x_1^\alpha \pi / 2) \sin(x_2^\alpha \pi / 2)$ $f_k(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) \sin(x_1^\alpha \pi / 2)$ where $g(\mathbf{x}_k) = \sum_{x_i \in \mathbf{x}_k} (x_i - 0.5)^2, \alpha = 100$
DTLZ6	$k+ \mathbf{x}_k -1$	$[0,1]$	$f_1(\mathbf{x}) = x_1$ $f_2(\mathbf{x}) = x_2$ \vdots $f_{k-1}(\mathbf{x}) = x_{k-1}$ $f_k(\mathbf{x}) = (1 + g(\mathbf{x}_k)) h(f_1, f_2, \dots, f_{k-1}, g)$ where $g(\mathbf{x}_k) = 1 + \frac{9}{ \mathbf{x}_k } \sum_{x_i \in \mathbf{x}_k} x_i,$ $h(f_1, f_2, \dots, f_{k-1}, g) = k - \sum_{i=1}^k \left[\frac{f_i}{1+g} (1 + \sin(3\pi f_i)) \right]$

为了同时评估解的收敛性和解分布的均匀性,我们采用 Deb 等人提出的 Convergence Metric^[68]和 Schott 提出的 Spacing 指标^[69].这两项指标的定义如下:

收敛性指标(convergence metric):令 $\mathbf{P}^* = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \dots, \mathbf{p}_{|\mathbf{P}^*|})$ 为理想 Pareto 前沿面上的均匀分布的 Pareto 最优解集合, $\mathbf{A} = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \dots, \mathbf{a}_{|\mathbf{A}|})$ 是通过 EMO 算法得到的近似 Pareto 最优解集.对于集合 \mathbf{A} 中的每个解 \mathbf{a}_i ,我们可以通过下式得到该解距离 \mathbf{P}^* 的最小归一化欧式距离:

$$d_i = \min_{j=1}^{|\mathbf{P}^*|} \sqrt{\sum_{m=1}^k \left(\frac{f_m(\mathbf{a}_i) - f_m(\mathbf{p}_j)}{f_m^{\max} - f_m^{\min}} \right)^2} \quad (6)$$

其中, f_m^{\max} 和 f_m^{\min} 是参考集合 \mathbf{P}^* 中第 m 个目标函数的最大值和最小值.收敛性度量值被定义为集合 \mathbf{A} 中所有点的归一化距离的平均值,如下式所示:

$$C(\mathbf{A}) \triangleq \frac{\sum_{i=1}^{|\mathbf{A}|} d_i}{|\mathbf{A}|} \quad (7)$$

收敛性指标代表算法得到的近似 Pareto 最优解集和理想 Pareto 前沿面的距离.因此,该指标值越低,表明算法得到的解的收敛性越好,越接近理想 Pareto 前沿面.

间距指标(spacing metric):令 \mathbf{A} 是算法得到的近似 Pareto 最优解集合.间距指标 S 定义为

$$S \triangleq \sqrt{\frac{1}{|\mathbf{A}|-1} \sum_{i=1}^{|\mathbf{A}|} (\bar{d} - d_i)^2} \quad (8)$$

其中

$$d_i = \min_j \left\{ \sum_{m=1}^k |f_m(\mathbf{a}_i) - f_m(\mathbf{a}_j)| \right\}, \quad \mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j \in \mathbf{A}, \quad i, j = 1, 2, \dots, |\mathbf{A}| \quad (9)$$

\bar{d} 是所有 d_i 的平均值, k 是目标函数的个数.如果该指标值为 0,表明我们得到的非支配解在目标空间是等间距分布的.

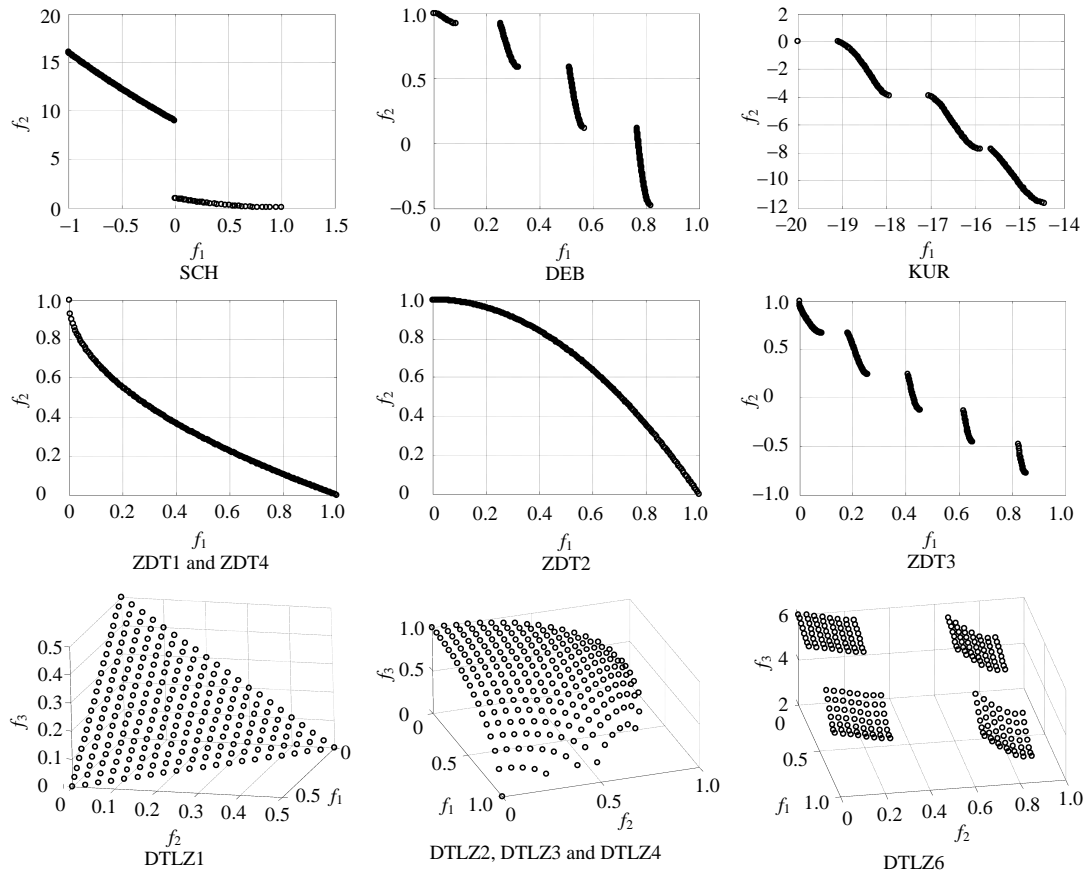


Fig.1 200 uniform points on the Pareto-optimal fronts of the test problems

图1 测试函数 Pareto 前沿面上均匀分布的 200 个采样点

4.2 NSGA-II, SPEA2, PESA-II 和 NNIA 性能比较

在本文比较的 4 种算法中,我们都采用了模拟二元交叉(simulated binary crossover)和多项式变异(polyomial mutation)^[70].在许多经典文献中我们可以看到,一些研究进化多目标优化的知名学者也采用模拟二元交叉和多项式变异^[1,2,58,68,71].各种算法的参数尽量参考算法原著中的取值.具体参数取值情况见表 2.对于 SPEA2,内部进化种群的大小设为 100,外部集合的大小也设为 100;对于 NSGA-II,种群大小为 100;对于 PESA-II,内部进化种群的大小和外部集合的大小均设为 100,在空间超格划分中,每维目标被划分的数目为 10;对于 NNIA,优势种群规模的最大值为 100,活性种群的大小为 20,克隆种群的大小为 100.正如 Coello Coello^[31]所分析的,对于一种进化多目标优化算法,很难明确地给出最优停止准则,国内外的学者大多设定迭代次数或函数评价次数作为算法终止条件.本文也是采用这种方式,对于 4 种算法和 12 个测试函数,当函数评价次数达到 50 000 时,算法停止运行.

我们利用盒图(boxplot)^[72]来表示每种算法对于各测试问题的统计结果.盒图一直是经济学领域统计分析的重要工具,它可以很好地反映数据的统计分布情况.本文用该工具来表现文中 4 种算法独立运行 30 次得到的解的统计特性.其中,盒子的上下两条线分别表示样本的上下四分位数,盒子中间的水平线为样本的中位数.盒子上下虚线表示样本的其余部分(野值除外),样本最大值为虚线顶端,样本最小值为虚线底端,“+”表示野值,盒子的切口为样本的置信区间.

Table 2 Parameter settings
表 2 参数值设置

Parameter	PESA-II	SPEA2	NSGA-II	NNIA
Crossover probability p_c	0.8	0.8	0.8	1
Distribution index for crossover	15	15	15	15
Mutation probability p_m	1/n	1/n	1/n	1/n
Distribution index for mutation	20	20	20	20

图 2 是 4 种算法求解 12 个测试问题时,30 次独立运行得出的收敛性指标的统计盒图。

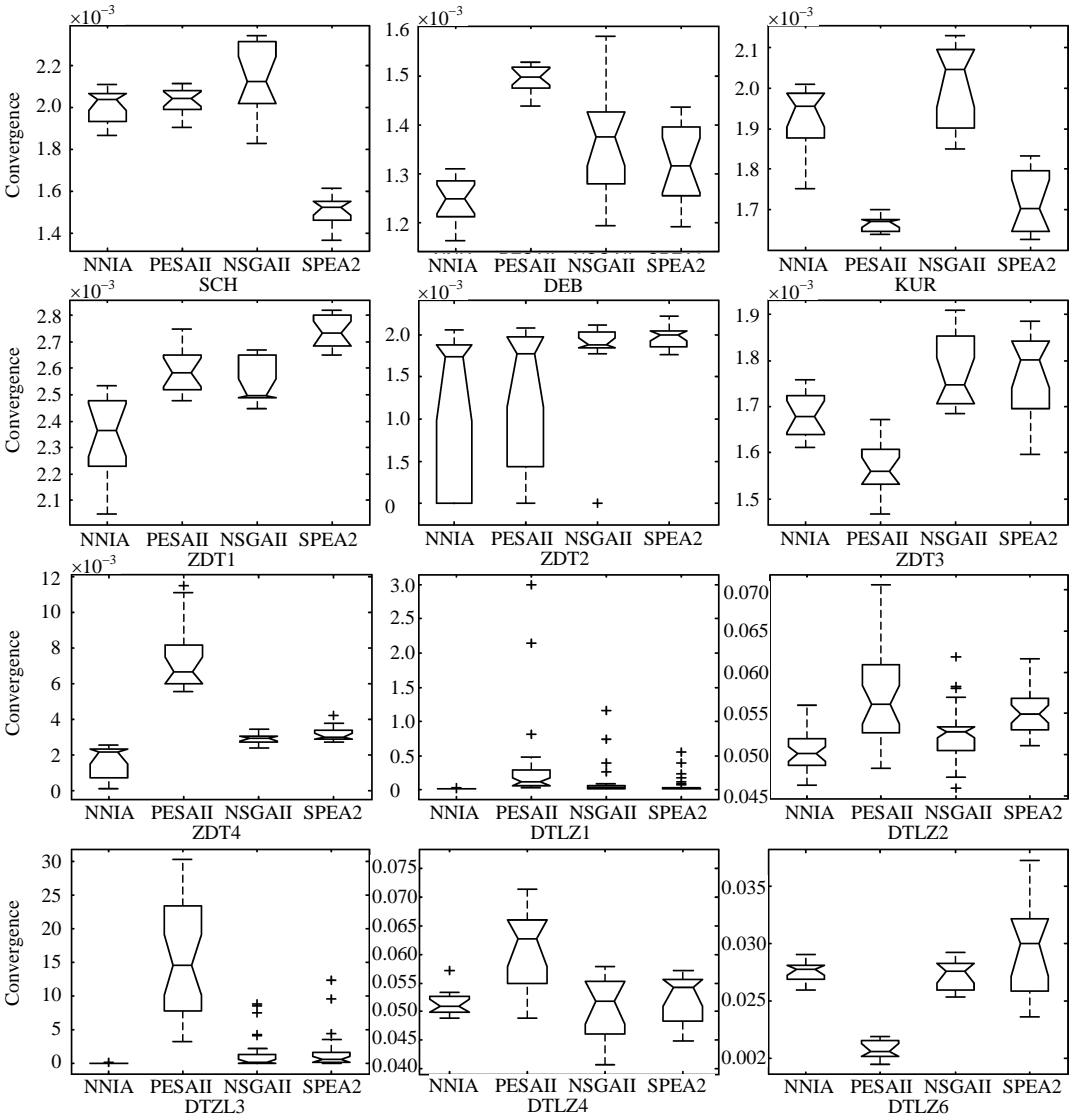


Fig.2 Box plots of the convergence metric based on 30 independent runs obtained by NNIA, PESA-II, NSGA-II and SPEA2 in solving the twelve test problems

图 2 NNIA,PESA-II,NSGA-II,SPEA2 求解 12 个测试问题时, 30 次独立运行得出的收敛性指标的统计盒图

从图 2 可以看出,对于 SCH,DEB,KUR 和 4 个 ZDT 问题在 4 种算法运行 30 次的结果中,几乎每次得到的收

敛性指标值都小于 10^{-2} . 其中, 对 DEB, ZDT1, ZDT2 和 ZDT4 这 4 个问题, NNIA 表现得最好; 对 KUR 和 ZDT3 两个问题, PESA-II 表现得最好; 对 SCH 问题, SPEA2 表现得最好. 对 5 个比较复杂的 DTLZ 问题, NNIA 在求解 DTLZ1, DTLZ2 和 DTLZ3 时的表现明显优于其他 3 种方法; PESA-II 在求解 DTLZ6 时收敛性最好; 对 DTLZ4 问题除了 PESA-II 较差以外, 其他 3 种算法效果很接近. 值得一提的是, DTLZ1 和 DTLZ3 分别有 $(11^{k_k}-1)$ 和 $(3^{k_k}-1)$ 个局部最优面, 一些学者^[58,63]已经指出, 对于 DTLZ3 问题, 在 500 代 (50 000 次函数评价) 内, NSGA-II 和 SPEA2 均不能收敛到理想 Pareto 前沿面. 在此, 我们可以看出, PESA-II 也不能收敛到理想 Pareto 前沿面.

图 3 是 4 种算法求解 12 个测试问题时, 30 次独立运行得出的间距指标的统计盒图.

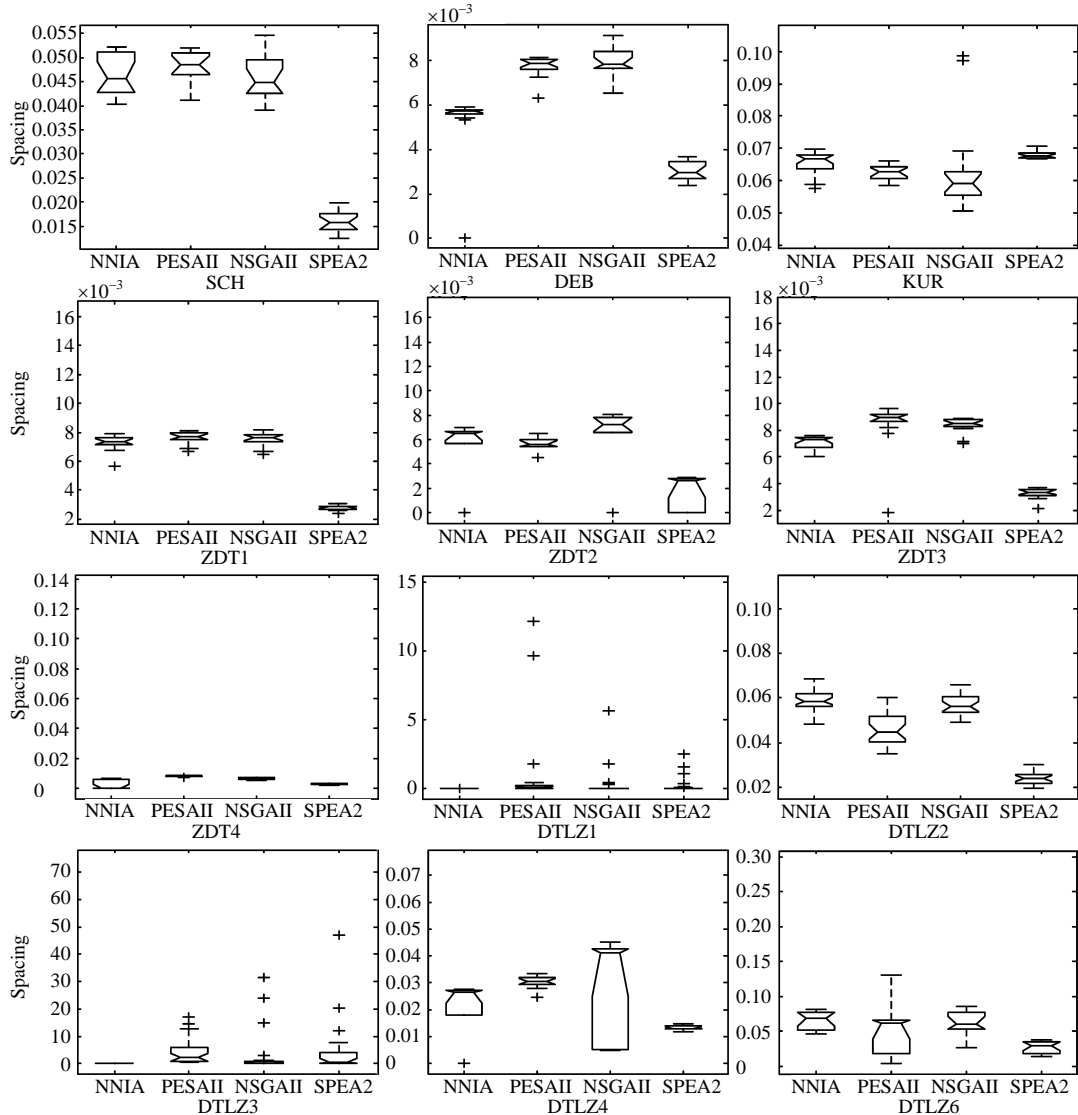


Fig.3 Box plots of the spacing metric based on 30 independent runs obtained by NNIA, PESA-II, NSGA-II and SPEA2 in solving the twelve test problems

图 3 NNIA, PESA-II, NSGA-II, SPEA2 求解 12 个测试问题时, 30 次独立运行得出的间距指标的统计盒图

从图 3 可以看出, SPEA2 对 12 个测试问题中的 8 个问题的间距指标结果优于其他 3 种算法. 但是, SPEA2

的环境选择的计算复杂度最大,为 $O(N^3)$,其中 N 是非支配解的数目.PESA-II 和 MISA 用空间超格的机制来删减非支配解,格子的大小是一个关键因素.NNIA 利用拥挤距离来删减非支配解,最坏情况下的时间复杂度仅为 $O(N\log(N))$.从图 3 可以看出,除了 SPEA2 以外,对于 DEB,ZDT1,ZDT3,ZDT4,DTLZ1,DTLZ3 和 DTLZ4(12 个问题中的 7 个),NNIA 得到的间距指标明显好于 NSGA-II 和 PESA-II.也就是说,NNIA 对于这些问题,能够在时间复杂度相对较小的情况下得到分布较均匀的解.而 PESA-II 对于 ZDT2,DTLZ2 和 DTLZ6 的效果较好;NSGA-II 对于 SCH 和 KUR 的效果较好.当然,这都是在暂不考虑 SPEA2 的情况下得出的结论.如果不考虑时间复杂度,则总体来说,SPEA2 在多样性保持方面是最好的.

根据以上实验分析,我们可以得到以下结论:

- (1) 对于 SCH,DEB 和 KUR 这 3 个问题,4 种算法均能收敛到理想 Pareto 前沿面.
- (2) 对于 DTLZ2,DTLZ4,DTLZ6 及 4 个 ZDT 问题,NNIA 对于其中 5 个问题的收敛性最好;SPEA2 对于这 7 个问题的均匀性效果最好.如果不考虑 SPEA2,则 NNIA 对于这 7 个问题中的 5 个的均匀性效果最好.
- (3) 对于 DTLZ1 和 DTLZ3,在 50 000 次函数评价次数下,NSGA-II,SPEA2 和 PESA-II 均不能收敛到理想 Pareto 前沿面,而 NNIA 能够较好地逼近理想 Pareto 前沿面.

5 总结与展望

本文首先简要介绍了进化多目标优化研究的概况,并指出了写该综述的必要性,然后给出了多目标优化问题、Pareto 最优解、Pareto 支配关系的数学描述,接着,分析了第一代和第二代进化多目标优化的经典算法.在第 3 节,我们详细地讨论了当前进化多目标优化算法研究的 4 个热点,重点分析了几个最新的进化多目标优化算法,这些算法大多是在进化计算领域的国际顶级期刊上发表的研究成果,代表着当今进化多目标优化的发展潮流和趋势.国内外文献中对这部分内容的总结还很少见到.最后,我们给出了代表性算法的实验性能比较.

每个时代的算法都是受当时所处的研究水平限制的:第一代进化多目标优化算法面临的问题是如何将进化算法与多目标优化问题有机地结合,第二代则开始考虑算法的效率问题,而当前一段时间研究者在进一步提高算法效率的同时,面临着如何处理高维多目标优化的难题.进化多目标优化发展到现在,逐渐呈现出多样性的特点:一方面,越来越多的进化范例被引进多目标优化领域,一些新颖的受自然系统启发的多目标优化算法相继被提出来,这也将是未来一段时间内的主要研究内容之一;另一方面,很多学者开始注意到 Pareto 占优的局限性,如何引入新的占优机制从而有效解决高维多目标优化问题成为进化多目标优化研究者们接下来的主要任务之一.除此之外,进化多目标优化算法也共同存在一些亟待解决的难题,主要体现在以下两个方面:

首先,一些文献^[3,58,73-75]已经指出,如果进化多目标优化算法采用小规模种群,则对于一些复杂的多目标优化问题,将很难收敛到理想 Pareto 前沿面,而且很难获得均匀分布的 Pareto 最优解.因此,如何根据问题的复杂度自适应地调整种群的规模是需要进一步研究的问题.根据非支配解在当前种群中所占的比率来自适应地调整种群规模或许是解决该问题的一个可行方向.

此外,如何设计有效的算法停止准则也是进化多目标优化的一个基础理论难题之一^[31,76,77].迄今为止,还很难明确地判断算法进化到某一代已经达到了最优或者说可以停止.在单目标优化过程中,当种群中个体的适应度值在一定代数内没有提高时,可以认定算法可以停止,这种停止策略是不能简单地应用于多目标优化的,因为多目标优化要得到的不是一个解,而是 Pareto 最优解的集合,即使是已经收敛到 Pareto 前沿面上的最优解集,接下来每一代得到的解也有许多不同.因此,学者们一般是预先设定进化代数或者函数评价次数的上限作为算法停止的条件.但是,如何有效地证明或者给出明确的算法停止准则仍有待研究.

References:

- [1] Deb K, Pratap A, Agarwal S, Meyarivan T. A fast and elitist multi-objective genetic algorithm: NSGA-II. IEEE Trans. on Evolutionary Computation, 2002,6(2):182-197.
- [2] Zitzler E, Thiele L. Multi-Objective evolutionary algorithms: A comparative case study and the strength Pareto approach. IEEE Trans. on Evolutionary Computation, 1999,3(4):257-271.

- [3] Deb K. Multi-Objective Optimization Using Evolutionary Algorithms. Chichester: John Wiley & Sons, 2001.
- [4] Coello Coello CA, van Veldhuizen DA, Lamont GB. Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems. New York: Kluwer Academic Publishers, 2002.
- [5] Coello Coello CA, van Veldhuizen DA, Lamont GB. Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems. 2nd ed., New York: Springer-Verlag, 2007.
- [6] Knowles J, Corne D, Deb K. Multiobjective Problem Solving from Nature. New York: Springer-Verlag, 2008.
- [7] Tan KC, Khor EF, Lee TH. Multiobjective Evolutionary Algorithms and Applications. London: Springer-Verlag, 2005.
- [8] Jin YC. Multi-Objective Machine Learning. Berlin: Springer-Verlag, 2006.
- [9] Schaffer JD. Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms. In: Grefenstette JJ, ed. Proc. of the Int'l Conf. on Genetic Algorithms and Their Applications. Hillsdale: L. Erlbaum Associates, Inc., 1985. 93–100.
- [10] Fonseca CM, Fleming PJ. Genetic algorithm for multiobjective optimization: Formulation, discussion and generation. In: Forrest S, ed. Proc. of the 5th Int'l Conf. on Genetic Algorithms. San Mateo: Morgan Kauffman Publishers, 1993. 416–423.
- [11] Srinivas N, Deb K. Multiobjective optimization using non-dominated sorting in genetic algorithms. *Evolutionary Computation*, 1994,2(3):221–248.
- [12] Horn J, Nafpliotis N, Goldberg DE. A niched Pareto genetic algorithm for multiobjective optimization. In: Fogarty TC, ed. Proc. of the 1st IEEE Congress on Evolutionary Computation. Piscataway: IEEE, 1994. 82–87.
- [13] Zitzler E, Laumanns M, Thiele L. SPEA2: Improving the strength Pareto evolutionary algorithm. In: Giannakoglou K, Tsahalis DT, Périaux J, Papailiou KD, Fogarty T, eds. *Evolutionary Methods for Design, Optimization and Control with Applications to Industrial Problems*. Berlin: Springer-Verlag, 2002. 95–100.
- [14] Knowles JD, Corne DW. Approximating the non-dominated front using the Pareto archived evolution strategy. *Evolutionary Computation*, 2000,8(2):149–172.
- [15] Corne DW, Knowles JD, Oates MJ. The Pareto-envelope based selection algorithm for multi-objective optimization. In: Schoenauer M, Deb K, Rudolph G, Yao X, Lutton E, Merelo JJ, Schwefel HP, eds. *Parallel Problem Solving from Nature, PPSN VI*. LNCS, Berlin: Springer-Verlag, 2000. 869–878.
- [16] Corne DW, Jerram NR, Knowles JD, Oates MJ. PESA-II: Region-Based selection in evolutionary multi-objective optimization. In: Spector L, Goodman ED, Wu A, Langdon WB, Voigt HM, Gen M, eds. *Proc. of the Genetic and Evolutionary Computation Conf., GECCO 2001*. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers, 2001. 283–290.
- [17] Erickson M, Mayer A, Horn J. The niched Pareto genetic algorithm 2 applied to the design of groundwater remediation system. In: Zitzler E, Deb K, Thiele L, Coello Coello CA, Corne D, eds. *Proc. of the 1st Int'l Conf. on Evolutionary Multi-Criterion Optimization, EMO 2001*. Berlin: Springer-Verlag, 2001. 681–695.
- [18] Coello Coello CA, Pulido GT. A micro-genetic algorithm for multiobjective optimization. In: Spector L, Goodman ED, Wu A, Langdon WB, Voigt HM, Gen M, eds. *Proc. of the Genetic and Evolutionary Computation Conf., GECCO 2001*. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers, 2001. 274–282.
- [19] Laumanns M, Thiele L, Deb K, Zitzler E. Combining convergence and diversity in evolutionary multi-objective optimization. *Evolutionary Computation*, 2002,10(3):263–282.
- [20] Brockhoff D, Zitzler E. Are all objective necessary on dimensionality reduction in evolutionary multi-objective optimization. In: Runarsson TP, Beyer HG, Burke E, Merelo-Guervós JJ, Whitley LD, Yao X, eds. *Parallel Problem Solving from Nature, PPSN IX*. LNCS, Berlin: Springer-Verlag, 2006. 533–542.
- [21] Hernández-Díaz AG, Santana-Quintero LV, Coello Coello CA, Molina J. Pareto-Adaptive ϵ -dominance. *Evolutionary Computation*, 2007,15(4): 493–517.
- [22] Deb K, Saxena DK. On finding Pareto-optimal solutions through dimensionality reduction for certain large-dimensional multi-objective optimization problems. Technical Report, 2005011, Kalyanmoy Deb and Dhish Kumar Saxena, Indian Institute of Technology Kanpur, 2005.
- [23] Saxena DK, Deb K. Non-Linear dimensionality reduction procedure for certain large-dimensional multi-objective optimization problems: Employing correntropy and a novel maximum variance unfolding. In: Coello Coello CA, Aguirre AH, Zitzler E, eds. *Proc. of the 4th Int'l Conf. on Evolutionary Multi-Criterion Optimization, EMO 2007*. Berlin: Springer-Verlag, 2007. 772–787.

- [24] Coello Coello CA, Pulido GT, Lechuga MS. Handling multiple objectives with particle swarm optimization. *IEEE Trans. on Evolutionary Computations*, 2004,8(3):256–279.
- [25] Gong MG, Jiao LC, Du HF, Bo LF. Multiobjective immune algorithm with nondominated neighbor-based selection. *Evolutionary Computation*, 2008,16(2):225–255.
- [26] Zhou AM, Zhang QF, Jin Y, Sendhoff B, Tsang E. Global multi-objective optimization via estimation of distribution algorithm with biased initialization and crossover. In: Thierens D, Beyer HG, Bongard J, Branke J, Clark JA, Cliff D, Congdon CB, Deb K, eds. *Proc. of the Genetic and Evolutionary Computation Conf., GECCO 2007*. New York: ACM Press, 2007. 617–622.
- [27] Zhang QF, Zhou AM, Jin Y. RM-MEDA: A regularity model based multiobjective estimation of distribution algorithm. *IEEE Trans. on Evolutionary Computation*, 2007,12(1):41–63.
- [28] Zhang QF, Li H. MOEA/D: A multiobjective evolutionary algorithm based on decomposition. *IEEE Trans. on Evolutionary Computation*, 2007,11(6):712–731.
- [29] Coello Coello CA. An updated survey of evolutionary multiobjective optimization techniques: State of the art and future trends. In: Banzhaf W, Daida J, Eiben AE, Garzon MH, Honavar V, Jakiela M, Smith RE, eds. *Proc. of the IEEE Congress on Evolutionary Computation, CEC 1999*. Piscataway: IEEE Service Center, 1999. 3–13.
- [30] Coello Coello CA. Evolutionary multiobjective optimization: current and future challenges. In: Benitez JM, Cordon O, Hoffmann F, Roy R, eds. *Advances in Soft Computing- Engineering, Design and Manufacturing*. Berlin: Springer-Verlag, 2003. 243–256.
- [31] Coello Coello CA. Recent trends in evolutionary multi-objective optimization. In: Abraham A, Jain LC, Goldberg R, eds. *Evolutionary Multi-Objective Optimization: Theoretical Advances and Applications*. Berlin: Springer-Verlag, 2005. 7–32.
- [32] Coello Coello CA. 20 years of evolutionary multi-objective optimization: What has been done and what remains to be done. In: Yen GY, Fogel DB, eds. *Computational Intelligence: Principles and Practice*. New York: IEEE Computational Intelligence Society, 2006. 73–88.
- [33] Coello Coello CA. Evolutionary multi-objective optimization: A historical view of the field. *IEEE Computational Intelligence Magazine*, 2006,1(1):28–36.
- [34] Xie T, Chen HW, Kang LS. Evolutionary algorithms of multi-objective optimization problems. *Chinese Journal of Computers*, 2003,26(8):997–1003 (in Chinese with English abstract).
- [35] Zheng XW, Liu H. Progress of research on multi-objective evolutionary algorithms. *Computer Science*, 2007,34(7):187–192 (in Chinese with English abstract).
- [36] Zheng JH. *Multi-Objective Evolutionary Algorithms and Their Applications*. Beijing: Science Press, 2007 (in Chinese).
- [37] Rosenberg RS. *Simulation of genetic populations with biochemical properties* [Ph.D. Thesis]. Michigan: University of Michigan, 1967.
- [38] Holland JH. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. Michigan: The University of Michigan Press, 1975.
- [39] Goldberg DE. *Genetic algorithm for search, optimization, and machine learning*. Boston: Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1989.
- [40] Goldberg DE, Richardson J. Genetic algorithms with sharing for multimodal function optimization. In: Grefenstette JJ, ed. *Proc. of the 2nd Int'l Conf. on Genetic Algorithm*. Hillsdale: L. Erlbaum Associates, Inc., 1987. 41–49.
- [41] Veldhuizen DV, Lamont G. Multiobjective optimization with messy genetic algorithms. In: Carroll J, Damiani E, Haddad H, Oppenheim D, eds. *Proc. of the 2000 ACM Symp. on Applied to Computing*. New York: ACM Press, 2000. 470–476.
- [42] Li X. A non-dominated sorting particle swarm optimizer for multiobjective optimization. In: Cantú-Paz E, Foster JA, Deb K, Lawrence D, Roy R, eds. *Proc. of the Genetic and Evolutionary Computation Conf., GECCO 2003*. Berlin: Springer-Verlag, 2003. 37–48.
- [43] Fieldsend JE, Sing S. A multi-objective algorithm based upon particle swarm optimization, an efficient data structure and turbulence. In: Bullinaria JA, ed. *Proc. of the 2002 UK Workshop on Computational Intelligence*. Birmingham: University of Birmingham, 2002. 37–44.
- [44] Reyes Sierra M, Coello Coello CA. Improving PSO-based multi-objective optimization using crowding, mutation and e-dominance. In: Coello Coello CA, Aguirre AH, Zitzler E, eds. *Proc. of the 3rd Int'l Conf. Evolutionary Multi-Criterion Optimization, EMO 2005*. Berlin: Springer-Verlag, 2005. 505–519.

- [45] Abido MA. Two level of nondominated solutions approach to multiobjective particle swarm optimization. In: Thierens D, Beyer HG, Bongard J, Branke J, Clark JA, Cliff D, Congdon CB, Deb K, eds. Proc. of the Genetic and Evolutionary Computation Conf., GECCO 2007. New York: ACM Press, 2007. 726–733.
- [46] Korudu P, Das S, Welch SM. Multi-Objective hybrid PSO using μ -fuzzy dominance. In: Lipson H, ed. Proc. of the Genetic and Evolutionary Computation Conf., GECCO 2007. New York: ACM Press, 2007. 853–860.
- [47] Jiao LC, Du HF, Liu F, Gong MG. Immunological Computation for Optimization, Learning and Recognition. Beijing: Science Press, 2006 (in Chinese).
- [48] Coello Coello CA, Cortes NC. Solving multiobjective optimization problems using an artificial immune system. Genetic Programming and Evolvable Machines, 2005,6(2):163–190.
- [49] Cutello V, Narzisi G, Nicosia G. A class of Pareto archived evolution strategy algorithms using immune inspired operators for ab-initio protein structure prediction. In: Rothlauf F, Branke J, Cagnoni S, Corne DW, Drechsler R, Jin YC, eds. Proc. of the 3rd European Workshop on Evolutionary Computation and Bioinformatics, EvoWorkshops 2005. Berlin: Springer-Verlag, 2005. 54–63.
- [50] Freschi F, Repetto M. VIS: An artificial immune network for multi-objective optimization. Engineering Optimization, 2006,38(8): 975–996.
- [51] Jiao LC, Gong MG, Shang RH, Du HF, Lu B. Clonal selection with Immune dominance and energy based multi-objective optimization. In: Coello Coello CA, Aguirre AH, Zitzler E, eds. Proc. of the 3rd Int'l Conf. on Evolutionary Multi-Criterion Optimization, EMO 2005. Berlin: Springer-Verlag, 2005. 474–489.
- [52] Khan N, Goldberg DE, Pelikan M. Multi-Objective Bayesian optimization algorithm. Technical Report, No.2002009, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2002.
- [53] Laumanns M, Ocenasek J. Bayesian optimization algorithms for multi-objective Optimization. In: Merelo JJ, Adamidis P, Beyer HG, eds. Proc. of the 7th Int'l Conf. on Parallel Problem Solving from Nature. London: Springer-Verlag, 2002. 298–307.
- [54] Li H, Zhang QF. Multiobjective optimization problems with complicated Pareto sets, MOEA/D and NSGA-II. IEEE Trans. on Evolutionary Computation, 2008. doi: 10.1109/TEVC.2008.925798
- [55] Lotov AV, Bushenkov VA, Lamenev GK. Interactive decision maps: Approximation and visualization of Pareto frontier. New York: Kluwer Academic Publishers, 2004.
- [56] Tenenbaum JB, Silva V, Langford JC. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction. Science, 2000, 290(22):2319–2323.
- [57] Fry B. Visualizing Data: Exploring and Explaining Data with the Processing Environment. Sebastopol: O'Reilly Press, 2007.
- [58] Khare V, Yao X, Deb K. Performance scaling of multi-objective evolutionary algorithms. In: Fonseca CM, Fleming PJ, Zitzler E, Deb K, Thiele L, eds. Proc. of the 2nd Int'l Conf. on Evolutionary Multi-Criterion Optimization, EMO 2003. Berlin: Springer-Verlag, 2003. 376–390.
- [59] Hughes EJ. Multiple single objective Pareto sampling. In: Sarker R, Reynolds R, Abbass H, Tan KC, McKay B, Essam D, Gedeon T, eds. Proc. of the IEEE Congress on Evolutionary Computation, CEC 2003. Piscataway: IEEE Service Center, 2003. 2678–2684.
- [60] Wagner T, Beume N, Naujoks B. Pareto-, aggregation-, and indicator-based methods in many-objective optimization. In: Obayashi S, Deb K, Poloni C, Hiroyasu T, Murata T, eds. Proc. of the 4th Int'l Conf. on Evolutionary Multi-Criterion Optimization, EMO 2007. Berlin: Springer-Verlag, 2007. 742–756.
- [61] Huband S, Hingston P, Barone L, While L. A review of multiobjective test problems and a scalable test problem toolkit. IEEE Trans. on Evolutionary Computation, 2006,10(5):477–506.
- [62] Zitzler E, Deb K, Thiele L. Comparison of multi-objective evolutionary algorithms: Empirical results. Evolutionary Computation, 2000,8(2):173–195.
- [63] Deb K, Thiele L, Laumanns M, Zitzler E. Scalable multi-objective optimization test problems. In: Fogel DB, ed. Proc. of the IEEE Congress on Evolutionary Computation, CEC 2002. Piscataway: IEEE Service Center, 2002.825–830.
- [64] Li H, Zhang QF. A multi-objective differential evolution based on decomposition for multiobjective optimization with variable linkages. In: Runarsson TP, Beyer HG, Burke E, Merelo-Guervós JJ, Whitley LD, Yao X, eds. Parallel Problem Solving from Nature, PPSN IX. LNCS, Berlin: Springer-Verlag, 2006. 583–592.

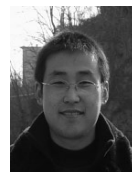
- [65] Zitzler E, Thiele L, Laumanns M, Fonseca CM, da Fonseca VG. Performance assessment of multiobjective optimizers: An analysis and review. *IEEE Trans. on Evolutionary Computation*, 2003,7(2):117–132.
- [66] Deb K. Multi-Objective genetic algorithms: Problem difficulties and construction of test problems. *Evolutionary Computation*, 1999,7(3):205–230.
- [67] Kursawe F. A variant of evolution strategies for vector optimization. In: Schwefel HP, Männer R. *Parallel Problem Solving from Nature-PPSN I*. Berlin: Springer-Verlag, 1991. 193–197.
- [68] Deb K, Jain S. Running performance metrics for evolutionary multi-objective optimization. Technical Report, No.2002004, Kanpur: Indian Institute of Technology Kanpur, 2002.
- [69] Schott, JR. Fault tolerant design using single and multicriteria genetic algorithm optimization [MS. Thesis]. Cambridge: Massachusetts Institute of Technology, 1995.
- [70] Deb K, Beyer HG. Self-Adaptive genetic algorithms with simulated binary crossover. *Evolutionary Computation*, 2001,9(2):197–221.
- [71] Igel C, Hansen N, Roth S. Covariance matrix adaptation for multi-objective optimization. *Evolutionary Computation*, 2007,15(1):1–28.
- [72] McGill R, Tukey JW, Larsen WA. Variations of boxplots. *The American Statistician*, 1978,32(1):12–16.
- [73] Tan KC, Lee TH, Khor EF. Evolutionary algorithms with dynamic population size and local exploration for multiobjective optimization. *IEEE Trans. on Evolutionary Computation*, 2001,5(6):565–588.
- [74] Lu HM, Yen G. Dynamic population size in multiobjective evolutionary algorithms. In: Fogel DB, ed. *Proc. of IEEE Congress on Evolutionary Computation, CEC 2002*. Piscataway: IEEE Service Center, 2002. 1648–1653.
- [75] Giel O, Lehre PK. On the effect of populations in evolutionary multi-objective optimization. In: Keijzer M, Cattolico M, Arnold D, Babovic V, Blum C, Bosman P, eds. *Proc. of the Genetic and Evolutionary Computation Conf., GECCO 2006*. New York: ACM Press, 2006. 651–658.
- [76] Suman B. Study of self-stopping PDMOSA and performance measure in multiobjective optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 2005,29(5):1131–1147.
- [77] Martí L, García J, Berlanga A, Molina JM. A cumulative evidential stopping criterion for multiobjective optimization evolutionary algorithms. In: Thierens D, Beyer HG, Bongard J, Branke J, Clark JA, Cliff D, eds. *Proc. of the Genetic and Evolutionary Computation Conf., GECCO 2007*. New York: ACM Press, 2007. 2835–2842.

附中文参考文献:

- [34] 谢涛,陈火旺,康立山.多目标优化的演化算法. *计算机学报*,2003,26(8):997–1003.
- [35] 郑向伟,刘弘.多目标进化算法研究进展. *计算机科学*,2007,34(7):187–192.
- [36] 郑金华.多目标进化算法及其应用.北京:科学出版社,2007.
- [47] 焦李成,杜海峰,刘芳,公茂果.免疫优化计算、学习与识别.北京:科学出版社,2006.



公茂果(1979—),男,山东蒙阴人,博士,副教授,主要研究领域为人工免疫系统,进化计算,数据挖掘,工程优化.



杨咚咚(1982—),男,博士生,主要研究领域为进化多目标优化,流形学习.



焦李成(1959—),男,博士,教授,博士生导师,CCF 高级会员,主要研究领域为自然计算,智能信息处理.



马文萍(1981—),女,博士,讲师,主要研究领域为人工免疫系统,进化计算,图像处理.