

# 基于相关分析的多目标优化 Pareto 优劣性预测

李文彬<sup>1,2</sup>, 贺建军<sup>1</sup>, 郭观七<sup>2</sup>, 冯彩英<sup>2</sup>, 潘理<sup>2</sup>

(1. 中南大学信息科学与工程学院, 湖南长沙 410083; 2. 湖南理工学院信息与通信工程学院, 湖南岳阳 414006)

**摘 要:** 昂贵多目标进化算法中, 目标向量评估所需计算时间或实验成本高昂, 大量昂贵评估必然导致成本灾难. 本文根据多目标优化 Pareto 优劣性取决于各目标分量的序关系这一关键性质, 提出一种序拟合方法进行 Pareto 优劣性预测. 在分析样本数据决策空间与目标空间序相关性的基础上, 通过线性相关的假设条件, 建立低成本的序关系预测方程, 并用预测的序关系确定 Pareto 优劣性. 然后对典型多目标优化问题进行 Pareto 优劣性预测对比实验, 结果表明所提方法显著提高了 Pareto 优劣性的预测精度. 最后, 将该预测方法集成到 NSGA-II 算法中, 可以避免进化过程中的模型重构, 有效减少昂贵目标向量的评估次数.

**关键词:** 相关分析; 序关系预测; 多目标优化; Pareto 优劣性

**中图分类号:** TP301      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0372-2112 (2017)02-0459-09

**电子学报 URL:** <http://www.ejournal.org.cn>      **DOI:** 10.3969/j.issn.0372-2112.2017.02.027

## Prediction of Pareto Dominance Based on Correlation Analysis

LI Wen-bin<sup>1,2</sup>, HE Jian-jun<sup>1</sup>, GUO Guan-qi<sup>2</sup>, FENG Cai-ying<sup>2</sup>, PAN Li<sup>2</sup>

(1. College of Information Science and Engineering, Central South University, Changsha, Hunan 410083, China;

2. College of Information and Communication Engineering, Hunan Institute of Science and Technology, Yueyang, Hunan 414006, China)

**Abstract:** In expensive multi-objective evolutionary algorithms, the evaluation of a large number of objective vectors spend a lot of time or experimental cost and lead to the cost of disaster. According to the fact that Pareto dominance relationships among candidate solutions are depended on the rank relationships of objective components, this paper proposes a predict method of rank equivalent to determine Pareto dominance. A decision vector and object vector rank matrix is established, and rank correlation analysis is used to calculate the correlation coefficient matrix R. Under the assumption of linear correlation, a prediction equation is established to predict rank relationships. Testing results on typical multi-objective optimization problems show that the proposed method only requires establishing a linear prediction model, which can remarkably improve the prediction accuracy and reduce the calculation of original expensive target function. Finally, the prediction method is integrated into the NSGA-II, it can avoid reconstruction the model in the process of evolution, then effectively decrease the number of evaluation for expensive objective vectors.

**Key words:** correlation analysis; rank relation prediction; multi-objective optimization; Pareto dominance

## 1 引言

多目标优化问题 (Multi-objective Optimization Problem, MOP) 普遍存在于工程优化与设计、运筹学、生物学等诸多领域<sup>[1]</sup>, 有效解决 MOP 具有重要的理论意义与应用价值. 进化算法是解决 MOP 的主要方法之一<sup>[2]</sup>,

采用进化算法求解 MOP 需要大量的评估目标向量<sup>[3]</sup>. 对于昂贵 MOP, 目标分量评估是一个复杂耗时的计算过程, 例如空气动力学设计优化、蛋白质设计等<sup>[4-6]</sup>. 大量的评估目标向量将导致计算成本灾难问题. 因此, 如何有效解决昂贵 MOP 已经引起了国内外学者的广泛关注.

收稿日期: 2015-05-11; 修回日期: 2016-07-25; 责任编辑: 马兰英

基金项目: 国家自然科学基金 (No. 60975049, No. 61174132); 湖南省省教育厅科学研究重点项目 (No. 15A079); 湖南省高校科技创新团队支持计划资助

代理模型辅助进化算法<sup>[7-13]</sup>是解决此类问题的主要方法之一. 张青富等<sup>[7]</sup>将昂贵多目标优化问题分解为多个单目标优化子问题,用高斯过程模型预测各单目标子问题的解,对减少某些多目标优化问题的目标评估次数取得了较好效果. Liu 等<sup>[8]</sup>提出一种基于高斯过程模型和径向基函数模型辅助进化的多精度代理模型方法,利用数据挖掘方法找到优秀且分布性好的个体进行高精度模型评估,减少昂贵目标函数的评估次数. Jin 等<sup>[11]</sup>提出在进化优化的过程中,使用 K 近邻方法将样本集进行分类,然后仅对聚类中心的个体使用昂贵适应值函数进行评价,对非聚类中心个体采用神经网络模型进行评价,减少昂贵目标函数的计算次数. Montemayor 等<sup>[13]</sup>对几种常用方法应用于多目标优化问题的准确性、鲁棒性、有效性和扩展性进行了实验研究,比较了各模型的优缺点. 虽然代理模型方法可减少昂贵目标函数的计算成本,但现实问题形态复杂程度各异,不可能对所有优化问题均采用同种代理模型来对其原始目标函数进行拟合. 因此,需要在不同优化问题上选择各自合适的模型,这要求更多的先验知识. 代理模型在辅助进化算法的迭代过程中,寻优的空间是在变化的,因此需要不断的重构模型,这增加了建模成本;同时,随着实际问题复杂程度的增强,建立高精度模型的难度也越来越大,尤其是昂贵多目标优化问题可能需要多个代理模型,这进一步增加了建模成本.

为避免在昂贵 MOP 中建立多种代理模型,降低建模的难度及成本. 本文根据候选解 Pareto 优劣性取决于各目标分量的序关系这一性质,提出一种低成本的序拟合模型,进行目标分量的序关系预测. 在线性相关的假设条件下,建立序拟合方程,通过序拟合方程预测样本之间的序关系,并用预测的序关系确定 Pareto 优劣性. 最后,将该方法与经典的多目标进化算法进行融合,其目的在于减少昂贵目标分量的评估次数,降低计算成本.

## 2 相关概念

### 2.1 Pareto 优劣性概念

一般地,具有  $n$  维决策变量,  $m$  个目标函数的最小化无约束多目标优化问题,可以表述为:

$$\begin{aligned} \min \mathbf{y} = F(\mathbf{x}) &= (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})), \\ \text{s. t } \mathbf{x} &= (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbf{X}, \\ \mathbf{y} &= (y_1, y_2, \dots, y_m) \in \mathbf{Y} \end{aligned} \quad (1)$$

其中,  $\mathbf{X}$  为  $n$  维决策空间,  $\mathbf{Y}$  为  $m$  维目标空间,  $F$  为将决策空间映射到目标空间的一组映射关系,相关定义如下<sup>[14]</sup>:

**定义 1 (Pareto 优劣性)** 对任意向量  $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_m) \in \mathbf{Y}, \mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_m) \in \mathbf{Y}$ , 当且仅当  $\forall i \in 1, 2, \dots, m: u_i \leq v_i \wedge \exists j \in 1, 2, \dots, m: u_j < v_j$  为真时,称  $\mathbf{u}$  支配

(优于)  $\mathbf{v}$ , 记作  $\mathbf{u} > \mathbf{v}$ ; 或称  $\mathbf{v}$  受支配于 (劣于)  $\mathbf{u}$ , 记作  $\mathbf{v} < \mathbf{u}$ ; 否则,称  $\mathbf{u}$  与  $\mathbf{v}$  不可比,记作  $\mathbf{u} \sim \mathbf{v}$ .

**定义 2 (Pareto 最优解)**  $\mathbf{x} \in \mathbf{X}$  称为 Pareto 最优解 (或 Pareto 非支配解、非劣解), 当且仅当  $\neg \exists \mathbf{x}' \in \mathbf{X}, \mathbf{v} = F(\mathbf{x}') > \mathbf{u} = F(\mathbf{x})$ .

**定义 3 (Pareto 最优集)** 决策空间中所有最优解的集合称为 Pareto 最优集, 目标空间中与之对应的目标向量集称为 Pareto 前沿或 Pareto 最优面.

### 2.2 决策属性与目标函数的序相关系数

序相关系数反映的是两变量等级间的相关<sup>[15]</sup>. 设目标函数  $\mathbf{y} = f(\mathbf{x})$  ( $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ ), 已知  $N$  个训练样本 ( $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ ), 构建样本集矩阵  $\mathbf{S} = [\mathbf{x} \ \mathbf{y}]$ , 并求元素  $x_{ij}$  与  $y_i$  在当前列中的序, 构成样本集序矩阵  $\mathbf{S}_1$ , 如式 2.

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} & y_1 \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} & y_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \dots & x_{Nn} & y_N \end{bmatrix} \Rightarrow \\ \mathbf{S}_1 &= \begin{bmatrix} Rx_{11} & Rx_{12} & \dots & Rx_{1n} & Ry_1 \\ Rx_{21} & Rx_{22} & \dots & Rx_{2n} & Ry_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ Rx_{N1} & Rx_{N2} & \dots & Rx_{Nn} & Ry_N \end{bmatrix} \quad (2) \end{aligned}$$

选取  $\mathbf{S}_1$  中前  $n$  列中的列  $j$  和最后一列  $y$ , 用式 (3) 计算出决策属性  $x_j$  与目标函数  $y$  的序相关系数.

$$r_j = 1 - \frac{6 \sum (Rx_{ij} - Ry_i)^2}{N(N^2 - 1)}, (i = 1 \dots N, j = 1 \dots n) \quad (3)$$

式 (3) 中  $N$  为样本容量,  $n$  为决策向量维数,  $Rx_{ij}$  为第  $i$  个样本的第  $j$  个属性在  $N$  个样本第  $j$  个属性中的序值,  $Ry_i$  为第  $i$  个样本的目标函数值在  $N$  个样本中的序值. 求得序相关向量  $\mathbf{CR} = (r_j | j = 1, \dots, n)$ , 且  $r_j \in [-1, 1]$ . 其中  $r_j = 0$  表示第  $j$  个属性的序与目标函数的序是非线性相关或者无关的,  $|r_j| \neq 0$  表示第  $j$  个属性的序与目标函数的序的线性相关程度.

## 3 序拟合模型

### 3.1 序等价关系

如给定矩阵  $\mathbf{A}, \mathbf{B}$  和  $\mathbf{C}$ , 如式 (4). 设  $\mathbf{A}$  的第 1 列为  $f_1(\mathbf{x})$  的函数值, 第 2 列为  $f_2(\mathbf{x})$  的函数值;  $\mathbf{B}$  的第 1 列为  $g_1(\mathbf{x})$  的函数值, 第 2 列为  $g_2(\mathbf{x})$  的函数值;  $\mathbf{C}$  为某一矩阵对应的序矩阵 (如  $\mathbf{A}$  矩阵中元素在该列中的序值),  $\mathbf{A}, \mathbf{B}$  矩阵的序矩阵同为  $\mathbf{C}$ .

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0.1576 & 0.1419 \\ 0.9706 & 0.4218 \\ 0.9572 & 0.9157 \\ 0.4854 & 0.7922 \\ 0.8003 & 0.9595 \end{bmatrix}, \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0.41 & 0.23 \\ 2.01 & 0.56 \\ 1.64 & 0.93 \\ 0.87 & 0.75 \\ 1.32 & 1.12 \end{bmatrix}, \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 5 & 2 \\ 4 & 4 \\ 2 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix} \quad (4)$$

若计算  $f_1(\mathbf{x})$  函数和  $g_1(\mathbf{x})$  函数(或  $f_2(\mathbf{x})$  函数和  $g_2(\mathbf{x})$  函数)的 5 个样本的优劣性,可以直接通过  $\mathbf{C}$  矩阵的第 1 列(或第 2 列)得出.若计算多目标 Pareto 优劣性,根据定义 1,通过比较候选解各同维目标分量的大小关系可确定其 Pareto 优劣性.如果不考虑候选解目标函数的精确值,而是将目标函数的精确值用序值取代,计算出的优劣关系与原优劣关系是一致的.例如,采用矩阵  $\mathbf{B}$  计算样本间的优劣关系,(1,1)为最优个体,(2,3)优于(4,4)和(3,5),与采用矩阵  $\mathbf{A}$  的计算结果是相同的,因此  $\mathbf{A}$  与  $\mathbf{B}$  在判断优劣性上是等价的(如定义 4 所示).

**定义 4** (序等价关系) 设函数  $f(\mathbf{x})$  与  $g(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ , 对定义域内任意  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ , 若  $f(\mathbf{x}_1) - f(\mathbf{x}_2)$  与  $g(\mathbf{x}_1) - g(\mathbf{x}_2)$  具有正负一致性, 则称  $g(\mathbf{x})$  与  $f(\mathbf{x})$  具有序等价关系.

### 3.2 序拟合模型

**定义 5** (序拟合模型) 对函数  $f(\mathbf{x})$ , 若存在函数  $g(\mathbf{x})$  与其具有序等价关系, 则称  $g(\mathbf{x})$  是  $f(\mathbf{x})$  的序拟合模型.

设函数  $f(\mathbf{x}) = k(\mathbf{x})(1 - \sqrt{x_1/k(\mathbf{x})})$ , ( $k(\mathbf{x}) = 1 + 9 \sum_{i=2}^n x_i/(n-1), 0 \leq x_i \leq 1, i = 1, 2, \dots, 10$ ), 根据定义 4, 构造  $f(\mathbf{x})$  的一种线性序拟合模型  $g(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \times \mathbf{CR}^T$ , 其中  $\mathbf{CR} = (-0.59, 0.23, 0.28, 0.25, 0.26, 0.27, 0.26, 0.27, 0.26, 0.24)$ .

随机产生 10 个测试样本, 计算得  $f(\mathbf{x}) = (5.49, 2.70, 3.19, 5.29, 4.12, 3.70, 4.31, 4.19, 4.50, 3.47)$ , 根据序拟合模型得  $g(\mathbf{x}) = (1.29, 0.52, 0.63, 1.21, 0.90, 0.80, 0.96, 0.92, 1.03, 0.68)$ . 序拟合效果如图 1,  $g(\mathbf{x})$  与  $f(\mathbf{x})$  的函数值并不在同一区间, 但曲线趋势基本一致,  $g(\mathbf{x})$  与  $f(\mathbf{x})$  的函数值在序上基本相同, 即存在序等价关系, 因此  $g(\mathbf{x})$  即为  $f(\mathbf{x})$  的序拟合模型.

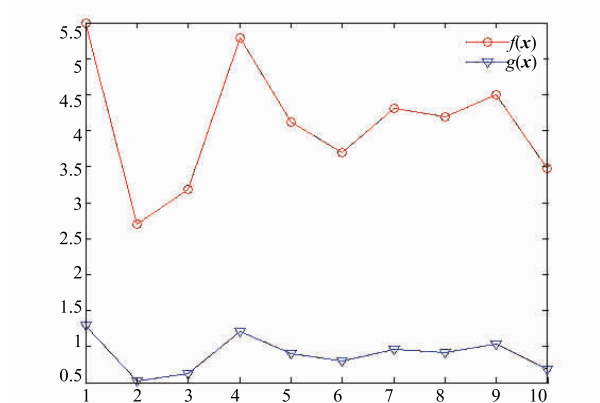


图1 函数  $f(\mathbf{x})$  与其序拟合函数  $g(\mathbf{x})$  的对比曲线  
(红色圆圈表示  $f(\mathbf{x})$  的变化趋势, 蓝色三角型表示  $g(\mathbf{x})$  的变化趋势)

## 4 基于序拟合模型的 Pareto 优劣性决策

### 4.1 序关系预测方法

对函数  $f(\mathbf{x})$  的  $N$  个训练样本  $(\mathbf{x}_i, f(\mathbf{x}_i)), i = 1, \dots, N, \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ , 构建样本集矩阵  $\mathbf{S} = [\mathbf{x} \ f(\mathbf{x})]$ , 其中  $\mathbf{x} = (x_j | i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, n), f(\mathbf{x}) = (f(\mathbf{x}_i) | i = 1, \dots, N)$ . 求出每个元素在当前列中的序, 构建序矩阵  $\mathbf{S}_1$ , 并应用式(3)计算决策属性与目标的序相关系数向量  $\mathbf{CR}$ . 根据序相关系数的性质, 其中不等于 0 的值主要反映决策属性与目标函数的线性相关程度. 因此, 在线性相关的假设条件下, 构造的序拟合模型为:

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{CR}^T \quad (\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n) \quad (5)$$

根据序等价函数, 建立的序关系预测方程为:

$$\begin{aligned} \text{sign}(f(\mathbf{x}_i), f(\mathbf{x}_j)) &= \text{sign}(g(\mathbf{x}_i), g(\mathbf{x}_j)) \\ &= \text{sign}((\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \times \mathbf{CR}^T) \quad (i, j = 1, \dots, N, i \neq j) \end{aligned} \quad (6)$$

即样本  $\mathbf{x}_i$  与  $\mathbf{x}_j$  的优劣性判别.

### 4.2 序关系预测的 Pareto 优劣性决策

若已知候选解之间各同维目标分量的大小关系即序关系, 则可确定它们的 Pareto 优劣性. 因此, 在线性相关的假设条件下, 对昂贵子目标函数, 根据序相关系数分析建立序关系预测方程, 通过序关系预测方程判别任意 2 个样本在该维上的优劣性, 结合其它维上非昂贵子目标函数优劣性判别来确定样本之间的 Pareto 优劣性. 为验证基于相关分析的序关系预测 (Rank Relation Prediction, RRP) 方法确定 Pareto 优劣性的有效性, 本文选取 ZDT1、ZDT2、ZDT3、ZDT6、KUR、MOP1、MOP2、MOP3、DTLZ1 和 DTLZ2 这 10 个测试函数<sup>[16-18]</sup>进行实验. 设每一个测试子函数都是昂贵函数, 在定义范围内产生均匀分布且规模相等的训练样本集与测试样本集, 二目标优化问题样本集大小  $N = 200$ , 三目标优化问题样本集大小  $N = 1000$ . 分别对每个测试问题进行 100 次实验, 每次实验都重新生成训练样本集和测试样本集, 则 100 次 Pareto 优劣性预测实验的 Pareto 优劣性的正确性评价和子目标函数优劣性正确性评价如表 1 所示. 参考数值主要有样本大小 ( $N$ ), 决策属性维数 ( $n$ ), 优劣性预测的评价精度.

表 1 实验数据表明, 基于序相关分析的 Pareto 优劣性预测方法的效果与决策向量维数、函数形态、目标向量维数都有关系. 在假设线性相关的条件下, ZDT1、ZDT2 测试函数的子目标优劣性预测平均正确率几乎达到 100%, 且多目标 Pareto 优劣性预测正确率在 95% 以上; ZDT3、MOP1 和 MOP3 测试函数的子目标优劣性预测平均正确率都在 90% 以上, Pareto 优劣性预测正确率在 85% 以上; 但是对一些目标函数是对称函数或类周期函数 (ZDT6、MOP2 和 KUR 的子目标函数), Pareto 优劣性预测的正确率并不理想. 对于此类情况, 说明线性

的假设并不成立,应采用其他序等价函数模型. 从 ZDT1、ZDT2、ZDT3 和 ZDT6 的决策维数变化对预测结果的影响可知,决策向量维数对 Pareto 优劣性及分目标序预测的平均正确率影响较小. 对于选取的 DTLZ1 和

DTLZ2 两个三目标函数,其分目标的等价率都大于 85%,但 Pareto 优劣性等价性小于 80%,这是由于随着目标数的增加,子目标函数序关系预测同时一致的难度也在增加.

表 1 序关系预测的平均精度

测试函数	$N$	$n$	Pareto 优劣性(%)	$f_1(\mathbf{x})$ 优劣性(%)	$f_2(\mathbf{x})$ 优劣性(%)	$f_3(\mathbf{x})$ 优劣性(%)
ZDT1	200	10	0.9679	0.9987	0.9740	
	200	20	0.9637	0.9966	0.9721	
	200	30	0.9522	0.9910	0.9660	
ZDT2	200	10	0.9921	0.9991	0.9981	
	200	20	0.9809	0.9918	0.9941	
	200	30	0.9721	0.9889	0.9881	
ZDT3	200	10	0.8536	0.9978	0.8608	
	200	20	0.8311	0.9939	0.8418	
	200	30	0.8242	0.9911	0.8375	
ZDT6	200	3	0.6384	0.6423	0.9988	
	200	10	0.5976	0.6085	0.9876	
MOP1	200	2	0.9375	1.0000	0.9393	
MOP2	200	1	0.5534	0.5534	1.0000	
MOP3	200	2	0.9167	0.9388	0.9776	
KUR	200	3	0.4181	0.4658	0.8896	
DTLZ1	1000	10	0.7501	0.8985	0.9041	0.9052
DTLZ2	1000	10	0.7380	0.9067	0.8822	0.9410

### 4.3 Pareto 优劣性决策的对比实验

选取 ZDT1、ZDT2、ZDT3、ZDT6、KUR、DTLZ1 和 DTLZ2 这七个存在等价子向量的测试函数,将 RRP 方法确定 Pareto 优劣性算法与等价子向量最小交叉距离加权和相似性测度的 Pareto 支配性最近邻分类算法(ESNNC)<sup>[19]</sup>、克里格模型方法(KRG)<sup>[20]</sup>和径向基函数神经网络模型方法(RBFNN)<sup>[21]</sup>预测 Pareto 优劣性进行对比实验. 在 KRG 和 RBFNN 方法中,需要对每一个子目标函数建立各自的模型,并组合模型的输出测试 Pareto 优劣性的分类准确性. ESNNC 方法是将 2 个  $n$  维候选解样本决策向量串接成  $2n$  维的训练样本,直接运用最近邻分类方法预测 Pareto 优劣性,减少对昂贵目标函数的评价次数,不建立代理模型. 对每一个测试函数,在定义域范围内随机产生两个规模为 200 的候选解集,计算并比较其所对应的目标向量,构造规模为 200

$\times 200$  的 Pareto 支配性样本集,结合分类算法预测随机产生的规模为  $40 \times 40$  的待测样本集中候选解之间 Pareto 优劣性. 分别对每个测试问题进 100 次实验,每次实验都重新生成已知样本集,待测样本集保持不变,实验结果如表 2 所示. 由表 2 数据可知,对 ZDT1、ZDT2 和 ZDT3 测试函数,RRP 方法对各类样本(支配类、非支配类、等价类)的预测准确率明显高于 ESNNC、KRG 和 RBFNN 模型;对 DTLZ1 和 DTLZ2 测试函数,由于每一个子函数都建立了模型,因此在判别 Pareto 优劣性时,会要求每一个函数都要满足线性相关的假设,但是这对于 DTLZ1 和 DTLZ2 的 3 个子函数是不同时成立的,所以当目标数增加时预测的准确性就会降低;对 ZDT6 和 KUR 函数,RRP 算法的预测结果并不理想,这是由于决策属性与目标函数的序相关性是非线性相关,与 RRP 算法的假设不一致.

表 2 ESNNC、KRG、RBFNN 和 RRP 的 Pareto 优劣性平均预测精度

测试函数	$n, m$	算法	平均准确率 (%)		
			< (支配)	> (被支配)	~ (等价)
ZDT1	$n = 30, m = 2$	ESNNC	83.17	83.32	87.56
		KRG	33.62	33.62	83.83
		RBFNN	38.26	37.78	84.09
		RRP	<b>91.99</b>	<b>93.17</b>	<b>98.08</b>
ZDT2	$n = 30, m = 2$	ESNNC	86.47	84.09	88.57
		KRG	56.06	56.06	71.93
		RBFNN	48.13	50.09	58.70
		RRP	<b>96.95</b>	<b>97.22</b>	<b>97.70</b>
ZDT3	$n = 30, m = 2$	ESNNC	73.29	72.02	86.98
		KRG	32.92	32.92	80.74
		RBFNN	58.24	55.91	73.38
		RRP	<b>75.54</b>	<b>74.87</b>	<b>90.79</b>
ZDT6	$n = 10, m = 2$	ESNNC	59.29	60.84	66.61
		KRG	44.05	44.05	61.09
		RBFNN	38.32	36.11	54.79
		RRP	<b>66.79</b>	<b>61.52</b>	<b>66.25</b>
KUR	$n = 3, m = 2$	ESNNC	<b>79.34</b>	<b>81.83</b>	<b>72.65</b>
		KRG	56.95	56.95	48.49
		RBFNN	58.89	55.92	39.06
		RRP	14.86	17.27	57.49
DTLZ1	$n = 10, m = 3$	ESNNC	27.09	<b>19.01</b>	93.51
		KRG	12.41	12.41	<b>94.68</b>
		RBFNN	3.11	7.09	90.65
		RRP	<b>61.11</b>	1.51	80.15
DTLZ2	$n = 10, m = 3$	ESNNC	23.12	<b>27.54</b>	95.31
		KRG	13.20	13.20	96.75
		RBFNN	4.92	6.11	<b>98.15</b>
		RRP	<b>51.03</b>	0.76	78.23

## 5 RRP 方法在多目标进化计算中的应用

### 5.1 RRP-MOEA 算法设计

进化算法在多目标优化领域的研究越来越多<sup>[2,22-26]</sup>,代表性的多目标进化算法包括 NSGA-II<sup>[22]</sup>、MOEA/D<sup>[23]</sup>、MOPSO<sup>[24]</sup>等.为验证 RRP 方法在减少昂贵目标函数评估次数上的有效性,将该方法集成到 NSGA-II 中,称为基于序关系预测 Pareto 支配性的多目标进化算法 (Multi-objective Evolutionary Algorithm Based on Rank Relation Prediction, RRP-MOEA),过程见算法 1. NSGA-II 与 RRP-MOEA 的基本流程分别如图 2(a)和

2(b)所示.

#### 算法 1 基于序关系预测 Pareto 支配性的多目标进化算法

Step1 产生种群,设置参数;

Step2 对样本集按子目标的解析函数计算函数值,计算决策属性与昂贵目标函数的序相关系数,构造昂贵目标函数的序拟合函数;

Step3 根据序拟合函数,建立序关系预测方程并集成到 Pareto 优劣性判别过程中,预测候选解样本之间的 Pareto 优劣性,计算个体的 rank 值;

Step4 计算拥挤距离并根据 rank 值对样本集进行适应值排序,执行进化操作,形成新种群;

Step5 判断是否满足迭代结束条件,如果是,转 Step6;否则,转

Step3;

Step6 用昂贵目标函数评估档案集中样本,结合 Pareto 优劣性判别方法计算个体的 rank 值,其中 rank = 1 的个体集合即非支配集.

对比 RRP-MOEA 和 NSGA-II 的算法流程,它们的主要区别如下:

(1) 在进化迭代开始前,RRP-MOEA 对比 NSGA-II 增加了一个环节,需要计算决策属性与昂贵目标函数的序相关性,建立昂贵目标函数的序拟合函数(图 2(b)-A2).

(2) 在进化迭代过程中,不同之处主要体现在 Pareto 优劣性决策. NSGA-II 在计算样本间 Pareto 优劣性过程中(图 2(a)-B),需要对每个样本都采用昂贵函数进行评估;RRP-MOEA 在计算样本间 Pareto 优劣性过程中(图 2(b)-B),集成了序关系预测方程,避免昂贵

函数评估.

(3) 在进化迭代过程结束后,NSGA-II 的档案集中 rank = 1 的个体集合就是非支配集. RRP-MOEA 则需要用昂贵目标函数评估档案集中样本的函数值,再用 Pareto 优劣性判别方法计算个体的 rank 值,求得非支配集.

对于 2 种算法中昂贵目标函数的评估次数,由图 2 可知,NSGA-II 需要在每一次迭代过程中都采用昂贵目标函数对个体进行适应值评估,评估次数为  $(Gen + 1) \times N$  ( $Gen$  为迭代次数);RRP-MOEA 算法在求解的过程中只需在进化迭代过程开始前的样本集和结束后的样本集采用昂贵目标函数进行评估,评估次数为  $2 \times N$  ( $N$  为样本集大小).

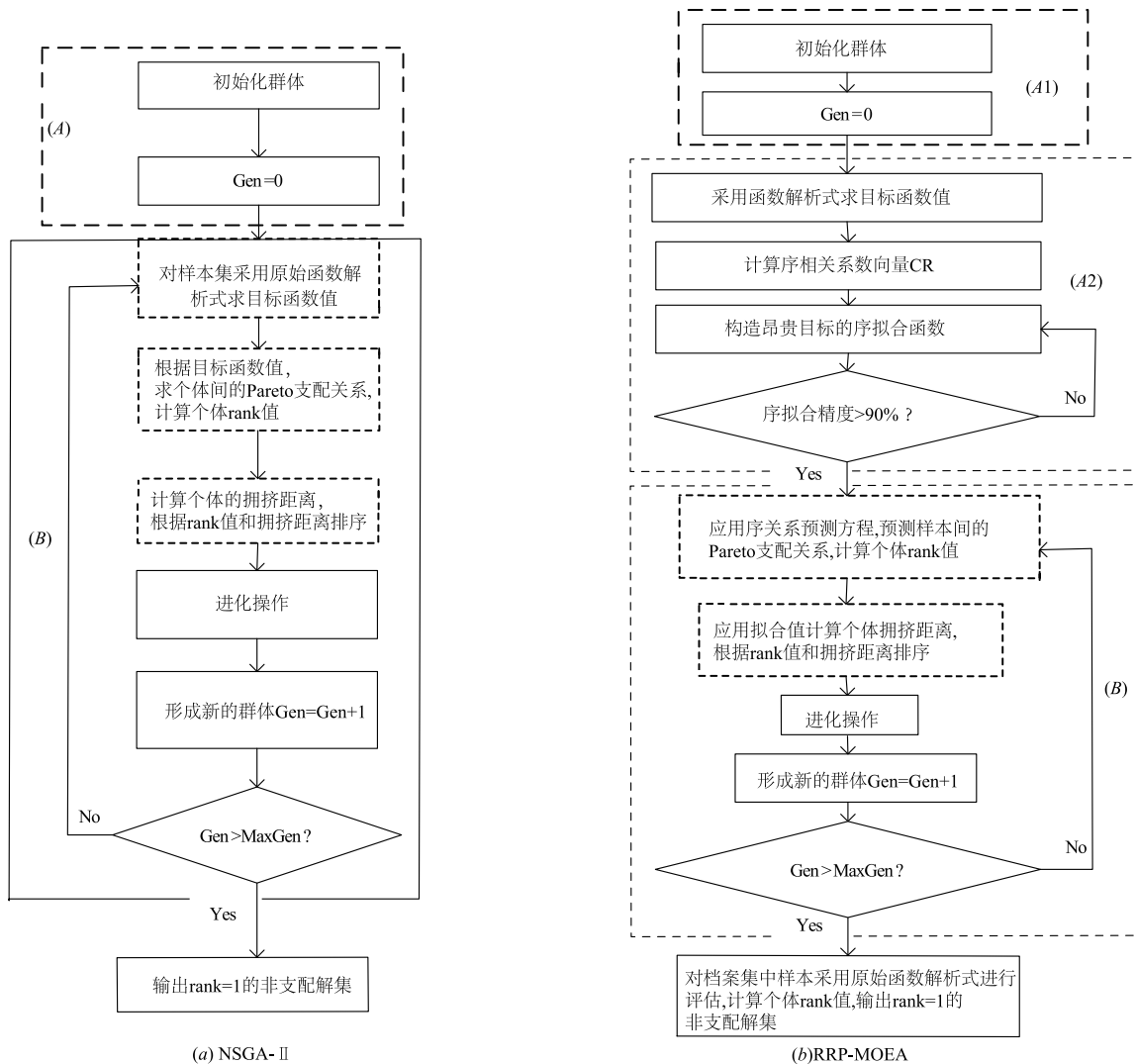


图2 NSGA-II和RRP-MOEA的基本流程

(a)描述了NSGA-II的算法流程;(b)描述了RRP-MOEA的算法流程

## 5.2 实验结果与分析

为验证 RRP 方法的可行性, 将 RRP-MOEA 算法与 NSGA-II 算法进行比照实验. 选取与 4.3 节相同的测试函数. 其中, ZDT1、ZDT2 和 ZDT3 有 2 个子函数, 都满足线性相关的假设, 但它们的  $f_1(x)$  子函数比较简单, 因此选择对它们的  $f_2(x)$  子函数建立序关系预测方程; ZDT6 和 KUR 测试函数的  $f_1(x)$  子函数不满足线性相关的假设,  $f_2(x)$  子函数满足线性相关假设, 因此分别建立序关系预测方程; DTLZ1 和 DTLZ2 有 3 个子函数, 都满足线性相关的假设, 但线性递增的方向不一致, 因此选取其中的一个子函数建立序关系预测方程.

所用实验平台为: Intel(R) i3-2120 CPU 3.3GHz, RAM 4GB, 所有程序代码均在 win7 系统中的 Matlab 2011a 上运行. 2 种算法的初始种群和参数设置如下:

PopSize = 100 or 1000; Generations (Gen) = 100 ~ 500; CrossoverRate = 0.9;

MutationRate = 0.15; DistributeIndex for crossover = 15;

DistributeIndex for mutation = 15; ExternalArchiveSize = PopSize;

仿真结果如图 3 所示.

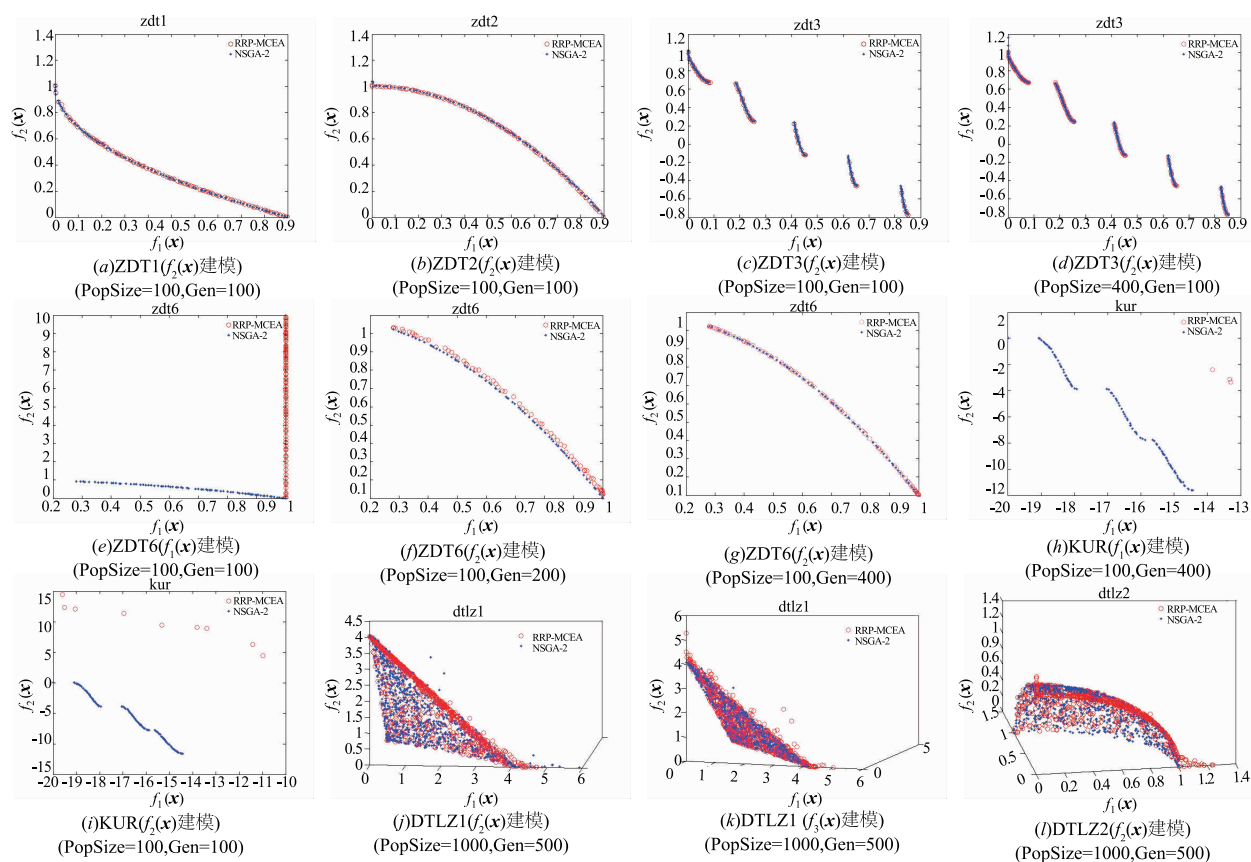


图3 RRP-MOEA和NSGA-II算法的对比实验

(图中红色圆圈表示RRP-MOEA算法的实验结果, 蓝色圆点表示NSGA-II算法的实验结果)

由图 3 可知, 当建立的序关系预测方程精度较高时 (见表 2), 在 ZDT1、ZDT2 和 ZDT6 测试函数的收敛性和分布性上, 两种算法结果基本一致, 但对 ZDT6 的  $f_2(x)$  子函数建模时, 由于该函数的非线性较强, 因此存在收敛慢的问题, 这可以通过适当增加迭代次数来解决 (如图 3(f) 和图 3(g)). ZDT3 的子函数  $f_2(x)$  的序关系预测方程精度没有超过 90% (见表 1), 虽然同样能收敛, 但在分布性上, RRP-MOEA 比 NSGA-II 要差, 但可以通过增加样本容量来增强分布性 (如图 3(d)). 当建立的序关系预测方程精度较差时 (即不满足线性相

关假设), 如 ZDT6 的  $f_1(x)$  子函数和 KUR 的子函数  $f_1(x)$  和  $f_2(x)$ , RRP-MOEA 算法不会收敛, 需要建立新的序拟合函数. DTLZ1 和 DTLZ2 的 3 个子目标, 序关系预测的精度都在 90% 左右, 对其中任意一个建模, 收敛性和分布性相差不大. 对于算法的时间复杂度, 在进化迭代过程中, RRP-MOEA 算法对建模的目标函数是执行线性运算的, 这将优于 NSGA-II 算法的迭代过程时间. 但建模过程是比 NSGA-II 算法额外增加的, 时间复杂度主要集中在序相关分析上, 为  $O(N^2)$ . RRP-MOEA 算法在寻优过程中, 仅在建模阶段和迭代结束后对昂贵目

标函数进行了计算,因此对昂贵目标函数总的评估次数为  $2 \times N$  ( $N$  为样本集大小).

## 6 结论

昂贵多目标进化算法需要对耗时复杂的目标函数多次评估,存在计算成本灾难的问题. 针对这一问题,本文通过对样本集决策属性和目标函数的序相关性进行分析,提出一种序拟合方法进行 Pareto 优劣性预测. 由于该方法不对函数值拟合,而是对函数值的序进行拟合,因而很容易构造. 对比实验结果表明在大多数测试问题上该方法的预测结果显著地优于现有的最近邻分类方法和典型代理模型方法. 将该预测方法应用到经典的多目标进化算法中,明显可以避免进化过程中的模型重构,减少昂贵目标函数的评估次数. 进一步工作将研究函数形态具有类周期性等复杂非线性情况的序等价函数构造问题.

### 参考文献

- [1] 詹炜. 求解高维多目标优化问题的流形学习算法研究 [D]. 武汉, 中国地质大学, 2013.
- [2] Zhou A, Qu B Y, Li H, et al. Multiobjective evolutionary algorithms: A survey of the state of the art [J]. *Swarm & Evolutionary Computation*, 2011, 1(1): 32–49.
- [3] Seah C W, Ong Y S, Tsang I W, et al. Pareto rank learning in multi-objective evolutionary algorithms [A]. 2012 IEEE Congress on Evolutionary Computation [C]. Brisbane, Australia; IEEE, 2012. 1–8.
- [4] Jin Y, Sendhoff B. A systems approach to evolutionary multiobjective structural optimization and beyond [J]. *IEEE Computational Intelligence Magazine*, 2009, 4(3): 62–76.
- [5] Schneider G, Schrödl W, Wallukat G, et al. Peptide design by artificial neural networks and computer-based evolutionary search [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 1998, 95(21): 12179–12184.
- [6] Venske S M, Gonçalves R A, Benelli E M, et al. ADEMO/D: an Adaptive Differential Evolution for Protein Structure Prediction Problem [J]. *Expert Systems with Applications*, 2016, 56: 209–226.
- [7] 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.
- [8] Liu B, Koziel S, Zhang Q. A multi-Fidelity surrogate-model-assisted evolutionary algorithm for computationally expensive optimization problems [J]. *Journal of Computational Science*, 2015, 12: 28–37.
- [9] Liu B, Zhang Q, Gielen G G E. A Gaussian process surrogate model assisted evolutionary algorithm for medium scale expensive optimization problems [J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2014, 18(2): 180–192.
- [10] Datta R, Regis R G. A surrogate-assisted evolution strategy for constrained multi-objective optimization [J]. *Expert Systems with Applications*, 2016, 57: 270–284.
- [11] Jin Y, Sendhoff B. Reduction of fitness evaluations using clustering techniques and neural network ensembles: US, US7363281 [P]. 2008.
- [12] Pavelski L M, Delgado M R, Almeida C P D, et al. Extreme learning surrogate models in multi-objective optimization based on decomposition [J]. *Neurocomputing*, 2016, 180: 55–67.
- [13] Montemayor-García G, Toscano-Pulido G. A study of surrogate models for their use in multiobjective evolutionary algorithms [A]. *International Conference on Electrical Engineering Computing Science and Automatic Control* [C]. Jilin, China; IEEE, 2011. 1–6.
- [14] Deb K, Kalyanmoy D. *Multiobjective Optimization Using Evolutionary Algorithms* [M]. Chichester; John Wiley & Sons, Inc, 2001.
- [15] Myers J L, Well A. *Research Design and Statistical Analysis* [M]. Mahwah; Lawrence Erlbaum Associates Publishers, 2013.
- [16] Zitzler E, Deb K, Thiele L. Comparison of multiobjective evolutionary algorithms: Empirical results [J]. *Evolutionary computation*, 2000, 8(2): 173–195.
- [17] Kursawe F. *A Variant of Evolution Strategies for Vector Optimization* [M]. Heidelberg; Springer, 1991.
- [18] K Deb, L Thiele, M Laumanns, et al. Scalable multi-objective optimization test problems [A]. 2002 IEEE Congress on Evolutionary Computation [C]. Honolulu, Hawaii; IEEE, 2002. 825–830.
- [19] 郭观七, 尹呈, 曾文静, 等. 基于等价分量交叉相似性的 Pareto 支配性预测. *自动化学报*, 2014, 40(1): 33–40. GUO Guan-qi, YIN Cheng, ZENG Wen-jing, et al. Prediction of Pareto dominance by cross similarity of equivalent components [J]. *Acta Automatica Sinica*, 2014, 40(1): 33–40. (in Chinese)
- [20] Kleijnen J P C. Kriging meta modeling in simulation: A review [J]. *European Journal of Operational Research*, 2009, 192(3): 707–716.
- [21] Rosales-Perez A, Coello C A C, Gonzalez J A, et al. A hybrid surrogate-based approach for evolutionary multi-objective optimization [A]. 2013 IEEE Congress on Evolutionary Computation [C]. Cancun, Mexico; IEEE, 2013. 2548–2555.

- [22] Deb K, Pratap A, Agarwal S, et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II [J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2002, 6 (2): 182 - 197.
- [23] Zhang Q, Li H. MOEA/D: a multi-objective evolutionary algorithm based on decomposition [J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2007, 11 (6): 712 - 731.
- [24] Coello C A C, Pulido G T, Lechuga M S. Handling multiple objectives with particle swarm optimization [J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2004, 8 (3): 256 - 279.
- [25] 谢承旺, 邹秀芬, 夏学文, 等. 一种多策略融合的多目标粒子群优化算法 [J]. 电子学报, 2015, 43 (8): 1538 - 1544.  
XIE Cheng-wang, ZOU Xiu-fen, XIA Xue-wen, et al. A multi-objective particle swarm optimization algorithm integrating multiply strategies [J]. Acta Electronica Sinica, 2015, 43 (8): 1538 - 1544. (in Chinese)
- [26] 王亚辉, 吴金妹, 贾晨辉. 基于动态种群多策略差分进化模型的多目标进化算法 [J]. 电子学报, 2016, 44 (6): 1472 - 1480.  
WANG Ya-hui, WU Jin-mei, JIA Chen-hui. Multi-objective evolutionary algorithm based on dynamic population multi-strategy differential models [J]. Acta Electronica Sinica, 2016, 44 (6): 1472 - 1480. (in Chinese)

## 作者简介



**李文彬** 男, 1981 年出生, 湖南岳阳人, 现为中南大学信息科学与工程学院博士研究生, 主要研究方向为进化计算、多目标优化、神经网络.

E-mail: wenbin\_li@163.com



**贺建军** 男, 1965 年出生, 湖南宁乡人, 中南大学信息科学与工程学院教授、博士生导师. 主要研究方向为复杂工业过程建模与优化控制、自适应控制理论与应用.

E-mail: jjhe@mail.csu.eud.cn

**郭观七 (通信作者)** 男, 1964 年出生, 湖南岳阳人, 湖南理工学院信息与通信工程学院教授、硕士生导师. 主要研究方向为计算智能、多目标优化、模式识别.

E-mail: gq.guo@163.com