多目标进化算法及其应用

郑金华◎著

科学出版社
www.sciencep.com

多目标进化算法及其应用

郑金华 著

科学出版社
北京

内 容 简 介

近年来，多目标进化算法（MOEA）的研究进入了快速发展阶段，越来越多的人开始从事 MOEA 的设计与实现，MOEA 的应用也日益广泛。

本书比较全面地综述了 MOEA 的国际研究现状和发展，讨论了 MOEA 的基本概念和基本原理，介绍了目前国际上比较典型的 MOEA，论述了 MOEA 的性能评价方法，阐述了构造 Pareto 最优解集的方法，刻画了保持进化群体分布性的方法和策略，详述了 MOEA 的测试方法。同时，对 MOEA 的收敛性及应用进行了讨论和分析。

本书可作为计算机、自动控制和其它相关专业高年级本科生和研究生，以及 MOEA 爱好者研究、学习的教材或参考书。

图书在版编目(CIP)数据

多目标进化算法及其应用/郑金华著. —北京:科学出版社,2007
ISBN 978-7-03-018489-4

Ⅰ. 多… Ⅱ. 郑… Ⅲ. 多目标(数学)-算法 Ⅳ. TP301.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 012467 号

责任编辑:赵卫江/责任校对:柏连海
责任印制:吕春珉/封面设计:耕者设计工作室

科 学 出 版 社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码: 100717
http://www.sciencep.com
新 蕾 印 刷 厂 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2007 年 2 月第 一 版 开本: B5 (720×1000)
2007 年 2 月第一次印刷 印张: 18
印数: 1—2 000 字数: 345 000

定价: 38.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换〈新欣〉)
销售部电话 010-62136131 编辑部电话 010-62138017 (BI01)

前　言

20 世纪 80 年代末期，国际上对多目标进化算法 MOEA（multi-objective evolutionary optimization）的研究进入了兴旺时期，从 1994 年到 2001 年的 8 年，国际上所出版的论文是过去 10 年（1984～1993）的 3 倍之多。最近几年的发展速度比过去 8 年又有提高，一方面，从 2001 年以来，每两年召开一次有关多目标进化的国际会议 EMO（Evolutionary Multi-Criterion Optimization）；另一方面，从在国际刊物“IEEE Transactions on Evolutionary Computation”（1997 年创刊）、“Evolutionary Computation”（1993 年创刊）和“Genetic Programming and Evolvable Machines”（1999 年创刊），以及各类国际进化计算的会议（如 Congress on Evolutionary Computation、Genetic and Evolutionary Computation Conference 等）上所发表的有关多目标进化的论文比过去有较大幅度的增加。这标志着 MOEA 的研究进入了快速发展阶段。

MOEA 研究之所以有今天这么好的势头，主要是因为它具有广泛的应用领域和应用前景。一方面，现实世界中的许多实际问题，都是多个目标的同时优化；另一方面，这些问题通常又是高度复杂的，非线性的。MOEA 非常适合于求解这类问题。事实上，比较早期的向量评估遗传算法（VEGA）就是为了解决机器学习中的有关问题而提出的，MOEA 发展到今天，已经在许多领域得到了成功应用，如优化控制，数据挖掘，机械设计，移动网络规划，证券组合投资、仿人机器人中枢神经运动控制器的设计，固体火箭发动机的优化设计，QoS 路由，物流配送，逻辑电路设计，多传感器多目标跟踪数据关联，水下机器人运动规划，导弹自动驾驶仪设计，柔性制造系统流程规划，森林规划优化，车间调度等。

作者积多年的研究心得和研究结果，结合国内外 MOEA 研究的最新成果写成本书，供 MOEA 爱好者参考，希望起到抛砖引玉的作用。

全书共分 8 章。第 1 章讨论了 MOEA 的基本概念，同时比较全面地综述了 MOEA 的国际研究现状和发展。第 2 章阐述了目前国际上比较典型的 MOEA，并给出了部分比较实验结果。第 3 章论述了 MOEA 的评价方法，对 MOEA 设计具有指导作用。第 4 章刻画了构造 Pareto 最优解集的方法，并给出了部分比较实验结果。第 5 章叙述了保持进化群体分布性的方法和策略。第 6 章对 MOEA 的收敛性进行了讨论和分析。第 7 章介绍了 MOEA 的测试方法，同时给出了大量的测试用例。第 8 章给出了几个具体的 MOEA 应用实例。

本书适合作为高年级本科生、硕士研究生、博士研究生和 MOEA 爱好者研

究和学习的教材或参考书。为此，作者在叙述上力求通俗易懂、深入浅出。

本书是笔者在博士后研究的基础上写成的，感谢史忠植教授的精心指导和关心。参加本书部分章节撰写的有：吴佳英（第 2 章第 3 节和第 4 节），李旭勇和薛娟（第 3 章），吴茜（第 2 章第 8 节，第 7 章），刘敏（第 8 章第 2 节和第 3 节），宋武（第 2 章第 7 节），彭琰（第 2 章第 10 节）。还有谢勇、邝达、蒋浩、肖桂霞、李丽荣、陈良军、谢炯亮、李密青、田小梅等做了大量的实验工作和文字工作。

我还要感谢蔡自兴教授对我多年的教导和关心，感谢 Charles X Ling 教授对我研究工作的指导和支持。感谢王勇对全书修改所提出的宝贵建议，感谢赵卫江对全书文字修饰所付出的辛勤劳动。感谢刘任任教授、高协平教授对本书出版的支持和鼓励。感谢国家自然科学基金，特别是湖南省自然科学基金对我多年研究的资助。感谢我的妻子对我工作的支持，是她的辛勤持家，我才有更多的时间从事科研与写作。同时，感谢所有支持我、关心我的朋友和同事。

由于作者水平有限，不足之处敬请专家和读者批评指正！作者 E-mail：jhzheng@xtu. edu. cn。

郑金华

2006 年 6 月

目　　录

第1章 绪　　论

进化算法(evolutionary algorithm,EA)是一类模拟生物自然选择与自然进化的随机搜索算法,因其适用于求解高度复杂的非线性问题而得到了非常广泛的应用,同时它又具有较好的通用性。在解决只有单个目标的复杂系统优化问题时,进化算法的优势得到了充分展现。然而,现实世界中的优化问题通常是多属性的,一般是对多个目标的同时优化。如一个国家的最优良性发展,涉及到经济的快速增长、社会秩序的稳定、环境的保护和改善等多个方面。在这里,经济快速增长和社会秩序稳定这两个优化目标是相辅相成的,互相促进的,通常称之为一致的。在多数情况下,被同时优化的多个目标之间是相互冲突的,如在企业生产活动中,产品质量与生产成本是两个相互冲突的目标。为了达到总目标的最优化,通常需要对相互冲突的子目标进行综合考虑,即对各子目标进行折衷(tradeoffs)。由此,针对多目标的优化问题,出现了多目标进化算法(multi-objective evolutionary algorithm,MOEA)。值得说明的是,在国内外诸多文献中,在称谓上可能有比较大的差异,如多目标遗传算法(multi-objective genetic algorithm,MOGA)、进化多目标优化(evolutionary multi-objective optimization,EMOO)等。

1.1 多目标优化问题

无论是科学研究还是在工程应用上,多目标优化都是非常重要的研究课题。这不仅是因为许多现实世界中的优化问题涉及到多个目标的同时优化,还有一些与多目标优化有关的问题也是难以回答的,如最优解,它不同于单目标的优化,通常有多个最优解,对于多个最优解,究竟哪个是我们要找的呢?与此同时,如何构造一个多目标优化问题的最优解集?如何评价由不同的MOEA所构造的最优解集的优劣?等等。

为了回答这些问题,我们首先给出有关多目标优化问题的一般描述。

给定决策向量 $X=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$,它满足下列约束:

$$g_i(X)\geqslant 0(i=1,2,\cdots,k) \tag{1.1}$$

$$h_i(X)=0(i=1,2,\cdots,l) \tag{1.2}$$

设有 r 个优化目标,且这 r 个优化目标是相互冲突的,优化目标可表示为

$$\boldsymbol{f}(X)=(f_1(X),f_2(X),\cdots,f_r(X)) \tag{1.3}$$

寻求 $X^*=(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$,使 $\boldsymbol{f}(X^*)$ 在满足约束(1.1)和(1.2)的同时达到最优。

在多目标优化中，对于不同的子目标函数可能有不同的优化目标，有的可能是最大化目标函数，也有的可能是最小化目标函数，归纳起来，不外乎下列 3 种可能的情况：

- 最小化所有的子目标函数；
- 最大化所有的子目标函数；
- 最小化部分子目标函数，而最大化其它子目标函数。

为了处理方便，一般来说，可以把各子目标优化函数统一转换为最小化或最大化。如将最大化转换为最小化，可以简单地用下列形式表示：

$$\max f_i(X) = -\min(-f_i(X)) \tag{1.4}$$

类似地，不等式约束

$$g_i(X) \leqslant 0 (i = 1,2,\cdots,k) \tag{1.5}$$

可以按下列方式方便地转换为式(1.1)的形式：

$$-g_i(X) \geqslant 0 (i = 1,2,\cdots,k) \tag{1.6}$$

这样一来，任何不同表达形式的多目标优化问题都可以转换成统一的表达形式。本书如没有特别说明，统一为求总目标的最小化，即

$$\min \boldsymbol{f}(X) = (f_1(X), f_2(X), \cdots, f_r(X)) \tag{1.7}$$

接下来讨论多目标优化问题最优解的有关概念。

1.2 基于 Pareto 的多目标最优解集

在多目标优化中，由于是对多个子目标的同时优化，而这些被同时优化的子目标之间往往又是相互冲突的，照顾了一个子目标的“利益”，同时必然导致其它至少一个子目标的“利益”受到损失。由此可以想象，针对一个多目标优化问题，没有绝对的或者说是唯一的最好解。

1.2.1 Pareto 最优解

多目标优化中的最优解通常称为 Pareto 最优解，它是由 Vilfredo Pareto 在 1896 年提出的，因此被命名为 Pareto 最优解(Pareto optimal solution)。一般地，可以描述如下。

定义 1.1 给定一个多目标优化问题 $\boldsymbol{f}(X)$，它的最优解 X^* 定义为

$$\boldsymbol{f}(X^*) = \underset{X \in \Omega}{\mathrm{opt}} \boldsymbol{f}(X) \tag{1.8}$$

其中，

$$\boldsymbol{f}: \Omega \to \mathbb{R}^r \tag{1.9}$$

这里 Ω 为满足式(1.1)和式(1.2)的可行解集，即

$$\Omega = \{X \in \mathbb{R}^n \mid g_i(X) \geqslant 0, h_j(X) = 0; (i = 1,2,\cdots,k; j = 1,2,\cdots,l)\}$$

称 Ω 为决策变量空间(简称决策空间),向量函数 $f(X)$ 将 $\Omega\subseteq\mathbb{R}^n$ 映射到集合 $\Pi\subseteq\mathbb{R}^r$,Π 是目标函数空间(简称目标空间)。

定义 1.1 是从理论上对 Pareto 最优解的一个最一般的描述,在多目标进化算法的有关文献中,还有多种更具体的定义,这些定义一方面有助于更好地理解 Pareto 最优解的含义,同时对设计算法具有重要指导意义。比较有代表性的定义有下列几个。

定义 1.2 给定一个多目标优化问题 $\min f(X)$,称 $X^*\in\Omega$ 是最优解(即 Pareto optimal solution),若 $\forall X\in\Omega$,满足下列条件:

或者

$$\bigwedge_{i\in I}(f_i(X)=f_i(X^*)) \tag{1.10}$$

或者至少存在一个 $j\in I$,$I=\{1,2,\cdots,r\}$,使

$$f_j(X)>f_j(X^*) \tag{1.11}$$

其中 Ω 是满足式(1.1)和式(1.2)的可行解集,其意义同定义 1.1。

定义 1.3 给定一个多目标优化问题 $\min f(X)$,若 $X^*\in\Omega$,且不存在其它的 $\overline{X}^*\in\Omega$ 使得 $f_j(X^*)\geqslant f_i(\overline{X}^*)(j=1,2,\cdots,r)$ 成立,且其中至少一个是严格不等式,则称 X^* 是 $\min f(X)$ 的 Pareto 最优解。其中 Ω 是满足式(1.1)和式(1.2)的可行解集,其意义同定义 1.1。

定义 1.4 给定一个多目标优化问题 $\min f(X)$,设 $X_1,X_2\in\Omega$。

如果 $f(X_1)\leqslant f(X_2)$,则称 X_1 比 X_2 优越;

如果 $f(X_1)<f(X_2)$,则称 X_1 比 X_2 更优越。

定义 $X^*\in\Omega$:

若比 X^* 更优越的 $X\in\Omega$ 不存在,则称 X^* 为弱 Pareto 最优解;

若 X^* 比任何 $X\in\Omega$ 都优越,则称 X^* 为完全 Pareto 最优解;

若比 X^* 优越的 $X\in\Omega$ 不存在,则称 X^* 为强 Pareto 最优解。

其中 Ω 是满足式(1.1)和式(1.2)的可行解集,其意义同定义 1.1。

由以上定义可以看出,满足 Pareto 最优解条件的往往不止一个,而是一个最优解集(Pareto optimal set),这里用 $\{X^*\}$ 表示。$\{X^*\}$ 定义如下。

定义 1.5 给定一个多目标优化问题 $\min f(X)$,它的最优解集定义为

$$P^*=\{X^*\}=\{X\in\Omega\mid\neg\ \exists X'\in\Omega,f_j(X')\leqslant f_j(X),(j=1,2,\cdots,r)\}$$

多目标进化算法的优化过程是,针对每一代进化群体,寻找出其当前最优个体(即当前最优解),称一个进化群体的当前最优解为非支配解(non-dominated solution),或称为非劣解(non-inferior solution);所有非支配解的集合称为当前进化群体的非支配集(non-dominated solutions,NDS),并使非支配集不断逼近真正的最优解集,最终达到最优,即使 $NDSet^*\subseteq\{X^*\}$,$NDSet^*$ 为算法运行结束时所求得的非支配集。

1.2.2 Pareto 最优边界

为了更好地理解 Pareto 最优解，下面讨论它在目标函数空间中的表现形式。简单地说，一个多目标优化问题的 Pareto 最优解集在其目标函数空间中的表现形式就是它的 Pareto 最优边界(Pareto front)。Pareto 最优边界 PF^* 或 PF_{true}(true Pareto front)定义如下。

定义 1.6 给定一个多目标优化问题 $\min \boldsymbol{f}(X)$和它的最优解集$\{X^*\}$，它的 Pareto 最优边界定义为

$$PF^* = \{\boldsymbol{f}(X) = (f_1(X), f_2(X), \cdots, f_r(X)) \mid X \in \{X^*\}\}$$

注意 Pareto 最优解集和 Pareto 最优边界之间的联系与区别。大家知道，多目标优化是从决策空间 $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ 到目标空间$\Pi \subseteq \mathbb{R}^r$ 的一个映射。Pareto 最优解集 P^* 是决策向量空间的一个子集，即有 $P^* \subseteq \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$；而 Pareto 最优边界则是目标函数空间的一个子集，即有 $PF^* \subseteq \Pi \subseteq \mathbb{R}^r$。

一个多目标问题的最优解 $X^* \in P^*$，或 $Y^* = \min \boldsymbol{f}(X^*) \in PF^*$，前者属于决策向量空间，后者属于目标函数空间，要注意区分。如图 1.1 所示，最优边界上的点(或个体)A、B、C、D、E、F 是 Pareto 最优解，它们属于目标空间。

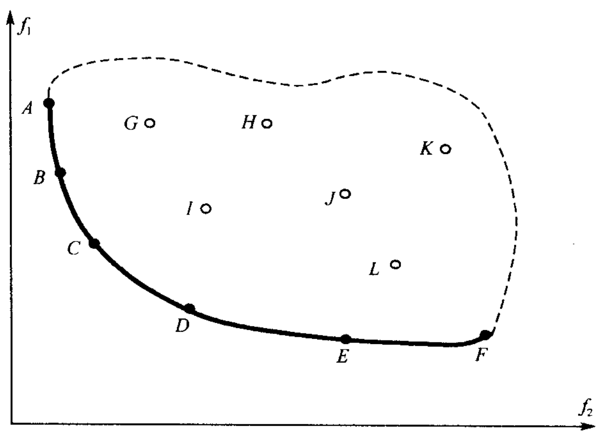

图 1.1　两个目标的最优边界

在目标空间中，最优解是目标函数的切点，它总是落在搜索区域的边界线(面)上。如图 1.1 所示，粗线段表示两个优化目标的最优边界。3 个优化目标的最优边界构成一个曲面，3 个以上的最优边界则构成超曲面。在图 1.1 中，实心点 A、B、C、D、E、F 均处在最优边界上，它们都是最优解(Pareto points)，是非支配的

(non-dominated);空心点 G、H、I、J、K、L 落在搜索区域内,但不在最优边界上,不是最优解,是被支配的(dominated),它们直接或间接受最优边界上的最优解支配。读者可用定义 1.2 和定义 1.3 来验证图 1.1 中粗线段上的点是否均为最优解。有关支配和非支配的概念可参见本书 1.3 节。

多目标遗传算法在优化过程中,初始时随机产生一个进化群体 Pop_0,然后按照某种策略构造 Pop_0 的非支配集 $NDSet_0$,此时的 $NDSet_0$ 可能距离 $\{X^*\}$ 比较远。按照某种方法或策略产生一些个体,这些个体可以是被当前非支配集 $NDSet_0$ 中的个体所支配的,也可以是随机新产生的,连同 $NDSet_0$ 中的个体一起构成新的进化群体 Pop_1,对新进化群体 Pop_1 执行进化操作后,再构造新的非支配集 $NDSet_1$。由于 $NDSet_1$ 是在 $NDSet_0$ 的基础上产生的,因此 $NDSet_1$ 比 $NDSet_0$ 更接近 $\{X^*\}$。如此继续下去,从理论上说,必能构造出 $NDSet_i$,使得当 $i \to \infty$ 时,$NDSet_i$ 为 Pareto 最优解集,即 $\lim_{i \to \infty} NDSet_i = NDSet^*$,使 $NDSet^* \subseteq \{X^*\}$。

1.2.3 凸空间和凹空间

在讨论与评价一个 MOEA 的搜索性能的时候,常涉及到凸空间(convexity)和凹空间(concavity 或 non-convexity)的概念。如某些 MOEA 在搜索空间呈凹状时,难以找到最优解。凸空间和凹空间也叫凸集和凹集。

定义 1.7 称 S 是一个凸集,若 $X_1, X_2 \in S$,则 $X \in S$,其中 $X = \theta X_1 + (1-\theta) X_2$,$0 \leqslant \theta \leqslant 1$。

也就是说,如果一个集合中任意两点的连线上的点仍在该集合中,则该集合为凸集,否则为凹集。图 1.2 和图 1.3 所示分别为凸集和凹集。

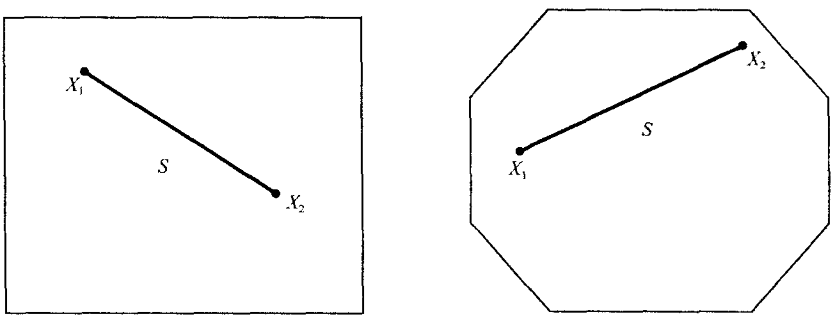

图 1.2 两个凸集示例

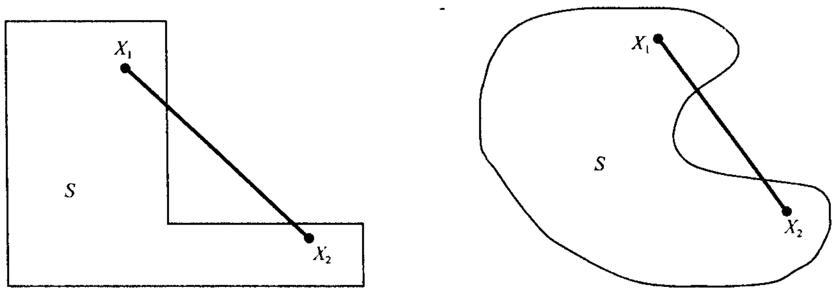

图 1.3　两个凹集示例

1.3　多目标进化个体之间的支配关系

对两个量之间的大小关系进行比较时，在单目标情况下，如常量 5 和 8，显然有 5 比 8 小或 8 比 5 大两种情况；对两个变量（个体）x 和 y 进行比较时，可能存在三种关系：x 大于 y、x 等于 y、x 小于 y。在多目标情况下，由于每个个体有多个属性，比较两个个体之间的关系不能使用简单的大小关系。如两个目标的个体(2，6)和(3，5)，在第一个目标上有 2 小于 3，而在第二个目标上又有 6 大于 5，那么在这种情况下个体(2，6)和(3，5)之间的关系是什么呢？另一种情况，如个体(2，6)和(3，8)，它们之间的关系又是什么呢？当目标数大于 2 时，又如何确定不同个体之间的关系呢？

为此，接下来就讨论多目标个体之间非常重要的一种关系，叫做支配关系。

定义 1.8（个体之间的支配关系）　设 p 和 q 是进化群体 Pop 中的任意两个不同的个体，称 p 支配(dominate)q，则必须满足下列两个条件：

① 对所有的子目标，p 不比 q 差，即 $f_k(p) \leqslant f_k(q)$，$(k=1,2,\cdots,r)$。

② 至少存在一个子目标，使 p 比 q 好。即 $\exists l \in \{1,2,\cdots,r\}$，使 $f_l(p) < f_l(q)$。

其中 r 为子目标的数量。

此时称 p 为非支配的，q 为被支配的，表示为 $p \succ q$，其中“$\succ$”是支配关系(dominate relation)。

值得说明的是，这里所定义的支配关系是“小”个体支配“大”个体，也可以按照完全相反的方式来定义支配关系，这取决于所求解的问题。此外，本书在表述上将“p 支配 q”表示为“$p \succ q$”，而在有些文献上则刚好相反，将“p 支配 q”表示为“$p \prec q$”。

定义 1.8 所定义的支配关系是针对决策空间的，类似地，可以在目标空间中定义支配关系，如定义 1.9 所示。

定义 1.9(目标空间中的支配关系)　设 $U=(u_1,u_2,\cdots,u_r)$ 和 $V=(v_1,v_2,\cdots,v_r)$ 是目标空间中的两个向量，称 U 支配 V(表示为 $U \succ V$)，当且仅当 $u_k \leqslant v_k(k=1,2,\cdots,r)$ 且 $\exists l \in \{1,2,\cdots,r\}$，使 $u_l < v_l$。

根据定义 1.9，可以得出结论：(2, 6)支配(3, 8)，(2, 6)和(3, 5)之间互相不支配。

值得说明的是，决策空间中的支配关系与目标空间中的支配关系是一致的，这一点由定义 1.8 可以看出，因为决策空间中的支配关系实质上是由目标空间中的支配关系决定的。此外，个体之间的支配关系还有程度上的差异，参见定义 1.10 和定义 1.11。

定义 1.10(弱非支配：weak nondominance)　若不存在 $X \in \Omega$，使 $f_k(X) < f_k(X^*)(k=1,2,\cdots,r)$ 成立，则称 $X^* \in \Omega$ 为弱非支配解(a weakly nondominated solution)。

定义 1.11(强非支配：strong nondominance)　若不存在 $X \in \Omega$，使 $f_k(X) \leqslant f_k(X^*)(k=1,2,\cdots,r)$ 成立，且至少存在一个 $i \in \{1,2,\cdots,r\}$，使 $f_i(X) < f_i(X^*)$，则称 $X^* \in \Omega$ 为强非支配解(a strongly nondominated solution)。

由以上定义可以看出，如果 X^* 是强非支配的，则 X^* 也是弱非支配的，反之则不然。对于两个目标的情况，如图 1.4 所示，在目标空间中强非支配解均落在粗曲线上，弱非支配解则落在细直线上。

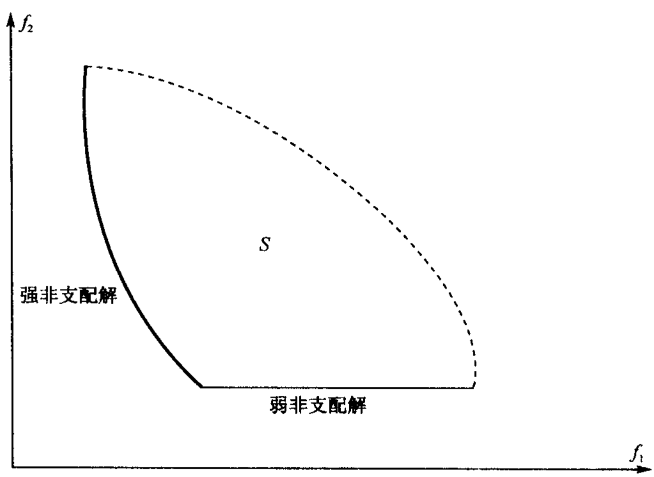

图 1.4　强非支配解和弱非支配解示例

为了进一步说明强非支配解和弱非支配解，下面来看一个例子。设一个三目标优化问题为 $\min \boldsymbol{f}(X)=(f_1(X),f_2(X),f_3(X))$，有 3 个可行解 X_1、X_2 和 X_3，它们对应的目标向量值为：$\boldsymbol{f}(X_1)=(3,8,6)$、$\boldsymbol{f}(X_2)=(5,8,12)$ 和 $\boldsymbol{f}(X_3)=(7,9,$