

## 一种基于边缘分布估计的多目标优化算法

李斌 钟润添 肖金超 庄镇泉

(中国科学技术大学自然计算与应用实验室 合肥 230027)

**摘要:** 该文提出了一种基于边缘分布估计的多目标优化算法,通过在每一进化代中估计较优个体的边缘概率分布来引导算法对 Pareto 最优解的搜索。通过与基于拥挤机制的多样性保持技术、基于非支配排序的联赛选择、精英保留等技术的有机结合,使得算法在具有良好收敛性能的同时,具有很好的维持群体多样性的能力。通过一组典型测试函数实验对该算法的性能进行了分析,并与 NSGA-II、SPEA、PAES 等知名多目标优化算法进行了比较,结果表明该文算法收敛速度较快,且得到的非支配解集分布均匀,适合于复杂多目标优化问题的求解。

**关键词:** 多目标优化; 边缘分布估计; 非支配解; 多样性

中图分类号: TP18

文献标识码: A

文章编号: 1009-5896(2007)11-2683-05

## A Multi-Objective Optimization Algorithm Based on Marginal Distribution Estimation

Li Bin Zhong Run-tian Xiao Jin-Chao Zhuang Zhen-quan

(Lab. of Nature Inspired Computation and Application,

University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

**Abstract:** A new multi-objective optimization algorithm based on marginal distribution estimation is proposed, in which marginal probability distribution of the selected better individuals is estimated and is used to guide the search of Pareto optimal solutions of the multi-objective optimization problems. Combined with non-dominant ranking, diversity preserving technique based on crowding mechanism, tournament selection based on non-dominant ranking, and elitist strategy, the algorithm achieves a good balance between convergence and diversity. A set of typical test functions are used to evaluate the performance of the proposed algorithm, and comparison is made between some well-known multi-objective optimization algorithms, i.e. NSGA-II, SPEA, PAES. The experimental results show that the proposed algorithm can achieve a good balance between convergence and diversity, and is suited to complex multi-objective problems.

**Key words:** Multi-objective optimization; Marginal distribution estimation; Non-dominated solution; Diversity

### 1 引言

在科学与工程实践中,很多决策与设计问题都是多目标优化问题,并且各个目标之间可能是相互竞争的,从而无法实现各目标同时达到最优。多目标优化问题的一般描述为

$$\begin{aligned} \min f(x) &= \{f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x)\} \\ \text{s.t.} &\begin{cases} g_1(x) \leq 0 \\ \vdots \\ g_m(x) \leq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (1)$$

其中  $x \in R^p$  为问题的  $p$  维控制向量;  $f(i=1,2,\dots,n)$  为问题的第  $i$  个目标函数;  $g_j(j=1,2,\dots,m)$  为问题的第  $j$  个约束条件。

对于多目标优化问题,定义解  $x_1$  支配(Dominate)  $x_2$ , 当且仅当以下两个条件都成立: (1)  $f_j(x_1) \leq f_j(x_2), j=1,2,\dots,n$ , 即  $x_1$  的各个目标都不比  $x_2$  差。(2)  $\exists i \in \{1,2,\dots,n\}$ , s.t.  $f_i(x_1)$

$< f_i(x_2)$ , 即至少存在一个目标函数  $f_i(x)$ , 使得  $x_1$  的目标值比  $x_2$  的目标值好。

在一个解的集合  $P$  中,定义非支配解集(Non-dominated Set)  $P'$  为那些不被  $P$  中任何一个解所支配的解的集合。整个可行解搜索空间  $R$  的非支配解集就是 Pareto 最优解集(Pareto-Optimal Set)。

对于多目标优化问题  $f(x)$  和 Pareto 最优解集  $P'$ , Pareto 前沿  $f^*(P)$  定义为

$$f^*(P) = \{u = f(x) \mid x \in P'\} \quad (2)$$

多目标优化算法的设计目标就是寻找尽可能逼近 Pareto 前沿、且均匀分布的非支配解集。

近年来,进化计算领域相继提出了一些多目标优化进化算法(MOEAs),如 Fonseca 和 Fleming 的多目标遗传算法(MOGA)<sup>[1]</sup>、Horn 和 Nafpliotis 的小组决胜遗传算法(NPGA)<sup>[2]</sup>、Srinivas 和 Deb 的非支配排序遗传算法(NSGA)<sup>[3]</sup>、Zitzler、Deb 和 Thiele 的增强 Pareto 域进化算法(SPEA)<sup>[4]</sup>。后来 Deb 和 Pratap 等通过引进计算复杂度为

2006-05-15 收到, 2007-01-30 改回

国家自然科学基金(60401015, 60572012)和安徽省自然科学基金(050420201)资助课题

$O(MN^2)$ 的快速非支配性排序和新的多样性保持方法,提出了第二代NSGA简称NSGA-II<sup>[5]</sup>。

在多目标进化算法中,新个体的产生机制无疑对算法性能具有重要的影响。目前的MOEAs仍然采用传统的交叉和变异操作产生新个体。研究表明,基于随机化技术的交叉和变异在产生新的优良个体的同时,也会破坏一些已获得的好模式<sup>[6]</sup>,进而影响算法向Pareto最优前沿的收敛。

分布估计算法(Estimation of Distribution Algorithms)是一类新的、基于群体搜索的进化算法,它利用概率模型对问题解空间中可能出现最优解的区域进行建模,并利用该模型引导算法进行搜索<sup>[7]</sup>。与传统进化算法(如遗传算法)不同,分布估计算法EDAs用以下两个步骤来代替传统的产生新个体的方法(如交叉和变异操作)<sup>[6]</sup>:(1)利用统计学习方法对较优解的概率分布进行估计;(2)根据估计得到的概率分布模型对解空间重新采样,得到一组新解。分布估计算法已被用于组合优化<sup>[8]</sup>和连续优化<sup>[9]</sup>两类问题的求解,是一类新的优化搜索算法。

本文将EDAs应用于多目标优化,提出了一种基于边缘分布估计(Marginal Distribution Estimation)的多目标优化算法,采用文献[4]中提出的5个典型测试函数对该算法的性能进行考察,并与SPEA, NSGA-II和PAES这3种优秀的多目标优化进化算法进行比较。实验结果表明,本文算法可以在保持群体的多样性的基础上,快速逼近Pareto前沿,且得到的非支配解集较均匀地分布于Pareto前沿。

本文后续内容安排如下:第2节介绍基于边缘概率分布估计的多目标优化算法;第3节介绍多目标优化算法性能评价方法;第4节为实验结果及分析;第5节总结全文。

## 2 算法描述

### 2.1 单变量边缘分布算法(UMDA)

UMDA<sup>[10]</sup>由Mühlenbein和Paaß于1996年提出,它利用概率向量对解空间中优良解的分布区域进行建模,然后利用该模型引导算法搜索全局最优解。UMDA的算法流程如下:

步骤1 初始化每个变量 $x_i$ 的取值概率 $p_{1,i}(x_i)=0.5$ ,  $t=1$ 为进化代数;

步骤2 按照概率分布 $P_{t+1}(X) = \prod_i^n p_{t,i}(x_i)$ 产生 $N$ 个新个体;

步骤3 计算 $N$ 个新个体的适应度,根据适应度选择 $M \leq N$ 个比较好的个体,计算所选择个体的边缘概率 $r_{t,i}(x_i)$ ;

步骤4 根据公式 $p_{t+1,i}(x_i) = p_{t,i}(x_i) + \lambda(r_{t,i}(x_i) - p_{t,i}(x_i))$ 更新概率向量 $\mathbf{P}$ ,  $t=t+1$ 。 $\lambda=[0,1]$ 是控制参数,控制当前代 $r_{t,i}(x_i)$ 对概率模型的影响,当 $\lambda=1$ 时,  $p_{t+1,i}(x_i) = r_{t,i}(x_i)$ ,下一代个体的采样概率完全由当前代较优个体的边缘概率所决定;而当 $\lambda=0$ 时,  $p_{t+1,i}(x_i) = p_{t,i}(x_i)$ ,当前代较优个体的边缘概率对概率模型没有任何影响;当 $\lambda$ 取值介于0, 1之间时,

当前代较优个体的边缘概率对概率模型有不同程度的影响。

步骤5 如果不满足终止条件,返回步骤2。

### 2.2 多目标边缘分布估计算法(Multi-Objective Marginal Distribution Algorithm MOMDA)

本文将UMDA应用于多目标优化,通过与基于拥挤机制的多样性保持技术<sup>[5]</sup>、基于非支配排序的联赛选择、精英保留等技术的有机结合,使得算法在具有良好收敛性能的同时,具有很好的维持群体多样性的能力。

MOMDA算法的流程如下:

步骤1 初始化,每个变量 $x_i$ 取值1的概率 $p_{1,i}(x_i) = 0.5$ ,  $t=1$ ;

步骤2 根据分布 $P_{t+1}(X) = \prod_i^n p_{t,i}(x_i)$ 随机产生 $N$ 个新个体( $N$ 为群体规模),用10位二进制数编码一个实数变量,30维变量对应的个体长度为300;

步骤3 将上一代得到非支配解与 $N$ 个新个体合并为新的群体,计算个体的目标函数值,按照非支配排序方法<sup>[5]</sup>对个体进行排序,得到每个个体的非支配解等级;然后计算每个个体的拥挤距离<sup>[5]</sup>;

步骤4 根据个体的非支配解等级和拥挤距离,采用联赛选择方式,选择出 $M$ 个个体( $M$ 小于或等于 $N$ );

步骤5 对选择出的 $M$ 个个体,统计每个二进制变量 $x_i$ 为1的边缘概率 $r_{t,i}(x_i)$ ;

步骤6 根据公式 $p_{t+1,i}(x_i) = p_{t,i}(x_i) + \lambda(r_{t,i}(x_i) - p_{t,i}(x_i))$ 更新概率向量 $\mathbf{P}$ ,  $\lambda$ 为控制参数,  $t=t+1$ ;

步骤7 如果满足终止条件,输出非支配解,否则返回步骤2。

## 3 算法性能评价的方法

多目标优化算法有两个设计目标:收敛到Pareto前沿,保持非支配解在Pareto前沿均匀分布。因此,对多目标优化算法的评价也就围绕这两个目标进行,本文采用文献[5]提出的收敛度和不均匀度两个指标来评价算法的性能。

收敛度 $\gamma$ 的计算公式如下:

$$\gamma = \frac{1}{|H^t|} \sum \min \{ \|d^t - \bar{d}\| \}, \quad \bar{d} \in H \quad (3)$$

其中 $H^t$ 表示算法所求到解集,  $d^t$ 为 $H^t$ 中的解;  $H$ 为理想Pareto解集,  $\bar{d}$ 为 $H$ 中分布均匀的一组解。 $\gamma$ 值越小说明算法的收敛程度越好。

不均匀度 $\Delta$ 的计算公式如下:

$$\Delta = \frac{d_f + d_i + \sum_{i=1}^{N-1} |d_i - \bar{d}|}{d_f + d_i + (N-1)\bar{d}} \quad (4)$$

对算法所求得的最优解在目标空间中按由小到大的顺序排列,计算相邻两个解之间的欧氏距离 $d_i$ ,再计算这些距离的平均距离 $\bar{d}$ 和所求得的解的边界点离真实Pareto最优域最远端点的距离 $d_f, d_i$ ,然后按式(4)计算不均匀度 $\Delta$ 。

4 实验结果与分析

为了考查本文提出算法的性能，并与其他多目标优化算法进行比较，本文选择了文献[4]中 5 个高维测试函数组进行实验。函数定义和参数设置如下：

函数 ZDT1

$$\left. \begin{aligned} f_1(x) &= x_1 \\ g(x_2, \dots, x_m) &= 1 + 9 \sum_{i=2}^m x_i / (m-1) \\ f_2(f_1, g) &= g(1 - \sqrt{f_1/g}) \\ m &= 30, \quad x_i \in [0, 1] \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

函数 ZDT2

$$\left. \begin{aligned} f_1(x) &= x_1 \\ g(x_2, \dots, x_m) &= 1 + 9 \sum_{i=2}^m x_i / (m-1) \\ f_2(f_1, g) &= g(1 - (f_1/g)^2) \\ m &= 30, \quad x_i \in [0, 1] \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

函数 ZDT3

$$\left. \begin{aligned} f_1(x) &= x_1 \\ g(x_2, \dots, x_m) &= 1 + 9 \sum_{i=2}^m x_i / (m-1) \\ f_2(f_1, g) &= g(1 - \sqrt{f_1/g} - (f_1/g) \sin(10\pi f_1)) \\ m &= 30, \quad x_i \in [0, 1] \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

函数 ZDT4

$$\left. \begin{aligned} f_1(x_1) &= x_1 \\ g(x_2, \dots, x_m) &= 1 + 10(m-1) + \sum_{i=2}^m (x_i^2 - 10 \cos(4\pi x_i)) \\ f_2(f_1, g) &= g(1 - \sqrt{f_1/g}) \\ m &= 10, \quad x_1 \in [0, 1], \quad x_2 \dots x_m \in [-5, 5] \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

函数 ZDT6

$$\left. \begin{aligned} f_1(x_1) &= 1 - \exp(-4x_1) \sin^6(6\pi x_1) \\ g(x_2, \dots, x_m) &= 1 + 9 \left( \left( \sum_{i=2}^m x_i \right) (m-1) \right)^{0.25} \\ f_2(f_1, g) &= g(1 - (f_1/g)^2) \\ m &= 10, \quad x_i \in [0, 1] \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

运用 MOMDA 求解这 5 个函数，采用不同规模和不同进化代数，每组实验每个函数都运行 30 次，得到的收敛度和不均匀度的均值和方差如表 1，表 2 和表 3 所示。

表 1 群体规模 100，进化代数 100 的结果

性能指标	ZDT1	ZDT2	ZDT3	ZDT4	ZDT6
收敛度 $\gamma$ 的均值和方差	0.0253	0.1522	0.0437	16.0339	1.2722
不均匀度 $\Delta$ 的均值和方差	0.0090	0.0526	0.0112	4.7745	0.6025
收敛度 $\gamma$ 的均值和方差	0.3407	0.9044	0.5710	0.6780	0.4983
不均匀度 $\Delta$ 的均值和方差	0.0271	0.2829	0.0653	0.2358	0.0693

表 2 群体规模 100，进化代数 150 的结果

性能指标	ZDT1	ZDT2	ZDT3	ZDT4	ZDT6
收敛度 $\gamma$ 的均值和方差	0.0192	0.1224	0.0353	15.5538	0.7919
不均匀度 $\Delta$ 的均值和方差	0.0062	0.0813	0.0121	5.3645	0.5989
收敛度 $\gamma$ 的均值和方差	0.3935	0.6792	0.3766	0.6406	0.5393
不均匀度 $\Delta$ 的均值和方差	0.0983	0.3137	0.0588	0.2714	0.1339

表 3 群体规模 200，进化代数 100 的结果

性能指标	ZDT1	ZDT2	ZDT3	ZDT4	ZDT6
收敛度 $\gamma$ 的均值和方差	0.0077	0.0363	0.0192	12.4190	0.1294
不均匀度 $\Delta$ 的均值和方差	0.0014	0.0104	0.0021	3.7146	0.3234
收敛度 $\gamma$ 的均值和方差	0.3323	0.5526	0.5667	0.6284	0.8930
不均匀度 $\Delta$ 的均值和方差	0.0169	0.1154	0.0402	0.2102	0.2099

每个函数在每组实验中最好的一次运行结果的非支配解在目标空间分布如图 1 所示。

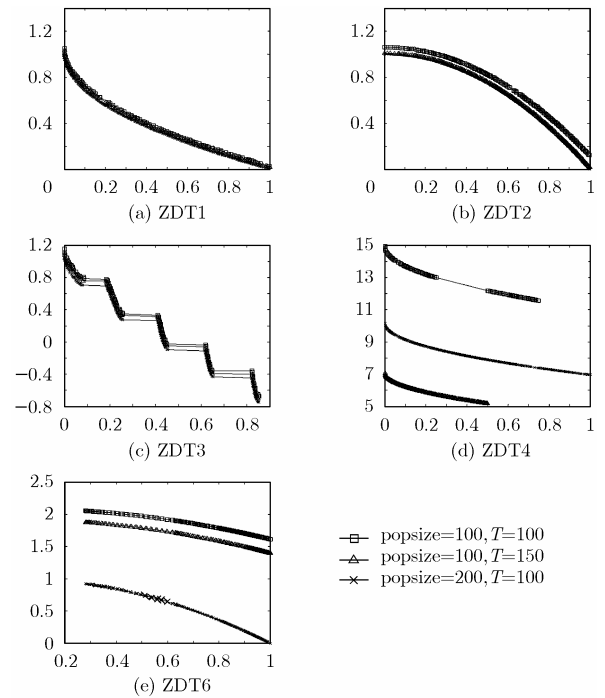


图 1 采用不同群体规模和进化代数时，MOMDA 搜索到的非支配解在目标空间的分布

从表 1~表 3 和图 1 可以看出，增加群体规模或者增加进化代数，对得到的非支配解的收敛度有明显的改善，对 ZDT1, ZDT2, ZDT3, ZDT6 得到的非支配解已经非常接近这 4 个函数的真实 Pareto 前沿；而对于 ZDT4，由于这个函数的 Pareto 域分布非常复杂，有许多局部的 Pareto 域，从表中可以看出增加群体规模，收敛程度虽然有所改善但不理想，没有收敛到真实的 Pareto 最优域。而从实验结果观察，增加群体规模或者进化代数，对算法非支配解的不均匀度的

影响不明显, 这表明, 群体规模和进化代数不是影响算法非支配解不均匀度的主要因素。

本文将 MOMDA 在群体规模为 200、进化代数为 100 的运行结果, 与文献[5]中 NSGA-II, SPEA 和 PAES(参数设置如表 4 所示)得到的实验数据进行比较, 如表 5 和表 6 所示。

表 4 几种算法的参数设置

算法	群体规模	运行代数	适应度评估次数
NSGA-II	100	250	25000
SPEA	100	250	25000
PAES	100	250	25000
MOMDA	200	100	20000

表 5 各种算法的收敛程度的均值  $\bar{\gamma}$  和方差  $\sigma_{\gamma}^2$

算法	ZDT1	ZDT2	ZDT3	ZDT4	ZDT6
NSGA-II	0.033482	0.072391	0.114500	0.513053	0.296564
Real-coded	0.004750	0.031689	0.007940	0.118460	0.013135
NSGA-II	0.000894	0.000824	0.043411	3.227636	7.806798
Binary-coded	0	0	0.000042	7.30763	0.001667
SPEA	0.001799	0.001339	0.047517	7.340299	0.221138
	0.000001	0	0.000047	6.572516	0.000449
PAES	0.082085	0.126276	0.023872	0.854816	0.085469
	0.008679	0.036877	0.00001	0.527238	0.006664
MOMDA	0.0077	0.0363	0.0192	12.4190	0.1294
	0.0014	0.0104	0.0021	3.7146	0.3234

表 6 各种算法的不均匀程度的均值  $\bar{\Delta}$  和方差  $\sigma_{\Delta}^2$

算法	ZDT1	ZDT2	ZDT3	ZDT4	ZDT6
NSGA-II	0.390307	0.430776	0.738540	0.702612	0.668025
Real-coded	0.001876	0.004721	0.019706	0.064648	0.009923
NSGA-II	0.463292	0.435112	0.575606	0.479475	0.644477
Binary-coded	0.041622	0.024607	0.005078	0.009841	0.035042
SPEA	0.784525	0.755148	0.672938	0.798463	0.849389
	0.004440	0.004521	0.003587	0.014616	0.002713
PAES	1.229794	1.165942	0.789920	0.870458	1.153052
	0.004839	0.007682	0.001653	0.101399	0.003916
MOMDA	0.3323	0.5526	0.5667	0.6284	0.8930
	0.0169	0.1154	0.0402	0.2102	0.2099

由表 5 可见, 除 ZDT4 外, 本文算法在其它 4 个测试问题上均表现出较好的收敛性。对于 ZDT1 和 ZDT2, 算法 NSGA-II(二进制编码)的收敛性能最好, 更接近真实的 Pareto 最优域, 本文算法 MOMDA 稍逊于算法 NSGA-II(二进制编码)和 SPEA; 对于 ZDT3, MOMDA 的收敛性能最好; 对 ZDT4, 算法 NSGA-II(实数编码)和 PAES 性能比较好; 对 ZDT6, 本文算法稍逊于 PAES。

而从表 6 可见, 对于 ZDT1 和 ZDT3, 本文算法 MOMDA

得到的结果相对较好, 非支配解分布较均匀; 对于 ZDT4, 算法 NSGA-II(二进制编码)的结果最好; 对于 ZDT6 来说, 由于这个函数在目标空间中真实的非支配解域受正弦函数的影响, 本身就分布不均匀, 因此本文算法虽然得到的结果非常接近真实的 Pareto 最优域, 但  $\Delta$  的均值却较高。对函数 ZDT4, 几乎这几种算法得到的结果都不是很理想, 因为 ZDT4 在搜索空间有  $21^9$  个不同的局部 Pareto 最优域, 而只有一个全局 Pareto 最优域, 算法很容易陷入不同的局部 Pareto 最优域。

为了能进一步考察本文算法性能, 本文计算了每一代非支配解的收敛度与不均匀度, 图 2 给出了用本文算法求解 5 个测试问题时, 每代的收敛度与不均匀度的变化情况(30 次独立实验的平均)。由图可见, 对 5 个函数, 算法的收敛度都是单调下降的, 除 ZDT4 外, 都较好地逼近了真实的 Pareto 前沿, 表现出良好的收敛性能。对 ZDT1, ZDT2, ZDT3, 算法的不均匀度呈现较明显的下降趋势, 表明随着进化代数的增大, 算法找到的非支配解的分布趋于均匀。而对 ZDT6,

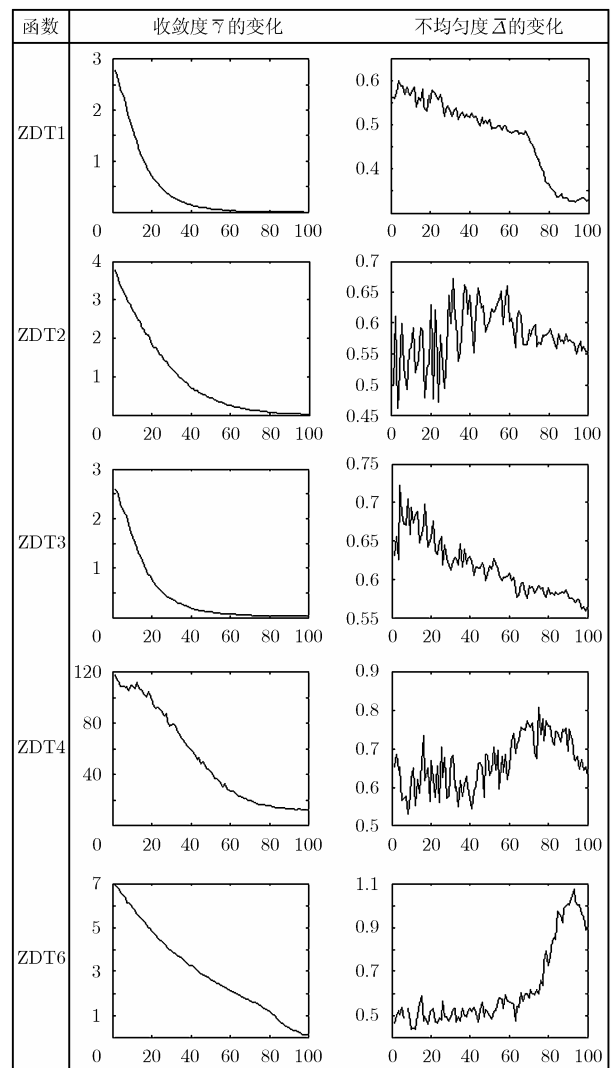


图 2 收敛度  $\bar{\gamma}$  和不均匀度  $\bar{\Delta}$  随代数变化情况

在进化后期不均匀度有一个明显的恶化过程,这表明在进化后期算法虽然逼近了 Pareto 前沿,但是其多样性却下降了。

## 5 结束语

新解的产生机制是决定进化算法性能的一个重要因素。本文将分布估计算法的新解产生机制引入多目标进化算法,提出了一个基于边缘分布估计的多目标优化算法,该算法使用边缘分布模型来对非支配解的分布进行估计,并用它来引导算法对 Pareto 最优前沿的搜索。通过与非支配排序、基于拥挤机制的多样性保持、精英保留等技术的结合,使得算法在具有很强寻优能力的同时,能够有效保持解集的多样性。实验结果表明,与其它多目标进化算法相比,本文算法收敛速度较快,计算复杂度较低,且得到的非支配解集分布均匀,适合于复杂多目标优化问题的求解。

## 参 考 文 献

- [1] Fonseca C M and Fleming P J. Genetic algorithms for multiobjective optimization: formulation , discussion and generation[C]. Proceedings of the 5th International Conference on Genetic Algorithms, San Mateo, California, 1993: 416-423.
  - [2] Horn J and Nafpliotis N. Multiobjective optimization using the niched Pareto genetic algorithm[R]. USA: IlliGAL Report 93005, 1993.
  - [3] Srinivas N and Deb K. Multiobjective optimization using nondominated sorting in genetic algorithms[J]. *Evolutionary Computation*, 1994, 2 (3): 221-248.
  - [4] Zitzler E, Deb K, and Thiele L.. Comparison of multiobjective evolutionary algorithms: Empirical results[J]. *Evolutionary Computation*, 2000, 8 (2):173-195.
  - [5] Deb K, Pratap A, and Agarwal T. A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm: NSGA-II[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2002, 6(2): 182-197.
  - [6] Pelikan M, Goldberg D E, and Lobo F. A survey of optimization by building and using probabilistic models[R]. IlliGAL Tech. Rep. 99018, 1999.
  - [7] Mühlenbein H and Paaß G. From recombination of genes to the estimation of distributions I. Binary parameters[C]. *Parallel Problem Solving from Nature – PPSN IV*, 1996: 178-187.
  - [8] Pelikan M, Goldberg D E, and Cantú-Paz E. BOA: The Bayesian optimization algorithm[C]. In Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO 1999), 13-17 July 1999, Orlando, Florida, USA, 1999, Vol I: 525-532.
  - [9] Larrañaga P, Etxeberria R, Lozano J A, and Peña J M. Optimization by Learning and Simulation of Bayesian and Gaussian Networks[R]. Dept. Comput. Sci. Artific. Intell., Univ. Basque Country, Tech. Rep. EHUKZAA-1K-4/99, 1999.
  - [10] Mühlenbein H, and Paaß G. From recombination of genes to the estimation of distributions I. Binary parameters. In Proc. 5th Parallel Problem Solving from Nature(PPSN V), Amsterdam, The Netherlands, September 27-30, 1998, LNCS 1141: 178.
- 李 斌: 男, 1970 年生, 副教授, 主要研究方向为进化计算、机器学习。  
 钟润添: 男, 1973 年生, 硕士生, 研究方向为进化计算。  
 肖金超: 男, 1984 年生, 本科生, 专业为电子信息科学与技术。  
 庄镇泉: 男, 1938 年生, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为智能信息处理。