

基于 ϵ -支配的昂贵超多目标黑箱问题代理优化算法*

魏玉涛¹, 白富生²

(1. 重庆师范大学 数学科学学院; 2. 重庆国家应用数学中心, 重庆 401331)

摘要:针对求解昂贵超多目标黑箱优化问题的算法进行研究。基于 SOCEMO 算法,将 ϵ -支配用于目标值采样策略,提出 ϵ -SOCEMO 算法。在 42 个超多目标测试问题上对 ϵ -SOCEMO 算法和 SOCEMO 算法进行了数值实验,结果显示 ϵ -SOCEMO 算法在性能评价指标上具有较好的表现。数值实验表明这种改进的目标值采样策略可以提升 SOCEMO 算法在昂贵超多目标黑箱优化问题上的计算效果。

关键词:多目标优化;昂贵黑箱函数;响应面方法;径向基函数

中图分类号:O224

文献标志码:A

文章编号:1672-6693(2023)04-0015-08

在工程和机器学习等领域中昂贵超多目标优化问题(many-objective problems, MaOP)普遍存在,这些问题的目标个数超过 3 个,且进行一次函数评估的代价十分高昂^[1]。一般形式如下:

$$\begin{aligned} \min F(\mathbf{x}) &= (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_k(\mathbf{x}))^T, \\ \text{s. t. } \mathbf{x} &\in \mathcal{D}. \end{aligned} \quad (1)$$

其中: $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_d]^T$ 表示决策向量, $F(\mathbf{x})$ 表示目标向量, $\mathcal{D} = \{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^d : x_j^l \leq x_j \leq x_j^u, j = 1, \dots, d\}$ 为决策空间, x_j^u, x_j^l 分别为 x_j 的上下界。在实际应用中,问题(1)通常没有明确的表达式,这类问题被称为黑箱问题。

本文考虑具有形式(1)的昂贵超多目标黑箱优化问题。由于目标函数的昂贵性,函数评估次数应在有限次数内。代理优化方法是求解昂贵问题的一种有效手段。该方法使用代理模型逼近目标函数,然后通过采样策略获取新的采样点,并迭代更新代理模型^[1]。代理优化方法已经广泛应用于昂贵多目标优化问题。然而多数代理优化算法仅针对 2 或 3 个目标的问题进行设计和测试,并不能高效求解 MaOP^[2]。部分代理优化算法是为昂贵 MaOP 设计的,这些算法基本上是代理模型辅助的进化算法^[3]。

Müller 提出一种昂贵多目标代理优化(surrogate optimization of computationally expensive multi-objective problems, SOCEMO)算法^[4]。该算法使用径向基函数插值模型逼近目标函数,并在迭代过程中通过不同采样策略平衡全局搜索与局部搜索。SOCEMO 算法不包含一组随迭代演变的种群,所以不属于进化算法。文献[4]的实验表明 SOCEMO 算法能够在较少的函数评估次数内求解昂贵多目标优化问题,其中包含目标个数 10、维数 30 的 MaOP。但是 SOCEMO 算法中并没有针对求解 MaOP 的采样策略。

MaOP 不同于一般的多目标优化问题。首先,随着目标个数的增加,一个解集中非支配解个数占所有解的比例接近于 1,传统 Pareto 支配关系难以从此类问题的解集中区分出更好的解。其次,目标个数的增加导致解集在目标空间中的多样性难以保持^[5]。 ϵ -支配是目前算法求解 MaOP 时常用的一种支配关系。与 Pareto 支配不同, ϵ -支配将目标空间划分为多个超立方体,并且不允许一个超立方体内的目标向量均为非支配。在算法迭代过程中,基于 ϵ -非支配解的存档策略可以同时实现收敛性与多样性^[6]。文献[1]利用 ϵ -支配的优势,提出基于 ϵ -改进(improvement)的采样策略。该采样策略根据 ϵ -支配构造的超立方体,通过最大化 ϵ -改进从候选点中选择收敛到 Pareto 前沿和多样性方面表现良好的点。并在 2~8 个目标的标准测试问题上进行了测试。

* 收稿日期:2022-09-27 修回日期:2023-01-05 网络出版时间:2023-06-20T14:02

资助项目:重庆市教育委员会科学技术研究计划重点项目(No. KJZD-K202114801);重庆市技术创新与应用发展专项(No. cstc2021jscx-jbgsX0001);重庆市自然科学基金创新发展联合基金项目(No. 2022NSCQ-LZX0301)

第一作者简介:魏玉涛,男,研究方向为最优化理论与算法,E-mail:2020110510059@stu.cqnu.edu.cn;通信作者:白富生,男,教授,博士,E-mail:fsbai@cqnu.edu.cn

网络出版地址:https://link.cnki.net/urlid/50.1165.N.20230620.1125.007

SOCEMO 通过目标值采样策略实现算法的多样性。目标值采样策略的主要思想是确定一个期望的目标值,然后选取决策向量使得其目标向量接近这一目标值。大致步骤为:1) 构造近似 Pareto 前沿面;2) 确定近似前沿面上的目标值;3) 求解辅助优化问题得到目标值对应的决策向量,并且将该决策向量作为新的采样点。因此,选取目标值的方式对策略的效果至关重要。SOCEMO 算法为了保持解集的多样性,通过最大化与已评估目标向量的距离选取目标值。然而该方法只考虑了解集的多样性。为了提高 SOCEMO 算法在 MaOP 问题上的表现,本文在目标值采样策略的基础上引入 ϵ -改进,提出 ϵ -目标值采样策略。改进后的算法则称为 ϵ -SOCEMO。 ϵ -目标值采样策略将近似前沿面上 ϵ -改进最大化的点作为目标值。目的是使得新采样点的目标向量的 ϵ -改进最大化。

本文在 DTLZ1-7 问题^[7]上与 SOCEMO 算法进行了数值实验对比,目标个数分别为 10、12、14、16、18 和 20,共 42 个测试问题。数值结果表明结合 ϵ -改进的 ϵ -SOCEMO 算法在超多目标问题上具有更好的表现。

1 预备知识

1.1 多目标优化中的一些概念

本文给出如下定义:

Pareto 支配^[1] 设决策空间 \mathbf{R}^n 的子集 \mathcal{D} 为可行域, $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathcal{D}$ 。若对任意的整数 $1 \leq i \leq k$, 有 $f_i(\mathbf{x}_1) \leq f_i(\mathbf{x}_2)$, 且存在 $i \in \{1, \dots, k\}$, 使得 $f_i(\mathbf{x}_1) < f_i(\mathbf{x}_2)$, 则称 \mathbf{x}_1 支配 \mathbf{x}_2 (记作 $\mathbf{x}_1 \prec \mathbf{x}_2$)。在目标空间中称 $F(\mathbf{x}_1)$ 支配 $F(\mathbf{x}_2)$ (记作 $F(\mathbf{x}_1) \prec F(\mathbf{x}_2)$)。

非支配解^[1] 设 \mathcal{D} 为可行域, 解集 \mathcal{S} 为 \mathcal{D} 的一个子集, 取 $\mathbf{x}^* \in \mathcal{S}$ 。若不存在 $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$ 支配 \mathbf{x}^* , 则称 \mathbf{x}^* 为 \mathcal{S} 中的非支配解。所有 \mathbf{x}^* 构成的集合 \mathcal{S}^* 称为 \mathcal{S} 的非支配解集。

Pareto 最优^[1] 设 \mathcal{D} 为可行域, 则称 \mathcal{D} 的非支配解集 \mathcal{N} 为 Pareto 最优集。集合 $\mathcal{P} = \{F(\mathbf{x}^*) | \mathbf{x}^* \in \mathcal{N}\}$ 称为 Pareto 前沿。

ϵ -支配、 ϵ -非支配解集^[6] 给定 $\boldsymbol{\epsilon} = [\epsilon_1, \dots, \epsilon_k]^T, \epsilon_i > 0, \forall 1 \leq i \leq k$ 。设目标空间中的两个目标向量 $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_k]^T$ 和 $\mathbf{z} = [z_1, \dots, z_k]^T$, 则 $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_k]^T \epsilon$ -支配 $\mathbf{z} = [z_1, \dots, z_k]^T$ (记作 $\mathbf{y} \prec_{\epsilon} \mathbf{z}$) 当且仅当满足如下条件之一:

$$a) \lfloor \lfloor y_1/\epsilon_1 \rfloor, \dots, \lfloor y_k/\epsilon_k \rfloor \rfloor^T \prec \lfloor \lfloor z_1/\epsilon_1 \rfloor, \dots, \lfloor z_k/\epsilon_k \rfloor \rfloor^T;$$

$$b) \lfloor \lfloor y_1/\epsilon_1 \rfloor, \dots, \lfloor y_k/\epsilon_k \rfloor \rfloor^T = \lfloor \lfloor z_1/\epsilon_1 \rfloor, \dots, \lfloor z_k/\epsilon_k \rfloor \rfloor^T \text{ 且 } \|[y_1 - \epsilon_1 \lfloor y_1/\epsilon_1 \rfloor, \dots, y_k - \epsilon_k \lfloor y_k/\epsilon_k \rfloor]^T\|_2 < \|[z_1 - \epsilon_1 \lfloor z_1/\epsilon_1 \rfloor, \dots, z_k - \epsilon_k \lfloor z_k/\epsilon_k \rfloor]^T\|_2。$$

其中: $\lfloor \cdot \rfloor$ 表示向下取整函数。在决策空间中, 点 $\mathbf{y}' = [y'_1, \dots, y'_d]^T \epsilon$ -支配 $\mathbf{z}' = [z'_1, \dots, z'_d]^T$ (记作 $\mathbf{y}' \prec_{\epsilon} \mathbf{z}'$) 当且仅当 $F(\mathbf{y}') \prec_{\epsilon} F(\mathbf{z}')$ 。将非支配解的定义中支配的概念替换为 ϵ -支配即可得 ϵ -非支配解集的概念。

ϵ -改进^[1] 给定 $\boldsymbol{\epsilon} = [\epsilon_1, \dots, \epsilon_k]^T, \epsilon_i > 0, \forall 1 \leq i \leq k$ 。设集合 \mathcal{S} 表示已采样点集, \mathcal{S}_{ϵ}^* 表示集合 \mathcal{S} 的 ϵ -非支配解集, \mathcal{F}_{ϵ}^* 表示 \mathcal{S}_{ϵ}^* 对应的函数值。设目标空间中的目标向量 $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_k]^T$ 的 ϵ -改进 $I(\mathbf{y}, \mathcal{F}_{\epsilon}^*)$ 计算方式如下:

$$I(\mathbf{y}, \mathcal{F}_{\epsilon}^*) = \min_{\mathbf{z} \in \mathcal{F}_{\epsilon}^*} \left[\max_{i=1, \dots, k} \left(\left\lfloor \frac{z_i}{\epsilon_i} \right\rfloor - \left\lfloor \frac{y_i}{\epsilon_i} \right\rfloor \right) \right]。 \quad (2)$$

ϵ -支配将目标空间划分为由 $\boldsymbol{\epsilon} = [\epsilon_1, \dots, \epsilon_k]^T$ 定义的超立方体, 如果多个非支配点位于一个超立方体中, 则 ϵ -非支配集只保留其中一个点。假设点 $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$ 的目标向量为 $F(\mathbf{x}) = [f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_k(\mathbf{x})]^T$, 在 $F(\mathbf{x})$ 处添加 l 次大小为 $\boldsymbol{\epsilon} = [\epsilon_1, \dots, \epsilon_k]^T$ 的扰动, 则目标向量变为 $[f_1(\mathbf{x}) + l \times \epsilon_1, f_2(\mathbf{x}) + l \times \epsilon_2, \dots, f_k(\mathbf{x}) + l \times \epsilon_k]^T$ 。 ϵ -改进的直观解释是, 使 $F(\mathbf{x})$ 由当前的 ϵ -非支配变为 ϵ -被支配所需要添加的最小扰动次数 l_{\min} 。详细解释可见文献[1]。

目前算法只能得到一组逼近真实 Pareto 前沿的非支配目标向量, 本文称这些非支配目标向量构成的集合为近似集合。

1.2 径向基函数代理模型

代理优化方法的主要区别在于代理模型类型和采样策略不同。目前已经开发了各种代理模型, 如多项式回

归模型、多元自适应回归样条^[8]、径向基函数(radial basis function, RBF)模型^[9]和 Kriging 模型^[10]。RBF 插值模型在求解计算量大且维数超过 15 维的多目标优化问题时表现得更高效^[11],因此本文以三次 RBF 模型为代理模型。

设 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \in \mathcal{D}$ 且对应的目标向量 $F(\mathbf{x}_1), \dots, F(\mathbf{x}_n)$ 已知。对于每一个目标函数 f_i 寻求如下形式的带多项式尾的径向基插值函数^[12]: $s_i(\mathbf{x}) = \sum_{v=1}^n \lambda_v \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_v\|_2) + p(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathcal{D}$, 其中 $s_i(\mathbf{x})$ 表示径向基函数代理模型, $\|\cdot\|_2$ 表示 \mathbf{R}^d 中的欧几里得范数, $p(\mathbf{x})$ 表示多项式尾部, 系数 $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbf{R}$ 。 $\varphi(\cdot)$ 表示径向基函数, 表 1 给出了几种不同形式的径向基函数。

表 1 径向基函数的一般形式

Tab. 1 Radial basis functions in different forms

径向基函数	$\varphi(r)$	$p(\mathbf{x})$
线性	r	a
三次	r^3	$\mathbf{b}^T \mathbf{x} + a$
薄板样条	$r^2 \ln r$	$\mathbf{b}^T \mathbf{x} + a$
多二次	$\sqrt{r^2 + \gamma^2}, \gamma > 0$	a
高斯	$\exp(-\gamma r^2), \gamma > 0$	$\mathbf{0}$

通过求解如下方程可得代理模型系数 $\boldsymbol{\lambda}$ 和 \mathbf{c} :

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Phi} & \mathbf{P} \\ \mathbf{P}^T & \mathbf{0}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\lambda} \\ \mathbf{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{0}_2 \end{bmatrix}, \quad (3)$$

式中: $\Phi_{lv} = \varphi(\|\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_v\|_2)$, $l, v = 1, \dots, n$, $\mathbf{0}_1$ 表示 $(d+1)$ 维的零方阵, $\mathbf{0}_2$ 表示元素为 0 的 $(d+1)$ 维列向量, 且

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^T & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{x}_n^T & 1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{\lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{bmatrix}, \mathbf{c} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_d \\ a \end{bmatrix}, \mathbf{H} = \begin{bmatrix} f_i(\mathbf{x}_1) \\ f_i(\mathbf{x}_2) \\ \vdots \\ f_i(\mathbf{x}_n) \end{bmatrix},$$

由文献[9], 矩阵 $\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Phi} & \mathbf{P} \\ \mathbf{P}^T & \mathbf{0}_1 \end{bmatrix}$ 是非奇异的当且仅当矩阵 \mathbf{P} 满足列满秩, 此时式(3)中的系数 $\lambda_i, i = 1, \dots, n, b_j, j = 1, \dots, d$ 和 a 可以唯一确定。

1.3 SOCEMO 算法

针对昂贵多目标黑箱优化问题, Müller 提出了一种代理优化算法 SOCEMO^[4]。SOCEMO 是一种迭代搜索算法, 在迭代过程中利用代理模型逼近昂贵的目标函数, 并决定下一次昂贵评估的采样点。文献[4]在 58 个标准问题和 2 个实例问题上将 SOCEMO 与 NSGA-II 进行了对比, 实验结果表明 SOCEMO 能够在较少的函数评估次数内得到收敛性和多样性更好的解。

SOCEMO 算法并不包含一组随时间迭代演变的种群, 而是在局部搜索与全局搜索的组合中利用代理模型的预测选择采样点, 同时探索决策空间中未采样的区域。该算法通过拉丁超立方设计进行初始点采样, 并在每次迭代中依次执行 5 种不同的采样策略, 分别为目标值采样、随机扰动策略、最小采样、随机采样和代理辅助采样。目标值采样策略是一种全局搜索策略, 主要思想是获取一个新的采样点使得预测值能够填补当前近似集中的空白区域, 以保持解集的多样性。目标值采样策略主要步骤如下:

第 1 步, 假设 Pareto 前沿是第 k 个目标关于其余目标的函数, 即映射 $\boldsymbol{\xi} = [f_1, \dots, f_{k-1}]^T \mapsto f_k$ 。利用近似集合 \mathcal{F}^* 构造近似的 Pareto 前沿, 即线性 RBF 模型 $g(\boldsymbol{\xi})$:

$$g(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{v=1}^{|\mathcal{F}^*|} \lambda_v \varphi(\|\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\alpha}^v\|_2) + p(\mathbf{x}). \quad (4)$$

式中: $p(\mathbf{x})$ 为一次多项式, λ_v 为待确定的系数。目标向量 $\mathbf{y}^v = [y_1^v, \dots, y_k^v] \in \mathcal{F}^*$, $\boldsymbol{\alpha}^v = [y_1^v, \dots, y_{k-1}^v]^T$ 。由于 $g(\boldsymbol{\xi})$ 是插值模型, 则对任意 $\mathbf{y} \in \mathcal{F}^*$, 有 $y_k = g([y_1, \dots, y_{k-1}]^T)$ 。

第 2 步, 以近似 Pareto 前沿为约束, 在目标空间中选取目标值, 使得该目标值与近似集合的最小距离最大化:

$$\begin{aligned} \max_{\boldsymbol{\tau}} \quad & \Delta(\boldsymbol{\tau}, \mathcal{J}), \\ \text{s. t.} \quad & \boldsymbol{\tau}_k = g([\boldsymbol{\tau}_1, \dots, \boldsymbol{\tau}_{k-1}]^T), \\ & -\infty < f_i^l \leq \tau_i \leq f_i^u < +\infty, i=1, \dots, k-1. \end{aligned} \quad (5)$$

式中: $\Delta(\boldsymbol{\tau}, \mathcal{J}) = \min_{\boldsymbol{p} \in \mathcal{J}} \|\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{p}\|$, $\mathcal{J} = \mathcal{F}^* \cup t^*$, t^* 表示已选取过的目标值集合。 f_i^l, f_i^u 分别表示 f_i 的最小值与最大值。

第 3 步, 求解如下辅助优化问题得到目标值对应的决策向量:

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & (|s_1(\mathbf{x}) - \tau_1|, |s_2(\mathbf{x}) - \tau_2|, \dots, |s_k(\mathbf{x}) - \tau_k|)^T, \\ \text{s. t.} \quad & \mathbf{x} \in \mathcal{D}. \end{aligned} \quad (6)$$

取采样点 $\mathbf{x}_{\text{new}} = \arg \min_{\mathbf{x} \in P'} \sum_{i=1}^k |s_i(\mathbf{x}) - \tau_i|$, 其中 P' 表示求解问题(6)所得解集。

随机扰动策略是一种局部搜索策略, 该策略在非支配解处增加扰动生成候选点云, 通过对每个点云中的候选点进行打分, 将分值最优的候选点作为新的采样点。最小值采样策略则是为了探索 Pareto 前沿的边缘部分, 以每个目标的代理模型作为目标函数构建多个单目标优化问题, 并将这些单目标优化问题的解作为新的采样点。随机采样策略在决策空间中随机生成多个候选点, 最后通过打分策略选取采样点。

代理辅助采样策略中, 求解如下辅助多目标优化问题(7)得候选解集:

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & \mathbf{s}(\mathbf{x}) = [s_1(\mathbf{x}), s_2(\mathbf{x}), \dots, s_k(\mathbf{x})]^T, \\ \text{s. t.} \quad & \mathbf{x} \in \mathcal{D}. \end{aligned} \quad (7)$$

然后, 从候选解集中随机选取 $2k$ 个作为采样点。

目标值采样策略、最小采样策略和代理辅助采样策略均需要求解若干个优化问题, 本文称这些问题为辅助优化问题。辅助优化问题的目标函数并不昂贵, 因此辅助问题的求解代价可忽略不计。随机扰动策略和随机采样策略通过相同的方式对候选点打分, 分值的计算主要考虑候选点的代理模型函数值和与已采样点的最小距离。代理函数值越小且与已采样点的最小距离越大的候选点分值越优。

2 基于 ε 目标值采样策略的 SOCEMO 算法

2.1 ε -SOCEMO 算法

本节详细介绍基于 SOCEMO 改进的 ε -SOCEMO 算法。下面给出 ε -SOCEMO 的算法步骤:

输入: 1) 初始采样点的个数 n_0 ;

2) 允许进行的最大函数评估次数 n_{max} ;

输出: 算法计算得到的非支配解集以及对应目标函数值

步骤 1, 初始化。

步骤 1.1, 拉丁超立方采样设计生成 n_0 个初始采样点 $\mathcal{S} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{n_0}\}$, 并进行函数评估, 得 $\mathcal{F} = \{F(\mathbf{x}_1), \dots, F(\mathbf{x}_{n_0})\}$ 。初始化 \mathcal{S}^* 为集合 \mathcal{S} 的非支配解集, \mathcal{F}^* 为非支配解的目标向量的集合。

步骤 1.2, $n \leftarrow |\mathcal{S}|$ 。

步骤 2, 依次执行步骤 2.1 至 2.6。

步骤 2.1, 生成或更新 RBF 代理模型 $s(\mathbf{x})$ 。

步骤 2.2, 采样策略: 根据代理模型信息执行采样策略, 获取新的采样点集 \mathcal{S}_{new} 。

步骤 2.3, 昂贵函数评估: 对采样点集 \mathcal{S}_{new} 进行昂贵函数评估, 得 \mathcal{F}_{new} 。

步骤 2.4, 更新: $\mathcal{S} \leftarrow \mathcal{S} \cup \mathcal{S}_{\text{new}}$, $\mathcal{F} \leftarrow \mathcal{F} \cup \mathcal{F}_{\text{new}}$, $n \leftarrow n + |\mathcal{S}_{\text{new}}|$ 。

步骤 2.5, 令 \mathcal{S}^* 为 \mathcal{S} 的非支配解集, \mathcal{F}^* 为非支配解的目标向量的集合。

步骤 2.6,若 $n < n_{\max}$,转至步骤 2;否则,转至步骤 3。

步骤 3,输出 \mathcal{S}^* 和 \mathcal{F}^* ,终止程序。

在数值实验中,初始采样点个数 n_0 和最大评估次数 n_{\max} 分别设置为 $2(d+1)$ 和 500, d 表示问题维数。在步骤 2.2 中, ϵ -SOCEMO 算法在每次迭代中依次执行如下 5 种采样策略:

- 1) ϵ 目标值采样策略:全局搜索,选择一个新的采样点,使得近似集合多样化;
- 2) 随机扰动策略:局部搜索,最多选择 $|\mathcal{S}^*|$ 个点,探索非支配解周围区域;
- 3) 最小采样策略:最多选择 k 个点,探索 Pareto 前沿的端点;
- 4) 随机采样策略:一个新的采样点,强调局部搜索;
- 5) 代理辅助采样策略:全局搜索,求解辅助的优化问题。

ϵ -SOCEMO 算法与 SOCEMO 算法的主要区别在于 ϵ 目标值采样策略。后文将详细介绍这种采样策略。

2.2 ϵ 目标值采样策略

ϵ 目标值采样策略是基于目标值采样策略的改进,步骤如下:

第 1 步,假设 Pareto 前沿是第 k 个目标关于前 $k-1$ 个目标的函数,即存在映射 $\xi = [f_1, \dots, f_{k-1}]^T \mapsto f_k$ 。使用线性 RBF 模型 $g(\xi)$ 逼近该映射,从而构建 Pareto 前沿的近似模型,利用的数据是近似集合 \mathcal{F}^* 中的非支配向量:

$$g(\xi) = \sum_{v=1}^{|\mathcal{F}^*|} \lambda_v \varphi(\|\xi - \alpha^v\|_2) + p(\mathbf{x}). \quad (8)$$

式中: $p(\mathbf{x})$ 为一次多项式; λ_v 为待确定的系数; \mathcal{F}^* 表示当前近似集合,即非支配目标向量的集合; α^v 的定义同式(4),表示非支配目标向量的前 $(k-1)$ 个元素组成的向量。

第 2 步,求解单目标优化问题获取目标值 τ :

$$\begin{aligned} \max_{\tau} \quad & I(\tau, \mathcal{F}_\epsilon^*), \\ \text{s. t.} \quad & \tau_k = g([\tau_1, \dots, \tau_{k-1}]^T), \\ & -\infty < f_j^l \leq \tau_j \leq f_j^u < +\infty, j=1, \dots, k-1. \end{aligned} \quad (9)$$

式中: $I(\cdot, \cdot)$ 表示 ϵ -改进, \mathcal{F}_ϵ^* 表示 \mathcal{F}^* 中 ϵ -非支配目标向量的集合。

第 3 步,求解辅助多目标优化问题得候选解集 P' :

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & (|s_1(\mathbf{x}) - \tau_1^*|, |s_2(\mathbf{x}) - \tau_2^*|, \dots, |s_k(\mathbf{x}) - \tau_k^*|)^T, \\ \text{s. t.} \quad & \mathbf{x} \in \mathcal{D}. \end{aligned} \quad (10)$$

取采样点 $\mathbf{x}_{\text{new}} = \arg \min_{\mathbf{x} \in P'} \sum_{i=1}^k |s_i(\mathbf{x}) - \tau_i^*|$ 。

ϵ 目标值采样策略在第一步中将前 $k-1$ 个目标作为自变量,第 k 个目标作为因变量,从而构建 Pareto 前沿的 RBF 近似模型。然后通过式(9)最大化 ϵ -改进获取近似模型上的目标值 τ^* 。通过求解问题(10)得新的采样点 \mathbf{x}_{new} 。

在 SOCEMO 算法中,目标值采样策略在近似前沿面上选取一个目标值,使得该目标值与非支配目标向量的最小距离最大化。该策略的主要思想是确定一个期望的目标值,并且采样点的真实目标向量接近这一目标值。目标值的选取方式对该策略的效果至关重要。然而,原策略在计算目标值时没有考虑算法的收敛性。 ϵ -改进能够同时考虑算法在超多目标问题上的收敛性与多样性^[1]。为了提升 SOCEMO 算法在超多目标问题上的表现,本文通过最大化 ϵ -改进选取目标值。

3 数值实验

3.1 实验设置

本节将 ϵ -SOCEMO 算法与 SOCEMO 算法进行了数值实验对比。与多数优化算法一样, ϵ -SOCEMO 算法包含一些参数。表 2 给出了 ϵ -SOCEMO 算法的部分参数,其余参数均与 SOCEMO 算法一致。

表 2 算法中的主要参数

Tab. 2 The main parameters in the algorithm

参数	含义	值
n_0	初始采样点个数	$2(d+1)$
n_{\max}	最大函数评估次数	500
ϵ	用于 ϵ -改进的计算	0.007 5

本文采用拉丁超立方设计^[13]生成初始点,并且初始点个数固定为 $2(d+1)$ 。 ϵ 的取值可根据用户的偏好自定义。 ϵ -SOCEMO 算法中存在多个辅助的优化问题,本文使用 MATLAB 中的 fmincon 工具箱求解单目标辅助优化问题,使用 gamultiobj 函数求解多目标辅助优化问题,种群大小设置为 20。此外,SOCEMO 算法的代码可在 GitHub 获取。

3.2 评价方法

为了全面评估数值实验中每种算法的性能,本文使用常见的 4 种性能评估指标:

- 1) 非支配解个数占比:算法采样点集中非支配解个数占总采样点个数的比例。
- 2) 覆盖率指标^[14]:设 $X', X'' \subseteq D$ 为两个决策向量集合,覆盖率指标通过公式:

$$C(X', X'') := \frac{|\{a'' \in X''; \exists a' \in X': a' \text{ 支配 } a''\}|}{|X''|}$$

将 (X', X'') 映射至 $[0, 1]$ 区间。若 $C(X', X'') = 1$, 表示 X'' 中所有点均被 X' 中的点支配。相反,若 $C(X', X'') = 0$, 表示 X'' 中的点均不被 X' 中的点支配。值得注意的是, $C(X', X'')$ 不一定等于 $C(X'', X')$ 。由覆盖率的定义可知, $C(A, B)$ 越接近于 1, 则表示集合 A 更占优。

3) 超体积指标^[15]:该指标是对收敛性和多样性的度量。给定参考点,该指标表示由算法所得目标向量以参考点为顶点,支配的目标空间的体积。为防止超体积均为 0 影响算法对比,本文将参考点设置为所有独立运行中每个目标的最大值。

- 4) 多样性指标^[7]:用于评估一组近似集合在目标空间的多样性,分值越大表明解集的多样性越好。

3.3 测试问题

本节数值实验在 DTLZ1-7 测试问题^[16]上评估 ϵ -SOCEMO 算法的性能。DTLZ 问题可以很容易地在目标数量上进行扩展,因此适合于测试算法在超多目标问题上的性能表现。 ϵ -SOCEMO 算法和 SOCEMO 算法在 42 个测试集上进行了测试,目标个数 k 分别为 10、12、14、16、18 和 20,对应维数为 $k+9$ 。为了保证实验对比的公平性,每种算法对每个问题独立运行 30 次,数值结果取平均值。

3.4 结果与讨论

本节将每个性能指标缩放至 $[0, 1]$ 区间,其中数值越大越好。 N 表示非支配解个数占比, C 表示覆盖率, HV 表示解集的超体积与最小目标向量(即在测试的所有算法的所有独立运行中,问题的每个目标的最小观测值)的超体积的比值, DM 表示多样性指标。为简便起见,图中用 ϵ -SOCEMO 表示 ϵ -SOCEMO 算法。图 1 显示了 ϵ -SOCEMO 算法在所有 42 个 DTLZ 问题上的数值结果,结果进行了归一化处理。

箱线图的中位线在一定程度上反映算法在该指标上的平均水平。在多数性能指标上, ϵ -SOCEMO 算法结果的中位线高于

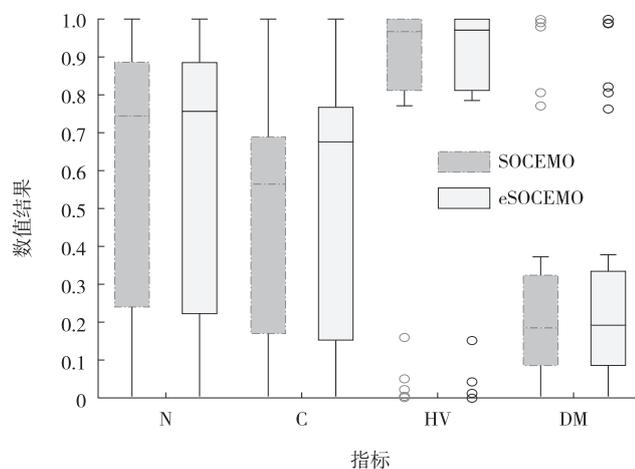


图 1 两种算法在 42 个 DTLZ 测试问题上的数值结果

Fig. 1 Numerical results of the two algorithms on 42 DTLZ test problems

SOCEMO 算法的结果,尤其是在覆盖率指标上优势很明显,这说明 ϵ -SOCEMO 算法得到的解支配 SOCME0 算法得到的大多数解。在超体积指标上,两种算法的性能表现相近。在非支配解个数和覆盖率指标上, ϵ -SOCEMO 算法结果的上四分位线略低于 SOCEMO 算法,而下四分位线略高于 SOCEMO 算法,表明改进后的算法的稳定性稍有下降。对于目标函数估值昂贵的超多目标优化问题,在真实目标函数评估次数有限的情况下,采用 ϵ 目标值采样策略的 ϵ -SOCEMO 算法通常比 SOCEMO 算法更具优势。

4 结束语

本文基于 SOCEMO 算法提出更适于求解昂贵超多目标黑箱问题的 ϵ -SOCEMO 算法。该算法通过最大化 ϵ -改进得到目标值,并将目标值对应的决策变量作为采样点。数值实验结果表明 ϵ -SOCEMO 算法通常能得到更高质量的解。在 ϵ -SOCEMO 算法中需要事先给定 ϵ 参数,而该参数的取值可能会对算法的效果产生影响。在今后的研究中将进一步探究如何合理选取参数 ϵ 的值。

参考文献:

- [1] WANG W Y, AKHTAR T, SHOEMAKER C A. Integrating ϵ -dominance and RBF surrogate optimization for solving computationally expensive many-objective optimization problems[J]. *Journal of Global Optimization*, 2022, 82(4): 965-992.
- [2] AKHTAR T, SHOEMAKER C A, WANG W Y. Surrogate many objective optimization: combining evolutionary search, ϵ -dominance and connected restarts[C]//LE THI H A, LE H M, DINH T P. *Optimization of Complex Systems: Theory, Models, Algorithms and Applications*. Switzerland: Springer, Cham, 2020.
- [3] PAN L Q, HE C, TIAN Y, et al. A classification-based surrogate-assisted evolutionary algorithm for expensive many-objective optimization[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2019, 23(1): 74-88.
- [4] MÜLLER J. SOCEMO: surrogate optimization of computationally expensive multiobjective problems[J]. *INFORMS Journal on Computing*, 2017, 29(4): 581-596.
- [5] von LÜCKEN C, BRIZUELA C, BARÁN B. An overview on evolutionary algorithms for many-objective optimization problems [J]. *WIRs Data Mining and Knowledge Discovery*, 2019, 9(1): e1267.
- [6] LAUMANN S M, THIELE L, DEB K, et al. Combining convergence and diversity in evolutionary multiobjective optimization[J]. *Evolutionary Computation*, 2002, 10(3): 263-282.
- [7] DEB K, JAIN S. Running performance metrics for evolutionary multi-objective optimization, KanGAL Report No. 2002004[R]. Kanpur: Indian Institute of Technology Kanpur, 2002.
- [8] CRINO S, BROWN D E. Global optimization with multivariate adaptive regression splines[J]. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B*, 2007, 37(2): 333-340.
- [9] POWELL M J D. *The theory of radial basis function approximation in 1990*[D]. Oxford: Oxford University, 1992.
- [10] JONES D R, SCHONLAU M, WELCH W J. Efficient global optimization of expensive black-box functions[J]. *Journal of Global Optimization*, 1998, 13(4): 455-492.
- [11] ROSALES-PÉREZ A, COELLO C A C, GONZALEZ J A, et al. A hybrid surrogate-based approach for evolutionary multi-objective optimization[C]//2013 IEEE Congress on Evolutionary Computation, June 20-23, 2013, Cancun, Mexico. Piscataway: IEEE, 2013: 2548-2555.
- [12] GUTMANN H M. A radial basis function method for global optimization[J]. *Journal of Global Optimization*, 2001, 19(3): 201-227.
- [13] McKAY M D, BECKMAN R J, CONOVER W J. A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code[J]. *Technometrics*, 2000, 42(1): 55-61.
- [14] ZITZLER E, DEB K, THIELE L. Comparison of multiobjective evolutionary algorithms: empirical results[J]. *Evolutionary Computation*, 2000, 8(2): 173-195.
- [15] ZITZLER E, THIELE L. Multi-objective evolutionary algorithms: a comparative case study and the strength Pareto approach [J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 1999, 3(4): 257-271.
- [16] DEB K, THIELE L, LAUMANN S M, et al. Scalable multi-objective optimization test problems [C]//Computational

Intelligence, Proceedings of the World on Congress on, Honolulu, HI, USA, Los Alamitos: IEEE Computer Society 2002: 825-830.

Operations Research and Cybernetics

A Surrogate Optimization Algorithm Based on the ϵ -Dominance for Expensive Many-Objective Black-Box Problems

WEI Yutao, BAI Fusheng

(1. School of Mathematical Sciences, Chongqing Normal University;

2. National Center for Applied Mathematics, Chongqing Normal University, Chongqing 401331, China)

Abstract: It investigates the algorithm for solving expensive many-objective black-box optimization problems. The algorithm ϵ -SOCEMO is proposed based on the SOCEMO algorithm, which uses ϵ -dominance for the target-value sampling strategy. Numerical experiments on algorithms ϵ -SOCEMO and SOCEMO were performed on 42 many-objective test problems, and the results show that ϵ -SOCEMO has better performance in the metrics. Numerical experiments show that this modified target-value sampling strategy can improve the computational effectiveness of the SOCEMO algorithm on expensive many-objective black-box optimization problems.

Keywords: many-objective optimization; expensive black box functions; surrogate methods; radial basis functions

(责任编辑 黄 颖)