

# 用于昂贵双目标优化的时间真实和代理适应度景观分析

Cedric J. Rodriguez

c.j.rodriguez@lumc.nl

Leiden University Medical Center

Leiden, The Netherlands

Tanja Alderliesten

t.alderliesten@lumc.nl

Leiden University Medical Center

Leiden, The Netherlands

Sarah L. Thomson

s.thomson4@napier.ac.uk

Edinburgh Napier University

Edinburgh, Scotland

Peter A.N. Bosman

peter.bosman@cw.nl

Centrum Wiskunde & Informatica

Amsterdam, The Netherlands

## ABSTRACT

许多现实世界的问题都具有计算成本高昂的适应度函数，并且本质上是多目标的。代理辅助进化算法通常用于解决此类问题。尽管如此，关于分析代理模型引起的适应度景观的文献是有限的，甚至对于多目标问题也不存在。本研究通过比较真实适应度函数的景观与多目标函数的代理模型的景观来弥补这一关键差距。此外，它还通过在优化过程中检查不同时间点的景观特征，在该时间点的人口附近，从时间上做到这一点。我们在实验中考虑了BBOB双目标基准函数。适应度景观分析的结果揭示了优化过程中不同时间点的真实特征和替代特征之间的显著差异。尽管存在这些差异，但真实景观特征和替代景观特征之间仍然显示出高度的相关性。此外，本研究确定了哪些景观特征与搜索相关，并证明代理景观特征和真实景观特征都能够预测算法性能。这些发现表明，景观特征的时间分析可能有助于促进替代切换方法的设计，以提高多目标优化的性能。

## CCS CONCEPTS

• Computing methodologies → Continuous space search.

## KEYWORDS

Fitness landscape analysis, surrogate models, expensive optimisation, bi-objective problems

## ACM Reference Format:

Cedric J. Rodriguez, Sarah L. Thomson, Tanja Alderliesten, and Peter A.N. Bosman. 2024. 用于昂贵双目标优化的时间真实和代理适应度景观分析. In *Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO '24)*, July 14–18, 2024, Melbourne, VIC, Australia. ACM, New York, NY, USA, ?? pages. <https://doi.org/10.1145/3638529.3654125>

## 1 介绍

在实际的优化问题中，适应度评估的计算成本可能很高—[?]—从几分钟到几小时不等，而且本质上是多目标 (MO)。这极大地限制了可能的适应度评估的总量，通常只有几百或几千个。对于这种评估成本高昂的问题，代理辅助进化算法 (SA-EA) 已被引入 [?]。SA-EA 通过在部分搜索期间替换真正的适应度

函数，用基于一组真实评估解决方案构建的问题的快速评估模型 (代理) 来减少所需的 (真实) 昂贵的问题评估。在类似于贝叶斯优化的一种方案中，SA-EA 迭代优化代理函数，选择一个或多个代理优化解决方案并使用真实函数进行评估，并根据一组新的真实评估解决方案更新代理模型。由于此替代项建立在非常有限的解决方案之上，因此真实的健身环境与替代性健身环境之间可能存在差异。因此，SA-EA 的性能不仅取决于真正的适应度函数，还取决于代理适应度函数。在这项工作中，我们分析了真实景观和代理景观之间的这些潜在差异，以更好地理解优化过程中优化性能、替代和真实适应度景观之间的关系。

为了正确研究真实和代理健身景观之间的潜在差异，我们需要在优化的不同点表征健身景观，因为代理景观可能会由于代理模型的更新而不断变化。健身景观分析 (FLA) 可以做到这一点，提供有关优化算法与不同健身景观之间相互作用的见解。FLA 的性质取决于搜索空间是离散的还是连续的，以及制定了多少目标。在这项工作中，我们考虑了连续的双目标问题，并计算了真实健身景观和替代景观的特征。在持续优化领域，许多 FLA 工作都集中在与算法无关的 (静态) 方法上，例如拉丁超立方体采样 (LHS) [??] 和随机游走 [??]。抽样的性质意味着计算出的景观指标可能与在实际优化运行期间执行的适应度评估观察到的景观没有密切关系。在一项关于景观分析的调查中，Malan 和 Engelbrecht 将其称为搜索独立性 [?]。还有几项工作使用依赖于搜索的方法：其中之一是连续空间局部最优网络 (LON) [??]。LON 虽然很有价值，但它来自整个进化时间跨度的信息合并到一个单一的数学对象 (LON) 中。还有多目标等价物，帕累托 LONs (PLON) [?]。PLON 具有多个与搜索性能相关的相关功能；但是，我们在这里不使用它们，因为它们不能完全描述算法在优化过程中观察到的景观。

与静态的 FLA 不同，Jankovic 和 Doerr 考虑了单一目标背景下探索性景观分析特征的演变 [?]，发现静态景观和时间景观不匹配。一些工作已经研究了轨迹特征的概念 (用于单目标问题)：这些特征允许算法在记录其轨迹的同时开始优化，然后从中计算特征以理解问题或做出算法决策 [????]。这些贡献与我们的贡献有关，因为它们利用了中间景观信息，但专注于单一目标问题。我们同意这样的观点，即研究与使用优化算法相关的时间特征，或考虑它们随时间的演变可能是有价值的。最近，Alsouly 等人研究了一组受约束的多目标 [?] 问题随时间推移的景观特征随时间的演变，发现景观在演化过程中发生了变化，并且可以通过时间特征预测算法性能。在这项工作中，一些特征与问题的约束性质有关。之前的两项研究 [??] 为代理引导的进化算法计算了进化中不同点的指标，但这些指标被合并在一起进行分析，并且没有分离和研究随时间

Permission to make digital or hard copies of part or all of this work for personal or classroom use is granted without fee provided that copies are not made or distributed for profit or commercial advantage and that copies bear this notice and the full citation on the first page. Copyrights for third-party components of this work must be honored. For all other uses, contact the owner/author(s).

GECCO '24, July 14–18, 2024, Melbourne, VIC, Australia

© 2024 Copyright held by the owner/author(s).

ACM ISBN 979-8-4007-0494-9/24/07.

<https://doi.org/10.1145/3638529.3654125>

的变化。在这种情况下，用于景观分析的样本点基于真实适应度函数，问题是单目标的；作者发现，有几个指标与代理辅助算法的性能有关。

除了上述作品外，很少有文章考虑替代健身景观。Werth 等人 [?] 探索了这个方向，将替代景观与少数单目标问题的真实适应度函数进行了比较。Harrison 等人分析了单目标参数配置 [?] 的代理景观，但没有与真实景观进行比较。一般来说，缺乏分析替代景观的文献。在多目标优化的背景下，据我们所知，这方面的文献——不存在。

本研究首次对多目标替代景观进行分析。此外，我们比较了真实健身景观和不断变化的替代健身景观的时间景观特征，强调了当地遇到的景观及其随时间的变化。虽然已经有一项研究跨进化 [?] 的多目标特征的初步工作，但这是针对约束问题，没有考虑替代物。此外，我们在这里考虑了一组不同的功能和特性，并认为这是一条未被充分探索的途径。另一个贡献是，我们展示了使用代理和真实景观的特征构建算法性能预测模型的潜力。本文的其余部分结构如下：第 ?? 节将介绍代理模型、EA 和 FLA 方法，以及本文将考虑的降维方法。第 ?? 节和第 ?? 节将分别介绍我们的主要方法和实验设置。在第 ?? 节中，将介绍实验结果。最后，第 ?? 部分由工作结论组成。

## 2 背景

### 2.1 MO 代理辅助 EA

图 ?? (a) 描述了我们在这项工作中考虑的 MO SA-EA 类型的主要过程。在初始化阶段，SA-EA 使用 LHS 对一组解决方案进行采样，使用真正的适应度函数对其进行评估，并构建初始代理模型。初始化后，SA-EA 由内循环和外循环组成。内部循环由 EA 的典型生成过程组成。此循环初始化为包含所有先前使用真适应度函数评估的解决方案的总体。在应用选择和变分算子后，使用快速评估代理模型而不是评估成本高昂的问题来评估后代解决方案。一旦执行了最大数量的替代评估，该周期就会终止。代际周期结束后，代理优化周期开始。然后，所有代理评估的解决方案都被视为具有真实适应度函数进行评估的潜在候选解决方案。在本文考虑的多目标上下文中，选择过程包括根据所有解决方案的代理适应度值计算其支配等级。通过排除 50 个排名最高的解决方案来进行预选。此后，从预选中随机选择一组解决方案进行真正的评估。然后记录真正评估的解决方案，随后根据这组新的解决方案更新代理模型。此 SA-EA 在算法 ?? 中进行了更正式的描述。

### 2.2 代理模型

**2.2.1 精确插值器**。在以前昂贵的多目标优化算法中，已经考虑了几种点插值方法，例如反距离加权 (IDW) [?]。IDW 是最直接、最广泛采用的 [?] 点插值方法之一，定义如下：

$$\hat{y}^{\text{idw}}(x) = \sum_{i=1}^n w_i(x) y_i \quad (1)$$

其中  $\hat{y}^{\text{idw}}$  是具有未知真实适应度值的解决方案的代理适应度值， $y_i$  是包含  $n$  解的存档  $A_i$  中  $i$ th 解的真实适应度值，以及

$$w_i(x) = \frac{d(x, A_i)^{-1}}{\sum_{j=1}^n d(x, A_j)^{-1}} \quad (2)$$

其中  $d$  是欧几里得距离， $x$  未知解和  $i$ th 解。使用 IDW 的缺点是，在已知解的参数范围之外的所有解的代理值都接近已知解的平均拟合度。为了克服这一限制，最近开发了反距离加权回归 (IDWR)，[?] 其中参数边界之外的解决方案的代理适应

### Algorithm 1 MO SA-EA

Input:  $N$  = Number of initial solutions;  $FE_{max}^{true}$  = maximum number of true fitness evaluations;  $FE_{max}^{surrogate}$  = maximum number of surrogate evaluations in each surrogate optimisation cycle;  $\mu$  = number of new selected solutions after each surrogate optimisation cycle;

Output:  $A$  = Archive of all non-dominated solutions

- 1: Start first surrogate optimisation cycle and set true function evaluation  $FE^{true}$  to 0
- 2: Initialize population  $P$  of size  $N$  using random sampling and evaluate solutions using the true fitness function
- 3: Add initial population  $P$  to archive  $A$
- 4: **while**  $FE < FE_{max}^{true}$  **do**
- 5:     Build surrogate model  $M$  based on  $A$
- 6:     Optimize  $M$  using EA with  $FE_{max}^{surrogate}$
- 7:     Select  $\mu$  solutions from all surrogate evaluated solutions to evaluate with true fitness function ( $FE^{true} = FE^{true} + \mu$ )
- 8:     Add solutions to the archive
- 9: **end while**
- 10: Return  $A$

度值遵循所有已知解决方案的适应度值的趋势线。使用 IDWR 插值方法的代理值计算如下

$$\hat{y}^{\text{idwr}}(x) = \hat{y}^{\text{idw}}(x) + n \frac{\sum_{i=1}^n y_i - n \hat{y}^{\text{idw}}(x)}{n^2 - \sum_{i=1}^n d(x, A_i) \sum_{i=1}^n d(x, A_i)^{-1}} \quad (3)$$

**2.2.2 线性回归**。另一个替代模型是线性回归。为了保留适应度景观的局部结构，代理项建立在具有未知真实适应度值的解决方案的  $k$  最近邻 (KNN) 上。线性回归定义为：

$$\hat{y}^{\text{lr-knn}}(x) = \beta_0 + \sum_{q=1}^D \beta_q x_q \quad (4)$$

其中  $\hat{y}^{\text{lr-knn}}(x)$  是代理适应度值， $\beta_q$  是每个问题维度的系数 (斜率)， $D$  是问题维度的数量， $x_q$  是决策变量。

### 2.3 参考向量引导 EA

本文中 SA-EA 的优化器是参考向量引导进化算法 (RVEA) [?]。初始总体是通过在多目标问题的初始化范围内均匀抽样生成的。只要不超过函数评估的最大数量，[?] 进行模拟二元交叉，然后进行多项式突变 [?]，以从亲本群体生成后代群体。这种生成后代解的方法等效于其他多目标 EA，例如 NSGA-III [?]。在结合亲本和后代种群后，使用称为角度惩罚距离的参考向量引导程序选择下一代的亲本种群。

**2.3.1 使用角度惩罚距离进行选择**。角度惩罚距离 [?] 由四种机制组成：参考向量的生成、将每个解分配给其中一个参考向量、为每个参考向量选择一个解以及参考向量的自适应。使用 RVEA，使用参考向量将目标空间划分为离散分区。这些均匀参考向量的初始生成是通过首先生成一组均匀分布的参考点来完成的。在下一步中，将总体中的每个解分配给目标向量 (目标值与原点之间的向量) 与参考向量之间角度最小的参考向量。这会将种群划分为多个子种群，其中每个子种群都与特定的参考向量相关联。在第三步中，为每个子种群选择一个解决方案。选择标准由两个子标准组成。第一个子标准 (收敛) 是测量目标向量的大小，其中较小的目标向量意味着更好的解决方案。第二个子标准 (散度) 是目标向量和参考向量之间的

角度, 角度越大意味着散度越大。这两个子标准合并为一个标准: 角度惩罚距离, 其中参数  $\alpha$  指定子标准之间的平衡。

### 3 方法论

图 ?? (b) 列出了该方法的主要过程。该方法由静态 FLA 和时间 FLA 组成。对于静态 FLA, 使用 LHS 对 200D 解决方案进行采样, 其中  $D$  是问题维度的数量。这些解决方案用于提取真实的健身景观特征。在时间 FLA 中, 对于每个问题和代理模型对, 我们使用 SA-EA 独立运行优化过程。需要由每个代理模型驱动的独立优化运行, 因为不同的模型可能会将 EA 引导到搜索空间的不同部分并遇到不同的健身环境。在每次优化期间, 解决方案都会与替代适应度和真实适应度一起记录。从这些样本中, 提取景观特征和优化指标进行最终分析。

#### 3.1 优化期间的采样

在优化的 15 次重复中, 在每个时间点按以下方式对局部遇到的真实和替代适应度景观进行采样: 从当前总体中, 我们重复应用选择和变分算子, 直到达到 2000 个评估; 因此, 我们对人口周围的附近地区进行了采样。从此示例中, 将删除重复项, 这意味着样本可以略小于 2000。因此, 在每个代理优化周期之后, 都会记录两组不同的解决方案:

- (1) SA-EA 在当前代理优化周期内评估的解决方案示例。此外, 还使用真实适应度函数对解决方案进行评估, 以获取真实适应度值。
- (2) 真正经过评估的优化解决方案。

#### 3.2 特征提取过程

在特征提取过程中, 使用 Liefvooghe 等人的 FLA 方法提取真实和替代景观特征 [?] 该方法专为连续多目标问题而设计。从 49 个特征中, 我们删除了任何样本中显示缺失值的任何特征。根据样本的性质, 某些特征可能会出现缺失值; 例如, 如果样本中只有一个非支配点, 则与非支配点之间的距离相关的度量将缺少值。此外, 我们还删除了一组与超容量相关的功能; 因为超容量是我们将要预测的测量值, 所以将它们排除在外似乎是合适的。由此产生的 28 个特征集在补充材料的表 1 中提供。随着代理模型在每个代理优化周期后更新, 预计代理特征将在时间上发生变化—事实上, 人口正在经历进化, 算法正在不同的搜索空间区域移动。在代理景观要素旁边, 在每个代理优化周期后提取真实的景观要素。随后, 使用真实适应度函数评估的所有解决方案 (直到当前的代理优化周期) 都用于量化优化运行的优化收敛性。优化收敛是通过首先使用理想点和最低点对目标进行归一化来评估的, 如文献 [?] 中所建议的那样。然后, 最低点对应于 [1, 1]。在多目标优化的背景下, 我们只对目标之间存在权衡的区域感兴趣, 这些目标是理想点和最低点之间的解决方案。景观特征和性能指标的中位数是通过 15 次重复计算得出的。

#### 3.3 用于分析的数据表示

对于每个问题和代理模型对, 数据由中值代理景观特征、真实景观特征和作为时间序列的性能指标组成。出于计算费用目的, 仅考虑实例 (真实函数评估) 256、1280、1792 和 8192 时的数据。

## 4 实验装置

### 4.1 基准测试问题

考虑了双目标 BBOB 函数 (BBOB-BIOBJ) [?] 与 COCO 框架 [?] 的连续问题变量。这 55 个问题是 10 个广为人知的单目标 BBOB 函数的成对组合。在这项工作中, 我们只考虑了 55 个 BBOB-BIOBJ 问题中每个问题的第一个实例。我们只关注 20 维实例。所有算法的种群都初始化为默认的 COCO 范围内:  $-100$  到  $100$ 。通过将最大真实函数求值数设置为 8192 来模拟基准问题的计算成本。每次优化的最长运行时间设置为 24 小时。生成的输出数据<sup>1</sup> 和脚本<sup>2</sup> 可以在公共存储库中找到。

### 4.2 SA-EA 算法

SA-EA 变体和设置. 对于这项工作, 我们正在考虑六种不同的替代物。我们正在考虑 IDW、IDWR 和 LR-KNN, 如第 ?? 节所述。IDW 和 IDWR 不需要任何设置, 并按照 Section ?? 中所述实现。对于 LR-KNN 来说,  $k$  设置为 32, 以捕捉健身景观的局部坡度。在这项工作中, 我们还考虑简单地使用  $k$  最近邻 (KNN), 其中代理适应度等价于使用真实适应度函数评估的解集中的最近解。考虑此代理项很有趣, 因为此代理项的计算速度很快, 并且不会在真正的评估解决方案之间进行插值。此外, 许多最先进的 SA-EA 都使用 Kriging。因此, 这项工作还使用了在 PlatEMO [?] 中实现的著名的 K-RVEA [?] 中的 Kriging 代理 (Kriging)。最后, 包含一个名为 No structure 的代理项。此代理项从真实评估的解决方案中随机选择一个解决方案, 并返回两个目标的适应度值。此代理项用作基线, 因为它返回先前评估的解决方案范围内的适应度值, 但真实适应度值和代理适应度值之间没有相关性。

所有 SA-EA 变体都使用使用 LHS 采样的 32 溶液进行初始化。对于所有变体, 每个代理优化周期 ( $\mu$ ) 的所选解决方案数设置为 1, 以便尽可能频繁地更新代理项 (每个新的真实评估)。在这项工作中, 利用了 PlatEMO 的 RVEA 的 MATLAB/Octave 代码实现 [?]。RVEA 初始化为种群大小 32, 使用 LHS 进行采样。此外,  $\alpha$  设置为  $1 \cdot 10^6$ ; 由于评价数量较少, 这样做的目的是最大限度地收敛。

### 4.3 降维

我们试图比较真实适应度函数和代理适应度函数之间以及不同替代体之间的景观特征向量。为此, 我们使用了  $t$  分布随机邻域嵌入 (t-SNE); 这是一种广泛采用的降维技术, 用于在低维空间中可视化高维数据, 同时保留数据点之间的成对相似性 [?]。对时间序列序列中的每个样本 (例如我们在本研究中跟踪的演化中的不同点) 单独采用降维可能会在连续预测中引入不必要的变异性。这使得跟踪优化的过程变得复杂。因此, 在这项工作中也使用了动态 t-SNE [?]。对于实验, 我们使用了 50 的困惑度、50 的 sigma 优化迭代、10000 的纪元计数, 并将随机种子设置为 1。在动态 t-SNE 的情况下, 运动惩罚设置为 0.001。

### 4.4 性能建模

以随机森林回归为学习算法进行建模; 它与默认的超参数一起使用, 即: 500 棵树, 每次拆分包含  $\frac{1}{3}N_f$  个特征 (其中  $N_f$  是特征的数量); 取样更换; 样本数量与观测值数相同。这 28 个特征是使用真实适应度景观和代理项计算的, 这导致候选池

<sup>1</sup><https://zenodo.org/records/10575290>

<sup>2</sup><https://zenodo.org/records/10496995>

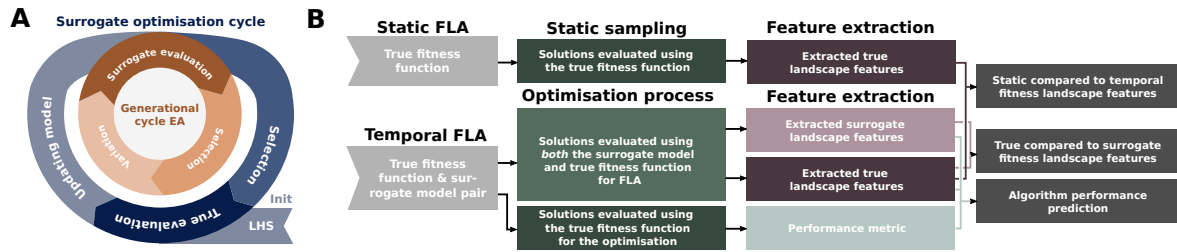


Figure 1: A) 可视化我们在这项工作中考虑的 SA-EA 类型的主要过程，其中（橙色）内循环表示具有选择和变分算子的 EA 的实际循环。在此周期内，使用代理模型评估解决方案。在世代周期终止后，（蓝色）外部循环开始，其中选择潜在的良好代理评估解决方案并使用真正的适应度函数进行评估。B) 一般方法由静态 FLA 和时态 FLA 组成，其中静态 FLA 使用静态采样策略，而时态 FLA 在优化期间记录解决方案。然后，要素提取过程提取真实景观要素和代理景观要素。此外，还计算了性能指标，用于算法性能预测。

中有 56 个特征。时间方法考虑了进化中的四个点：经过 256 次评估;1280 年后;1782 年后; 和 8192。

对于静态分析，所有特征都基于真实适应度函数，并且 28 个特征有一个快照。时态和静态分析的样本数量相同：2000 (100  $D$ ) 个点。响应变量是替代辅助 RVEA 变体获得的中位数 (使用理想点和最低点归一化) 最终超容量。IDW 辅助的 RVEA 被排除在算法性能分析之外：它在 55 个函数中只有一个实现了非零超容量，因此无法构建有意义的模型。

我们执行递归特征消除 (RFE) <sup>3</sup>，自举 1000 次迭代。根据特征与观测值之比的十分之一的准则 [?]，我们将所选特征的数量限制为最多五个 (有 55 个基准问题正在研究中)。模型是使用 RFE 期间确定的特征构建的。为了尝试解释有限数量的观察值的潜在影响 (模型可能容易受到数据拆分中的随机性的影响)，我们在数据集上使用 80-20 的训练验证拆分来引导模型进行 1000 次迭代。为了量化模型性能，我们考虑了伪  $R^2$ ；这计算为  $1 - \frac{MSE}{variance(y)}$  其中  $y$  是目标变量 (通过替代辅助 RVEA 实现的归一化最终超容量)。如果模型非常差，则伪  $R^2$  有时可能小于零；为了保持其作为所解释的方差比例的含义，我们将任何负值替换为零。我们报告了模型在验证数据上的  $R^2$  的自举平均值、中位数和标准误差。

## 5 结果

### 5.1 静态与时间 FLA 的比较

为了确定与静态 FLA 相比，时间 FLA 是否产生不同的特征，我们在 t-SNE 图中比较了两种分析的真实景观特征。结果如图 ?? 所示。使用 Kriging 代理时，55 个 BBOB-BIOBJ 中只有 33 个在优化运行时限制之前超过了 256 个功能评估，请参阅补充材料中的表 1。进一步分析中仅包括这 33 个问题。图 ?? 中的每个标记都代表了其中一个 BBOB-BIOBJ 问题的真实适应度景观特征。黑色标记表示静态 FLA 产生的特征，而彩色标记表示时间 FLA 的演变阶段。

这里最重要的发现是来自静态和时间 FLA 的标记之间的明显差异，表明两种类型的分析表现出不同的特征分布。此外，不同 BBOB-BIOBJ 问题之间的特征相似性似乎大于不同进化阶段的特征之间的相似性 (特别是，请注意图左上角的红色聚类包含大多数进化后期样本)，强调需要在时间上进行适应度景观分析。我们还根据特征评估了静态和时间分析之间是否存在统计差异 (参见补充材料)。

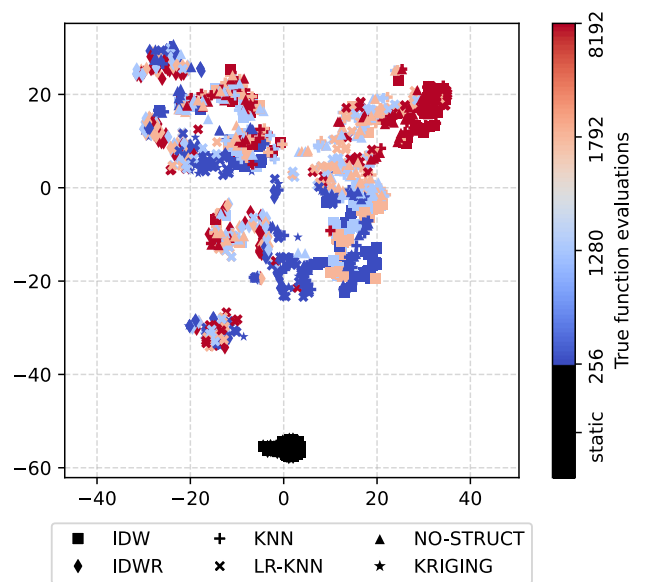
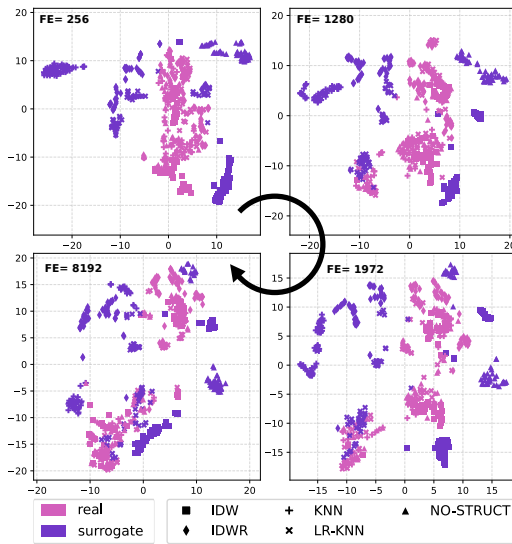


Figure 2: t-SNE 图比较了时间 FLA 和静态 FLA 产生的真实特征。每个标记表示特定 BBOB-BIOBJ 问题的中位数适应度景观特征。点的颜色表示景观要素在演变的哪个阶段计算，如颜色条所示。

### 5.2 与替代景观相比，真实

我们还比较了不同演化阶段的真实景观特征和替代景观特征，见图 ??。左上角的图表示优化开始时的特征 (256 个功能评估)。顺时针方向的图，进化有不同的阶段，如带注释的文本所示。在图中，每个标记表示其中一个 BBOB-BIOBJ 问题的健身景观特征。现在，颜色用于描述要素是基于真实景观还是替代景观。替代项 (使用标记形状表示) 也与真实景观特征相关，因为不同的替代项可以引导优化到真实健身景观的不同区域。克里金法被排除在分析之外，因为我们只有 256 个函数评估之前的数据。经过 256 次函数评估后，有趣的是，所有真实景观适应度特征都聚集在一起 (注意粉红色标记)，而替代特征 (这些特征为紫色) 分散到图的外围区域；这表明真实特征和代理特征之间存在很大差异。同时，代理模型数据点在本地聚类在一起 (按其代理类型)，这表明不同代理的特征之间也存在明显差异。为了研究代理项和底层真实景观之间的相似性，我们

<sup>3</sup><https://www.rdocumentation.org/packages/caret/versions/6.0-92/topics/rfe>



**Figure 3: 动态 t-SNE 图比较了在时间 FLA 中获得的真实适应度评估和替代适应度评估的适应度景观特征。散点图中的每个标记表示特定 BBOB-BIOBJ 问题的适应度景观特征中位数**

通过统计检验比较了相应的特征分布。由于在图 ?? 中，不同的替代物在整个进化过程中形成单独的聚类，因此对每个替代物—进行统计比较，从而产生 588 次测试。由于代理景观要素的计算方法与真实景观要素的解相同，因此使用 Wilcoxon 检验；我们认为统计显著性  $p \leq 0.05$ （使用 Bonferroni 校正进行校正）。

图 ?? (a) 总结了结果，其中黑色方块表示分布的显著差异。对于 KNN 来说，在整个演化过程中，28 个替代特征中有 17 个与真实特征有显著差异；对于 IDWR、无结构、LR-KNN 和 IDW，分别是：14、10、8 和 8 个特征。此外，LR-KNN 似乎从 1280 个函数评估中捕捉到了真实的情况：当垂直轴向上朝向 8192 个评估时，浅灰色方块的增加可以观察到这一点。IDWR 和 KNN 不会发生这种情况。有趣的是，尽管存在这些差异，但当我们考虑真实景观特征分布和代理景观特征分布之间的 Spearman 相关性时，这些特征似乎确实相互关联：参见图 ?? (b)。总体而言，由蓝色方块的数量表示，无结构、LR-KNN 和 KNN 似乎比 IDWR 和 IDW 具有更高的特征相关性。请注意，对于 KNN，有许多特征分布在 ?? (a) 中显示出显著差异，同时具有高度相关性。我们还注意到，一些特征似乎在真实分布和代理分布之间具有完美的相关性。在  $\text{dist-x-avg}$ 、 $\text{dist-x-avg-neig}$  和  $\text{dist-x-max}$  的情况下—这是因为它们与变量空间中的距离有关。对于其他 ( $\text{dist-f-avg}$ 、 $\text{dist-f-max}$  和  $\text{dist-f-avg-neig}$ )：这三个在真实景观和代理景观中都有高度偏态的分布，绝大多数数值都很低，但有一些非常大的异常值。这些分布可能是由于不同函数的适应度范围的差异而发生的，而分布的性质可能是强相关性的原因。这引发了人们的思考，即是否应该在未来的研究中重新审视或进一步开发这一特定的特征子集。

为了进一步理解分布，我们还可可视化了（归一化）特征分布的真实景观中位数和替代景观中位数之间的差异：参见图 ?? (c)。对于某些特征，特别是 KNN 和 IDWR，特征分布的中位数存在很大差异，这解释了图 ?? (a) 中看到的显著差异。

### 5.3 算法性能预测

表 ?? 总结了算法性能预测模型。每行都与特定类型的代理项相关，并包含有关五个模型（每列一个模型）的信息，其中响应变量是与使用该代理项关联的最终超量。例如，第一行表示：四个模型使用使用 KNN 代理项在运行期间采样的时间特征，以及一个模型使用从拉丁超立方体样本中提取的静态特征。采样类型在标题行中指示；对于其下方的每一行，选定的报告模型中包含的特征（这些特征由 RFE 选择）—代理景观的特征为 **蓝色文本**，真实景观的特征为黑色文本；在代理项的名称旁边，我们展示了验证数据上模型伪  $R^2$  的引导均值、中位数和标准误差。不应将  $R^2$  值视为替代项性能的指标，而应将其视为景观要素预测优化结果的指标。

查看表 ?? 中的  $R^2$  值，我们可以考虑使用静态景观样本作为解释基线构建的模型的值。对于 KNN 和 LRKNN 代理，四个时间模型中的三个优于静态等价模型；剩下的一个是时间序列中的第一个（256 个评估）。对于 IDW，有两个优越的时间模型，一个大致等于静态等价物，另一个质量低于静态对应物（这又是最早的时间样本，有 256 个评估）。最后，对于无结构代理，尚不清楚时间分析还是静态分析是最佳方法：有些时间模型比静态模型更好，有些则不是。对于 IDW 和 No 结构替代项，256 次评估的模型都比静态基线差。这可能是由于由替代适应度引导的抽样被引导到不太相关的区域：这种行为可能是由于在搜索的这一点上实际评估的解决方案档案有限，以及这两个替代对象的能力差（事实上，它们在问题上的表现低于 KNN 和 LRKNN）。

从表 ?? 可以看出，对于使用时间特征构建的 16 个模型中的每一个，RFE 都选择了替代特征和真实景观特征的混合。这意味着，在考虑代理辅助优化的性能预测时，必须同时考虑代理和真实景观的特征；然而，为了验证这个想法，我们还使用 1) 仅代理特征和 2) 仅真实特征的特征池构建了模型。该实验表明，通常，仅代理模型和仅真实模型的性能与表 ?? 中的模型大致相同。这一发现意味着，首先，代理模型可能很好地模仿了真实景观；其次，两者的特征都可以用于性能预测。这两种设置的结果可以在补充材料的表 2 和表 3 中找到。在表 ?? 中，可以看出基于适应度的特征（蓝色或黑色文本中包含 f 的特征）似乎在许多预测中起着不可或缺的作用：大多数模型至少包含一个模型。

当涉及到这些基于健身的功能时，与真实景观相比，会选择更多来自替代景观的景观。我们注意到，重要的特征类型似乎在进化的各个阶段发生了变化：当达到 1792 年的时间点时，从基于适应度的特征转向捕捉可变空间距离的可进化性和坚固性的特征（以  $\text{avg-neig}$  和  $\text{cor-neig}$  结尾的特征）。再看整个时间模型，模型中也出现了与局部最优—相关的特征的明显趋势，包括单目标和帕累托—（例如： $\text{slo-n}$ 、 $\text{plo-n}$  和  $\text{plo-dist-max}$ ）。请注意，这在 LRKNN 代理的情况下尤为明显，并且无论这些特征是从代理景观还是真实景观计算得出的，它们似乎都很重要。LRKNN 模型中局部最优特征的普遍性意味着这种类型的替代物的性能可能特别受局部最优的影响。

就模型质量随时间推移而言，对于 KNN 代理，随着时间的推移有一个趋势：模型质量提高。其他三个代理人没有明显的趋势。如前所述，最后一列包含与使用静态样本特征作为预测变量的模型相关的模型。我们观察到，这些模型的大多数选定特征在某种程度上与适应度有关。将静态模型与时间等价模型进行比较，可以看出所有四个时间 KNN 模型都优于静态 KNN 模型；其中三个 LR-KNN 时间模型优于等效静态模型。

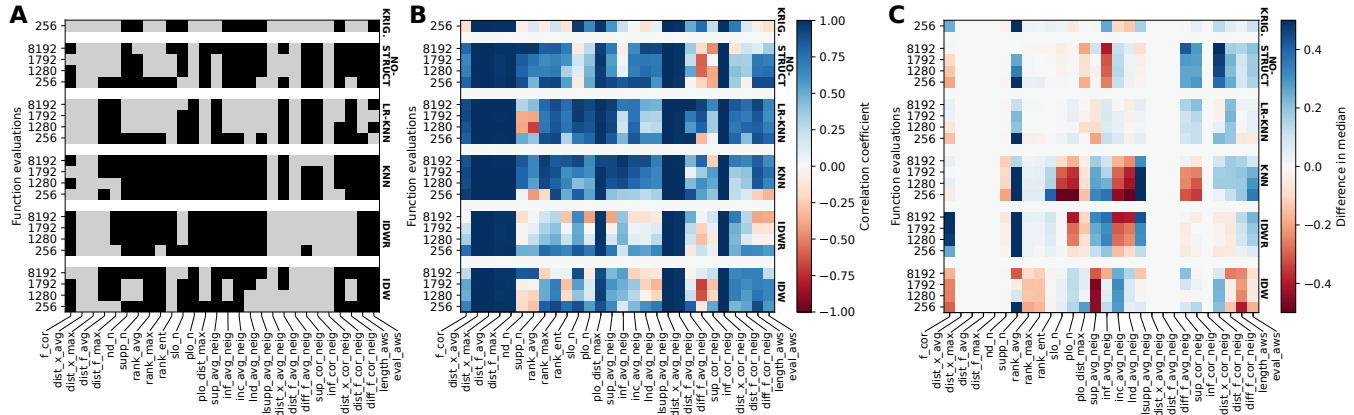


Figure 4: A) 比较在进化的不同阶段产生的真实景观特征分布和替代景观特征分布，其中黑色是指根据 Wilcoxon 检验具有统计学意义 ( $p \leq 0.05$ ) 的差异。B) 在不同演化阶段产生的真实景观特征分布和替代景观特征分布之间的相关性。C) 在不同演化阶段产生的真实景观特征分布和替代景观特征分布之间的中位数差异。

Table 1: 算法性能预测模型。预测变量是真 (黑色文本) 和替代 (蓝色文本) 景观特征，在进化的四个点 (和静态样本) 通过特征选择; 响应变量是由第一列中指示的替代辅助 RVEA 变体实现的最终 (归一化) 超容量。预测变量和响应是 15 次运行的中位数。模型质量指标是伪  $R^2$ 。每个模型都经过 1000 次迭代的引导，报告的值是 bootstrap mean | Bootstrap median (bootstrap standard error) 用于验证数据的指标。

sampling →	temporal (256 evals)	temporal (1280)	temporal (1792)	temporal (8192)	static
selected →	[ dist-f-max, dist-f-avg, dist-f-max, dist-f-avg-neig, 差异-f-平均-neig ]	[ inf-avg-neig, slo-n, diff-f-avg-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-avg ]	[ inf-avg-neig, plo-dist-max, dist-x-avg-neig, ND-N (敦-N) ]	[ diff-f-cor-neig, dist-f-cor-neig, lsupp-avg-neig, diff-f-cor-neig, rank-avg ]	[ dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-max, dist-f-avg, diff-f-avg-neig ]
KNN	$R^2$ : [0.755   0.753 (0.236)]	$R^2$ : [0.819   0.855 (0.176)]	$R^2$ : [0.913   0.858 (0.174)]	$R^2$ : [0.947   0.934 (0.096)]	$R^2$ : [0.697   0.785 (0.209)]
selected →	[ sup-avg-neig, eval-aws, inc-avg-neig, dist-f-avg-neig, 差异-f-平均-neig ]	[ diff-f-cor-neig, 长度-aws, sup-avg-neig, dist-x-cor-neig, dist-x-cor-neig ]	[ diff-f-cor-neig, sup-avg-neig, dist-x-cor-neig, 长度-aws ]	[ slo-n, nd-n, dist-f-cor-neig, supp-n, diff-f-cor-neig ]	[ dist-f-cor-neig, sup-cor-neig, dist-f-avg, dist-f-avg-neig, diff-f-cor-neig ]
IDW	$R^2$ : [0.682   0.698 (0.223)]	$R^2$ : [0.834   0.786 (0.201)]	$R^2$ : [0.748   0.763 (0.204)]	$R^2$ : [0.870   0.866 (0.181)]	$R^2$ : [0.754   0.749 (0.192)]
selected →	[ PLO-N, 排名, plo-dist-max, plo-dist-max, dist-f-avg ]	[ PLO-dist-max, SLO-N, PLO-N 型, plo-dist-max, slo-n ]	[ SLO-N 型, sup-avg-neig, dist-x-cor-neig, PLO-DIST-最大, PLO-N, slo-n ]	[ nd-n, plo-dist-max, SLO-N 型, inf-avg-neig, slo-n ]	[ dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-avg, diff-f-avg-neig, dist-f-max ]
LR-KNN	$R^2$ : [0.867   0.832 (0.163)]	$R^2$ : [0.967   0.837 (0.181)]	$R^2$ : [0.945   0.846 (0.180)]	$R^2$ : [0.923   0.836 (0.185)]	$R^2$ : [0.871   0.754 (0.213)]
selected →	[ diff-f-cor-neig, diff-f-avg-neig, dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-avg ]	[ slo-n, dist-x-avg-neig, dist-x-avg-neig, rank-ent, dist-f-cor-neig ]	[ dist-x-avg-neig, dist-x-avg-neig, dist-x-avg, dist-x-avg, slo-n ]	[ nd-n, ND-N (敦-N), supp-n, supp-n, eval-aws ]	[ dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, sup-cor-neig, dist-f-avg, diff-f-avg-neig ]
No structure	$R^2$ : [0.686   0.730 (0.215)]	$R^2$ : [0.815   0.786 (0.171)]	$R^2$ : [0.778   0.754 (0.202)]	$R^2$ : [0.618   0.838 (0.172)]	$R^2$ : [0.728   0.701 (0.223)]

IDW 和 No 结构代理项的情况不太清楚。考虑到这四种时间模型，可以说等效静态模型的性能与它们相似。无结构模型的平均  $R^2$  值介于 0.618 和 0.815 之间，这似乎有悖常理。此代理项只是将随机的 true 评估适应度分配给解决方案。但是，当我们考虑这些模型的细节时，事情变得更加清晰。例如：在时间 (256 个评估) 模型的情况下，代理项还无法访问许多真实评估的解决方案，因此用于景观分析的样本—随后的预测模型—类似于第 5 列中的静态样本。对于第二和第三时间模型，选择了很多基于可变空间中距离的特征 (这些特征以 dist-x 开头); 这是有道理的，因为它们与代理适应度函数没有直接关系。为 1280 评估模型选择特征 dist-f-cor-neig (代理项)。这是一个基于适应度的特征 (因此与替代项高度相关)，但是当我们考虑到该特征与真实景观的等效特征显示出适度的相关性时，它被选用于模型的事实是可以理解的，如图 ?? b 所示)。在本节的最后，我们注意到所有模型的特征重要性都是计算的，并且通常模型中的特征彼此具有相似的重要性。相关数据见补充材料的表 3、表 5 和表 7。

### 5.4 限制与讨论

性能预测结果表明，时间适应度景观分析有可能用于多目标优化中的在线替代选择。这批准了在单一目标上下文中显示的内容 [?]。我们还发现，虽然许多景观特征在替代景观和真实景观之间有显著差异，但它们通常是相关的。之前的一项研究 [?] 观察到单目标问题的特征差异。此外，我们的结果表明，使用替代特征和真实景观特征中的一种或两种都有助于性能预测; 据我们所知，这是一种新颖的方法：以前的研究主要集中在代理 [?] 的可进化性或适应度近似误差 [?]。所进行的研究存在局限性。递归特征消除—特征选择方法—可能会受到数据拆分中的随机性的影响，有时可能无法删除冗余特征。即便如此，每种特征选择方法都有其自身的缺点：例如，进化特征选择的计算量很大，可能需要参数调整。我们还注意到，用于进行时间景观分析的抽样策略会带来额外的计算费用。未来的工作将考虑如何最好地利用在优化过程中已经进行的适应性评估。另一个考虑因素是，选择包含的代理模型是因为它们简单明了; 然而，在未来的工作中，应该考虑更多来自其他

最先进的 SA-EA 的 Kriging 模型，如 [??] 和其他类型的代理模型，如 [?] 中的神经网络。最后，当解决方案存档变得太大时，其中一些模型的构建和评估成本可能会变得很高。在减少档案大小时，还应考虑健身景观的影响。

## 6 结论

代理辅助进化算法可以通过替换昂贵的适应度函数来有效地利用问题结构。分析替代环境与真实环境之间的相似性和差异性可以更好地了解替代环境如何通过捕获真实健身环境的各种特征来帮助 EA 执行有效的优化。在这项工作中，我们研究了进化多目标优化过程中真实景观特征和替代景观特征之间的差异。我们考虑了参考向量引导进化算法的几个代理辅助版本，并使用了众所周知的 BBOB-BIOBJ 双目标函数套件。我们的结果表明，替代景观特征与真实景观特征存在显著差异，并且这些特征在运行过程中会发生变化。尽管存在这些差异，但替代物和真实景观通常显示出高度相关性。这项工作还评估了这些不同的特征如何影响实际搜索，并从代理和真实景观中识别出关键景观特征，并具有预测算法性能的能力。这为未来多目标优化中的在线代理切换打开了大门。

## 7

确认 这项研究是研究计划开放技术计划的一部分，项目编号为 15586，该计划由荷兰研究委员会 (NWO)、Elekta 和 Xomnia 资助。此外，这项工作由荷兰经济事务部为顶级知识和创新联盟 (TKI) 提供的公私合作津贴共同资助。

## A 健身景观功能

Table 2: 对所考虑的景观特征的描述，所有这些特征都来自 [?]。

Features	Description
f_cor	correlation among objective values
dist_x_avg	average distance among solutions in the parameter space
dist_x_max	maximum distance among solutions in the parameter space
dist_f_avg	average distance among solutions in the objective space
dist_f_max	maximum distance among solutions in the objective space
nd_n	proportion of non-dominated solutions
supp_n	proportion of supported non-dominated solutions
rank_avg	average rank w.r.t. non-dominated sorting
rank_max	maximum rank w.r.t. non-dominated sorting
rank_ent	entropy of the number of solutions per rank
slo_n	proportion of single-objective local optima per objective
plo_n	proportion of Pareto local optima
plo_dist_max	avg. distance among Pareto local optima in the var. space
sup_avg_neig	avg. proportion of dominating neighbours
inf_avg_neig	avg. proportion of dominated neighbours
inc_avg_neig	avg. proportion of incomparable neighbours
lnd_avg_neig	avg. proportion of locally non-dominated neighbours
lsupp_avg_neig	avg. proportion of supported locally non-dominated neig.
dist_x_avg_neig	avg. distance from neighbours in the parameter space
dist_f_avg_neig	avg. distance from neighbours in the objective space
diff_f_avg_neig	avg. difference per objective with neig.
sup_cor_neig	neig.'s cor. of the proportion of dominating neig.
inf_cor_neig	neig.'s cor. of the proportion of dominated neig.
dist_x_cor_neig	neig.'s cor. of the avg. distance from neig. in the var. space
dist_f_cor_neig	neig.'s cor. of the avg. distance from neig. in the obj. space
diff_f_cor_neig	neig.'s cor. of the avg. difference per objective from neig.
length_aws	average length of adaptive walks
eval_aws	adaptive walk evaluations

## B 实验设置详细信息

### B.1 硬件规格

优化和特征提取过程使用由 AMD EPYC 7H12 节点组成的高性能计算执行，每个节点包含 64 个内核，基本时钟速度为 2.6GHz，每个内核 2 GB 内存。优化过程中每个独立运行的运行时间限制为 24 小时。优化过程使用 Octave 7.3.0 版本，COCO 框架 [?] <sup>4</sup> 2023 年克隆。特征提取过程使用 R 4.2.1 和脚本，这些脚本与提出指标的论文一起公开，该论文 [?] <sup>5</sup> 2023 年克隆。生成的输出数据 <sup>6</sup> 和脚本 <sup>7</sup> 可以在公共存储库中找到。降维是在 Ubuntu 22.04 环境中使用联想 IdeaPad 5 Pro 机器执行的，该机器包含 8 个 AMD Ryzen 7 6800HS 内核，时钟速度为 3.2GHz、16 GB 内存和 NVIDIA GeForce RTX 3050 Ti GPU。动态 t-SNE 来自 2023 年克隆 [?] <sup>8</sup>。性能建模是在具有 20 个第 12 代 Intel i9-12900HK 内核和 32GB 内存的机器上使用 Ubuntu 22.04 环境中的 R 执行的。

<sup>4</sup><https://github.com/numbbo/coco>

<sup>5</sup><https://gitlab.com/aliefoghe/landscape-features-mo-icops>

<sup>6</sup><https://zenodo.org/records/10575290>

<sup>7</sup>Empty

<sup>8</sup><https://github.com/paulorauber/thesne>

Table 3: 对于每个功能，在优化过程的时间限制（24 小时）内，使用 *Kriging* 的独立运行次数超过 256 次真实功能评估。

Func. Runs	Func. Runs	Func. Runs	Func. Runs
1 0	15 2	29 0	43 2
2 6	16 1	30 0	44 0
3 3	17 1	31 0	45 12
4 0	18 4	32 0	46 14
5 0	19 6	33 0	47 15
6 9	20 3	34 0	48 11
7 0	21 0	35 3	49 14
8 0	22 5	36 8	50 13
9 0	23 3	37 2	51 13
10 0	24 1	38 1	52 12
11 11	25 0	39 0	53 0
12 9	26 1	40 0	54 0
13 6	27 3	41 12	55 0
14 5	28 0	42 3	

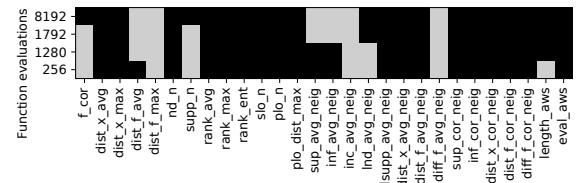


Figure 5: 比较静态 FLA 产生的单个景观特征分布与时间 FLA 在不同演化阶段产生的特征分布；其中 black 表示根据 Mann-Whitney U 检验具有统计学意义， $p$  值  $\leq 0.05$ 。

## C 静态分析与时间分析的比较

为了分别研究所有 28 个特征的静态和动态 FLA 之间的差异，按采样类型划分真实景观特征分布，并在演变的四个阶段与统计检验进行比较。这导致了 112 次 Mann-Whitney U 测试；我们认为  $p$  值为 0.05 或更低（使用 Bonferroni 校正校正）作为统计显著性的指示。由于 *Kriging* 代理项不包括针对每个 BBOB-BIOBJ 问题和时间点的运行，因此此代理项被排除在本工作的其余部分之外。在图 ?? 中，所有黑色方块表示时间和静态 FLA 特征的分布之间存在显著差异。该图显示，无论时间特征来自哪个时间点，28 个特征中有 18 个具有显著不同的静态和时间分布，并且只有 28 个特征中的 3 个特征所有四个时间点都没有与静态分布的统计差异。

## D 性能预测模型

表 ??、?? 和 ?? 分别显示了使用代理和真实景观特征、仅代理特征和仅真实特征的模型的性能预测结果。表 ??、?? 和 ?? 中提供了相关的特征重要性估计值。



**Table 4:** 算法性能预测模型。预测变量是真（黑色文本）和替代（蓝色文本）景观特征，在进化的四个点（和静态样本）通过特征选择；响应变量是由第一列中指示的替代辅助 RVEA 变体实现的最终（归一化）超容量。预测变量和响应是 15 次运行的中位数。模型质量指标是伪  $R^2$ 。每个模型都经过 1000 次迭代的引导，报告的值是 bootstrap mean | Bootstrap median (bootstrap standard error) 用于验证数据的指标。表 3 中提供了功能重要性。

sampling →	temporal (256 evals)	temporal (1280)	temporal (1792)	temporal (8192)	static
selected → KNN	[ dist-f-max, dist-f-avg, dist-f-max, dist-f-avg-neig, 差异-f-平均-neig ] $R^2$ : [0.755   0.753 (0.236)]	[ inf-avg-neig, slo-n, diff-f-avg-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-avg ] $R^2$ : [0.819   0.855 (0.176)]	[ inf-avg-neig, plo-dist-max, dist-x-avg-neig, dist-x-avg-neig, ND-N (牧-N) ] $R^2$ : [0.913   0.858 (0.174)]	[ diff-f-cor-neig, dist-f-cor-neig, lsupp-avg-neig, diff-f-cor-neig, rank-avg ] $R^2$ : [0.947   0.934 (0.096)]	[ dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-max, dist-f-avg, diff-f-avg-neig ] $R^2$ : [0.697   0.785 (0.209)]
selected → IDW	[ sup-avg-neig, eval-aws, inc-avg-neig, dist-f-avg-neig, 差异-f-平均-neig ] $R^2$ : [0.682   0.698 (0.223)]	[ diff-f-cor-neig, 长度-aws, sup-avg-neig, dist-x-cor-neig, dist-x-cor-neig ] $R^2$ : [0.834   0.786 (0.201)]	[ diff-f-cor-neig, sup-avg-neig, dist-x-cor-neig, dist-x-cor-neig, 长度-aws ] $R^2$ : [0.748   0.763 (0.204)]	[ slo-n, nd-n, dist-f-cor-neig, supp-n, diff-f-cor-neig ] $R^2$ : [0.870   0.866 (0.181)]	[ dist-f-cor-neig, sup-cor-neig, dist-f-avg, dist-f-avg-neig, diff-f-cor-neig ] $R^2$ : [0.754   0.749 (0.192)]
selected → LR-KNN	[ PLO-N, 排名, plo-dist-max, plo-dist-max, dist-f-avg ] $R^2$ : [0.867   0.832 (0.163)]	[ PLO-dist-max, SLO-N, PLO-N 型, plo-dist-max, slo-n ] $R^2$ : [0.967   0.837 (0.181)]	[ SLO-N 型, sup-avg-neig, PLO-DIST-最大, PLO-N, slo-n ] $R^2$ : [0.945   0.846 (0.180)]	[ nd-n, plo-dist-max, SLO-N 型, inf-avg-neig, slo-n ] $R^2$ : [0.923   0.836 (0.185)]	[ dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-avg, dist-f-avg-neig, dist-f-max ] $R^2$ : [0.871   0.754 (0.213)]
selected → No structure	[ diff-f-cor-neig, diff-f-avg-neig, dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-avg ] $R^2$ : [0.686   0.730 (0.215)]	[ slo-n, dist-x-avg-neig, dist-x-avg-neig, rank-ent, dist-f-cor-neig ] $R^2$ : [0.815   0.786 (0.171)]	[ dist-x-avg-neig, dist-x-avg-neig, dist-x-avg, dist-x-avg, slo-n ] $R^2$ : [0.778   0.754 (0.202)]	[ nd-n, ND-N (牧-N), supp-n, supp-n, eval-aws ] $R^2$ : [0.618   0.838 (0.172)]	[ dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, sup-cor-neig, dist-f-avg, dist-f-avg-neig ] $R^2$ : [0.728   0.701 (0.223)]

**Table 5:** 表 2 中性能预测模型的特征重要性。重要性是节点杂质的平均值（超过 500 棵树）减少，在使用该特征的每个拆分中合计。节点杂质质量化为残差平方和。报告的重要性值是 1000 次引导迭代的中位数。

sampling →	temporal (256)	temporal (1280)	temporal (1792)	temporal (8192)	static
KNN →	[ 1.288, 1.336, 1.287, 1.303, 1.276 ]	[ 1.422, 1.230, 1.306, 1.289, 1.289 ]	[ 1.333, 1.320, 1.314, 1.322, 1.308 ]	[ 0.702, 1.704, 1.658, 1.012, 1.561 ]	[ 1.429, 1.279, 1.276, 1.280, 1.262 ]
IDW →	[ 1.057, 1.039, 1.056, 1.098, 1.095 ]	[ 1.199, 1.132, 1.022, 1.037, 1.038 ]	[ 1.103, 1.109, 1.094, 1.091, 1.043 ]	[ 1.138, 1.148, 1.095, 1.091, 1.057 ]	[ 1.272, 1.117, 1.096, 1.087, 0.872 ]
LRKNN →	[ 1.383, 0.948, 1.409, 1.422, 1.387 ]	[ 1.356, 1.331, 1.332, 1.332, 1.234 ]	[ 1.345, 1.329, 1.326, 1.301, 1.284 ]	[ 1.337, 1.334, 1.336, 1.279, 1.289 ]	[ 1.570, 1.233, 1.237, 1.231, 1.227 ]
No structure →	[ 1.192, 0.987, 1.196, 1.183, 1.181 ]	[ 1.283, 1.262, 1.262, 0.897, 1.106 ]	[ 1.224, 1.218, 1.172, 1.171, 1.03 ]	[ 1.203, 1.179, 1.180, 1.183, 1.112 ]	[ 1.329, 1.158, 0.955, 1.163, 1.136 ]

**Table 6:** 仅使用代理景观特征的算法性能预测模型。预测变量是通过特征选择在演化中的四个点（以及从静态样本）按时间抽样的景观特征; 响应变量是由第一列中指示的替代辅助 RVEA 变体实现的最终（归一化）超容量。预测变量和响应是 15 次运行的中位数。模型质量指标是伪  $R^2$ 。每个模型都经过 1000 次迭代的引导，报告的值为 bootstrap mean | Bootstrap median (bootstrap standard error) 用于验证数据的指标。表 5 中提供了功能重要性。

sampling →	temporal (256 evals)	temporal (1280)	temporal (1792)	temporal (8192)	static
selected → KNN	[diff-f-cor-neig, dist-f-cor-neig, lsupp-avg-neig, dist-x-cor-neig, dist-x-avg-neig ] $R^2$ : [0.379   0.517 (0.224)]	[inf-avg-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-avg, dist-f-max, lnd-avg-neig ] $R^2$ : [0.774   0.835 (0.190)]	[dist-x-avg-neig, inf-avg-neig, nd-n, dist-x-avg, dist-f-max ] $R^2$ : [0.884   0.867 (0.177)]	[diff-f-cor-neig, dist-f-cor-neig, lsupp-avg-neig, dist-x-cor-neig, dist-x-avg-neig ] $R^2$ : [0.960   0.938 (0.092)]	[dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-max, dist-f-avg, diff-f-avg-neig ] $R^2$ : [0.697   0.785 (0.209)]
selected → IDW	[dist-f-avg, dist-f-avg-neig, diff-f-avg-neig, dist-f-max, sup-avg-neig ] $R^2$ : [0.803   0.703 (0.231)]	[diff-f-cor-neig, length-aws, dist-x-cor-neig, dist-f-max, dist-f-avg ] $R^2$ : [0.805   0.788 (0.195)]	[dist-x-cor-neig, diff-f-cor-neig, 长度-aws, 秩-平均, dist-f-avg ] $R^2$ : [0.759   0.761 (0.211)]	[dist-f-cor-neig, diff-f-cor-neig, dist-x-avg-neig, slo-n, eval-aws ] $R^2$ : [0.867   0.797 (0.194)]	[dist-f-cor-neig, sup-cor-neig, dist-f-avg, dist-f-avg-neig, diff-f-cor-neig ] $R^2$ : [0.754   0.749 (0.192)]
selected → LR-KNN	[PLO-N, PLO-Dist-MAX, rank-ent, dist-f-avg, dist-f-avg-neig ] $R^2$ : [0.879   0.818 (0.163)]	[PLO-dist-max, slo-n, PLO-N, Inc-AVG-NEIG, 长度-aws ] $R^2$ : [0.945   0.831 (0.182)]	[PLO-dist-max, slo-n, PLO-N, sup-avg-neig, ND-N (秩-N) ] $R^2$ : [0.937   0.857 (0.165)]	[SLO-N, PLO-Dist-MAX, dist-x-max, dist-x-avg-neig, diff-f-cor-neig ] $R^2$ : [0.946   0.834 (0.190)]	[dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-avg, diff-f-avg-neig, dist-f-max ] $R^2$ : [0.871   0.754 (0.213)]
selected → No structure	[diff-f-cor-neig, diff-f-avg-neig, dist-f-cor-neig, dist-f-max, dist-f-avg ] $R^2$ : [0.684   0.733 (0.213)]	[dist-x-avg-neig, dist-x-max, dist-f-cor-neig, dist-x-avg, 排名 ] $R^2$ : [0.745   0.774 (0.197)]	[dist-x-avg-neig, dist-x-avg, dist-x-max, plo-dist-max, diff-f-cor-neig ] $R^2$ : [0.751   0.779 (0.198)]	[nd-n, supp-n, eval-aws, dist-x-cor-neig, dist-x-avg-neig ] $R^2$ : [0.630   0.817 (0.186)]	[dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, sup-cor-neig, dist-f-avg, diff-f-avg-neig ] $R^2$ : [0.728   0.701 (0.223)]

**Table 7:** 表 4 中性能预测模型的特征重要性。重要性是节点杂质的平均值（超过 500 棵树）减少，在使用该特征的每个拆分中合计。节点杂质量化为残差平方和。报告的重要性值是 1000 次引导迭代的中位数。

sampling →	temporal (256)	temporal (1280)	temporal (1792)	temporal (8192)	static
KNN →	[ 1.081, 1.072 , 1.394, 1.166, 1.447 ]	[ 1.444, 1.328, 1.321, 1.309, 1.167 ]	[ 1.353, 1.371, 1.332, 1.294, 1.235 ]	[ 0.599, 1.570 , 1.514, 1.472, 1.515 ]	[ 1.429, 1.279, 1.276, 1.280, 1.262 ]
IDW →	[ 1.102, 1.092, 1.094, 1.094, 1.047 ]	[ 1.277, 1.203, 1.137, 0.917, 0.928 ]	[ 1.198, 1.167, 1.106, 1.056, 0.940 ]	[ 1.210, 1.180, 1.031, 0.968, 1.028 ]	[ 1.272, 1.117, 1.096, 1.087, 0.872 ]
LRKNN →	[ 1.418, 1.422, 0.961, 1.374, 1.361 ]	[ 1.424, 1.382, 1.379, 1.219, 1.134 ]	[ 1.386, 1.395, 1.362, 1.302, 1.107 ]	[ 1.458, 1.392, 1.295, 1.137, 1.288 ]	[ 1.570, 1.233, 1.237, 1.231, 1.227 ]
No structure →	[ 1.206, 1.009, 1.217, 1.162, 1.161 ]	[ 1.296, 1.154, 1.161, 1.211, 0.955 ]	[ 1.280, 1.205, 1.200, 1.136, 1.001 ]	[ 1.272, 1.273, 1.205, 0.948, 1.130 ]	[ 1.329, 1.158, 0.955, 1.163, 1.136 ]

**Table 8:** 仅使用真实景观特征的算法性能预测模型。预测变量是通过特征选择在演化中的四个点（以及从静态样本）按时间抽样的景观特征；响应变量是由第一列中指示的替代辅助 RVEA 变体实现的最终（归一化）超容量。预测变量和响应是 15 次运行的中位数。模型质量指标是伪  $R^2$ 。每个模型都经过 1000 次迭代的引导，报告的值为 bootstrap mean | Bootstrap median (bootstrap standard error) 用于验证数据的指标。表 7 中提供了功能重要性。

sampling →	temporal (256 evals)	temporal (1280)	temporal (1792)	temporal (8192)	static
selected → KNN	[ dist-f-max, diff-f-avg-neig, dist-f-avg, dist-f-avg-neig ] $R^2$ : [0.799   0.717 (0.254)]	[ diff-f-avg-neig, slo-n, dist-f-avg-neig, dist-f-max, dist-f-avg ] $R^2$ : [0.775   0.819 (0.196)]	[ plo-dist-max, dist-x-avg-neig, dist-x-avg, sup-avg-neig, slo-n ] $R^2$ : [0.916   0.869 (0.159)]	[ dist-x-cor-neig, diff-f-cor-neig, rank-avg, dist-x-avg-neig, dist-x-max ] $R^2$ : [0.964   0.910 (0.125)]	[ dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-max, dist-f-avg, diff-f-avg-neig ] $R^2$ : [0.697   0.785 (0.209)]
selected → IDW	[ dist-f-avg-neig, dist-f-avg, dist-f-max, sup-avg-neig, eval-aws ] $R^2$ : [0.650   0.690 (0.200)]	[ dist-x-cor-neig, sup-avg-neig, sup-cor-neig, inf-cor-neig, dist-f-max ] $R^2$ : [0.769   0.756 (0.200)]	[ dist-x-cor-neig, sup-avg-neig, plo-dist-max, sup-cor-neig, plo-n ] $R^2$ : [0.761   0.817 (0.164)]	[ slo-n, nd-n, supp-n, dist-f-cor-neig, dist-x-avg-neig ] $R^2$ : [0.913   0.852 (0.190)]	[ dist-f-cor-neig, sup-cor-neig, dist-f-avg, dist-f-avg-neig, diff-f-cor-neig ] $R^2$ : [0.754   0.749 (0.192)]
selected → LR-KNN	[ plo-dist-max, dist-f-avg, dist-f-avg-neig, dist-f-max, diff-f-avg-neig ] $R^2$ : [0.799   0.762 (0.196)]	[ plo-dist-max, sup-avg-neig, slo-n, inf-avg-neig, plo-n ] $R^2$ : [0.945   0.815 (0.217)]	[ sup-avg-neig, supp-n, slo-n, plo-dist-max, inf-avg-neig ] $R^2$ : [0.902   0.837 (0.156)]	[ nd-n, plo-dist-max, slo-n, supp-n, inf-avg-neig ] $R^2$ : [0.925   0.845 (0.194)]	[ dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, dist-f-avg, dist-f-avg-neig, dist-f-max ] $R^2$ : [0.871   0.754 (0.213)]
selected → No structure	[ dist-f-avg, dist-f-avg-neig, dist-f-max, diff-f-avg-neig, rank-ent ] $R^2$ : [0.715   0.696 (0.235)]	[ slo-n, dist-x-avg-neig, dist-x-max, dist-f-avg-neig, dist-x-avg ] $R^2$ : [0.857   0.772 (0.180)]	[ dist-x-avg-neig, dist-x-avg, dist-x-max, plo-dist-max, slo-n ] $R^2$ : [0.792   0.757 (0.207)]	[ nd-n, supp-n, lsupp-avg-neig, dist-x-max, dist-x-cor-neig ] $R^2$ : [0.575   0.834 (0.184)]	[ dist-f-cor-neig, dist-f-avg-neig, sup-cor-neig, dist-f-avg, diff-f-avg-neig ] $R^2$ : [0.728   0.701 (0.223)]

**Table 9:** 表 6 中性能预测模型的特征重要性。重要性是节点杂质的平均值（超过 500 棵树）减少，在使用该特征的每个拆分中合计。节点杂质量化为残差平方和。报告的重要性值是 1000 次引导迭代的中位数。

sampling →	temporal (256)	temporal (1280)	temporal (1792)	temporal (8192)	static
KNN →	[ 1.638, 1.643, 1.625, 1.626 ]	[ 1.346, 1.279, 1.331, 1.304, 1.300 ]	[ 1.414, 1.409, 1.341, 1.115, 1.280 ]	[ 1.422, 0.870, 1.419, 1.473, 1.427 ]	[ 1.429, 1.279, 1.276, 1.280, 1.262 ]
IDW →	[ 1.067, 1.058, 1.080, 1.109, 1.036 ]	[ 1.164, 1.144, 1.099, 1.029, 0.958 ]	[ 1.238, 1.237, 1.058, 1.037, 0.870 ]	[ 1.235, 1.253, 1.203, 0.784, 1.032 ]	[ 1.272, 1.117, 1.096, 1.087, 0.872 ]
LRKNN →	[ 1.396, 1.307, 1.310, 1.253, 1.247 ]	[ 1.433, 1.351, 1.283, 1.242, 1.219 ]	[ 1.404, 1.216, 1.348, 1.293, 1.247 ]	[ 1.333, 1.341, 1.298, 1.299, 1.288 ]	[ 1.570, 1.233, 1.237, 1.231, 1.227 ]
No structure →	[ 1.236, 1.232, 1.211, 1.221, 0.843 ]	[ 1.256, 1.185, 1.089, 1.128, 1.122 ]	[ 1.243, 1.188, 1.172, 1.16, 1.022 ]	[ 1.308, 1.266, 1.227, 1.100, 0.957 ]	[ 1.329, 1.158, 0.955, 1.163, 1.136 ]