

本文引用格式:张毅芹,韩宗宸,孙靖,等. 图神经网络引导的演化算法求解约束多目标优化问题[J]. 聊城大学学报(自然科学版),2025,38(1):135-146.

Citation format:ZHANG Yiqin, HAN Zongchen, SUN Jing, et al. Graph neural network-guided evolutionary algorithm for solving constrained multi-objective optimization problems[J]. Journal of Liaocheng University(Natural Science Edition), 2025, 38(1):135-146.

文章编号 1672-6634(2025)01-0135-12

DOI 10.19728/j.issn1672-6634.2024070005

图神经网络引导的演化算法求解约束多目标优化问题

张毅芹¹, 韩宗宸², 孙靖¹, 赵春亮¹

(1. 青岛科技大学 数据科学学院, 山东 青岛 266061; 2. 青岛科技大学 信息科学技术学院, 山东 青岛 266061)

摘要 约束多目标优化问题由于其约束复杂性、可行域不规则性和可行解稀疏性,通常存在难以精准刻画约束关系,以及难以找到收敛性好且分布均匀的帕累托非支配解等问题。为此,本文提出了一种图神经网络引导的约束多目标演化算法,该算法包括了学习模块与权向量自适应策略,其中学习模块通过训练图神经网络对解集进行快速评估,权向量自适应策略通过判别准则和更新机制增强种群多样性。实验结果表明,该算法在多个基准测试问题上显著优于现有的五个先进算法,在复杂约束多目标优化问题上表现出色。

关键词 图神经网络;约束多目标优化问题;约束多目标演化算法;权向量更新

中图分类号 N032

文献标志码 A

开放科学(资源服务)标识码(OSID)



Graph Neural Network-Guided Evolutionary Algorithm for Solving Constrained Multi-Objective Optimization Problems

ZHANG Yiqin¹, HAN Zongchen², SUN Jing¹, ZHAO Chunliang¹

(1. College of Data Science, Qingdao University of Science and Technology, Qingdao 266061, China; 2. College of Information Science and Technology, Qingdao University of Science and Technology, Qingdao 266061, China)

Abstract Constrained multi-objective optimization problems are typically challenging due to the complexity of constraints, irregularity of the feasible region, and sparsity of feasible solutions. These factors make it difficult to precisely characterize the constraint relationships and to find Pareto non-dominated solutions that are both well-converged and evenly distributed. To address these challenges, this paper proposes a graph neural network-guided constrained multi-objective evolutionary algorithm. The algorithm includes a learning module and an adaptive weight vector strategy. The learning module leverages a graph neural network trained to rapidly evaluate solution sets, while the adaptive weight vector strategy enhances population diversity through a discrimination criterion and an update mechanism. Experimental results show that the proposed algorithm significantly outperforms five state-of-the-art algorithms on various benchmark test

收稿日期:2024-07-13

基金项目:国家自然科学基金项目(62373171);山东省自然科学基金项目(ZR2023QF065);低空飞行智能服务保障山东省工程研究中心开放课题(KF2024SD006)资助

通信作者:赵春亮,男,汉族,博士,副教授,研究方向:智能优化,E-mail:zhaochunliang@qust.edu.cn.

problems and performs exceptionally well on complex constrained multi-objective optimization problems.

Key words graph neural networks; constrained multi-objective optimization problems; constraint-based multi-objective evolutionary algorithms; weight vector update

0 引言

约束多目标优化问题(Constrained Multi-Objective Optimization Problems, CMOPs)广泛存在于各种实际应用中。例如,批次流水车间调度优化问题^[1]、电力系统优化问题^[2]、无人机路径规划问题^[3]和工程优化问题^[4]。

在求解多目标优化问题时,多目标演化算法表现出优异的全局搜索能力,能够找到一组最优解。然而,在处理带有复杂约束的多目标问题时,多目标演化算法难以在保证约束满足的同时找到一组收敛性好、分布均匀的最优解。为此,若干约束处理技术被提出,并衍生出一系列约束多目标演化算法(Constraint-Based Multi-Objective Evolutionary Algorithms, CMOEAs)。CMOEAs 大致可分为四类:

(1) 基于罚函数的 CMOEAs,这类算法将约束条件纳入目标函数以简化决策空间。例如, Ma 等人^[5]提出了一种基于位移的惩罚机制来处理约束的方法,并设计了一个自适应惩罚函数 Ship 用来引入潜力解。Takahama 等人^[6]提出了一种基于种群优化算法的等效惩罚系数值 EPC。Maldonado 等人^[7]将两种动态适应惩罚函数引入到基于分解的多目标演化算法(Multi-Objective Evolutionary Algorithm Based on Decomposition, MOEA/D)的搜索过程中,促进可行解和不可行解之间的转换,加速求解 CMOPs。该类算法具有较好的鲁棒性,但是非常依赖于惩罚函数的参数设置,一旦设置不当,会严重降低算法性能。此外,在处理非线性约束或者不等式约束时,该类算法无法准确地捕捉约束的相互影响,难以高效搜索。

(2) 多种群协同进化的 CMOEAs,其利用多个种群并行搜索解空间,提高算法发现优异可行解的能力。例如, Kong 等人^[8]提出了一种动态双种群协同进化多目标进化算法 DDCMEA,通过动态调整种群的子代数量,增强平衡收敛性和可行性的能力。Ming 等人^[9]提出了一种基于三种群的协同进化框架 Trip,其中,第一种群和第二种群分别优化原始问题和无约束的简化问题,第三种群仅针对约束松弛问题,用约束松弛技术进化。Zou 等人^[10]提出了 COD 和 ADD 两类策略,并将其与 CMOEA 组合获得 MCCMO,实现 1 个主种群和 $C+1$ (C 表示约束条件数量)个辅助种群协同进化的新模式。该类算法通过种群交互信息,加速种群的收敛过程。但是,一旦种群之间的知识传递机制失效,会造成进化停滞。

(3) 多阶段的 CMOEAs,其思想是将求解 CMOPs 的过程划分为多个阶段。例如, Ming 等人^[11]将整个搜索过程分为了两个阶段,第一阶段忽略约束条件,只侧重于逼近无约束帕累托前沿,并构造辅助存档。第二阶段考虑约束条件,利用存档中逼近约束问题的帕累托前沿。Ma 等人^[12]提出了一种多阶段进化算法,通过逐个添加约束与逐步处理方式,增强收敛性和多样性。Sun 等人^[13]根据单个与公共帕累托前沿的关系得到约束优先级,利用优先级实现分阶段强调收敛性与多样性。该类算法能够根据问题特性,灵活处理约束关系。然而,多个阶段之间的有效切换是非常困难的,不恰当的切换会导致算法陷入局部最优或停滞。

(4) 基于存档的 CMOEAs,通过维护一个或多个存档,以加速种群的搜索。例如, Xia 等人^[14]提出了一种双存档 CMOEAs,提供两类个体,有助于平衡收敛性和多样性。Qin 等人^[15]提出了一种双存档辅助的推拉算法 PPTA,其中,第一个存档用于提升探索程度,第二个存档用于提高约束满足性。Gu 等人^[16]提出了存档和权向量协作的策略 CMOEA-MSWA,以存档信息更新权向量。该类算法通过存储有价值的个体,加速整体进化过程。但是,存档的构建与使用严重依赖人工经验或问题特性,不利于求解实际未知问题。

综上所述,已有 CMOEAs 在求解 CMOPs 时具有较好性能。但是,缺乏对约束特征的学习,面对未知的实际 CMOPs 时,难以快速找到最优解。基于此,本文提出了一个图神经网络引导的约束多目标演化算法,称为 MOEA/Dlearning。该算法将非线性约束转化为图结构,利用节点与边的关系表示个体之间的隐性依赖,实现对约束、收敛性与多样性特征的提取。并利用高层次特征获得图分类器与节点分类器,以精确评估解的质量。最后,通过构造权向量调整策略,维护了进化子方向的有效性。本文的主要贡献有:(1) 提出了一个图神经网络引导的约束多目标演化算法。将学习模块与 MOEA/D 相融合,使算法具备学习未知问题特征的能力,提升约束多目标演化算法的搜索性能与折衷能力。(2) 提出了基于图采样和聚合(Graph Sam-

ple and Aggregate, GraphSAGE) 的图分类器与节点分类器,以快速精确地评估解的质量。通过抽样大量基准测试案例训练图神经网络,该分类器具有识别文体特征的能力。(3) 设计了一种权向量判别准则,能够利用种群状态实时判别权向量等级。提出了一种基于聚类的权向量更新机制,确保种群在最有力的子方向上进化。(4) 本文提出的 MOEA/Dlearning 在一系列基准测试问题和实际问题中明显优于其他 5 个竞争者,证明了其在约束处理与目标折衷方面的潜力。

本文剩余部分结构如下:第一部分为预备知识与动机;第二部分为 MOEA/Dlearning 算法的详细描述;第三部分为实验结果与分析;第四部分为总结。

1 预备知识及动机

1.1 图神经网络

图神经网络(Graph Neural Networks, GNNs)^[17] 是一类专门用于处理图数据的神经网络模型。与传统的处理向量和矩阵数据的神经网络模型不同,图神经网络能够对图结构进行建模和学习,提取图结构的高层特征,并在此基础上进行图分类、节点分类等任务。GNNs 中,图表示学习主要通过节点更新实现,每个节点对自身特征与邻居节点特征做信息交互,以获得更丰富的特征。这种信息传播和聚合的过程可以通过图卷积操作实现。图 1 所示为图神经网络模型聚合所有邻居节点信息的示意图,蓝色为目标节点,它会聚合所有的邻居节点的信息。

本文选用了一种轻量级图神经网络模型 GraphSAGE^[18]。该模型使用节点采样和邻居聚合的方式来学习节点的特征,降低计算全图的复杂性。首先,邻居采样的方式有助于模型处理大规模图数据。此外,将节点特征从依赖单一局部结构转变为基于多种局部结构的归纳表示,有效避免训练过拟合。其次,通过多层聚合操作学习节点的特征,能够有效地捕捉节点在图中的结构信息和语义信息,确保模型能够利用测试数据的邻居信息得到未知数据的节点特征。GraphSAGE 中,应用池化操作来聚合邻居特征的函数表达式为

$$\mathbf{h}_v^l = \sigma(\mathbf{W}^l \max(\{\sigma(\mathbf{W}_{\text{pool}} \mathbf{h}_u^{l-1} + \mathbf{b}), \forall u \in N(v)\})), \quad (1)$$

式中 $\mathbf{h}_v^l$ 是节点 v 在第 l 层的特征向量; σ 表示激活函数; $\mathbf{W}^l$ 是第 l 层的权重矩阵; $\max$ 最大池化操作; $\mathbf{W}_{\text{pool}}$ 和 $\mathbf{b}$ 是池化层的权重和偏置; $N(v)$ 是节点 v 的邻居集合。

图 2 为 GraphSAGE 模型中采样和聚合的原理图。与一般图神经网络模型不同,GraphSAGE 只会聚合随机采样的节点的信息。在图 2 中,首先对蓝色目标节点进行邻居随机采样,再使用公式(1)聚合采样的邻居节点信息,并用于更新蓝色目标节点。将绿色节点(第一层)的信息聚合到蓝色目标节点。然后,将橙色节点(第二层)的信息聚合到绿色节点。聚合完成后,每个节点都包含了其邻居节点的信息。通过更新后的绿色节点,再次更新蓝色目标节点,最终保证目标节点包含所有新邻居节点的信息。

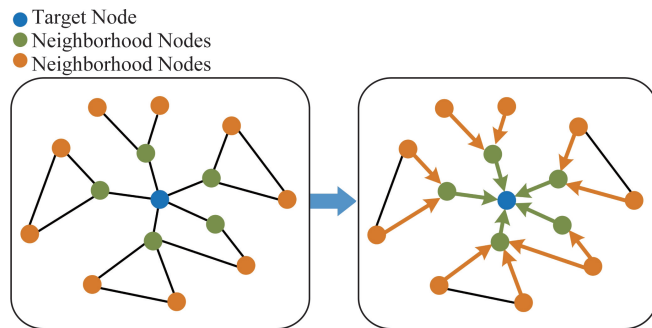


图 1 图神经网络模型聚合所有邻居节点信息的示意图

Fig. 1 A schematic diagram of a Graph Neural Network model aggregating information from all neighboring nodes

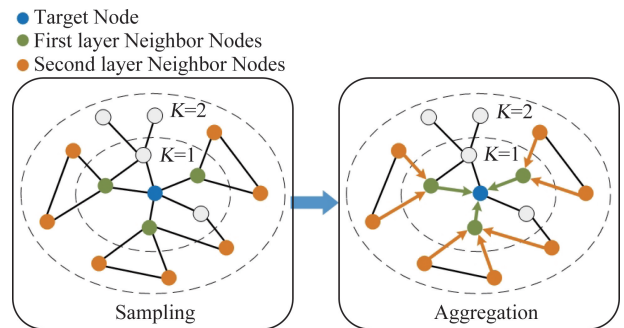


图 2 GraphSAGE 模型中采样和聚合的原理图

Fig. 2 A schematic diagram of the sampling and aggregation process in the GraphSAGE model

1.2 动机

实际 CMOPs 的帕累托前沿通常是未知、不规则的,容易导致算法性能急速恶化。原因可能是:高度非线性的帕累托解集、拓扑空间复杂的帕累托前沿导致搜索难度极大;无法获得冲突目标之间的关系,难以有效平衡解的收敛性和多样性。

研究结果表明^[19], MOEA/D 所具备的分解思想, 在解决多目标问题时具有一定的优势。通过将复杂的多目标问题划分为一组单目标子问题, 有效降低了问题的复杂性, 使得问题更易于处理, 特别是对于一些简单且已知的多目标问题, MOEA/D 能够取得较好的求解效果。然而, 在处理具有不规则、未知帕累托前沿时, 性能迅速退化。另外, 复杂约束限制了可行区域的范围, 导致种群难以进行有效搜索。GNNs 具有刻画种群拓扑结构、多重特征表达、泛化能力强等优势。通过构建图分类器和节点分类器, GNNs 能够准确评估种群之间的相似性, 为正向迁移问题的知识做准备。此外, GNNs 能够学习全局收敛性、约束性和多样性, 自适应划分决策空间, 指导搜索方向调整。同时, 可以将从已知问题中获得的知识应用于未知问题, 提升算法求解能力。

为了解决以上问题, 本文将图神经网络与 MOEA/D 相结合, 提出了一种图神经网络引导的约束多目标演化算法 MOEA/Dlearning。该算法能够利用聚类技术与综合评价指标生成通用测试函数的训练集, 为算法提供更广泛的学习基础。此外, 将学习模块融合到 MOEA/D 中, 使得算法具备学习问题、处理约束的能力, 提高了算法对复杂 CMOPs 的适应性。并且, 提出了一个新的权向量自适应策略, 可以通过学习到的知识指导种群进化, 避免陷入局部最优解或低质量解空间, 提高搜索效率的同时保持了种群的收敛性和多样性。

2 MOEA/Dlearning 算法

MOEA/Dlearning 的核心思想是利用数据与图神经网络训练一个质量评估器, 并嵌入到 MOEA/D 中, 实现对种群收敛性、多样性和约束违反的快速精准评价。MOEA/Dlearning 的算法框架如算法 1 所示。

算法 1 MOEA/Dlearning 算法框架

输入: W : 权向量, N : 种群大小

输出: P : 种群

1: 初始化: P, Z : 理想点, B : 邻居个体集合, $Class$: 权向量类别值, HC : 历史类别值集合, R : $rank$ 值, AM : 权向量关联个体矩阵, $gen = 0$, FE : 最大评估次数

2: **while** $gen = 0$ to FE **do**

3: 设子代个体集合 $offs = \emptyset$

4: **for** $i = 1$ to N **do**

5: 从 B 中随机选择两个父代个体进行交叉变异, 得到子代个体 $offspring$

6: $CV \leftarrow offspring$ 的约束违反程度

7: 修复 CV 和更新 Z

8: $offs \leftarrow offs \cup offspring$

9: 保存旧种群 $P_{old} \leftarrow P_{old} \cup P$

10: 更新 P 和 AM

11: **if** $gen \geq 0.6 \times N/FE$ **then**

12: $Pop \leftarrow offs \cup P_{old}$

13: $L_1, L_2 \leftarrow$ 模型训练(Pop, P) // 算法 3

14: $Class \leftarrow$ 判别 V

15: $HC \leftarrow HC \cup Class$

16: 计算 R

17: **if** Number of 0 in $L_1 < N$ **then**

18: (W, HC, R, P, B) $\leftarrow$ 权向量更新(N, W, HC, R, P, AM, B, p) // 算法 4

19: **end if**

20: **end if**

21: **end for**

22: **end while**

23: **return** P

首先, 进行种群初始化, 并将子代个体集合 $offs$ 设置为空集(第 1~3 行)。然后, 从邻居个体集合 B 中

随机选取两个父代执行交叉和变异操作,得到子代个体 *offspring*, 计算其约束违反程度,并修复约束违反和更新理想点(第 5~7 行)。之后,保存所有父代和子代个体(第 8~9 行)。接着,聚合 *offs* 以更新种群,利用个体与每个权向量之间的欧氏距离,用距离权向量最近的 N 个个体更新关联个体矩阵 AM (第 10 行)。当评估次数达到一定阈值时,调用训练好的图神经网络模型进行图分类预测,并调用对应的节点分类模型,以评估个体质量(第 11~13 行)。最后,进行权向量的判别与更新,具体更新策略将在算法 4 中展示(第 18 行)。

2.1 学习模块

学习模块主要包含数据集构造和模型构建两个阶段,用来学习问题的特征,精准评估候选解的质量。

2.1.1 数据集构造。随机选取 10 种先进的 CMOEAs(AGEMOEa、ANSGAIII、ARMOEA、CMOEAD、IDBEA、MaOEAIT、MOEADD、NSGAIII、PPS、RVEAa)用于求解 31 种约束多目标的测试问题,以获得充足的训练样本。具体地,CMOPs 包含 12 个 DTLZ 类问题^[20]、3 个 MW 类问题^[21]和 16 个 ZXH_CF 类问题^[22]。每个测试问题的目标函数设置为 3、5、8、10 和 15。因此,测试案例的数量为 155 个,能够覆盖大多数问题特征,DTLZ 和 MW 问题的种群数量设为 150,ZXH_CF 的种群数量设为 100。从迭代至第 4 000 代开始,每隔 20 000 代保存一次结果,共保存 4 次。此外,给所有获得的个体打标签。

算法 2 数据集构造框架

输入: 包含 N 个个体 $I_1, I_2, \dots, I_N$ 的种群 P

输出: DS : 数据集

```

1: 初始化:  $x$ : 决策变量,  $F(x)$ : 目标函数值,  $CV$ : 约束违反程度,  $L$ : 个体标签
2: for  $i = 1$  to  $N$  do
3:    $X \leftarrow$  从  $I_i$  中提取( $x, F(x), CV$ )
4:   if  $I_i$  被支配 then
5:      $L \leftarrow 1$ 
6:     计算  $I_i$  的超体积 HV
7:   else
8:      $L \leftarrow 0$ 
9:     聚合  $CV$ 
10:    if 平均  $CV$  最小 then
11:       $L \leftarrow 0$ 
12:    end if
13:     $L \leftarrow 1$ 
14:  end if
15:   $DS \leftarrow ((X, L) \cup DS)$ 
16: end for
17: 数据处理
18: 更新  $DS$ 
19: return  $DS$ 

```

算法 2 展示了构造数据集的全部过程。首先,初始化后,从每个个体中提取并保存决策变量 x 、目标函数值 $F(x)$ 和约束违反程度 CV (第 1~3 行)。然后,判断个体的支配或非支配情况:若为支配个体,则标记为非优秀(标签为 1),并计算超体积 HV;若为非支配个体,则标记为优秀(标签为 0),并对 CV 进行聚类,根据聚类结果,将平均 CV 较小的个体标记为 0,其余标记为 1(第 4~16 行)。接着,进行数据处理:(1)将支配个体按照 HV 降序排序,抛弃后 1/4 的个体;(2)补零操作,寻找目标个数相同的所有个体的最大决策变量个数,如果某个体的决策变量个数不足,则在其末尾补充零值,保证所有个体的决策变量个数相同(第 17 行)。

2.1.2 模型构建。模型构建主要包括图结构定义、图分类模型训练和节点分类模型训练。对于图结构定

义,首先,根据所构造的数据集,计算其中每个个体与其他所有个体的欧氏距离,并对这些距离进行排序。然后,对于每个个体,选取不包括自身且距离排名前4%的个体,作为其图结构中的边,以当前个体作为有向边的头节点,所选取的邻居个体作为有向边的尾节点。并且,边信息不使用邻接矩阵存放,而是仅存放头尾个体的索引,可以极大地节省存储空间,提高处理效率。最后,根据得到的节点特征和边信息,构建训练所需的图结构。

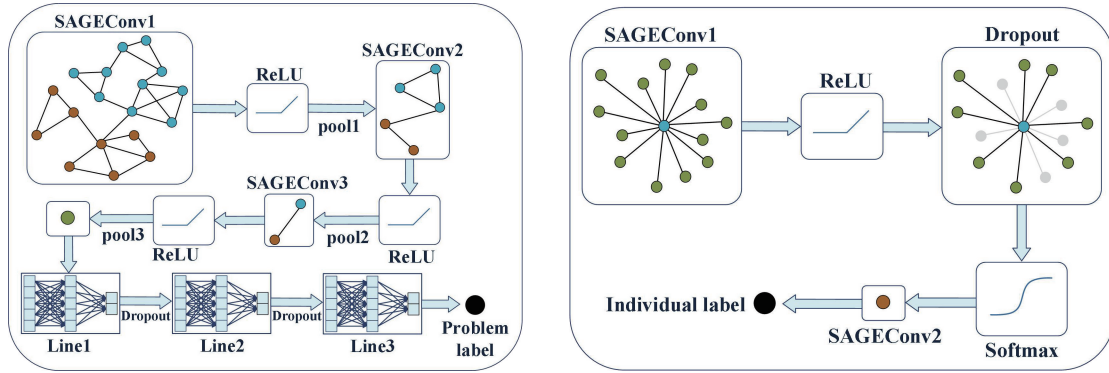


图3 模型结构 (a) 图分类模型;(b) 节点分类模型

Fig. 3 Model Structure (a) Graph classification model; (b) Node classification model

图分类模型包括三个图卷积层(SAGEConv)、三个图池化层(Pool)、三个全连接层(Line),以及相应的激活函数(ReLU)、批标准化层和随机失活层(Dropout)。在前向传播过程中,每个卷积层后进入 ReLU 激活函数,再进入池化层。池化后的节点特征经过全局最大池化和全局平均池化,聚合两个池化的结果后进入全连接层和随机失活层,最后将特征映射到最终的问题结果。

算法3 模型训练(DS, P)

输入: DS : N 个数据集 $DS_1, DS_2, \dots, DS_N$ 的集合其中包含个体特征 X , P : 种群

输出: L_1 : 问题标签, L_2 : 个体标签

```

1: 初始化:  $H$ : 边的头索引,  $T$ : 边的尾索引,  $E'$ : 边集合,  $L_1, L_2$ 
2: for  $e = 1$  to  $epoch$  do
3:   for  $i = 1$  to  $N$  do
4:     从  $DS_i$  中提取  $X$ 
5:      $H \leftarrow DS_i$  的索引
6:      $D \leftarrow$  计算  $DS_i$  中的个体与  $P$  中其他个体的距离
7:      $q = N \times 4\%$ 
8:      $T \leftarrow$  个体按  $D$  升序排序并取前  $q$  个的索引:  $T_1', T_2', \dots, T_q'$ 
9:     for  $j = 1$  to  $q$  do
10:       $T \leftarrow T_j'$ 
11:       $E \leftarrow (H, T)$ 
12:       $E' \leftarrow (E' \cup E)$ 
13:    end for
14:  end for
15:  $Graph \leftarrow (X, E')$ 
16:  $L_1 \leftarrow$  进行图分类训练
17:  $L_2 \leftarrow$  进行节点分类训练
18: end for
19: return  $L_1, L_2$ 

```

节点分类模型包括两个卷积层,第一个卷积层后进入 ReLU 激活函数,再进入随机失活层;第二个卷积

层后进入 Softmax 激活函数。第一个卷积层后通过 ReLU 和随机失活层防止过拟合,第二个卷积层后通过 Softmax 激活函数计算得到最终的点分类结果。图 3 所示为图分类与节点分类的模型结构。

算法 3 展示了模型训练的详细过程。首先,初始化边后,从构造的数据集中提取个体的 $\mathbf{x}$ 、 $F(\mathbf{x})$ 和 CV 作为节点特征,当前个体索引为边的头索引(第 1~5 行)。然后,计算当前个体与其他个体的欧式距离,与距离最近的前 $4\% \times N$ 个个体构建边,以此构建图结构(第 6~11 行)。最后,进行图分类训练和节点分类训练,确保模型具有识别问题类型与个体质量的能力(第 13~14 行)。

2.2 权向量更新策略

针对具有不规则帕累托前沿的 CMOPs,为 MOEA/Dlearning 设计了权向量判别准则和更新机制,以预测最优权向量及其邻域,从而增强算法的动态适应能力。算法 4 描述了权向量更新的细节。

算法 4 权向量更新($N, \mathbf{W}, HC, R, P, \mathbf{AM}, B, p$)

输入: N : 种群大小, $\mathbf{W}$: 权向量, HC : 历史类别值集合, R : rank 值, P : 种群, $\mathbf{AM}$: 权向量关联个体矩阵, B : 邻居个体集合, p : 删除概率

输出: $\mathbf{W}, HC, R, P, B$

```

1: if  $R \neq 0$  then
2:   if  $rand \leq p$  then
3:      $\mathbf{W} \leftarrow$  删除具有最小  $R$  值的权向量
4:     从  $\mathbf{AM}$  和  $HC$  中分别删除对应关联个体和历史类别值
5:     更新  $P$ 
6:     对  $\mathbf{W}$  进行聚类,得到最大簇的簇心 MaxC
7:      $\mathbf{W} \leftarrow (\mathbf{W}, \text{MaxC})$ 
8:     更新  $B$ 
9:   end if
10: end if
11:  $R \leftarrow 0$ 
12: return  $\mathbf{W}, HC, R, P, B$ 

```

首先,根据所得到的关联矩阵进行权向量判别,准则如下:(1) 如果权向量有关联个体,且优秀个体数量大于 1,则该权向量定义为强权向量,类别值 $Class$ 设为 4。(2) 如果权向量有关联个体,且仅有一个优秀个体,则该权向量定义为标准权向量,类别值 $Class$ 设为 3。(3) 如果权向量有关联个体,且无优秀个体,则该权向量定义为弱权向量,类别值 $Class$ 设为 2。(4) 如果权向量没有关联个体,则将其定义为差权向量,类别值 $Class$ 设为 1。

其次,记录权向量连续三代的历史 $Class$ 值,并利用公式(2)计算权向量的 $rank$ 值,

$$rank(\lambda) = Class^t(\lambda) + rClass^{t-1}(\lambda) + r^2Class^{t-2}(\lambda) + \cdots + r^{t-1}Class^{t-T+1}(\lambda), \quad (2)$$

式中 $rank(\lambda)$ 表示权向量 λ 的等级值, $Class^t(\lambda)$ 表示第 t 代权向量的类别值, r 表示学习率。 $rank$ 值可以反映权向量的性能变化趋势,是评价其未来潜力的重要指标。该判别准则和类别值可以作为分类权向量和个体特性的标准。

再次,基于权向量判别准则,获得每个权向量的类别值。根据公式(3)计算删除概率 p 值,以一定的概率删除具有最小 $rank$ 值的权向量,并删除其关联的个体以及历史 $Class$ 值(算法 4 第 2~4 行),

$$p = (-g^2 + g \times FE) / FE^2 + 0.1, \quad (3)$$

式中 p 表示概率, g 表示当前迭代次数, FE 表示最大评估次数。

最后,更新种群,使用高斯混合模型^[23]对剩余个体进行聚类,利用最大簇的簇心来生成新的权向量,确保权向量的数量不变,并更新矩阵 B (算法 4 第 5~8 行)。利用公式(3),以一定的概率删除具有最小 $rank$ 值的权向量,使得算法具备一定的随机性,避免算法过于依赖当前的局部信息,帮助种群跳出局部最优,同时避免了频繁的权向量删除。

3 实验结果与分析

为了验证 MOEA/Dlearning 的有效性,本文选取了 5 种先进的 CMOEAs 进行对比实验,分别是:基于参考点的 ANSGA-III^[24]、基于指标和拥挤距离的 IDBEA^[25],基于分解的 MOEA/D-D^[26],基于参考向量的 RVEA^[27]以及基于存档的 C-TAEA^[28]。为确保实验的公平性,本次对比实验使用 MATLAB R2023a 在 PlatEMO 平台^[29]上运行,其中对比算法的参数由各算法的作者直接提供。为全面验证 MOEA/Dlearning 的性能,本文分别在基准测试问题和实际问题上进行了一系列实验。

3.1 评价指标

选用反世代距离(Inverted Generational Distance,IGD)和超体积(Hypervolume,HV)作为评价指标,全面评估最终解的收敛性和多样性。

$$IGD(X, PF^*) = \frac{1}{|PF^*|} \sum_{x \in X, y \in PF^*} d(y, x), \quad (4)$$

式中 X 表示近似解集, PF^* 表示最优帕累托前沿, y 代表真实的最优帕累托前沿中的每个解, x 表示与 y 最近的解, $d(y, x)$ 表示 y 与 x 的欧式距离。IGD 越小代表解的质量越高。

$$HV(X, V) = \delta(\bigcup_{i=1}^{|S|} v_i), \quad (5)$$

式中 V 表示理想点集合。 δ 表示 Lebesgue 测度,用来测量体积。 $|S|$ 表示非支配解集的数目, v_i 表示理想点与第 i 个解构成的超体积。HV 越大表示算法的性能越好。

3.2 基准测试问题

为验证 MOEA/Dlearning 的整体性能,选择了 4 个 C_DTLZ 问题作为基准测试问题,并且每个问题包含 3, 5, 8, 10, 15 共 5 个不同的目标个数。DTLZ 类问题具有非线性、复杂和非凸帕累托前沿等特点,解决这类问题的挑战在于,在非凸帕累托前沿上找到均匀分布的解,同时避免陷入局部最优。为了保证算法的公平性,测试问题的种群规模统一设置为 100,最大评价次数 FE 为 300 000,且所有算法在每个测试问题上独立运行 30 次。

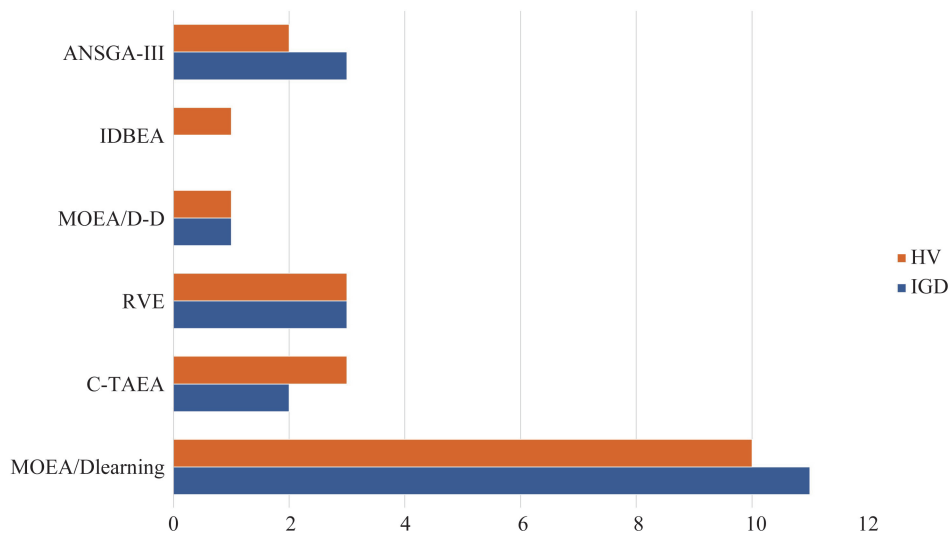


图 4 测试问题的 IGD 与 HV 指标的最优值分布情况

Fig. 4 Distribution of optimal values of IGD and HV indicators for testing problems

从图 4 可以看出,相较于其他算法,MOEA/Dlearning 在求解基准测试问题时更有效性,所获得的解具有良好的收敛性、多样性和分布性,而其他比较算法在许多基准测试问题上均表现相对较差。

3.3 对比实验结果

图 4 所示为算法 MOEA/Dlearning 与 ANSGA-III、IDBEA、MOEA/D-D、RVEA 和 C-TAEA 在基准测试问题中获得的 IGD 和 HV 指标的最佳结果的个数。可以发现,MOEA/Dlearning 在所有测试问题中关于

IGD 指标,获得了 11 个最佳 IGD 结果,ANSGA-III 和 RVEA 各获得 3 个,C-TAEA 获得 2 个,MOEA/D-D 获得 1 个,IDBEA 未获得最佳 IGD 结果。关于 HV 指标,MOEA/Dlearning 获得了 10 个最佳 HV 结果,C-TAEA 和 RVEA 各获得 3 个,ANSGA-III 获得 2 个,IDBEA 和 MOEA/D-D 各获得 1 个。

3.4 实际问题结果

本节选择 3 个实际问题验证所提 MOEA/Dlearning 的性能,他们分别是汽车侧面碰撞设计问题^[30]、水资源管理问题^[31]和散货船设计问题^[32]。其中,汽车侧面碰撞设计问题包含 3 个目标、7 个决策变量和 10 个约束条件;水资源管理问题包含 5 个目标、3 个决策变量和 7 个约束条件;散货船设计问题包含 3 个目标、6 个决策变量和 9 个约束条件。

三个问题的最大评估次数 FE 均设为 200 000,每个问题独立运行 30 次。表 1 所示为 MOEA/Dlearning 与 5 个对比算法在 3 个实际问题上的 IGD 指标的均值和标准差,标黑数据表示最优值, M 表示目标个数, D 表示决策变量个数。在威尔卡松测度下,“+”“-”和“=”分别表示比较算法与 MOEA/Dlearning 相比,获得的结果更好、更差和相似。

表 1 3 个实际问题的 IGD 指标的均值和标准差

Table 1 Mean and standard deviation of IGD indicators for three practical problems

Problem	M	D	ANSGA-III	IDBEA	MOEA/D-D	RVEA	C-TAEA	MOEA/Dlearning
Car side impact design problem	3	7	5.096 4E+0 (7.54E+0)=	2.024 2E+1 (1.47E+1) -	1.238 3E+1 (2.43E+0) -	3.674 1E+1 (8.12E+0) -	3.046 2E+0 (2.05E+0) -	2.129 6E+0 (1.14E-3)
Water resource management problem	5	3	2.531 9E+6 (3.56E+4)=	2.549 2E+6 (1.04E+5)=	3.343 0E+6 (2.55E+5) -	2.508 2E+6 (1.20E+5) -	2.537 7E+6 (4.25E+4)=	2.467 5E+6 (1.76E+5)
Bulk carriers design problem	3	6	5.397 9E+3 (8.44E+2) +	1.003 4E+5 (4.73E+5) +	4.630 7E+3 (1.67E+2) +	4.598 2E+3 (1.46E+3) +	4.767 5E+3 (4.69E+2) +	8.203 3E+9 (9.49E+8)
+/-/=			1/0/2	1/1/1	1/2/0	1/2/0	1/1/1	

从表 1 可以看出,MOEA/Dlearning 在 3 个实际问题中取得了 2 个最佳 IGD 结果,RVEA 仅获得了 1 个,其余 4 个算法均未获得最佳 IGD 结果。这表明 MOEA/Dlearning 在这 3 个实际问题上的性能优于其他 5 个比较算法。实验不仅验证了 MOEA/Dlearning 在复杂多目标问题中的有效性,还体现了其在实际应用中的广泛适应性和竞争力。相比于其他 5 个先进算法,MOEA/Dlearning 在求解实际问题时展示了更高的效率和更优的解质量。

3.5 消融实验

本文所提出的 MOEA/Dlearning 包括两个主要组件,为了验证每个组件的有效性,本次实验设计了以下两种变体:(1) 变体 I:所提算法结合了学习模块,使算法具备了学习约束问题的能力,从而引导种群搜索。为了验证学习模块的有效性,将不结合学习模块的 MOEA/Dlearning 作为变体 I。(2) 变体 II:本文在所提算法中采用了新的权向量划分标准和更新策略,以一定概率删除劣质权向量,以引导种群的进化方向。为了验证其有效性,将不进行权向量划分与更新的 MOEA/Dlearning 作为变体 II。

所有参数设置与上节中相同。表 2 和表 3 分别展示了变体 I、变体 II 与 MOEA/Dlearning 算法在测试问题上的 IGD 指标和 HV 指标的结果对比,标黑数据表示最优值。

表 2 MOEA/Dlearning 及其变体的 IGD 指标的均值和标准差

Table 2 Mean and standard deviation of IGD indicators for MOEA/Dlearning and its variants

Problem	M	D	Variant I	Variant II	MOEA/Dlearning
Cl_DTLZ1	3	7	2.247 0E-2 (3.29E-4) +	6.335 9E+0 (4.19E+0) -	4.713 9E-2 (1.40E-2)
	5	9	1.150 6E-1 (1.88E-2) -	9.128 1E-1 (7.12E-2) -	7.662 4E-2 (2.56E-3)
	8	12	2.031 4E-1 (4.31E-2) -	2.591 8E+2 (1.82E+2) -	1.118 5E-1 (1.14E-4)
	10	14	1.632 4E-1 (3.51E-3) +	1.299 9E+0 (6.49E-2) -	2.065 1E-1 (5.66E-2)
	15	19	3.776 6E-1 (1.13E-1) -	3.628 8E-1 (1.43E-1) -	1.892 8E-1 (2.94E-3)

(续)表2 MOEA/Dlearning 及其变体的 IGD 指标的均值和标准差

Table 2 Mean and standard deviation of IGD indicators for MOEA/Dlearning and its variants

Problem	M	D	Variant I	Variant II	MOEA/Dlearning
C1_DTLZ3	3	12	3.311 1E+0 (4.10E+0) —	2.323 7E+1 (1.46E-1) —	5.446 4E-2 (4.86E-7)
	5	14	2.120 8E-1 (1.55E-4) +	2.344 1E+1 (1.76E-1) —	2.344 1E+1 (1.76E-1)
	8	17	1.186 4E+1 (3.51E-2) —	2.352 3E+1 (2.42E-1) —	3.869 4E-1 (1.80E-4)
	10	19	1.444 7E+1 (3.29E-2) —	2.364 9E+1 (1.74E-1) —	6.361 7E-1 (2.83E-1)
	15	24	1.455 8E+1 (6.38E-2) =	2.366 7E+1 (2.80E-1) —	1.201 5E+0 (1.59E-1)
C2_DTLZ2	3	12	1.227 2E-1 (3.09E-2) —	1.118 8E+0 (3.30E-2) —	5.233 3E-2 (6.09E-7)
	5	14	2.220 3E-1 (8.94E-4) +	1.309 4E+0 (0.00E+0) =	3.737 3E-1 (5.50E-2)
	8	17	3.057 6E-1 (5.48E-6) +	4.155 4E-1 (2.38E-2) —	8.583 9E-1 (5.73E-2) —
	10	19	4.547 7E-1 (3.19E-5) +	2.554 1E+1 (2.91E+0) —	8.239 4E-1 (2.75E-2) —
	15	24	1.291 3E+0 (8.64E-3) =	1.432 9E+0 (0.00E+0) —	1.101 5E+0 (1.30E-1) +
C3_DTLZ4	3	12	NaN (NaN)	3.300 0E-1 (2.43E-1) +	1.418 0E+0 (2.79E-1)
	5	14	NaN (NaN)	NaN (NaN)	5.894 1E-1 (9.94E-2)
	8	17	NaN (NaN)	NaN (NaN)	9.198 2E-1 (8.13E-2)
	10	19	NaN (NaN)	NaN (NaN)	9.706 3E-1 (6.08E-2)
	15	24	NaN (NaN)	NaN (NaN)	1.188 6E+0 (4.32E-2)
+/-/=			6/7/2	1/14/1	

表3 MOEA/Dlearning 及其变体的 HV 指标的均值和标准差

Table 3 Mean and standard deviation of HV indicators for MOEA/Dlearning and its variants

Problem	M	D	Variant I	Variant II	MOEA/Dlearning
C1_DTLZ1	3	7	8.030 1E-1 (1.00E-2) +	5.125 7E-2 (1.47E-1) —	7.496 3E-1 (5.46E-2)
	5	9	8.832 3E-1 (3.03E-2) +	2.166 0E-1 (1.36E-1) —	7.937 9E-1 (7.40E-2)
	8	12	5.402 5E-1 (7.81E-2) —	9.264 7E-3 (5.07E-2) +	8.398 1E-1 (1.58E-2)
	10	14	4.616 1E-1 (6.71E-2) —	1.266 6E-2 (2.69E-2) —	8.777 1E-1 (5.51E-2)
	15	19	2.604 7E-1 (1.05E-1) —	2.001 1E-2 (3.43E-2) —	7.450 2E-1 (4.15E-2)
C1_DTLZ3	3	12	5.044 6E-1 (2.20E-1) =	3.237 0E-2 (4.66E-2) —	5.595 9E-1 (2.03E-5)
	5	14	8.090 1E-1 (1.80E-1) +	8.036 1E-3 (1.28E-3) +	7.742 4E-1 (4.57E-4)
	8	17	8.840 2E-1 (8.16E-4) +	0.000 0E+0 (0.00E+0) =	0.000 0E+0 (0.00E+0)
	10	19	7.670 8E-1 (3.53E-1) +	0.000 0E+0 (0.00E+0) —	1.276 1E-1 (1.90E-1)
	15	24	9.303 5E-2 (2.88E-2) +	2.239 6E-5 (7.63E-5) —	1.587 9E-1 (1.45E-1)
C2_DTLZ2	3	12	4.910 1E-1 (2.38E-6) +	0.000 0E+0 (0.00E+0) —	4.181 2E-1 (3.33E-2)
	5	14	4.215 9E-1 (5.43E-2) —	1.304 1E-1 (1.68E-1) —	5.952 4E-1 (8.76E-4)
	8	17	1.232 7E-1 (6.58E-2) —	3.907 1E-3 (1.53E-2) —	5.923 0E-1 (5.69E-4)
	10	19	6.644 9E-1 (5.17E-4) +	3.333 7E-3 (1.83E-2) —	8.662 6E-2 (4.93E-2)
	15	24	2.377 2E-1 (1.25E-1) +	2.050 1E-3 (1.12E-2) —	8.118 8E-2 (6.04E-3)
C3_DTLZ4	3	12	NaN (NaN)	1.126 5E-1 (8.26E-2) —	6.735 4E-1 (1.01E-1)
	5	14	NaN (NaN)	NaN (NaN)	7.956 2E-1 (5.76E-2)
	8	17	NaN (NaN)	NaN (NaN)	5.465 4E-1 (1.29E-1)
	10	19	NaN (NaN)	NaN (NaN)	4.397 6E-1 (1.68E-1)
	15	24	NaN (NaN)	NaN (NaN)	2.863 5E-1 (1.94E-1)
+/-/=			9/4/2	2/13/1	

从表2和表3中可以看出,MOEA/Dlearning 在所有测试问题中获得的 IGD 与 HV 指标的最优值数量

远超于两个变体的最优值数量。这表明,本文所提出的学习模块、新的权向量划分标准和更新策略显著优化了算法性能,提升了算法处理复杂约束多目标问题的能力。

3.6 实验小结

本次实验结果表明,所提的 MOEA/Dlearning 算法在基准测试问题和实际问题均表现出显著优势。在基准测试问题中,MOEA/Dlearning 获得了最多的最佳 IGD 和 HV 结果,分别为 11 个和 10 个,表现优于其他 5 个对比算法。实际问题的实验同样验证了 MOEA/Dlearning 的有效性,在 3 个实际问题中获得了 2 个最佳 IGD 结果,优于其他算法。此外,消融实验表明,MOEA/Dlearning 中的学习模块和权向量划分策略显著提升了算法的性能,有效引导了种群的进化。总的来说,MOEA/Dlearning 在复杂约束多目标问题中展示了卓越的收敛性、多样性和解质量,具有较强的适应性和竞争力。

4 结论

本文提出了一种图神经网络引导的约束多目标演化算法,该算法结合了学习和演化两种智能行为,旨在克服现有 CMOEAs 在解决 CMOPs 时的不足。首先,利用数据训练了一个基于图神经网络的学习模块,该模块能够自主识别解的约束违反、多样性、收敛性等指标,从而为环境选择提供最优子代。然后,提出了一个权向量判别标准和基于聚类的更新机制,使算法能够利用种群信息调整权向量,动态生成有潜力的进化方向,引导种群快速逼近最优帕累托前沿。本文提出的 MOEA/Dlearning 能够加速种群搜索,通过感知问题特性来增强探索与开发的过程。实验结果表明,该方法具有巨大潜力。未来研究中,将采用降维技术和平衡技术构造面向约束问题的高质量数据集,以解决 CMOPs 中的未知性和动态性。此外,构建适用于约束优化问题的新型轻量级图神经网络架构,对于推动学习机制嵌入到演化算法中具有重要意义。

参 考 文 献

- [1] WANG J, TANG H, LEI D. A feedback-based artificial bee colony algorithm for energy-efficient flexible flow shop scheduling problem with batch processing machines[J]. *Applied Soft Computing*, 2024, 153: 111254.
- [2] VALENCIA-RIVERA G H, BENAVIDES-ROBLES M T, MORALES A V, et al. A systematic review of metaheuristic algorithms in electric power systems optimization[J]. *Applied Soft Computing*, 2024, 150: 111047.
- [3] LI Y, ZHANG L, CAI B, et al. Unified path planning for composite UAVs via Fermat point-based grouping particle swarm optimization[J]. *Aerospace Science and Technology*, 2024, 148: 109088.
- [4] TIAN A Q, LIU F F, LV H X. Snow geese algorithm: a novel migration-inspired meta-heuristic algorithm for constrained engineering optimization problems[J]. *Applied Mathematical Modelling*, 2024, 126: 327-347.
- [5] MA Z, WANG Y. Shift-based penalty for evolutionary constrained multi-objective optimization and its application[J]. *IEEE Transactions on Cybernetics*, 2021, 53(1): 18-30.
- [6] TAKAHAMA T, SAKAI S. An equivalent penalty coefficient method: an adaptive penalty approach for population-based constrained optimization[C]. //IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC). IEEE, 2019: 1620-1627.
- [7] MALDONADO H M, ZAPOTECAS-MARTÍNEZ S. A dynamic penalty function within MOEA/D for constrained multi-objective optimization problems[C]. //IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC). IEEE, 2021: 1470-1477.
- [8] KONG X, YANG Y, LV Z, et al. A dynamic dual-population co-evolution multi-objective evolutionary algorithm for constrained multi-objective optimization problems[J]. *Applied Soft Computing*, 2023, 141: 110311.
- [9] MING F, GONG W, WANG L, et al. A tri-population based co-evolutionary framework for constrained multi-objective optimization problems[J]. *Swarm and Evolutionary Computation*, 2022, 70: 101055.
- [10] Zou J, Sun R, Liu Y, et al. A multipopulation evolutionary algorithm using new cooperative mechanism for solving multiobjective problems with multiconstraint[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2023, 28(1): 267-280.
- [11] MING F, GONG W, ZHEN H, et al. A simple two-stage evolutionary algorithm for constrained multi-objective optimization[J]. *Knowledge-Based Systems*, 2021, 228: 107263.
- [12] MA H, WEI H, TIAN Y, et al. A multi-stage evolutionary algorithm for multi-objective optimization with complex constraints[J]. *Information Sciences*, 2021, 560: 68-91.

- [13] Sun R, Zou J, Liu Y, et al. A multistage algorithm for solving multiobjective optimization problems with multiconstraints[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2022, 27(5): 1207-1219.
- [14] XIA M, DONG M. A novel two-archive evolutionary algorithm for constrained multi-objective optimization with small feasible regions[J]. *Knowledge-Based Systems*, 2022, 237: 107693.
- [15] QIN C, MING F, GONG W, et al. Constrained multi-objective optimization via two archives assisted push-pull evolutionary algorithm[J]. *Swarm and Evolutionary Computation*, 2022, 75: 101178.
- [16] GU Q, LIU R, HUI Z, et al. A constrained multi-objective optimization algorithm based on coordinated strategy of archive and weight vectors[J]. *Expert Systems with Applications*, 2024, 244: 122961.
- [17] CORSO G, STARK H, JEGELKA S, et al. Graph neural networks[J]. *Nature Reviews Methods Primers*, 2024, 4(1): 17.
- [18] Hamilton W, Ying Z, Leskovec J. Inductive representation learning on large graphs[C]. // *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2017, 30: 1024-1034.
- [19] ZHENG W, TAN Y, YAN Z, et al. A novel clustering-based evolutionary algorithm with objective space decomposition for multi/many-objective optimization[J]. *Information Sciences*, 2024, 677: 120940.
- [20] DEB K, THIELE L, LAUMANN S, et al. Scalable test problems for evolutionary multi-objective optimization[C]. // *Evolutionary multi-objective optimization: theoretical advances and applications*. London: Springer, 2005: 105-145.
- [21] MA Z, WANG Y. Evolutionary constrained multi-objective optimization: test suite construction and performance comparisons[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2019, 23(6): 972-986.
- [22] ZHOU Y, XIANG Y, HE X. Constrained multi-objective optimization: test problem construction and performance evaluations[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2020, 25(1): 172-186.
- [23] REYNOLDS D A. Gaussian mixture models[J]. *Encyclopedia of Biometrics*, 2009, 741: 659-663.
- [24] JAIN H, DEB K. An evolutionary many-objective optimization algorithm using reference-point based nondominated sorting approach, part II: handling constraints and extending to an adaptive approach[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2013, 18(4): 602-622.
- [25] ASAFUDDOULA M, RAY T, SARKER R. A decomposition-based evolutionary algorithm for many objective optimization[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2014, 19(3): 445-460.
- [26] LI K, DEB K, ZHANG Q, et al. An evolutionary many-objective optimization algorithm based on dominance and decomposition[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2014, 19(5): 694-716.
- [27] CHENG R, JIN Y, OLHOFFER M, et al. A reference vector guided evolutionary algorithm for many-objective optimization[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2016, 20(5): 773-791.
- [28] LI K, CHEN R, FU G, et al. Two-archive evolutionary algorithm for constrained multi-objective optimization[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2018, 23(2): 303-315.
- [29] TIAN Y, CHENG R, ZHANG X, et al. PlatEMO: a matlab platform for evolutionary multi-objective optimization [Educational Forum][J]. *IEEE Computational Intelligence Magazine*, 2017, 12(4): 73-87.
- [30] JAIN H, DEB K. An evolutionary many-objective optimization algorithm using reference-point based nondominated sorting approach, part II: Handling constraints and extending to an adaptive approach[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2013, 18(4): 602-622.
- [31] KUMAR A, WU G, ALI M Z, et al. A benchmark-suite of real-world constrained multi-objective optimization problems and some baseline results[J]. *Swarm and Evolutionary Computation*, 2021, 67: 100961.
- [32] DANIEL H, ANTUNES C H, TROVAO J P F, et al. Shore operations enhancement of bulk carriers based on a multi-objective sizing approach[J]. *Energy Conversion and Management*, 2023, 276: 116497.

(责任编辑:刘庆松)