

控制与决策

Control and Decision

基于马尔科夫网混合分布估计算法的多维0-1背包问题求解

王境琦, 江振鑫, 吴楚格, 夏元清

引用本文:

王境琦, 江振鑫, 吴楚格, 等. 基于马尔科夫网混合分布估计算法的多维0-1背包问题求解[J]. *控制与决策*, 2026, 41(4): 1005-1013.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2025.0909>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[混合柯西变异和均匀分布的蝗虫优化算法](#)

Hybrid Cauchy mutation and uniform distribution of grasshopper optimization algorithm
控制与决策. 2021, 36(7): 1558-1568 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.1609>

[基于粒子群算法的满载需求可拆分车辆路径规划](#)

Split vehicle route planning with full load demand based on particle swarm optimization
控制与决策. 2021, 36(6): 1397-1406 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.1323>

[基于16方向24邻域改进蚁群算法的机器人路径规划](#)

Mobile robots path planning based on 16-directions 24-neighborhoods improved ant colony algorithm
控制与决策. 2021, 36(5): 1137-1146 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.0600>

[基于FWADE-ELM的短时交通流预测方法](#)

Short-term traffic flow forecasting based on hybrid FWADE-ELM
控制与决策. 2021, 36(4): 925-932 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.1103>

[基于多种群分解预测的动态多目标引力搜索算法](#)

Dynamic multi-objective gravitational searching algorithm based on multi-population decomposition prediction
控制与决策. 2021, 36(12): 2910-2918 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.1002>

基于马尔科夫网混合分布估计算法的多维 0-1 背包问题求解

王境琦, 江振鑫, 吴楚格[†], 夏元清

(北京理工大学 自动化学院, 北京 100081)

摘要: 针对多维 0-1 背包问题, 提出一种基于马尔科夫网的混合分布估计算法 (hDEUM), 使用马尔科夫网络 (MRF) 作为概率模型, 采用无向图表示变量间的依赖关系. 基于多维背包问题的特性设计解的修复机制和局部增强操作, 有效修复采样后新种群的不可行解, 并设计邻域搜索算子以增强算法的局部搜索能力. 最后基于多个标准测试集进行实验, 通过对比经典进化算法与 hDEUM 的求解效果验证了所提出算法的有效性和性能的优越性.

关键词: 多维背包问题; 分布估计算法; 马尔科夫网络; 概率图模型; 邻域搜索

中图分类号: TP273 文献标志码: A

DOI: 10.13195/j.kzyjc.2025.0909

引用格式: 王境琦, 江振鑫, 吴楚格, 等. 基于马尔科夫网混合分布估计算法的多维 0-1 背包问题求解 [J]. 控制与决策, 2026, 41(4): 1005-1013.

Hybrid distribution estimation using Markov network for multi-dimensional 0-1 knapsack problems

WANG Jing-qi, JIANG Zhen-xin, WU Chu-ge[†], XIA Yuan-qing

(School of Automation, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: For the 0-1 multi-dimensional knapsack problem (MdKP), a hybrid distribution estimation algorithm using the Markov network (hDEUM) is proposed, which uses a Markov random field as the probability distribution model and represents the relationships between variables with an undirected graph. To effectively rectify the infeasible solutions in the post-sampling population, a repair mechanism and a local enhancement operator are designed. Additionally, a neighborhood search operator is proposed to enhance the algorithm's local search capability. Experimental results on several standard benchmark sets demonstrate that the proposed hDEUM is effective and outperforms several existing evolutionary algorithms designed for solving the MdKP, validating its superiority for solving the 0-1 MdKP.

Keywords: multi-dimensional knapsack problem; estimation of distribution algorithm; Markov random field; probabilistic graphical model; neighborhood search

0 引言

多维背包问题^[1-3] (multi-dimensional knapsack problem, MdKP) 研究在多维资源约束下选择一组物品, 其优化目标为最大化总收益. 该问题广泛应用于云计算资源分配^[4] 和资本预算^[5] 等领域, 兼具重要的理论意义和实践价值. MdKP 是强 NP 难问题, 其求解方法主要分为精确算法、启发式规则和智能优化算法 3 类^[3]. 精确算法方面, 分支定界^[6] 和动态规划^[7] 可用于该问题的求解. 基于 MdKP 解空间的几何特性, 文献 [8] 提出一种正交约束生成方法降低问题容量约束维度. 然而, 精确求解算法的计算复杂度

难以有效处理大规模问题. 启发式规则方面, 文献 [9] 提出随机优先级搜索元启发方法 (meta-heuristic for randomized priority search, Meta-RaPS), 通过随机优先级规则构建可行解. 在此基础上, 文献 [10] 引入分布估计算法和 Q -learning 改进 Meta-RaPS, 显著提高了算法性能. 文献 [11] 提出一种结合线性规划和启发式规则的算法来逼近最优解. 上述算法复杂度低, 但全局搜索能力和鲁棒性存在一定的局限性. 智能优化算法方面, 文献 [12] 提出和声搜索 (harmony search, HS) 并引入修复算子处理不可行解. 文献 [13] 提出多宇宙优化算法, 通过随机信息优化 MdKP 解.

收稿日期: 2025-08-31; 录用日期: 2025-12-16.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (62573056).

责任编辑: 王凌.

[†]通信作者. E-mail: wucg@bit.edu.cn.

文献 [14] 结合粒子群优化和遗传算法, 随机选择背包某些维度进行交叉或变异以生成新种群. 文献 [15] 设计了一种新型二级协作果蝇优化算法, 通过一级和二级果蝇的产生、交流及修复机制来平衡算法的全局探索与局部开发能力. 文献 [16] 提出了蚁群优化与拉格朗日松弛相结合的混合算法, 利用对偶信息定义效用指标以指导蚁群优化算法的搜索过程. 文献 [17] 提出一种混合和声搜索算法 (hybrid harmony search, HHS), 将果蝇优化算法集成到和声搜索中以跳出局部最优, 并采用两种修复算子确保解的可行性, 对于解的开发与探索取得了良好平衡. 上述智能优化算法能够平衡算力和优化性能, 适用于大规模组合优化问题求解.

分布估计算法^[18-19] (estimation of distribution algorithm, EDA) 是一种基于概率模型的进化算法, 一方面通过概率模型描述候选解在解空间的分布从而实现全局搜索; 另一方面通过采样优势解的变量分布, 引导搜索趋向解空间中更具潜力的区域. EDA 已广泛应用于包括 MdKP 在内的复杂组合优化问题求解^[20] 和机器学习中的聚类、参数调整^[21] 等领域. 基于变量间独立性假设的差异, EDA 通常分为变量无关 EDA、双变量相关 EDA 及多变量相关 EDA. 常见的变量无关 EDA 包括 PBIL (population based incremental learning)^[22]、UMDA (univariate marginal distribution algorithm)^[23] 以及 CGA (compact genetic algorithm)^[24] 等. 双变量相关 EDA 包括 MIMIC (mutual information maximizing input clustering)^[25] 和 COMIT (combining optimizers with mutual information trees)^[26] 等. 多变量相关 EDA 包括 FDA (factorized distribution algorithms)^[27]、ECGA (extended compact genetic algorithm)^[28]、基于贝叶斯网络的优化算法^[29] 以及基于马尔科夫网络的 EDA (distribution estimation using Markov networks, DEUM)^[30-31]. 其中, 贝叶斯网络利用有向无环图表征变量间的因果关系, 马尔科夫网络利用无向图表征变量间的概率依赖关系.

目前, EDA 已成功应用于如 MdKP^[32-33] 和任务调度^[34-35] 等复杂组合优化问题的求解, 并表现出高效的性能. 为更好表征 MdKP 中决策变量与多维资源约束的耦合关系, 本文提出一种基于马尔科夫网的混合分布估计算法 (hDEUM). hDEUM 基于 MRF 的多变量相关性表征优势^[36-37], 构建 MRF 以描述决策变量间的条件独立结构及联合概率分布. 同时, 为增强 hDEUM 的搜索能力, 本文设计了问题特征驱动的解的修复机制和基于邻域的局部搜索算子.

1 多维背包问题

给定 n 个价值为 $p_j (j = 1, 2, \dots, n)$ 的物品和一个拥有 m 种资源的背包, 每种资源有一定的容量限制 $B_i (i = 1, 2, \dots, m)$, 且物品 j 对资源 i 的消耗量为 a_{ij} . MdKP 的目标是在满足各个资源约束条件下, 从 n 个物品中选出一个组合放入背包中, 使得所选物品总价值最大, 其数学描述如下:

$$\max f(x) = \sum_{j=1}^n p_j x_j. \quad (1)$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq B_i, \quad i = 1, 2, \dots, m; \quad (2)$$

$$x_j \in \{0, 1\}, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (3)$$

其中: n 为物品数量; m 为资源约束维度; p_j 为第 j 个物品的价值; a_{ij} 为物品 j 对资源 i 的消耗量; B_i 为资源 i 的总量; 决策变量 $x_j = 1$ 表示选择物品 j , 相应地, $x_j = 0$ 表示不选择物品 j .

2 基于马尔科夫网的混合分布估计算法

EDA 是一系列基于统计学习理论的群体进化算法, 通过建立概率模型描述候选解在搜索空间中的分布信息^[38]. 标准 EDA 算法流程如下.

step 1: 初始化种群 P .

step 2: 选择优势种群 D .

step 3: 根据优势群体构建概率模型.

step 4: 对概率模型采样生成新种群.

step 5: 判断是否满足终止条件, 若满足则输出当前最优解, 否则转至 step 2.

与 PBIL、UMDA 等传统变量无关 EDA 不同, hDEUM 考虑变量间的相关性. 首先根据种群优势个体的变量分布构建 MRF 作为概率模型, 并使用最小二乘法或奇异值分解确定网络参数, 最后结合近似推断采样生成新种群. 基于 MdKP 特性, 设计解的修复算子和局部增强机制以修复不可行解, 同时设计多起点邻域搜索算子来提高算法的局部搜索能力, 实现全局搜索和局部增强的协同进化.

2.1 前置知识

2.1.1 马尔科夫网络

MRF 将一个解 $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 视为随机变量 $X = \{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ 的取值. 本文使用 (G, Ψ) 表示 MRF. 其中: $G = (V, E)$ 为 MRF 图结构, 节点集合 V 对应随机变量 X , 无向边集合 E 表示变量间的条件独立关系; Ψ 为 MRF 参数集合, 由 MRF 各团对应势函数的参数组成. 记 $N = \{N_1, N_2, \dots, N_n\}$ 为图 G 上的邻域集合, 其中 N_i 表示节点 X_i 的邻接节

点集合. 图 1 展示了包含 6 个随机变量的 MRF. 其中变量 X_1 有 2 个邻接节点, 其邻域 $N_1 = \{X_2, X_3\}$; 同样 $N_2 = \{X_1, X_3, X_4, X_5\}$.

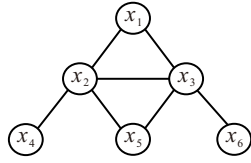


图1 基于 6 个随机变量的 MRF 结构

2.1.2 团和势函数

团是 MRF 图结构 $G = (V, E)$ 中的完全子图. 具体而言, 若节点集合 $C \in V$ 满足对任意不同节点 $u, v \in C$ 都有边 $(u, v) \in E$, 则称 C 为一个团. 特别地, MRF 中每个节点 X_i 自身构成一元团. 当 $|C| = 2$ 时, 团由一条边连接的两个节点组成, 称为二元团; 当 $|C| = 3$ 且 3 个节点两两相连时, 称为三元团. 进一步地, 若不存在节点 $v \in V \setminus C$ 使得 $C \cup \{v\}$ 仍为团, 则称 C 为极大团. 对于任一团 C_i , 其势函数 $u(c_i)$ 的计算方式如下. 一元团 $C_i = \{X_i\}$ 的势函数 $u(c_i)$ 为

$$u(c_i) = \beta_i x_i. \tag{4}$$

二元团 $C_{ij} = \{X_i, X_j\}$ 的势函数为

$$u(c_{ij}) = \beta_{ij} x_i x_j. \tag{5}$$

其中: β_i 和 β_{ij} 均为对应团的参数, $\beta_1, \beta_2 \in \Psi$. 高阶团的势函数按上述形式推广, 下面将使用团的势函数来描述变量的联合概率分布.

2.1.3 联合概率分布的因子分解

MRF 基于局部马尔科夫性质^[39] 表征变量间的相关性, 对于给定随机变量集合, X_i 的取值条件概率由其邻居集合 N_i 确定, 即

$$p(x_i | x - \{x_i\}) = p(x_i | N_i). \tag{6}$$

进一步地, 基于 Hammersley-Clifford 定理^[40], 将随机变量 X 的联合概率分布分解为势函数的乘积形式, 有

$$p(x) = \frac{1}{Z} \prod_{i=1}^m \psi(c_i), \tag{7}$$

$$Z = \sum_{x \in \Omega} \prod_{i=1}^m \psi(c_i). \tag{8}$$

其中: $\psi(c_i)$ 为定义在团 C_i 上的指数势函数且 $\psi(c_i) > 0$; Z 为配分函数, 用于保证联合概率分布归一化; Ω 为所有可能解的集合. 由于非极大团的势函数可被吸收到其对应极大团的势函数中, MRF 的联合概率分布可等价地由极大团势函数表征. 根据文献

[31], 使用 Gibbs 能量模型表示指数势函数 $\psi(c_i)$, 有

$$\psi(c_i) = e^{-\frac{u(c_i)}{T}}. \tag{9}$$

其中: T 为温度参数, $u(c_i)$ 为团 C_i 的势函数. 将 MRF 中所有团的势函数之和定义为 $U(x)$, 有

$$U(x) = \sum_{i=1}^m u(c_i). \tag{10}$$

将式 (9) 和 (10) 代入 (7) 得

$$p(x) = \frac{e^{-\sum_{i=1}^m \frac{u(c_i)}{T}}}{Z} = \frac{e^{-\frac{U(x)}{T}}}{Z}. \tag{11}$$

2.2 MRF 概率模型初始化

概率模型是 EDA 的核心, 其作用在于表征优势个体在解空间的分布并以此指导新种群的生成. 本文选取 MRF 作为概率模型以表征决策变量间的复杂依赖关系, 其中节点表征 MdKP 的决策变量, 无向边表征变量间的条件独立特性. 概率模型的构建主要分为两步: 首先学习变量间的条件独立关系, 从而确定 MRF 网络结构 (结构学习); 随后找出图 G 对应的极大团并估计其势函数的参数 (参数学习). 上述结构学习和参数学习均基于优势种群 D 的适应度和变量取值, 下面介绍其具体实现.

2.2.1 概率模型结构学习

MRF 结构学习通过 D 中变量的联合概率分布确定各变量间的条件独立关系. 首先计算 D 中各变量两两之间的互信息, 构建互信息矩阵. 根据文献 [41], 任意两个随机变量 A 和 B 的互信息计算如下:

$$I(A, B) = \sum_{a,b} p(a, b) \log \left(\frac{p(a, b)}{p(a) \cdot p(b)} \right). \tag{12}$$

其中: 边缘概率 $p(a)$ 、 $p(b)$ 及联合概率 $p(a, b)$ 利用 D 中随机变量分布的频率来估计得到. 若变量对的互信息值高于阈值 TR, 则在 MRF 中为该节点对添加一条无向边. 阈值 TR 计算如下:

$$TR = \text{avg}(\text{MI}) \times \text{sig}. \tag{13}$$

其中: $\text{avg}(\text{MI})$ 为互信息矩阵元素的平均值, sig 为显著性参数. 此外, 为避免概率模型结构过于复杂导致的局部最优, 规定每个节点的最大邻居数不超过 MN, 即候选连边中仅保留与该节点互信息值最大的前 MN 条无向边.

2.2.2 概率模型参数学习

MRF 参数学习的本质在于确定其极大团势函数的参数. 本文采用 Bron-Kerbosch 算法^[42] 搜索 MRF 的极大团集合, 然而考虑到问题规模增大会导致极大团数量的指数级增长, 为避免极大团数量过大导致的模型参数学习的复杂度增长, 本文设计多

种极大团筛选策略,在保证参数学习有效性的同时,提升算法计算效率.相关筛选策略将在实验部分详细介绍,下面对 MRF 参数学习过程进行说明.

首先,假设对 MRF 采样得到解 x 的概率与其适应度 $f(x)$ 成正比,则联合概率分布 $p(x)$ 表示为

$$p(x) = \frac{f(x)}{Z}. \quad (14)$$

其中:适应度 $f(x) > 0$, $Z = \sum_{y \in \Omega} f(y)$ 为配分函数, Ω 为所有可能解的集合.将式 (11) 代入式 (14),建立马尔科夫适应度模型 (Markovfitness model, MFM)^[36] 如下:

$$p(x) = \frac{e^{-\frac{U(x)}{T}}}{\sum_{y \in \Omega} e^{-\frac{U(y)}{T}}} \equiv \frac{f(x)}{\sum_{y \in \Omega} f(y)}. \quad (15)$$

式 (15) 表征了 MRF 联合概率分布与解 x 适应度的对应关系,即在 MdKP 中最大化适应度 $f(x)$ 与在 MFM 框架下最小化能量函数 $U(x)$ 在目标是等价的.不失一般性,令 $T = 1$,结合式 (10) 可得 MFM 方程为

$$-\ln f(x) = \sum_{i=1}^m u(c_i). \quad (16)$$

进一步地,根据 D 中精英解的适应度和对应决策变量的取值列出上述 MFM 方程,可得 MFM 线性方程组如下:

$$F = A\theta^T + C. \quad (17)$$

其中:向量 F 由 D 中各精英解的 $-\ln(f(x))$ 组成,向量 θ 由 MRF 参数构成,矩阵 A 通过代入 D 中各决策变量的取值得到, C 为方程组的截距.为确保决策变量取值的对称性,将 MdKP 的 0-1 编码映射为 -1 和 1 .最终,通过最小二乘法或奇异值分解等数值方法求解上述 MFM 方程组,从而估计 MRF 参数 θ .

2.3 概率模型的采样

MRF 结构和参数确定后,联合概率分布 $p(x)$ 确定,对其采样生成新种群. DEUM^[31] 基于联合概率分布生成边缘概率分布,并使用 Gibbs 采样生成新种群.考虑到 Gibbs 采样在变量维度较高时采样时间过长,本文在 DEUM 采样环节的基础上进行改进,使用变分推断^[43] 近似 Gibbs 采样,在不损失精度的前提下大幅度提升算法收敛速度,实现对概率模型的高效采样.其中变分推断利用近似分布 $q(x)$ 逼近真实分布 $p(x)$,使得两个分布的 KL 散度 $KL(q(x)||p(x))$ 最小,其具体流程如下.

step 1: 初始化近似分布 $q(x)$, 温度 T .

step 2: 对每个变量 x_i , 固定其他变量分布,根据平均场方程更新 x_i 的边缘分布 $q_i(x_i)$.

step 3: 降低温度 T , 若当前迭代次数小于变分推断最大迭代次数,则返回 step 2.

step 4: 采样近似边缘分布 $q^*(x)$, 生成新解 x' .

2.4 修复机制和局部搜索算子

2.4.1 不可行解的修复机制

由于 MdKP 的多维资源约束在紧致程度上存在差异,全局最优解和高质量的局部最优解往往分布在可行域边界附近. hDEUM 通过概率模型引导种群在高质量的解空间定向搜索,但上述方法可能导致采样生成的新种群偏离可行域,从而产生一定比例的不可行解.因此本文引入基于伪效用比 q_j 的不可行解修复机制和可行解的局部增强机制,其中伪效用比的计算基于文献 [32] 的代理对偶方法.不可行解修复机制的流程如下.

step 1: 对具有 n 个变量的不可行解 $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]$, 将 0-1 变量按 MdKP 的伪效用比 (q_j) 升序排列.

step 2: 按照升序逐个遍历决策变量,直到出现 $x_k = 1$, 将变量置为 0, 得到新解 x' .

step 3: 若新解仍违反 MdKP 约束,则保留新解并返回 step 2; 若满足约束,则修复完成.

为进一步提高求解质量,根据 MdKP 的特性设计可行解的局部增强机制,具体流程如下.

step 1: 对具有 n 个变量的可行解 $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]$, 将 0-1 变量按 MdKP 的伪效用比 (q_j) 降序排列.

step 2: 按照降序逐个遍历决策变量,直到出现 $x_k = 0$, 将变量置为 1, 得到新解 x' .

step 3: 若新解违反 MdKP 约束,则保留原解并返回 step 2; 若满足约束或 step 2 已完成对所有变量的降序遍历,则结束局部增强.

对于采样生成的新解,若该解不可行,则依次执行解的修复和局部增强操作;若可行,则执行可行解的局部增强操作来提高解的质量.

2.4.2 多起点邻域搜索机制

为提高 hDEUM 局部搜索能力,本文设计了问题特征驱动的多起点邻域搜索,其核心为变邻域下降算法 (variable neighborhood descent, VND)^[44].多起点邻域搜索以精英个体为初始解,对其施加多次扰动以改变搜索轨迹的起点,进而降低搜索陷入局部最优的概率.考虑到扰动可能导致新解不可行,使用修复算子保证其可行性,随后基于预先设计的邻

域结构, 对扰动解应用变邻域下降算法. 多起点邻域搜索伪代码如下.

算法1 多起点邻域搜索.

输入: 初始解 $initial_solution$;
 输出: 改进解 s_{global} , 改进解适应度 f_{global} .

- 1: $f_{global} \leftarrow -\infty$
- 2: $s_{global} \leftarrow initial_solution$
- 3: for $i = 1$ to num_starts do
- 4: $s_{perturb} \leftarrow Perturb(s_{global})$
- 5: $s_{temp} \leftarrow RepairOperator(s_{global})$
- 6: $s_{local}, f_{local} \leftarrow VNDsearch(s_{temp})$
- 7: If $f_{local} > f_{global}$ then
- 8: $f_{global} \leftarrow f_{local}$
- 9: $s_{global} \leftarrow s_{local}$
- 10: end if
- 11: end for
- 12: return s_{global}, f_{global}

算法 1 中, $RepairOperator$ 为不可行解的修复操作, $VNDsearch$ 为变邻域下降算法. VND 选取 3 种邻域结构 $N = N_1, N_2, N_3$, 分别为 One_flip , K_flip 和 $Segment_flip$. 其中: One_flip 定义为在 0-1 编码序列中随机选取 1 位并将其取值翻转, K_flip 定义为在编码序列中随机选取 k 位并将其取值翻转, $Segment_flip$ 定义为随机选取某一段编码序列并将整段取值翻转.

算法2 $VNDsearch$.

输入: 修复后的扰动解 s_{temp} ;
 输出: 当前最优解 s_{curr} , 当前最优值 f_{curr} .

- 1: $s_{curr} \leftarrow s_{temp}$
- 2: $f_{curr} \leftarrow f_{temp}$
- 3: 初始化邻域结构 $N = \{N_1, N_2, N_3\}$
- 4: While True do
- 5: Improved \leftarrow False
- 6: for $j = 1$ to $|N|$ do
- 7: $s', f' \leftarrow FirstImprove(s_{curr}, N_j)$
- 8: if $f' > f_{curr}$ then
- 9: $s_{curr} \leftarrow s'$
- 10: $f_{curr} \leftarrow f'$
- 11: Improved \leftarrow True
- 12: break
- 13: end if
- 14: end for
- 15: if not Improved then

- 16: break
- 17: end if
- 18: end while
- 19: return s_{curr}, f_{curr}

算法 2 中, $FirstImprove$ 表示首次改进的搜索策略, 即应用不同邻域结构以随机或遍历的方法产生邻域解. 若出现更好的解, 则停止邻域搜索, 并用新解替换原解.

2.5 算法整体流程

算法整体流程如图 2 所示.

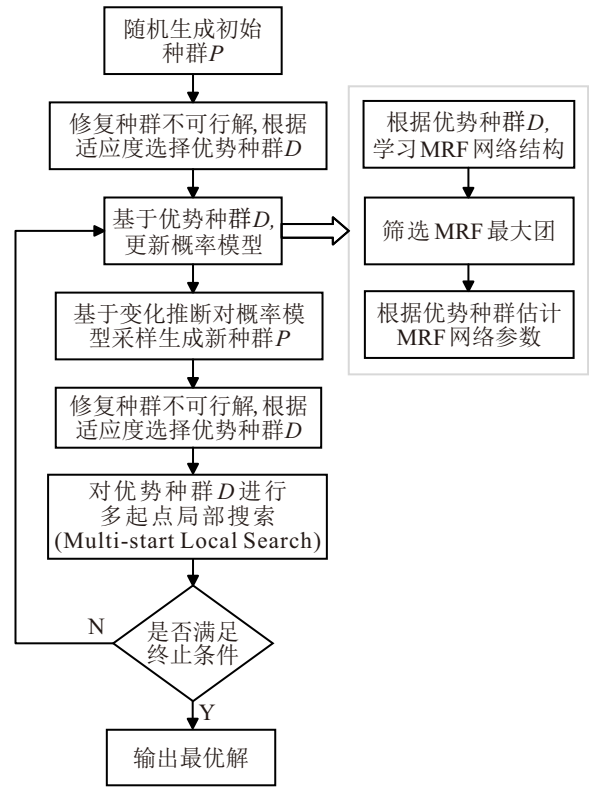


图2 hDEUM 流程

3 仿真实验

为验证 hDEUM 有效性, 选取 3 组 MdKP 标准测试集. 测试集 1^[45] 包含 8 个小规模实例 (物体个数分别为 15, 20, 28, 39, 60, 105), 测试集 2 (<http://hces.bus.olemiss.edu/tools.html>) 包含 11 个中规模和大规模实例, 测试集 3 (<http://people.brunel.ac.uk/mastjjb/jeb/info.html>) 包含 20 个中规模实例.

仿真程序在 Pycharm2025.2.0.1 环境中编写, 运行环境为 Windows11 系统, Intel Core i7-14700KF 处理器 (3.40 GHz). hDEUM 算法的截止条件为达到预先设定的最大迭代次数, 对每个问题实例多次实验并记录结果.

3.1 参数设置及其影响

为确定 hDEUM 超参数设置, 对概率模型关键

参数及极大团筛选方式进行显著性分析实验,统计 hDEUM 所得最优解与已知最优解 (BKS) 的偏差 $\text{Gap} = \frac{\text{BKS} - \text{hDEUM}}{\text{BKS}} \times 100\%$. 其中: 1) MRF 结构学习中显著性参数 sig 分别设置为 0.8, 1.0, 1.1, 1.2, 1.4 进行测试; 2) hDEUM 设置了 4 种极大团筛选方式, 分别为: 保留所有极大团 (C1), 从极大团中提取所有二元团 (C2), 从极大团中提取所有二元团和三元团 (C3), 从极大团中提取所有三元团 (C4).

3.1.1 MRF 结构学习中显著性参数的影响

hDEUM 在测试集 1 的小规模实例上均已获得已知最优解, 为使实验更具代表性, 在测试集 2 和测试集 3 上分别开展超参数敏感性分析. 除显著性参数 sig 外, 其余参数设置均保持不变, 极大团筛选方法为保留所有极大团 (C1), 结果如表 1 和表 2 所示.

表1 sig对 hDEUM 最优相对偏差的影响 (测试集 2)

sig	0.8	1.0	1.1	1.2	1.4
Gap/%	0.2377	0.2376	0.2342	0.7114	0.7338

表2 sig对 hDEUM 最优相对偏差的影响 (测试集 3)

sig	0.8	1.0	1.1	1.2	1.4
Gap/%	0.0165	0.0109	0.0092	0.0270	0.0315

由表 1 和表 2 可见, 过大的 sig 导致 MRF 结构过于稀疏, 影响变量间的关键依赖关系的提取与学习, 进而降低了后续极大团筛选及 MRF 参数估计的有效性, 最终可能导致求解质量下降. 此外, 过小的 sig 引入冗余边, 增加噪声, 导致算法计算复杂度过高, 可能导致模型过拟合或陷入局部最优. 因此 sig 应选择适中的值, 有助于保留重要结构信息, 提升 hDEUM 的整体性能.

3.1.2 极大团筛选方式的影响

基于显著性参数的实验结果 sig = 1.1, 进一步分析极大团筛选策略对 hDEUM 性能的影响, hDEUM 在测试集 2 和测试集 3 的结果如表 3 和表 4 所示.

表3 极大团筛选方式对 hDEUM 的影响 (测试集 2)

极大团筛选方式	C1	C2	C3	C4
Gap/%	0.2026	0.2040	0.1934	0.2040

表4 极大团筛选方式对 hDEUM 的影响 (测试集 3)

极大团筛选方式	C1	C2	C3	C4
Gap/%	0.0741	0.0698	0.0721	0.0662

由表 3 可见, 在大规模问题实例中, 采用从极大团提取所有二元团和三元团 (C3) 的策略能获得最

优效果. 这表明当变量数量增加导致极大团规模迅速增大时, 提取所有二元团和三元团的方法能够在降低计算复杂度的同时, 保留变量间的关键依赖关系. 由表 4 可见, 对于中规模实例, 从极大团提取所有三元团 (C4) 的效果最好, 表明三元团在捕捉中规模下的变量依赖关系方面更具代表性. 基于上述结果, 后续实验中对 3 个测试集分别设置如下: sig = 1.1. 极大团筛选方式上, 测试集 2 采用 C3, 测试集 3 采用 C4. 测试集 1 仅包含小规模实例, 算法性能受参数设置影响较小, 极大团筛选方法采用 C1.

此外, 其他算法相关参数设置如下:

1) 变分推断采用模拟退火策略, 初始温度 $T = 1.0$, 降温系数 $R = 0.9$, 变分推断的最大迭代次数 $\text{sample_iter} = 100$;

2) 种群 P 个体数 $\text{pop_size} = 100$, 优势种群 D 个体数 $\text{elite_size} = 10$;

3) MRF 结构学习中最大邻居数 $\text{MN} = 5$;

4) hDEUM 最大迭代次数 $\text{max_iter} = 100$;

5) 局部搜索的起点数量 $\text{num_points} = 5$.

3.2 实验结果与比较

首先, 基于小规模测试集 1 开展算法性能验证, 选择 HEDA^[33] 作为对比算法. 每个实例独立运行 20 次, 统计所有独立实验所得解与已知最优解之间的最优相对偏差 (MIN.DEV) 和平均相对偏差 (AVG.DEV), 所得结果如表 5 所示.

表5 hDEUM 与 HEDA 基于测试集 1 的结果对比

问题	维度	已知最优解	hDEUM		HEDA	
			MIN.DEV	AVG.DEV	MIN.DEV	AVG.DEV
Knap15	15, 10	4015	0	0	0	0
Knap20	20, 10	6120	0	0	0	0
Knap28	28, 10	12400	0	0	0	0
Knap39	39, 5	10618	0	0	0	0
Sento1	60, 30	7772	0	0	0	0
Sento2	60, 30	8722	0	0	0	0
Weing7	105, 2	1095445	0	0	0	0
Weing8	105, 2	624319	0	0	0	0

由表 5 可见, 对于小规模 MdKP 实例, hDEUM 性能与 HEDA 一致, 基本能搜索到已知最优解, 验证了 hDEUM 在小规模问题上的有效性.

下面基于测试集 2 验证 hDEUM 求解中规模 and 大规模 MdKP 的有效性, 选择 TCFOA^[15] 和 AL_MKP^[16] 作为对比算法. 考虑大规模问题的复杂性, 对每个问题实例均独立运行 10 次, 统计所有独立实验所得解与已知最优解之间的最优相对偏差、平均相对偏差和偏差标准差 (STD.DEV), 结果如表 6 所

表6 hDEUM 与 AL_MKP、TCFOA 基于测试集 2 的结果对比

维度	BKS	AL_MKP			TCFOA			hDEUM		
		MIN.DEV	AVG.DEV	STD.DEV	MIN.DEV	AVG.DEV	STD.DEV	MIN.DEV	AVG.DEV	STD.DEV
100.15	3766	0.0000	0.0765	0.0449	0.0000	0.0783	0.0379	0.1062	0.2203	0.0435
100.25	3958	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0366	0.0501	0.0253	0.1162	0.0574
150.25	5650	-0.0177	0.0290	0.0176	0.0000	0.0539	0.0153	0.1238	0.1874	0.0335
150.50	5764	0.0520	0.1430	0.0236	0.0173	0.0867	0.0263	0.0867	0.1284	0.0478
200.25	7557	0.0265	0.0709	0.0298	0.0661	0.1111	0.0238	0.0529	0.0887	0.0207
200.50	7672	0.1564	0.2310	0.0273	0.1303	0.1642	0.0181	0.0912	0.1460	0.0230
500.25	19215	0.1197	0.1397	0.0079	0.0364	0.0757	0.0138	0.0208	0.0406	0.0122
500.50	18801	0.4468	0.4751	0.0130	0.2287	0.2430	0.0107	0.0372	0.0612	0.0151
1500.25	58085	0.0861	0.1258	0.0093	0.0723	0.1020	0.0178	0.0172	0.0389	0.0108
1500.50	57292	0.3159	0.3607	0.0129	0.2059	0.2471	0.0117	0.0262	0.0445	0.0089
1500.100	95231	0.4095	0.4199	0.0058	0.2436	0.2556	0.0049	0.0273	0.0467	0.0092

表7 hDEUM 与 HHS 基于测试集 3 的结果对比

问题编号	BKS	HHS				hDEUM			
		AVG	MIN.DEV	AVG.DEV	VAR.DEV	AVG	MIN.DEV	AVG.DEV	VAR.DEV
5.100.00	24381	24378.4	0	0.0107	0.0465	24381	0	0	0
5.100.01	24274	24264.4	0	0.0395	0.0323	24274	0	0	0
5.100.02	23551	23532.75	0	0.0775	0.0304	23549.7	0	0.0055	0.0003
5.100.03	23534	23489.9	0.0297	0.1874	0.0680	23529.8	0	0.0178	0.0002
5.100.04	23391	23964.85	0	0.1090	0.0209	23981	0	0.0417	0.0029
5.100.05	24613	24603.05	0	0.0404	0.0688	24613	0	0	0
5.100.06	25591	25538.8	0	0.2052	0.1184	25591	0	0	0
5.100.07	23410	23368.8	0	0.1760	0.0318	23410	0	0	0
5.100.08	24216	24216	0	0	0	24216	0	0	0
5.100.09	24411	24379.8	0	0.1278	0.0999	24411	0	0	0
10.100.00	23064	23041	0.0304	0.0997	0.0974	23053	0.0304	0.0477	0.0002
10.100.01	22801	22739.55	0	0.2695	0.1161	22756.3	0	0.1960	0.0048
10.100.02	22131	22096.25	0	0.1570	0.1435	22131	0	0	0
10.100.03	22772	22753.85	0.0395	0.0797	0.0928	22772	0	0	0
10.100.04	22751	22657.05	0.2373	0.4129	0.1941	22707.8	0	0.1899	0.0100
10.100.05	22777	22717.42	0	0.2616	0.1107	22724.8	0.1668	0.2292	0.0070
10.100.06	21875	21814.9	0.1853	0.2747	0.0941	21837.4	0	0.1719	0.0081
10.100.07	22635	22518.7	0.3711	0.5138	0.0327	22559.4	0	0.3340	0.0138
10.100.08	22511	22416.75	0.3243	0.4187	0.0557	22452.4	0	0.2603	0.0330
10.100.09	22702	22645.78	0	0.2476	0.0789	22702	0	0	0

示, 其中 BKS 为问题已知最优解.

由表 6 可见, hDEUM 在测试集 2 中 54.55% 的测例上优于 AL_MKP 和 TCFOA, 表明 hDEUM 性能的优越性. 具体地, 当物品数量大于 200 时, 在最优偏差指标方面, hDEUM 相比 AL_MKP 和 TCFOA 分别提高了 0.268% 和 0.153%, 在平均偏差指标方面, hDEUM 相比 AL_MKP 和 TCFOA 分别提高了 0.276% 和 0.158%. 而针对前 5 个 hDEUM 表现相对较差的测例, 在最优偏差指标方面, hDEUM 相比 AL_MKP 和 TCFOA 的差距仅为 0.064% 和 0.057%, 在平均偏差指标方面, hDEUM 相比 AL_MKP 和 TCFOA 的差距仅为 0.073% 和 0.063%.

为进一步验证 hDEUM 求解 MdKP 的有效性,

基于测试集 3 与 HHS^[17] 进行对比, 结果如表 7 所示. 由表 7 可见, hDEUM 在 90% 的测例上找到了已知最优解. 相比 HHS, hDEUM 在 30% 的测例上效果更好, 在剩余测例上效果与 HHS 持平, 表明 hDEUM 是求解 MdKP 的有效方法.

4 结论

本文提出了一种有效解决多维 0-1 背包问题的基于马尔科夫网的混合分布估计算法, 使用 MRF 作为概率分布模型以表征变量条件独立关系. 基于 MdKP 的特性设计了不可行修复机制, 有效修复了采样后种群中的不可行解; 另外, 设计了局部搜索算子以提高算法性能. 基于标准测试问题的实验表明, hDEUM 无论对于中小规模实例还是大规模实例

均具有优良的求解效果. 进一步的工作将针对改进 hDEUM 概率模型的采样和更新操作, 以降低其算法复杂度, 并讨论多变量相关 EDA 对其他组合优化问题应用, 如生产调度问题等.

参考文献 (References)

- [1] Fréville A. The multidimensional 0-1 knapsack problem: An overview[J]. *European Journal of Operational Research*, 2004, 155(1): 1-21.
- [2] Laabadi S, Naimi M, El Amri H, et al. The 0/1 multidimensional knapsack problem and its variants: A survey of practical models and heuristic approaches[J]. *American Journal of Operations Research*, 2018, 8(5): 395-439.
- [3] Cacchiani V, Iori M, Locatelli A, et al. Knapsack problems — An overview of recent advances. Part II: Multiple, multidimensional, and quadratic knapsack problems[J]. *Computers & Operations Research*, 2022, 143: 105693.
- [4] Yang Y N, Zhao L P, Li Y M, et al. INFless: A native serverless system for low-latency, high-throughput inference[C]. *Proceedings of the 27th ACM International Conference on Architectural Support for Programming Languages and Operating Systems*. New York: ACM, 2022: 768-781.
- [5] 王丽娜, 陆芷. 多维背包问题的启发式算法研究探讨[J]. *软件*, 2024, 45(2): 34-36.
(Wang L N, Lu Z. Heuristic algorithms of multidimensional knapsack problem[J]. *Software*, 2024, 45(2): 34-36.)
- [6] Shih W. A branch and bound method for the multiconstraint zero-one knapsack problem[J]. *Journal of the Operational Research Society*, 1979, 30(4): 369-378.
- [7] Toth P. Dynamic programming algorithms for the zero-one knapsack problem[J]. *Computing*, 1980, 25(1): 29-45.
- [8] Setzer T, Blanc S M. Empirical orthogonal constraint generation for Multidimensional 0/1 Knapsack Problems[J]. *European Journal of Operational Research*, 2020, 282(1): 58-70.
- [9] Moraga R J, DePuy G W, Whitehouse G E. Meta-RaPS approach for the 0-1 multidimensional knapsack problem[J]. *Computers & Industrial Engineering*, 2005, 48(1): 83-96.
- [10] Arin A, Rabadi G. Integrating estimation of distribution algorithms versus Q -learning into Meta-RaPS for solving the 0-1 multidimensional knapsack problem[J]. *Computers & Industrial Engineering*, 2017, 112: 706-720.
- [11] Hanafi S, Wilbaut C. Improved convergent heuristics for the 0-1 multidimensional knapsack problem[J]. *Annals of Operations Research*, 2011, 183(1): 125-142.
- [12] Kong X Y, Gao L Q, Ouyang H B, et al. Solving large-scale multidimensional knapsack problems with a new binary harmony search algorithm[J]. *Computers & Operations Research*, 2015, 63: 7-22.
- [13] Abdel-Basset M, El-Shahat D, Faris H, et al. A binary multi-verse optimizer for 0-1 multidimensional knapsack problems with application in interactive multimedia systems[J]. *Computers & Industrial Engineering*, 2019, 132: 187-206.
- [14] Mingo López L F, Gómez Blas N, Arteta Albert A. Multidimensional knapsack problem optimization using a binary particle swarm model with genetic operations[J]. *Soft Computing*, 2018, 22(8): 2567-2582.
- [15] 张清勇, 钱浩, 雷德明. 求解多维背包问题的二级协作果蝇优化算法[J]. *控制与决策*, 2019, 34(3): 503-510.
(Zhang Q Y, Qian H, Lei D M. Two-level cooperative fruit fly optimization algorithm for multidimensional knapsack problem[J]. *Control and Decision*, 2019, 34(3): 503-510.)
- [16] 任志刚, 赵松云, 黄姗姗, 等. 求解多维背包问题的蚁群-拉格朗日松弛混合优化算法[J]. *控制与决策*, 2016, 31(7): 1178-1184.
(Ren Z G, Zhao S Y, Huang S S, et al. Hybrid optimization algorithm of ant colony optimization and Lagrangian relaxation for solving multidimensional knapsack problem[J]. *Control and Decision*, 2016, 31(7): 1178-1184.)
- [17] Zhang B, Pan Q K, Zhang X L, et al. An effective hybrid harmony search-based algorithm for solving multidimensional knapsack problems[J]. *Applied Soft Computing*, 2015, 29(C): 288-297.
- [18] Hauschild M, Pelikan M. An introduction and survey of estimation of distribution algorithms[J]. *Swarm and Evolutionary Computation*, 2011, 1(3): 111-128.
- [19] 王圣尧, 王凌, 方晨, 等. 分布估计算法研究进展[J]. *控制与决策*, 2012, 27(7): 961-966.
(Wang S Y, Wang L, Fang C, et al. Research advances in estimation of distribution algorithms[J]. *Control and Decision*, 2012, 27(7): 961-966.)
- [20] Ceberio J, Mendiburu A, Lozano J A. A roadmap for solving optimization problems with estimation of distribution algorithms[J]. *Natural Computing*, 2024, 23(1): 99-113.
- [21] Larrañaga P, Bielza C. Estimation of distribution algorithms in machine learning: A survey[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2024, 28(5): 1301-1321.
- [22] Baluja S. Population-based incremental learning: A method for integrating genetic search based function optimization and competitive learning[R]. Pittsburgh: CMU, 1994.
- [23] Mühlenbein H. The equation for response to selection and its use for prediction[J]. *Evolutionary Computation*, 1997, 5(3): 303-346.
- [24] Harik G R, Lobo F G, Goldberg D E. The compact genetic algorithm[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 1999, 3(4): 287-297.
- [25] de Bonet J S, Isbell C L, Viola P A. MIMIC: Finding

- optima by estimating probability densities[C]. *Neural Information Processing Systems*. Cambridge: MIT Press, 1996: 424-430.
- [26] Baluja S, Davies S. Using optimal dependency-trees for combinatorial optimization: Learning the structure of the search space[C]. *Proceedings of the Fourteenth International Conference on Machine Learning*. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers Inc, 1997: 30-38.
- [27] Muhlenbein H, Mahnig T. Convergence theory and applications of the factorized distribution algorithm[J]. *Journal of Computing and Information Technology*, 1999, 7(1): 19-32.
- [28] Pelikan M, Sastry K, CantúPaz E. Scalable optimization via probabilistic modeling[M]. Berlin, Heidelberg: Springer, 2006: 39-61.
- [29] Pelikan M, SpringerLink. Hierarchical Bayesian optimization algorithm: Toward a new generation of evolutionary algorithms[M]. Berlin, Heidelberg: Springer, 2005: 31-48.
- [30] Shakya S, McCall J. Optimization by estimation of distribution with DEUM framework based on Markov random fields[J]. *International Journal of Automation and Computing*, 2007, 4(3): 262-272.
- [31] Shakya S, McCall J, Brownlee A, et al. DEUM-distribution estimation using Markov networks[C]. *Markov Networks in Evolutionary Computation*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2012: 55-71.
- [32] Wang L, Wang S Y, Xu Y. An effective hybrid EDA-based algorithm for solving multidimensional knapsack problem[J]. *Expert Systems with Applications*, 2012, 39(5): 5593-5599.
- [33] 王凌, 王圣尧, 方晨. 一种求解多维背包问题的混合分布估计算法[J]. *控制与决策*, 2011, 26(8): 1121-1125.
(Wang L, Wang S Y, Fang C. A hybrid distribution estimation algorithm for solving multidimensional knapsack problem[J]. *Control and Decision*, 2011, 26(8): 1121-1125.)
- [34] 杨晓林, 胡蓉, 钱斌, 等. 增强分布估计算法求解低碳分布式流水线调度[J]. *控制理论与应用*, 2019, 36(5): 803-815.
(Yang X L, Hu R, Qian B, et al. Enhanced estimation of distribution algorithm for low carbon scheduling of distributed flow shop problem[J]. *Control Theory & Applications*, 2019, 36(5): 803-815.)
- [35] Chen S H, Chen M C. Addressing the advantages of using ensemble probabilistic models in estimation of distribution algorithms for scheduling problems[J]. *International Journal of Production Economics*, 2013, 141(1): 24-33.
- [36] Brownlee A E I, McCall J A W, Zhang Q F. Fitness modeling with Markov networks[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2013, 17(6): 862-879.
- [37] Shakya S, Santana R. A review of estimation of distribution algorithms and Markov networks[J]. *Markov Networks in Evolutionary Computation*, 2012, 14(1): 21-37.
- [38] Larrañaga E, Lozano J A. Estimation of distribution algorithms[M]. Boston: Kluwer Academic Publishers, 2002: 57-90.
- [39] Richardson T. Markov properties for acyclic directed mixed graphs[J]. *Scandinavian Journal of Statistics*, 2003, 30(1): 145-157.
- [40] Hammersley J M, Clifford P. Markov fields on finite graphs and lattices[EB/OL]. [2025-12-04]. <https://ora.ox.ac.uk/objects/uuid:4ea849da-1511-4578-bb88-6a8d02f457a6>.
- [41] Shakya S, Santana R. An EDA based on local Markov property and Gibbs sampling[C]. *Proceedings of the 10th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation*. New York: ACM, 2008: 475-476.
- [42] Bron C, Kerbosch J. Algorithm 457: Finding all cliques of an undirected graph[J]. *Communications of the ACM*, 1973, 16(9): 575-577.
- [43] Jordan M I, Ghahramani Z, Jaakkola T S, et al. An introduction to variational methods for graphical models[J]. *Machine Language*, 1999, 37(2): 183-233.
- [44] Mladenović N, Hansen P. Variable neighborhood search[J]. *Computers & Operations Research*, 1997, 24(11): 1097-1100.
- [45] 杨广益, 欧阳智敏, 全惠云. 松弛互补的分布估计算法求解多维背包问题[J]. *计算机工程与应用*, 2007, 43(12): 77-80.
(Yang G Y, Ouyang Z M, Quan H Y. Relaxed complementary estimation of distribution algorithm for the multidimensional knapsack problem[J]. *Computer Engineering and Applications*, 2007, 43(12): 77-80.)

作者简介

王境琦 (2001-), 男, 硕士生, 主要研究方向为智能优化调度, E-mail: 3220241188@bit.edu.cn;

江振鑫 (2003-), 男, 硕士生, 主要研究方向为智能优化调度, E-mail: e1582289@u.nus.edu;

吴楚格 (1993-), 女, 助理教授, 博士, 硕士生导师, 主要研究方向为智能优化调度, E-mail: wucg@bit.edu.cn;

夏元清 (1971-), 男, 教授, 博士, 博士生导师, 主要研究方向为多源信息复杂系统的信息处理与控制、云控制与决策理论及其应用、天空地一体化网络环境下多运动体跨域协同控制与智能决策, E-mail: xia_yuanqing@bit.edu.cn.