

DOI:10.19651/j.cnki.emt.2518177

# 基于 PSO-DSS-NSGA-III 和 DLA-CatBoost 的 钕铁硼粉末压型工艺参数优化\*

章启平<sup>1</sup> 谢小云<sup>2,3</sup>

(1. 江西理工大学信息工程学院 赣州 341000; 2. 赣南科技学院电子信息工程学院 赣州 341000;  
3. 赣州市智能互联重点实验室 赣州 341000)

**摘要:** 钕铁硼(NdFeB)永磁材料凭借其极高的磁能积和矫顽力,在现代工业与电子技术领域得到了广泛应用。然而,在实际生产中,压型工艺作为钕铁硼生产的关键环节,其工艺参数的设置仍主要依赖于操作人员的经验。由于操作人员经验的差异以及生产过程的复杂性,这种依赖容易导致参数设置不稳定,从而影响产品质量并造成资源浪费。为了精确预测钕铁硼粉末压型阶段的工艺参数,本研究提出一种动态分层调整的 CatBoost 多输出预测模型 DLA-CatBoost,并创新性地提出基于粒子群优化引导动态搜索空间调整的混合优化策略 PSO-DSS-NSGA-III,实现预测模型超参数的多目标协同优化。实验结果表明,经 PSO-DSS-NSGA-III 策略优化的 DLA-CatBoost 模型在多输出预测任务中表现优异,其均方根误差(RMSE)在 0.5~0.9 之间,平均绝对误差(MAE)在 0.2~0.5 之间,决定系数( $R^2$ )在 0.96~0.99 之间,展现出卓越的预测效果,为钕铁硼压型工艺参数优化提供了一种有效的新方法。

**关键词:** 钕铁硼永磁材料;参数优化;CatBoost 算法;多目标优化;NSGA-III 算法

**中图分类号:** TN05;TG146.2;TP181 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 520.1040

## Optimisation of NdFeB powder compacting process parameters based on PSO-DSS-NSGA-III and DLA-CatBoost

Zhang Qiping<sup>1</sup> Xie Xiaoyun<sup>2,3</sup>

(1. School of Information Engineering, Jiangxi University of Science and Technology, Ganzhou 341000, China;  
2. School of Electronic Information Engineering, Gannan Science and Technology College, Ganzhou 341000, China;  
3. Ganzhou Key Laboratory of Intelligent Interconnection, Ganzhou 341000, China)

**Abstract:** NdFeB (neodymium-iron-boron) permanent magnetic materials have been widely applied in modern industry and electronics due to their exceptionally high magnetic energy product and coercivity. However, in practical production, the compaction process—a critical stage in NdFeB manufacturing—still relies primarily on operator experience for setting process parameters. Variations in operator expertise and the inherent complexity of the production process often lead to unstable parameter settings, which adversely affect product quality and result in resource wastage. To accurately predict the process parameters during the powder compaction stage, this study proposes a Dynamic Layered Adjustment CatBoost (DLA-CatBoost) multi-output prediction model. Furthermore, an innovative hybrid optimization strategy, PSO-DSS-NSGA-III, which integrates particle swarm optimization to guide dynamic search space adjustment, is introduced to achieve multi-objective cooperative optimization of the model's hyperparameters. Experimental results demonstrate that the DLA-CatBoost model optimized with the PSO-DSS-NSGA-III strategy exhibits excellent performance in multi-output prediction tasks, with a root mean square error (RMSE) ranging from 0.5 to 0.9, a mean absolute error (MAE) between 0.2 and 0.5, and a coefficient of determination ( $R^2$ ) between 0.96 and 0.99, thereby demonstrating its superior predictive capability and establishing it as an effective new approach for optimizing the process parameters in NdFeB compaction.

**Keywords:** NdFeB permanent magnets; parameter optimisation; CatBoost algorithm; multi-objective optimization; NSGA-III algorithm

## 0 引言

钕铁硼永磁材料凭借其卓越的磁性能和高性价比,在

各个领域得到了广泛应用,成为目前最广泛、用量最大的稀土永磁材料<sup>[1]</sup>,其极高的磁能积和矫顽力使其获得“磁王”的美誉。永磁材料生产工艺中包含很多个生产步骤,烧结

收稿日期:2025-02-25

\* 基金项目:国家重点研发计划专项(2020YFB1713700)、江西省 03 专项及 5G 项目(20204ABC03A18)资助

钕铁硼制备工艺复杂,其基本制备过程为:配料、熔炼、氢碎、气流磨制粉、成型、烧结、性能检测、机械加工、表面处理、检验、充磁、包装等环节<sup>[1-2]</sup>。本论文选取钕铁硼磁性材料生产工艺中的“成型”工艺作为具体研究对象,“成型”是永磁材料生产过程中最重要的阶段<sup>[3]</sup>,在生产“成型”工艺中剩磁(remanence)作为产品性能主要的判别指标,而剩磁与成型阶段的充磁过程有密切的关系,因此“退磁电流”、“充磁时上缸位置”、“充磁时下缸位置”作为本文最重要的工艺操作参数。模压成型的过程中,工艺参数的正确性对于产品质量有较大地影响,但实际生产过程中工艺操作参数大多为人工经验参数。不同批次原料和模具在进行批量生产前,需通过大量的试验来调整生产设备参数,才能达到优化工艺的目的,仅由现场人员根据已知的生产情况进行参数调整,缺乏精准的计算,很难对操作参数进行合理调整。这不仅需要大量的调试时间,造成不必要的材料浪费,也对操作人员的依赖程度较高,存在产品一致性差、成品率低、生产效率低的问题<sup>[1]</sup>。针对这些问题,本文引入人工智能算法模型,基于生产历史数据,进行数学驱动建模,形成可供生产服务所调用的生产工艺优化模型,从而给工艺生产人员提供参考指导<sup>[4]</sup>。

随着工业人工智能技术的发展,许多研究将智能算法模型成功运用到钕铁硼磁性材料生产参数预测过程中,单志敏<sup>[5]</sup>通过 BP (backpropagation)神经网络建立钕铁硼氢粉碎过程的参数预测模型,在实时动态预测控制参数的变化方面可以起到很好的作用。王雪萍<sup>[6]</sup>针对钕铁硼氢爆碎工艺的建模与优化控制开展了深入研究,构建了基于滚动优化的径向基函数(RBF)神经网络模型,用于精确预测氢爆碎工艺中吸氢过程的关键参数,根据仿真实验结果证明了模型的可行性。Qiao 等<sup>[7]</sup>利用机器学习方法构建了烧结钕铁硼性能预测模型,通过引入材料成分与工艺参数作为特征,结合 SHAP 方法解释性分析,显著提升了模型的准确性和可解释性。Lambard 等<sup>[8]</sup>通过结合机器学习、贝叶斯优化和主动学习,快速优化钕铁硼磁体的直接热挤压工艺,实现了高矫顽力和剩磁,显著提升了磁性能,解决了传统试错法效率低的问题。

目前,烧结钕铁硼制备工艺参数预测研究主要集中于单输出预测模型,而多输出预测模型的研究相对较少。此外,由于稀土永磁材料数据具有高维度高维、异构、非线性、强噪声干扰的特点,模型的预测准确性和泛化能力仍有显著提升空间<sup>[9]</sup>。在实际生产过程中,压型设备的物料信息常常发生变化,传统的参数预测模型难以适应这种多变的生产需求。

综上所述,本文基于压型工艺生产的实际数据,提出了一种采用 PSO-DSS-NSGA-III 优化策略的 DLA-CatBoost 预测模型。该模型利用 CatBoost 高效解决稀土永磁数据中高维、异构和非线性问题的优势,通过改进 CatBoost 构建回归模型,并在其超参数优化过程中引入粒子群优化

(PSO)指导 NSGA-III 算法中的交叉与变异阶段,同时结合动态搜索空间调整(DSS)方法,共同构成混合优化策略 PSO-DSS-NSGA-III。该策略在多目标优化约束下能高效搜索到 DLA-CatBoost 模型的最优超参数组合,从而显著提升模型性能。最终,通过与当前最新回归模型的对比,并以均方根误差(RMSE)、平均绝对误差(MAE)和决定系数( $R^2$ )作为评价指标,验证了本文所提出模型的准确性与有效性。

## 1 方法学

### 1.1 CatBoost 模型

CatBoost (categorical boosting)<sup>[10]</sup>是一种基于梯度提升决策树(GBDT)的高效机器学习算法,专为处理分类特征优化设计。其核心改进在于通过有序目标编码(ordered target encoding)和对称树(symmetrized trees),有效解决分类特征编码偏差与高基数特征处理难题,同时结合动态排序策略与正则化技术,显著提升模型泛化能力与训练效率。

给定一个类别特征  $X_{i,j}$  和输出特征  $Y$ ,目标编码的计算公式为:

$$X_{i,j} = \frac{\sum_{k=1}^n \mathbb{I}[X_{k,j} = X_{i,j}] \cdot Y_k + \alpha \cdot P}{\sum_{k=1}^n \mathbb{I}[X_{k,j} = X_{i,j}] + \alpha} \quad (1)$$

其中, $X_{i,j}$ 是样本  $i$  的第  $j$  个特征, $Y_k$ 是第  $k$  个样本的输出特征值。 $\mathbb{I}[X_{k,j} = X_{i,j}]$ 是指示函数,当  $X_{k,j}$  等于  $X_{i,j}$  时,值为 1,否则为 0。 $n$ 是样本总量。 $\alpha$ 是平滑参数,用于防止过拟合,通常设为一个较小的正数。 $P$ 是全局目标均值,即所有输出特征  $Y$  的均值。分子部分表示所有类别与  $X_{i,j}$  的输出特征值之和,添加一个平滑项  $\alpha \cdot P$  以避免类别样本数过少时的过拟合问题。分母部分表示与  $X_{i,j}$  相同的类别样本数,同样添加一个平滑项  $\alpha$ 。

### 1.2 NSGA-III 算法

第三代非支配排序遗传算法(non-dominated sorting genetic algorithm III, NSGA-III)<sup>[11]</sup>是一种基于参考点的高维多目标优化算法,旨在解决传统 NSGA-II 在目标维度升高时种群多样性维持不足的问题<sup>[12]</sup>。其核心改进在于引入参考点机制,通过均匀分布的参考点引导种群向 Pareto 前沿的广泛区域分布,同时结合非支配排序确保收敛性,最终实现收敛性与多样性的平衡。算法实现具体流程如图 1 所示。

### 1.3 粒子群算法

粒子群优化算法 (particle swarm optimization, PSO)<sup>[13]</sup>是一种模拟自然界鸟群觅食行为的群体智能优化算法。PSO 算法的核心思想是通过模拟多个个体(粒子)在解空间中相互协作和信息共享,以求解复杂的优化问题。粒子群算法基于群体智能的思想,将搜索空间中的解看作

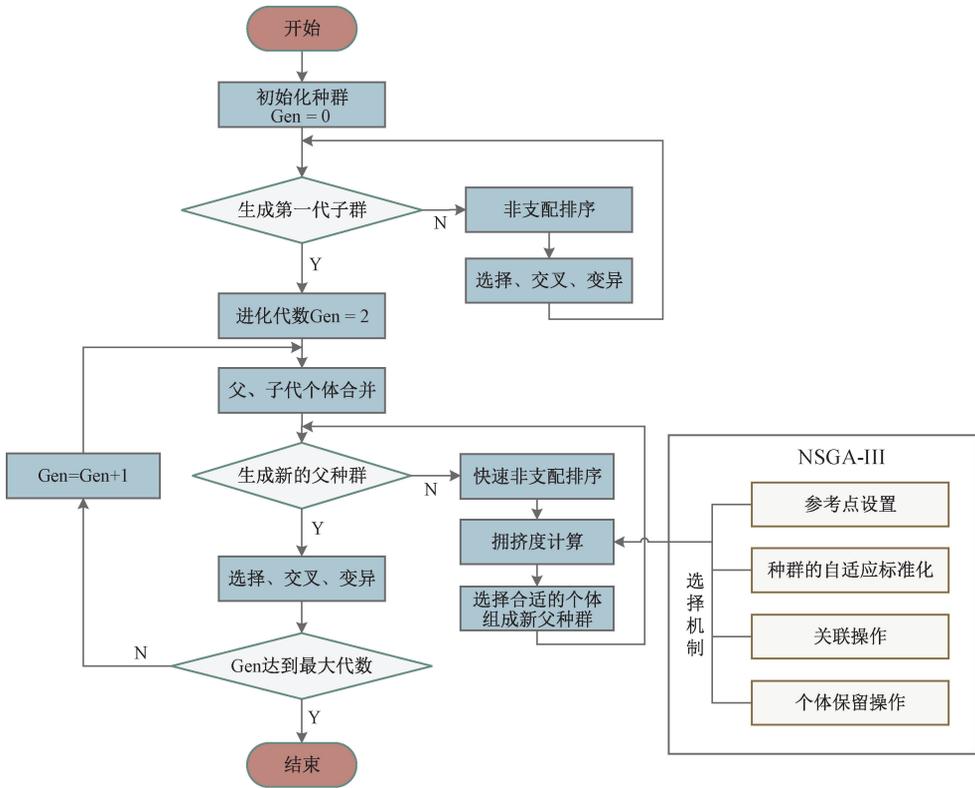


图 1 NSGA-III 算法原理流程图

Fig. 1 Principle flow chart of NSGA-III algorithm

是“粒子”，每个粒子通过其位置和速度在解空间中移动，并通过学习到的最佳位置来调整自己的运动方向。PSO 的主要操作包括粒子位置更新、速度更新和粒子间信息共享。算法基本框架为：

每个粒子在解空间中代表一个潜在解。粒子的状态由位置向量  $\mathbf{X}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{id})$  和速度向量  $\mathbf{V}_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{id})$  表示，其中  $d$  为问题的维度， $i$  表示粒子索引。粒子的运动由两个因素决定：一是粒子当前的速度，二是粒子历史最优解和全体粒子群的全局最优解。每个粒子根据以下更新公式调整自己的位置和速度：

$$v_{id}(t+1) = \omega \cdot v_{id}(t) + c_1 \cdot r_1 \cdot (p_{id} - x_{id}(t)) + c_2 \cdot r_2 \cdot (g_d - x_{id}(t)) \quad (2)$$

$v_{id}(t)$  是粒子在第  $i$  个维度的速度； $\omega$  是惯性权重，用于控制粒子当前速度的影响； $c_1, c_2$  是加速常数，分别控制粒子对自身经验和全局经验的依赖； $r_1, r_2$  是  $[0, 1]$  之间的随机数，用于增加搜索的随机性； $p_{id}$  是粒子历史最优位置； $g_d$  是粒子群的全局最优位置。同时粒子根据新的速度更新位置公式：

$$x_{id}(t+1) = x_{id}(t) + v_{id}(t+1) \quad (3)$$

## 2 实验数据集的收集和处理

### 2.1 数据预处理

本文实验数据来源于赣州市某稀土永磁生产企业<sup>[14]</sup>，

使用 2023 年 1 月~2023 年 5 月的七万多条实际生产数据形成了一个数据集。在数据采集下载的过程中，有些数据会出现缺失值、冗余值、异常值等，在本文中将每一列的平均值填充其相对应的位置，或者删除多余的数据。由于数据集中包含数值型数据和非数据值型数据，数值型数据列不同列的属性值和取值范围都不一样，为了缩小监测参数数值之间的差异，提高预测的效率及准确率，本文选取最小-最大归一化方法对参数进行归一化处理，将数值特征缩放到  $[0, 1]$  内。

### 2.2 特征选择

本文将知识驱动方法<sup>[15]</sup>和 TreeSHAP<sup>[16]</sup>解释性方法结合进行特征选择。首先进行知识驱动选择，知识驱动是一种利用领域知识和专家经验来选择和构建特征的方法，主要是为了消除对工艺参数影响几乎可以忽略不计的参数，同时结合 TreeSHAP 解释性方法进一步的筛选合适的特征。从 16 个参数中选择了 12 个参数。使用初步筛选的特征集训练模型，然后应用 TreeSHAP 方法计算每个特征的特征 Shapley 值，根据 Shapley 值对特征进行排序，识别对模型预测重要的特征。以量化其分别对 3 个工艺操作参数的贡献。最终综合选择了前 8 个参数最终作为模型的输入特征。实验数据集数据介绍如表 1 所示，各输入特征 SHAP(shapley additive explanations) 散点图如图 2~4 所示。

表 1 实验数据集数据介绍

Table 1 Data description of the experimental dataset

特征类型	特征名	含义
输入特征	毛坯物料编码 (Blank Material Code)	用于标识不同物料的编码,指代毛坯材料的具体种类或批次。
	毛坯规格型号 (Blank Specifications and Model)	毛坯材料的规格与型号信息,指代其尺寸、形状等物理特征。
	气流磨物料编码 (Jet Mill Material Code)	在气流磨过程中使用的物料编码,指代在粉碎工艺中使用的材料类型。
	毛坯单重 (Blank Unit Weight)	每个毛坯材料的单位重量,通常与毛坯的密度、体积相关。
	气流磨粒度 (Jet Mill Particle Size)	气流磨加工后粉末颗粒的大小,影响最终烧结产品的致密度和磁性能。
	物料牌号 (Material id)	物料的牌号或标识号,用于区分不同特性和成分的材料。
	模具编号 (Model number)	成型过程中使用模具的编号,指代用于制造特定形状和尺寸产品的模具。
	成型尺寸 (size)	毛坯或成品的尺寸,通常是成型工艺中的关键质量控制参数。
	输出特征	退磁电流 (Current demagnetization)
充磁时上缸位置 (Upper cylinder position of magnetization position)		充磁过程中的上缸位置,影响磁化方向与均匀性。
充磁时下缸位置 (Magnetization position lower cylinder position)		充磁过程中的下缸位置,与上缸位置一起决定材料的磁化状态和均匀性。

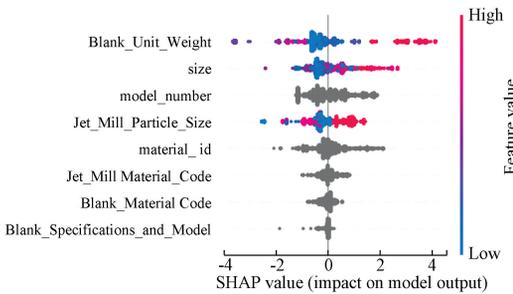


图 2 退磁电流 SHAP 散点图

Fig. 2 Scatter plot of current demagnetization SHAP

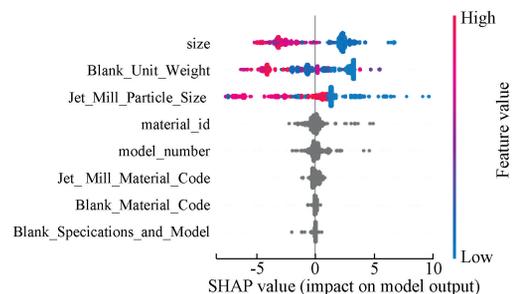


图 3 充磁上缸位置 SHAP 散点图

Fig. 3 SHAP scatter plot of upper cylinder position of magnetization position

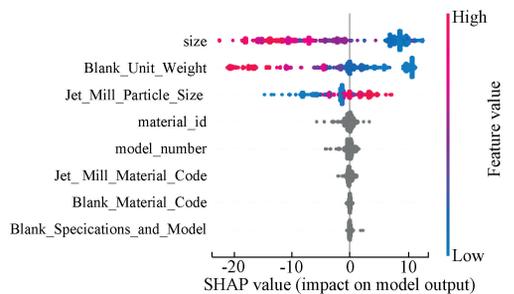


图 4 充磁下缸位置 SHAP 散点图

Fig. 4 SHAP scatter plot of magnetization position lower cylinder position

### 3 优化方法

#### 3.1 动态分层调整 CatBoost 模型 DLA-CatBoost

由于生产设备数据包含 3 个主要调节的生产参数,所以本文需要构建一个多输出<sup>[17]</sup>回归预测模型。本文选择 CatBoost 作为基础模型,因为该模型能够自动处理数据集包含的非数值型数据和类别型特征。在训练过程中,只需将 cat\_features 参数指定为数据框中的类别特征列即可。目前,构建多输出 CatBoost 模型的方法主要有两种:

使用多输出回归器或将 CatBoost 与其他机器学习算法结合实现多输出预测。然而,考虑到模型构建的简洁性和适用性,以及 3 个输出预测值之间的相关性<sup>[4]</sup>,这两种方法均不适合本文需求。为此,本文提出了一种基于分阶段训练的动态分层优化框架,通过划分训练周期、调整层数比例和参数映射策略,实现了模型复杂度的层次化控制和多目标协同优化。

### 3.2 动态分层优化框架设计

CatBoost 模型的训练过程通常是基于固定的超参数进行的,因此无法在训练过程中灵活调整其树的深度、学习率等关键参数。为了在输出 3 个预测值的过程中同时兼顾输出特征之间的相关性和模型的复杂度,本文提出将训练过程划分为两个阶段来逐步优化模型。动态分层优化的核心在于将训练过程划分为两个阶段:特征到目标的映射阶段和目标间相关性优化阶段。这两个阶段分别对应不同的模型结构设计和优化目标,通过动态切换机制和参数继承实现无缝衔接。

#### 1) 阶段划分与参数设定

(1) 特征映射阶段(浅层训练):在模型特征到目标映射的第 1 个阶段,为初步建立输入特征与各输出目标之间的基础映射关系,生成基础模型。使用 CatBoost 原生接口训练模型,以浅层树结构和高迭代次数来捕捉输入特征与目标的基础映射关系。训练结束后保存中间模型权重及特征重要性分布。

(2) 相关性优化阶段(深层训练):在目标间相关性优化的第 2 个阶段,使用深层树结构和低迭代次数建模目标间的协同效应,并通过调整正则化系数来控制模型复杂度。实验中设置深层树结构树深度至少为浅层树的 2 倍。训练过程中,首先加载前一阶段的模型,本文使用通过 init\_model 参数继承阶段一的树结构,继续训练并冻结浅层树参数,仅优化新增的深层树节点,继续训练深层树以优化多目标相关性,从而在不破坏梯度提升连续性的前提下实现分阶段参数调整。

#### 2) 层数比例的动态调整

为了确保模型在不同阶段能够有效学习任务特定的特征和关系,本文进一步引入了层数比例的动态调整。具体来说,阶段 1 主要负责学习特征与目标之间的映射关系,而阶段 2 则主要优化目标间的协同关系。阶段间的切换基于验证集的误差收敛性和特征重要性分布动态触发,确保模型在适当时候调整优化重点。根据验证集的误差变化动态调整阶段 1 和阶段 2 的训练比例。具体方案如下:

设总迭代次数为  $T$ ,阶段 1 和阶段 2 的迭代次数比例为  $\alpha:(1-\alpha)$ ,其中  $\alpha=N/(N+M)$ 。

(1) 自适应调整策略:基于验证集性能动态调整比例  $\alpha$ :若阶段 1 的验证误差快速下降( $\Delta\text{RMSE}>5\%$ ),则增大  $\alpha$ ,延长特征映射阶段。若阶段 1 误差趋于稳定( $\Delta\text{RMSE}<$

$1\%$ ),则减小  $\alpha$ ,提前进入目标相关性优化阶段。实验过程中设置为:若连续  $K$  次迭代( $K=5$ )的  $\Delta\text{RMSE}<1\%$ ,判定特征映射趋于稳定,触发阶段切换。其中,监控验证集的均方根误差(root mean squared error, RMSE)变化率为:

$$\Delta\text{RMSE} = \frac{|\text{RMSE}_t - \text{RMSE}_{t-1}|}{\text{RMSE}_{t-1}} \quad (4)$$

(2) 残差协同训练:残差协同训练的核心思想是分阶段解耦目标间依赖关系,在模型训练过程中,阶段一独立训练各目标的浅层模型,对每个目标  $y_1, y_2, y_3$  进行初步预测,得到  $\hat{y}_1, \hat{y}_2, \hat{y}_3$ 。每个目标  $y_i$  独立训练的浅层 CatBoost 模型  $f_i(x)$ ,初步预测  $\hat{y}_i = f_i(x)$ ,然后将  $\hat{y}_1, \hat{y}_2, \hat{y}_3$  作为新特征加入原始特征集,形成增强特征矩阵:

$$\mathbf{X}_{\text{augmented}} = [X, \hat{y}_1, \hat{y}_2, \hat{y}_3] \quad (5)$$

这一设计使模型在第 2 阶段能够直接利用其他目标的预测信息,从而隐式建模目标间依赖关系。例如,在预测目标  $y_1$  时,模型可依据  $\hat{y}_2$  与  $\hat{y}_3$  的数值动态调整分裂策略。同时在阶段 2 训练过程中,基于 TreeSHAP 的特征重要性评估方法,动态调整分裂增益的计算权重。具体来说,对重要性排名前 5 的原始特征,保持其分裂增益权重不变,以保留关键特征的基础贡献。而对新增的预测值特征  $\hat{y}_i$ ,依据其与当前目标的相关性强弱,自适应调整增益权重。例如,若  $\hat{y}_2$  与目标  $y_1$  的 SHAP 值较高,则增加其在  $y_1$  分裂计算中的权重系数  $\beta$ 。

阶段 2 使用增强特征训练深层模型,结合加权损失函数优化多目标间的相关性。通过残差联合训练捕捉目标间相关性,生成联合残差矩阵  $\epsilon = \mathbf{Y} - [\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_k]$ ,显式量化各目标的预测偏差,其中  $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N \times K}$  为真实标签矩阵。以残差  $\epsilon$  为监督信号,结合增强特征集  $\mathbf{X}_{\text{augmented}}$  训练深层 CatBoost 模型  $g(x)$ ,使模型能够聚焦于捕捉目标间的高阶交互与协同偏差。

#### 3) 加权均方误差与协方差正则化

在多目标回归任务中,需要对不同目标进行加权处理,以确保优化过程中能够考虑到各目标的重要性。为此,本文引入了加权均方误差(MSE)作为损失函数的一部分,允许根据任务需求为每个目标指定不同的权重  $\alpha_j$ ,通过在损失函数中引入权重,模型能够更加关注重要目标的优化,从而提升整体预测精度。

$$\mathcal{L} = \sum_{j=1}^K \alpha_j \cdot \text{MSE}(y_j, \hat{y}_j) + \lambda \cdot \sum_{i \neq j} \text{Cov}(\hat{y}_i, \hat{y}_j) \quad (6)$$

协方差项  $\text{Cov}(\cdot)$  明确约束目标间残差的相关性,迫使模型捕捉多目标的协同效应。其中,  $\alpha_j$  为各目标的误差权重,用于平衡不同目标的优化优先级。例如,若目标  $y_1$  在应用中更为关键,可设定  $\alpha_1 > \alpha_2, \alpha_3$  以强化其误差约束。 $\text{Cov}(\hat{y}_i, \hat{y}_j)$  表示预测值  $\hat{y}_i$  与  $\hat{y}_j$  的协方差,  $\lambda$  为协方差正则化强度系数。此项通过惩罚目标间预测值的非期望协方差模式(如负相关或弱相关),迫使模型学习与真实数据

分布一致的依赖结构。动态分层优化框架设计原理如图 5 所示。

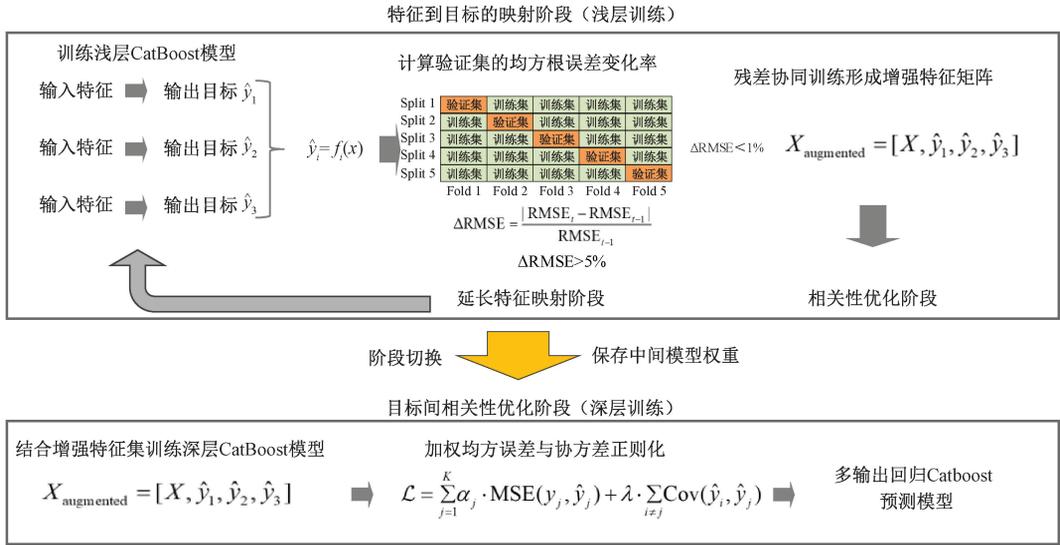


图 5 DLA-CatBoost 动态分层优化框架设计原理图  
Fig. 5 Schematic design of DLA-CatBoost dynamic hierarchical optimisation framework

### 3.3 PSO-DSS-NSGA-III 混合超参数优化策略

CatBoost 拥有多个关键超参数,这些参数直接影响模型的拟合能力和泛化性能。在实际应用中,进行超参数优化不仅能够提升模型的准确性,还能提高训练和预测的速度与效率,从而节省计算资源。因此,CatBoost 的超参数优化是至关重要的。NSGA-III 在处理高维多目标优化问题时展现了优异的可扩展性,能够高效地探索大规模的超参数空间,为模型的超参数优化提供了一种高效、灵活且全面的解决方案。然而,NSGA-III 算法在收敛速度上存在一定的瓶颈,且容易陷入局部最优解,因此,需要进一步改进算法以解决这些不足。

目前已有多种针对 NSGA-III 的改进算法。例如,ANSGA-III (adaptive non-dominated sorting genetic algorithm, ANSGA-III)<sup>[18]</sup>通过引入自适应机制来提高多目标优化问题的解空间探索能力和收敛速度;杨贵林等<sup>[19]</sup>提出一种改进的 NSGA-III 算法(INSGA-III),引入了组合初始化、反向生成、自适应交叉与变异、变邻域搜索策略以提高算法的求解能力;耿焕同等<sup>[20]</sup>提出 AR-NSGA-III 算

法,该算法设计了个参考点自适应策略,根据种群的熵差删除一部分的参考点,提高了种群在不规则 Pareto 前沿上的分布性与收敛性,搜索到的非支配前沿不同部分上不同个体拥挤度自适应添加或删除参考点,提高算法在不规则 Pareto 前沿上的分布性与收敛性。

尽管这些改进方法各有侧重,但都引入自适应机制来动态调整操作(如参考点选择、交叉与变异等),增强 NSGA-III 算法的全局搜索能力,确保解空间探索的全面性,避免陷入局部最优。基于此,本研究利用粒子群优化算法的历史最优解与全局最优解,进一步提升 NSGA-III 算法的全局搜索能力和解的多样性,并提出一种 NSGA-III 算法结合粒子群优化算法引导交叉与变异与动态搜索空间调整的混合策略(PSO-DSS-NSGA-III),通过分阶段收缩决策空间和 NSGA-III 算法的改进,将计算资源聚焦于潜在解区域,显著提升优化效率与解的质量。

本研究中 CatBoost 模型的超参数:决策树的迭代次数(iterations)、决策树的深度(depth)、学习率(learning\_rate)、L2 正则化系数(l2\_leaf\_reg),具体设定范围如表 2 所示。

表 2 CatBoost 模型超参数空间设定  
Table 2 CatBoost model hyperparameter space settings

超参数	定义	搜索范围
决策树的迭代次数(iterations)	模型在整个训练过程中将生成的决策树的数量	500~2 000
决策树的深度(depth)	决策树的深度范围	4~12
学习率(learning_rate)	控制每一步的权重更新幅度	0.01~0.1
L2 正则化系数(l2_leaf_reg)	控制叶子节点权重的正则化程度	1~10

1) 动态搜索空间调整的核心思想  
在优化 CatBoost 的超参数时,搜索空间的大小和范围

通常决定了优化的效率。如果搜索空间过大,算法可能会在不相关的区域进行冗余搜索,导致计算资源的浪费。若

搜索空间过小,则可能错过潜在的优质解,导致优化结果不理想。因此,合理缩小搜索空间,并动态调整边界对于提升优化效率至关重要。动态调整搜索空间的关键在于基于优化过程中的反馈信息,逐步收缩无效区域的搜索范围,将焦点集中在有潜力的解区域,这样可以避免无效的搜索、加速收敛过程同时提高解的质量。本文方法的核心在于分阶段平衡全局探索和局部优化,框架原理图如图 6 所示。

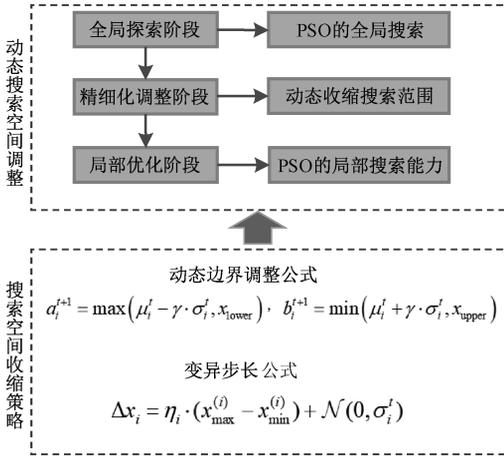


图 6 动态搜索空间调整框架设计原理图

Fig. 6 Schematic design of the dynamic search space adjustment framework

具体步骤如下:

(1)全局探索阶段:利用 NSGA-III 的多样性保持能力,结合 PSO 的全局搜索<sup>[21]</sup>,在宽泛初始空间内识别潜在优质解。

在优化的初期,使用 PSO 引导 NSGA-III 的交叉与变异进行全局搜索。此时,搜索空间较宽,允许优化算法广泛探索解空间,找到潜在的有效区域。PSO 在此阶段用于指导交叉和变异操作,根据初始种群的适应度和误差表现,找到初步的优质解区域。

(2)精细化调整阶段:根据种群适应度与误差收敛性,动态收缩超参数搜索范围,减少无效区域的计算。

随着优化过程的进行,监控每代优化过程中的误差变化和标准差。当误差的标准差变得很小,说明种群已经趋于稳定,搜索空间可以收缩。种群中每个个体的参数配置即每个超参数的当前解。

(3)局部优化阶段:当优化过程进入后期时,种群已经稳定,并且误差值已经相对较小。此时,搜索空间的收缩程度最大,算法的重点是对潜在优解区域进行精细化调整,这个阶段,在收缩后的高潜力区域内,利用 PSO 的局部搜索能力<sup>[22]</sup>加速收敛。同时通过误差收敛和标准差检测,判断是否达到了预定的优化精度。如果收敛,可以提前终止优化过程。最终,搜索空间将仅集中在最有可能找到全局最优解的区域。

#### 2)搜索空间收缩策略

为通过动态调整超参数搜索范围,使优化过程更聚焦

于高潜力区域,设计了一种搜索空间收缩策略,具体步骤如下:

(1)首先对于超参数  $x_i \in [a_i, b_i]$ ,其动态边界调整公式为:

$$\begin{cases} a_i^{t+1} = \max(\mu_i^t - \gamma \cdot \sigma_i^t, x_{\text{lower}}) \\ b_i^{t+1} = \min(\mu_i^t + \gamma \cdot \sigma_i^t, x_{\text{upper}}) \end{cases} \quad (7)$$

其中,  $\mu_i^t$  为当前代超参数均值,  $\sigma_i^t$  为标准差,用于衡量当前搜索范围内的超参数分布情况;  $\gamma$  为收缩系数,控制搜索空间的收缩速率;  $x_{\text{lower}}$  和  $x_{\text{upper}}$  为预设全局边界。确保搜索空间不会收缩到超出合理范围。

同时设置了误差收敛检测,若连续 5 代的平均目标误差变化率满足  $\Delta \text{RMSE} < 0.5\%$ ,种群标准差  $\sigma < 0.1$  触发搜索空间收缩,即进一步缩小超参数的搜索范围,加速收敛。

(2)在 CatBoost 模型的超参数优化中,不同参数的数值范围差异显著,例如,学习率(learning\_rate)范围可能在 0.01~0.1,决策树的迭代次数(iterations)范围可能在 500~2 000。这种量级差异可能导致不同参数的收敛速度差异大,增加调整搜索空间的难度,同时范围较大的参数在适应度计算中占据主导地位,影响其他参数的优化效率。因此本文设计了一种自适应步长调整的方法,可以保证不同数值范围的超参数在搜索过程中均衡优化,确保搜索粒度合理,从而提高整体优化效率。自适应步长调整方法设计如下:

$$\Delta x_i = \eta_i \cdot (x_{\text{max}}^{(i)} - x_{\text{min}}^{(i)}) + \mathcal{N}(0, \sigma_i^t) \quad (8)$$

其中,  $\eta_i$  为参数特异性步长比例(决策树的迭代次数  $\eta_{\text{iterations}} = 0.01$ ,学习率  $\eta_{\text{learning\_rate}} = 0.001$ ,决策树的深度  $\eta_{\text{depth}} = 0.005$ ,L2 正则化系数  $\eta_{\text{l2\_leaf\_reg}} = 0.01$ ),  $\sigma_i^t$  是时间衰减扰动项,为高斯扰动的标准差随迭代次数衰减,具体公式为:

$$\sigma_i^{(i)} = \sigma_{\text{init}}^{(i)} \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau^{(i)}}\right) \quad (9)$$

其中,  $\sigma_i^{\text{init}}$  是第  $i$  个超参数的初始标准差;  $t$  是当前的迭代次数;  $\tau^{(i)}$  是第  $i$  个超参数的衰减系数,决定了标准差下降的速度。通过使用  $\sigma_i^t$  可以确保每个超参数的标准差都在独立的衰减过程中变化,这允许每个超参数的搜索空间都独立调节。

### 3.4 PSO 引导 NSGA-III 的交叉与变异

NSGA-III 作为一种经典的多目标优化算法,通过非支配排序和参考点机制,在保持种群多样性和收敛性方面表现优异。然而,其交叉与变异操作通常依赖随机策略,导致在高维或复杂解空间中搜索效率低下,易陷入局部最优或产生无效探索。粒子群优化(particle swarm optimization, PSO)通过模拟群体智能行为<sup>[23]</sup>,利用全局最优解(gbest)和个体历史最优解(pbest)引导搜索方向,具有高效的全局探索与局部开发能力。本文提出将 PSO 的引导机制嵌入 NSGA-III 的交叉与变异操作中,旨在解

决传统遗传操作随机性过强的问题,提升算法在复杂多目标优化任务中的搜索效率与解集质量。粒子的速度表示解空间的移动幅度,粒子的位置信息引导搜索,帮助选择合适的父代进行交叉,并控制变异幅度,确保搜索效率。

### 1) 父代选择机制

在传统遗传算法中,父代个体通常通过随机选择产生,这种方式缺乏对解空间结构的主动引导。本文提出 PSO 引导交叉策略,通过结合粒子群的全局最优 (gbest) 和个体历史最优 (pbest)<sup>[24]</sup>,设计了一种适应度-距离加权的概率选择模型,选择那些适应度较高且接近全局最优解的个体进行交叉,具体步骤如下:

(1) 首先,对种群中每个个体  $x_i$  的适应度值进行归一化处理,消除目标函数量纲影响。本文目标函数为最小化问题,因此归一化公式为:

$$f_{\text{norm}}(x_i) = \frac{f(x_i) - f_{\min}}{f_{\max} - f_{\min} + \epsilon} \quad (10)$$

其中,  $f_{\min}$ 、 $f_{\max}$  分别为当前种群的最小和最大适应度值,  $\epsilon$  为防止分母为零的小常数。

(2) 然后,计算个体  $x_i$  与全局最优解  $g_{\text{best}}$  的欧氏距离,反映其与当前最优解的接近程度,距离度量公式为:

$$d(x_i, g_{\text{best}}) = \sqrt{\sum_{k=1}^D (x_{i,k} - g_{\text{best},k})^2} \quad (11)$$

其中,  $D$  为解空间的维度,  $x_{i,k}$  为个体  $x_i$  的第  $k$  个变量。

(3) 最后,结合适应度与距离,定义个体  $x_i$  的选择概率,选择概率计算公式为:

$$p(x_i) = \frac{\alpha \cdot (1 - f_{\text{norm}}(x_i)) + (1 - \alpha) \cdot \exp(-\beta \cdot d(x_i, g_{\text{best}}))}{\sum_{j=1}^N [\alpha \cdot (1 - f_{\text{norm}}(x_j)) + (1 - \alpha) \cdot \exp(-\beta \cdot d(x_j, g_{\text{best}}))]} \quad (12)$$

其中,  $\alpha \in [0, 1]$  为适应度权重系数(设置为 0.6),控制适应度与距离的平衡。  $\beta$  为距离衰减系数(设置为 0.5),决定距离对概率的影响强度。  $N$  为种群规模。适应度越高 ( $f_{\text{norm}}$  越小)、距离  $g_{\text{best}}$  越近的个体,被选为父代的概率越大。指数函数  $\exp(-\beta \cdot d)$  用于放大近距离个体的优势。

### 2) 粒子群优化的全局混合交叉策略

在选定父代后,为使 NSGA-III 算法的交叉操作可以结合粒子群算法的全局-局部搜索特性生成高质量子代。本研究提出一种全局-局部混合交叉策略,具体流程为:

(1) 首先全局父代选择与  $g_{\text{best}}$  距离最近的个体  $x_g$ , 局部父代选择与当前个体历史最优  $p_{\text{best}}$  距离最近的个体  $x_l$ 。

(2) 然后对交叉权重进行动态调整,交叉权重  $\theta$  随迭代次数  $t$  递减,具体格式如下:

$$\theta(t) = \theta_{\max} - \left( \frac{\theta_{\max} - \theta_{\min}}{T} \right) \cdot t \quad (13)$$

其中,  $\theta_{\max} = 0.9$ ,  $\theta_{\min} = 0.5$ ,  $T$  为总迭代次数。

(3) 最后通过混合交叉生成子代,子代个体  $x_{\text{child}}$  的每个维度  $k$  通过式(14)生成。

$$x_{\text{child},k} = \theta \cdot x_{g,k} + (1 - \theta) \cdot x_{l,k} + \mathcal{N}(0, \sigma_k') \quad (14)$$

其中,  $\mathcal{N}(0, \sigma_k')$  为高斯扰动项,标准差  $\sigma_k'$  随迭代衰减:

$$\sigma_k' = \sigma_{\text{init}} \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (15)$$

其中,  $\sigma_{\text{init}}$  为初始标准差(设置为 0.1),  $\tau$  为衰减系数(设置为 100)。扰动项用于维持种群多样性,避免早熟收敛。

粒子群算法通过全局最优解和个体最优解的引导,动态调整变异幅度,避免过大或过小的变异。随着搜索空间的逐步收缩,变异的幅度也会逐渐减小,最后集中在当前最优解附近。

### 3) 速度驱动的动态调整

传统变异操作通过固定步长,如高斯变异或均匀变异引入随机扰动,缺乏对搜索空间状态的适应性。本文提出一种速度驱动的动态变异幅度,将 PSO 的粒子速度与历史搜索信息融入变异过程,具体设计如下:

(1) 首先通过粒子速度和变异幅度之间的映射来确定搜索范围,粒子速度  $v_i$  反映了其在解空间中的探索强度。速度越大,表明该维度仍需广泛搜索;速度越小,表明该维度已接近最优区域。变异幅度  $\Delta x_i$  与速度的绝对值成正比:

$$\Delta x_i = \eta \cdot |v_i| + \mathcal{N}(0, \sigma_i') \quad (16)$$

其中,  $\eta \in [0.1, 0.3]$  为速度缩放因子,控制速度对变异幅度的贡献。  $\mathcal{N}(0, \sigma_i')$  为高斯扰动项,其标准差  $\sigma_i'$  随迭代次数自适应衰减。

(2) 然后通过种群中个体的情况来调整全局和局部变异权重,根据个体与全局最优解 ( $g_{\text{best}}$ ) 的距离,动态调整粒子变异幅度的全局探索与局部开发权重:

$$\Delta x_i^{\text{final}} = \left(1 - \frac{d(x_i, g_{\text{best}})}{d_{\max}}\right) \cdot \Delta x_i^{\text{local}} + \frac{d(x_i, g_{\text{best}})}{d_{\max}} \cdot \Delta x_i^{\text{global}} \quad (17)$$

其中,  $\Delta x_i^{\text{local}} = \Delta x_i \cdot \exp\left(-\frac{d(x_i, g_{\text{best}})}{d_{\text{avg}}}\right)$  为局部开发项,侧重精细调整。  $\Delta x_i^{\text{global}} = \Delta x_i \cdot \left(1 + \frac{d(x_i, g_{\text{best}})}{d_{\text{avg}}}\right)$  为全局探索项,侧重跳出局部最优。  $d_{\max}$  为种群中个体与全局最优解  $g_{\text{best}}$  的最大距离,  $d_{\text{avg}}$  为平均距离。

### 4) PSO 对变异位置的定向引导

为避免随机变异对优质解的破坏,本研究提出历史最优引导变异策略,具体设计如下:

(1) 通过粒子群的历史最优解  $p_{\text{best}}$  来引导个体的精英变异,对每个个体  $x_i$ ,在其个体历史最优解  $p_{\text{best}i}$  附近施加小幅度扰动,保留优质基因,具体公式为:

$$x_i^{\text{mut}} = x_i + \gamma \cdot (p_{\text{best}i} - x_i) + \mathcal{N}(0, \sigma_p') \quad (18)$$

其中,  $\gamma \in [0.1, 0.5]$  为精英保留强度系数,  $\sigma_p' = \sigma_{\text{init}} \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_p}\right)$ ,  $\tau_p = 50$ ,为精英扰动的快速衰减系数。

(2) 通过全局最优解  $g_{\text{best}}$  来引导个体的协同变异,对

靠近全局最优解 ( $g_{best}$ ) 的个体,施加协同扰动以探索其邻域,具体公式为:

$$x_i^{mut} = x_i + \delta \cdot (g_{best} - x_i) + \mathcal{N}(0, \sigma_g^t) \quad (19)$$

其中,  $\delta \in [0.05, 0.2]$  为协同搜索系数。  $\sigma_g^t = \sigma_{init} \cdot$

$\exp\left(-\frac{t}{\tau_g}\right)$ ,  $\tau_g = 150$  为慢速衰减系数,维持长期探索能力。

5) 自适应变异概率机制

由于传统固定变异概率(如  $p_m = 1/D$ )难以适应本研究中全局探索和局部优化不同优化阶段的需求。因此,本文设计动态变异概率策略,具体实现公式为:

$$p_m(t) = p_{max} - \left(\frac{p_{max} - p_{min}}{T}\right) \cdot t + \frac{\sigma(t)}{\sigma_{init}} \quad (20)$$

其中,  $p_{max} = 0.3, p_{min} = 0.1$  为变异概率上下界。  $\sigma(t)$  为当前种群标准差,用于反映种群收敛状态;标准差越小,变异概率越低。  $T$  表示算法的最大迭代次数,  $t$  表示当前迭代次数。这种设计机制让算法在初期尽可能进行广泛探索,避免过早陷入局部最优;在后期逐步减小变异幅度以利于收敛。

3.5 PSO-DSS-NSGA-III 算法的目标函数

为平衡多个输出目标之间的冲突关系,同时考虑到模

型的简洁性和适用性以及动态分层调整、动态收缩空间调整的策略实施,目标函数结合模型误差、复杂度与多目标协方差约束设计为:

$$\mathcal{L} = w_1 \cdot \text{RMSE} + w_2 \cdot \text{Complexity} + \lambda \cdot \text{Cov}(y_1, y_2, y_3) \quad (21)$$

其中, RMSE 为 3 个预测值的均方根误差平均值, Complexity 为模型复杂度,这里表示树的深度,  $\text{Cov}(\cdot)$  为目标间协方差约束,  $w_1, w_2$  为权重系数,  $\lambda$  控制协方差正则化强度。

3.6 PSO-DSS-NSGA-III 算法的实现流程

本研究提出了一种混合优化策略——PSO-DSS-NSGA-III,用于高效优化模型超参数。该策略综合了粒子群优化算法(PSO)、NSGA-III 算法及动态搜索空间调整方法(DSS),以 NSGA-III 为核心框架,通过 PSO 引导交叉与变异阶段的搜索,同时动态调整搜索空间边界,以增强全局探索与局部开发能力。该算法主要包括以下关键模块:种群初始化与参考点生成、PSO 驱动的解生成、动态搜索空间调整以及非支配排序与环境选择。算法实现的详细步骤如图 7 所示。

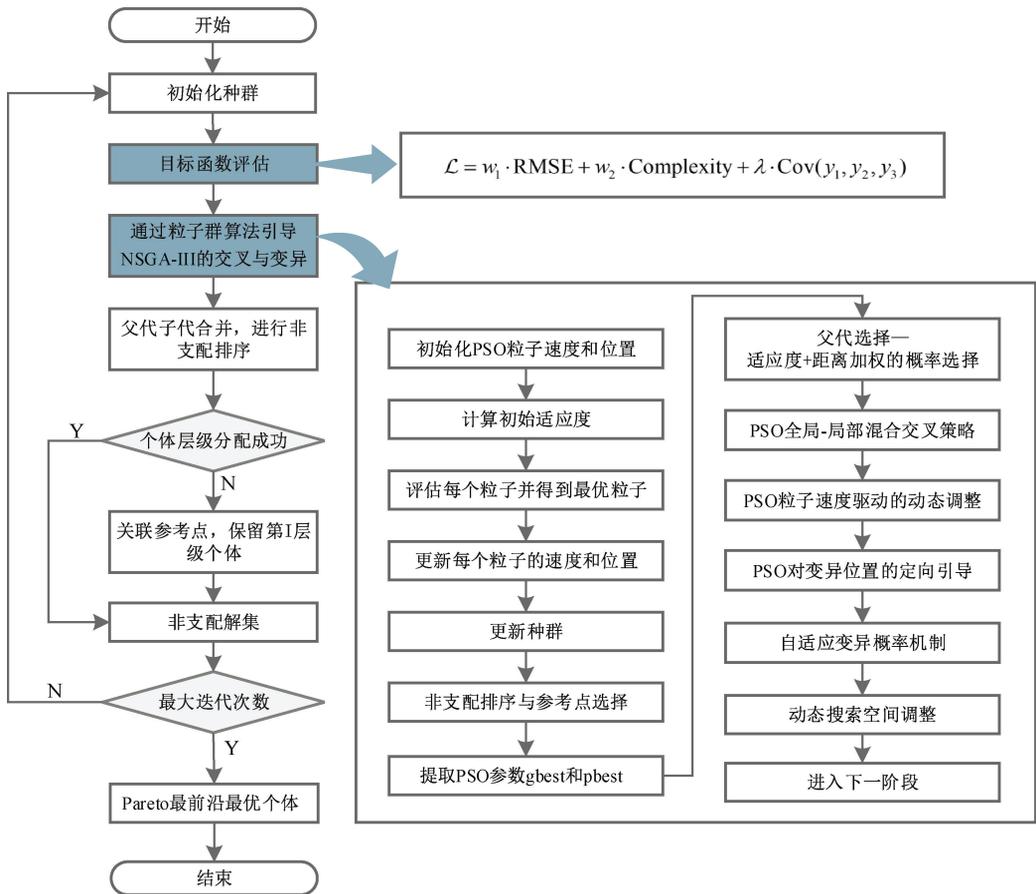


图 7 PSO-DSS-NSGA-III 算法原理图

Fig. 7 Schematic diagram of PSO-DSS-NSGA-III algorithm

本研究使用的环境为 Python3.8 和 scikit-learn1.3.2, 硬件环境为容量 10 GB 的 GPU RTX 3080 CPU 型号 Intel<sup>®</sup> Xeon<sup>®</sup> Platinum 8255C。容量 64 GB 的 RAM。

## 4 实验结果及分析

### 4.1 模型评估指标

本研究采用相关系数 (coefficient of determination,  $R^2$ )、均方根误差 (root mean squared error, RMSE)、平均绝对误差 (mean absolute error, MAE) 对模型预测性能进行评估。RMSE 值, MAE 值越小表示模型的预测结果更接近真实值。 $R^2$  值越接近 1 表示模型对数据的拟合程度越好。相关计算公式为:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (22)$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (23)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (24)$$

其中,  $n$  为测试集样本数;  $\hat{y}_i$  表示第  $i$  个样本的预测值;  $y_i$  表示第  $i$  个样本的实际值;  $\bar{y}$  实际值为退磁电流、充

磁上缸位置、充磁下缸位置的实验值,  $y$  预测值为退磁电流、充磁上缸位置、充磁下缸位置的预测值。

### 4.2 PSO-DSS-NSGA-III 与其他超参数优化算法对比

在本研究中, 为了评估不同优化算法对 DLA-CatBoost 模型性能的提升, 采用 K 折交叉验证<sup>[25]</sup>。在每一折中, 使用优化算法获得的当前最优超参数组合训练一个 DLA-CatBoost 模型, 并在验证集上进行预测。

为验证本研究提出的 PSO-DSS-NSGA-III 算法对模型超参数优化的有效性, 采用多目标螳螂搜索算法 MOMSA (multi-objective mantis search algorithm, MOMSA)、自适应非支配排序遗传算法 ANSGA-III (adaptive non-dominated sorting genetic algorithm, ANSGA-III)<sup>[18]</sup> 算法以及多子群粒子群优化算法 MSPSO (multi-subpopulation particle swarm optimization, MSPSO) 与本文提出算法进行对比, 在本研究中, 设置了训练次数 100 次、300 次以及 500 次的对比试验, 来对比不同的多目标算法的性能, 以确保找到最合适的多目标优化算法以及性能最好的超参数组合。各算法的超参数优化结果, 如表 3 所示, 其中预测性能为各算法优化后的 DLA-CatBoost 模型的 3 个输出参数在测试集上的 RMSE 值的平均值。运行时间为评估每次超参数优化的总运行时间, 为评估各算法的计算效率。收敛速度是指算法在多少次试验中达到了最优解。

表 3 多目标算法的超参数优化结果

Table 3 Hyperparameter optimisation results of the multi-objective algorithm

试验次数	算法类型	预测性能(RMSE)	运行时间/s	收敛速度
100	MSPSO	2.521 2	2 121.48	69
	NSGA-III	2.301 4	2 173.49	63
	ANSGA-III	2.201 4	2 473.49	81
	MOMSA	2.203 3	2 411.55	92
	PSO-DSS-NSGA-III	2.431 6	2 036.04	76
300	MSPSO	0.852 4	6 267.00	166
	NSGA-III	0.802 6	6 970.03	209
	ANSGA-III	0.792 6	7 570.03	254
	MOMSA	0.783 1	7 402.56	223
	PSO-DSS-NSGA-III	0.738 7	6 002.56	130
500	MSPSO	0.790 1	12 087.90	216
	NSGA-III	0.800 7	19 911.12	298
	ANSGA-III	0.753 8	16 288.32	288
	MOMSA	0.715 4	18 791.11	291
	PSO-DSS-NSGA-III	0.699 1	10 541.46	207

训练过程中各多目标算法的损失迭代变化如图 8 所示, 其中输出 1 损失, 输出 2 损失, 输出 3 损失分别表示为输出特征退磁电流、充磁时上缸位置、充磁时下缸位置随着迭代次数增加得到的损失值。

### 4.3 PSO-DSS-NSGA-III-DLA-CatBoost 与其他算法对比

根据图 8 五个多目标优化算法的损失函数迭代图, 本

文可以对比分析得到初期阶段 MOMSA 多目标螳螂搜索算法和自适应非支配排序遗传算法 ANSGA-III 表现最好, PSO-DSS-NSGA-III 算法预测还不理想, 但随着迭代次数的增加, PSO-DSS-NSGA-III 的性能逐渐赶超, 且损失函数值趋于稳定, 收敛趋势更加平滑, 具有较快的收敛速度。从图 8 可以看出, 各多目标优化算法优化得到的 3 个输

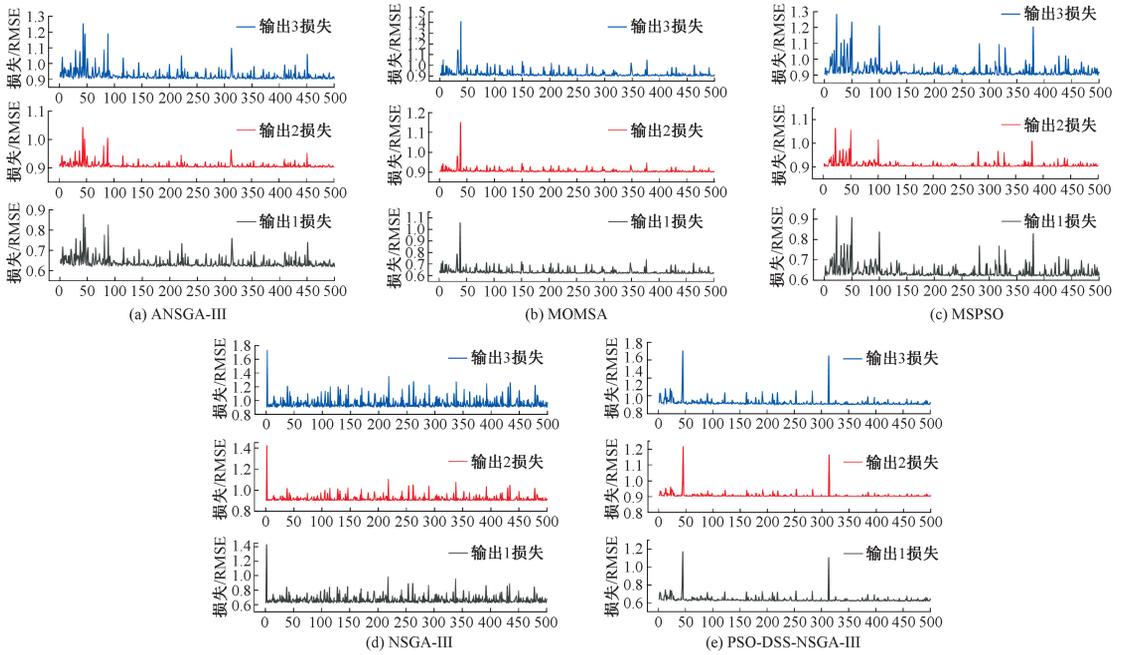


图 8 多目标算法损失迭代对比图

Fig. 8 Comparison of loss iterations of multi-objective algorithms

出平均损失中, PSO-DSS-NSGA-III 算法得到的输出平均损失最小,同时收敛趋势也最平稳,说明 PSO-DSS-NSGA-III 算法优化下,DLA-CatBoost 算法的预测效果最好,搜索到最优超参数组合的速度最快即模型运行时间最快,达到最优效果的速度也最快。PSO-DSS-NSGA-III 在与其他的多目

标优化算法对比中达到了最低的平均 RMSE 为 0.699 1,对比改进前的 NSGA-III 算法,平均 RMSE 为 0.800 7,优化性能提升了约 12.6%,收敛速度提升了约 30.5%,可以证明本文提出的对 NSGA-III 算法的改进方法是有效的。各个多目标优化算法得出的最优超参数结果如表 4 所示。

表 4 超参数调优结果对比

Table 4 Comparison of hyperparameter tuning results

超参数	默认值	NSGA-III	MSPSO	ANSGA-III	MOMSA	PSO-DSS-NSGA-III
iterations	1 000	1 607	1 944	1 855	1 733	1 585
depth	6	12	12	12	12	12
learning_rate	0.03	0.097 7	0.095 6	0.089 33	0.093 3	0.094 6
l2_leaf_reg	3	3.551 2	4.572 3	3.758 3	4.011 2	4.141 9

为了验证本文建立的 PSO-DSS-NSGA-III-DLA-CatBoost 模型的预测性能,将模型与基于 NSGA-III 优化的 DLA-CatBoost 模型 NSGA-III-DLA-CatBoost,基于粒子群算法优化的 DLA-CatBoost 模型 PSO-DLA-CatBoost,以及未使用 PSO-DSS-NSGA-III 进行超参数优化前的模型 DLA-CatBoost,进行实验对比,进一步验证改进后 PSO-DSS-NSGA-III 算法的有效性。

同时加入猎人猎物优化算法(HPO)优化的 CatBoost 模型 HPO-CatBoost,多个单输出 CatBoost 组合模型(multiple single output CatBoost, MSO-CatBoost),基于河马优化算法(hippopotamus optimization algorithm, HO)优化的 BP 神经网络(back propagation neural network, BP) HO-BP,基于鲸鱼优化算法(whale

optimization algorithm, WOA)优化的 BP 神经网络 WOA-BP,以及 XGBoost 模型、LightGBM 模型进行实验对比,多种模型对钕铁硼压型生产的工艺参数进行预测的结果如表 5 所示。

根据表 5 可以得出,所建立的 PSO-DSS-NSGA-III 优化的 DLA-CatBoost 模型预测效果最为优异。“退磁电流”相关性系数( $R^2$ )在 0.95~0.96 之间,“充磁上缸位置”相关性系数( $R^2$ )保持在 0.98~0.99 之间。“充磁下缸位置”相关性系数( $R^2$ )保持在 0.998~0.999。这样的结果证明模型对数据的拟合效果特别好,解释力很强。“退磁电流”均方根误差(RMSE)为 0.591 9,“充磁上缸位置”(RMSE)为 0.840 5,“充磁下缸位置”(RMSE)为 0.711 2。结果证明模型的预测误差较小,模型预测值与实际值之间的差异越

表 5 多输出回归预测模型评价指标的计算结果

Table 5 Calculation of evaluation indicators for multi-output regression prediction models

预测模型	RMSE			MAE			R <sup>2</sup>		
	退磁	充磁上	充磁下	退磁	充磁上	充磁下	退磁	充磁上	充磁下
	电流	缸位置	缸位置	电流	缸位置	缸位置	电流	缸位置	缸位置
PSO-DSS-NSGA-III-DLA-CatBoost	0.591 9	0.840 5	0.711 2	0.275 4	0.411 9	0.281 7	0.961 2	0.985 5	0.998 6
DLA-CatBoost	1.148 0	1.325 0	1.924 1	1.102 9	0.914 2	0.929 7	0.895 8	0.912 3	0.907 5
MSO-CatBoost	1.812 6	2.000 0	3.000 5	1.150 0	1.100 0	1.351 0	0.830 0	0.881 2	0.868 8
NSGA-III-DLA-CatBoost	1.036 5	1.146 2	1.643 3	0.938 8	0.885 2	0.900 3	0.914 5	0.908 3	0.909 1
PSO-DLA-CatBoost	1.455 8	1.627 1	2.131 8	1.013 5	1.107 6	1.105 5	0.871 1	0.896 5	0.897 0
HPO-CatBoost	0.933 4	1.032 2	1.053 9	0.874 9	0.893 3	0.895 1	0.931 2	0.932 2	0.936 9
HO-BP	0.714 2	0.907 7	0.837 1	0.314 4	0.395 7	0.372 5	0.941 1	0.963 1	0.965 6
WOA-BP	0.624 5	0.984 7	0.990 7	0.329 1	0.563 6	0.314 4	0.946 5	0.951 3	0.973 8
XGBoost	0.760 3	0.846 3	0.795 7	0.380 1	0.431 9	0.349 1	0.936 0	0.955 3	0.948 2
LightGBM	0.662 9	0.961 7	1.018 5	0.293 5	0.453 7	0.318 8	0.951 3	0.931 0	0.961 7

小。“退磁电流”平均绝对误差(MAE)为 0.275 4,“充磁上缸位置”平均绝对误差(MAE)为 0.411 9,“充磁下缸位置”平均绝对误差(MAE)为 0.281 7。这表明模型预测值与实际值之间的平均绝对误差较小,模型预测准确性较高。

对比未使用 PSO-DSS-NSGA-III 进行超参数优化时,DLA-CatBoost 模型的预测精度,输出特征“退磁电流”的相关系数(R<sup>2</sup>)为 0.895 8,优化后模型相关系数为 0.961 2,预测精度提升 7.3%,输出特征“充磁上缸位置”未优化前相关系数为 0.912 3 优化后为 0.985 5,预测精度提升 8%,输出特征“充磁下缸位置”优化前相关系数为 0.907 5,优化后为 0.998 6,预测精度提升 10%,并对比仅用 NSGA-III 优化的 DLA-CatBoost 模型,本研究提出的预测模型效果都更为优异,充分验证了混合策略 PSO-DSS-NSGA-III 对超参数优化的有效性。

对比其他的多目标预测算法,本文提出的改进模型在综合预测性能上仍展现出相对更优的表现,也说明模型能够有效地捕捉多个输出特征之间的相关性,从而提高预测精度。每个输出特征的 RMSE 结果也进一步验证了模型的性能优势,混合策略 PSO-DSS-NSGA-III 优化的 DLA-CatBoost 模型预测拟合效果如图 9 所示。

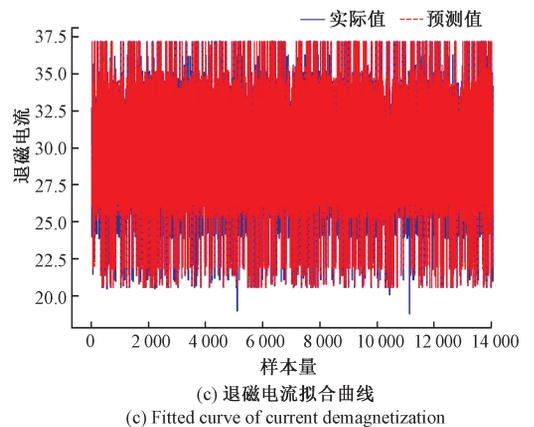
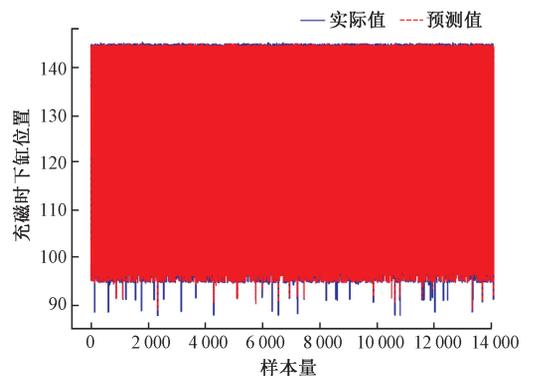
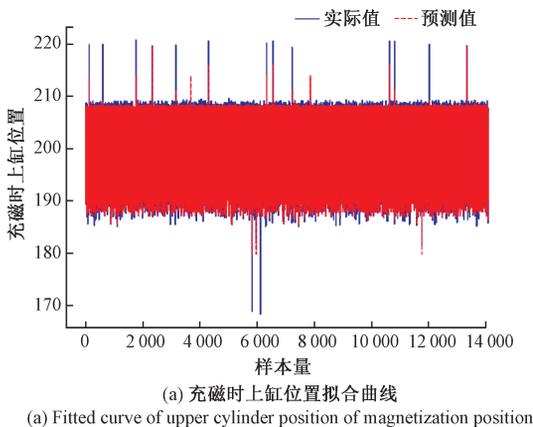


图 9 PSO-DSS-NSGA-III-DLA-CatBoost 模型预测拟合效果图

Fig. 9 PSO-DSS-NSGA-III-DLA-CatBoost model prediction fitting effect plot

综合上述可以得出,本文方法提供了一种有效的多输出回归解决方案,利用 CatBoost 的强大功能和适当的损失函数以及超参数优化算法,能够在多个输出特征之间建立更好的关系,从而提升整体预测性,从而验证了该方法对稀土磁性材料生产中工艺参数预测的可行性和优势。

## 5 结 论

本文针对钕铁硼压型生产工艺参数设置复杂、预测精度不高的问题,提出了一种混合策略(PSO-DSS-NSGA-III)优化的 DLA-CatBoost 模型,对钕铁硼压型阶段的生产工艺参数进行预测。

首先针对多输出预测问题提出动态分层调整的 CatBoost 预测模型 DLA-CatBoost,以 CatBoost 模型为基础,结合动态分层调整的优化框架,通过分阶段训练和参数继承策略,实现模型复杂度的层次化控制与模型输出的多目标协同优化。然后为进一步优化模型,使用 NSGA-III 算法结合粒子群优化算法引导交叉与变异与动态搜索空间调整的混合策略(PSO-DSS-NSGA-III)对模型的超参数进行优化,本混合策略通过粒子群算法引导的交叉变异增强全局搜索能力,结合动态搜索空间调整提升算法适应性,同时保留 NSGA-III 的参考点机制保障解集多样性与收敛性。

实验结果表明,本研究提出的 PSO-DSS-NSGA-III 优化的 DLA-CatBoost 模型在综合预测性能上优于其他模型,其均方根误差(RMSE)在 0.5~0.9 之间,平均绝对误差(MAE)在 0.2~0.5 之间,决定系数( $R^2$ )在 0.96~0.99 之间,展现出卓越的预测效果。充分验证了本研究提出模型的有效性,为钕铁硼压型工艺参数优化提供了一种有效的新方法。

## 参 考 文 献

- [1] 刘义伦,曾洋.不同成型工艺下钕铁硼模压成型过程的力学行为分析[J].粉末冶金技术,2020,38(4):262-268.  
LIU Y L, ZENG Y. Mechanical behavior analysis on the compression molding process of NdFeB by different molding technology[J]. Powder Metallurgy Technology, 2020, 38(4): 262-268.
- [2] 谢明.基于机器视觉的稀土磁材质检算法研究[D].赣州:江西理工大学,2023.  
XIE M. Research on quality inspection algorithm of rare earth magnetic materials based on machine vision[D]. Ganzhou: Jiangxi University of Science and Technology, 2023.
- [3] 甘家毅,韦世强,曾阳庆,等.钕铁硼磁性粉末压制工艺的研究进展[J].大众科技,2018,20(7):46-48,102.  
GAN J Y, WEI SH Q, ZENG Y Q, et al. Research progress of NdFeB magnetic powders pressing technology[J]. Popular Science & Technology, 2018, 20(7): 46-48,102.
- [4] 刘晨阳.基于机器学习的生产工艺参数寻优[D].北京:北方工业大学,2023.  
LIU CH Y. Optimization of production process parameters based on machine learning[D]. Beijing: North University of Technology, 2023.
- [5] 单志敏.钕铁硼氢粉碎过程平行控制方法研究[D].包头:内蒙古科技大学,2015.  
SHAN ZH M. Research based on parallel control method in the process of NdFeB hydrogen decropitation[D]. Baotou: Inner Mongolia University of Science and Technology, 2015.
- [6] 王雪萍.钕铁硼氢粉碎过程建模与优化控制研究[D].包头:内蒙古科技大学,2014.  
WANG X P. The research of modeling and optimization control in NdFeB hydrogen decrepitation process[D]. Baotou: Inner Mongolia University of Science and Technology, 2014.
- [7] QIAO Z, DONG S, LI Q, et al. Performance prediction models for sintered NdFeB using machine learning methods and interpretable studies[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2023, 963: 171250.
- [8] LAMBARD G, SASAKI T T, SODEYAMA K, et al. Optimization of direct extrusion process for Nd-Fe-B magnets using active learning assisted by machine learning and Bayesian optimization [J]. Scripta Materialia, 2022, 209: 114341.
- [9] 李金栋,郝永勤,孙旭,等.机器学习在永磁材料研究中的应用进展[J].功能材料,2025,56(1):1064-1074.  
LI J D, HAO Y Q, SUN X, et al. Application of machine learning in permanent magnetic material[J]. Journal of Functional Materials, 2025, 56(1): 1064-1074.
- [10] PROKHORENKOVA L, GUSEV G, VOROBEBV A, et al. CatBoost: unbiased boosting with categorical features [J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2018, 31: 6638-6648.
- [11] 王昊煜,高培超,谢一茹,等.基于遗传算法的土地利用优化:NSGA-II 和 NSGA-III 的对比研究[J].生态学报,2023,43(2):639-649.  
WANG H Y, GAO P CH, XIE Y R, et al. Land-use optimization based on genetic algorithm: A comparison between NSGA-II and NSGA-III [J]. Acta Ecologica Sinica, 2023, 43(2): 639-649.
- [12] 郑夏,马良.一种多目标非线性优化的 NSGA-II 改进算法[J].微电子学与计算机,2020,37(7):47-53.  
ZHENG X, MA L. An Improved NSGA-II algorithm for multi-objective nonlinear optimization [J]. Microelectronics & Computer, 2020, 37(7): 47-53.
- [13] 王强,秦华旺,齐春帅,等.基于自适应 SA-PSO 改进的 XGBoost 气温预测方法[J].电子测量技术,2023,46(7):67-72.  
WANG Q, QIN H W, QI CH SH, et al. Improved

- XGBoost temperature prediction method based on SA-PSO[J]. *Electric Measurement Technology*, 2023, 46(7): 67-72.
- [14] 谢小云, 聂燕萍, 胡海滨, 等. 基于窄带物联网技术的稀土磁性材料压型生产数据采集系统[J]. *江西冶金*, 2023, 43(5): 394-404.
- XIE X Y, NIE Y P, HU H B, et al. Rare earth magnetic material pressing production data acquisition system based on the narrow band internet of things [J]. *Jiangxi Metallurgy*, 2023, 43(5): 394-404.
- [15] 卢小宾, 霍帆帆, 王壮, 等. 数智时代的信息分析方法: 数据驱动、知识驱动及融合驱动[J]. *中国图书馆学报*, 2024, 50(1): 29-44.
- LU X B, HUO F F, WANG ZH. et al. The methods of information analysis in data intelligence era: Data driven, knowledge driven, and fusion driven by data and knowledge [J]. *Journal of Library Science in China*, 2024, 50(1): 29-44.
- [16] LUNDBERG S M, ERION G G, LEE S I. Consistent individualized feature attribution for tree ensembles[J]. *ArXiv preprint arXiv:1802.03888*, 2018.
- [17] XU D, SHI Y, TSANG I W, et al. Survey on multi-output learning [J]. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2019, 31(7): 2409-2429.
- [18] LU Z, CHEN Y, LIU H, et al. A high-power-density design method for polymer gear systems via an adaptive NSGA-III algorithm and surrogate sub-models[J]. *Materials & Design*, 2024, DOI: 10.1016/j.matdes.2024.112875.
- [19] 杨贵林, 于丽娅, 周鹏, 等. 基于 NSGA-III 算法的云制造中机床供需组合匹配研究[J]. *组合机床与自动化加工技术*, 2024(12): 187-192.
- YANG G L, YU L Y, ZHOU P, et al. Research on supply and demand combination matching of machine tools in cloud manufacturing based on NSGA-III algorithm[J]. *Modular Machine Tool & Automatic Manufacturing Technique*, 2024(12): 187-192.
- [20] 耿焕同, 戴中斌, 王天雷, 等. 基于参考点选择策略的改进型 NSGA-III 算法[J]. *模式识别与人工智能*, 2020, 33(3): 191-201.
- GENG H T, DAI ZH B, WANG T L, et al. Improved NSGA-III algorithm based on reference point selection strategy[J]. *Pattern Recognit. Artif. Intell.*, 2020, 33(3): 191-201.
- [21] 朱恒, 李荣冰, 何梓君, 等. 基于 PSO-BP 的嵌入式大气数据系统算法研究[J]. *电子测量技术*, 2024, 47(22): 67-75.
- ZHU H, LI R B, HE Z J, et al. Research on flush air data sensing system algorithms based on PSO-BP algorithm for embedded air data system[J]. *Electronic Measurement Technology*, 2024, 47(22): 67-75.
- [22] 夏焰坤, 王宛婷, 黄鹏. 基于 PSO-VMD 的永磁同步电机匝间短路振动信号故障特征提取研究[J]. *电子测量与仪器学报*, 2024, 38(7): 196-207.
- XIA Y K, WANG W T, HUANG P, et al. Fault feature extraction of inter-turn short circuit vibration signals in PMSM based on PSO-VMD[J]. *Journal of Electronic Measurement and Instrumentation*, 2024, 38(7): 196-207.
- [23] 陈洪芳, 吴欢, 王子帅, 等. 基于改进粒子群算法的三坐标测量机最佳测量区域评价方法[J]. *仪器仪表学报*, 2024, 45(11): 197-205.
- CHEN H F, WU H, WANG Z SH, et al. An evaluation method for optimal measurement region of coordinate measuring machines based on improved particle swarm optimization algorithm [J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2024, 45(11): 197-205.
- [24] YAN A, GU T. Model prediction and optimal control of gas oxygen content for a municipal solid waste incineration process [J]. *Instrumentation*, 2024, 11(1): 101-111.
- [25] 袁嘉辉, 刘蕊, 梁虹, 等. 基于 SE-ResNet34 的红火蚁巢穴判别模型[J]. *电子测量技术*, 2023, 46(23): 97-104.
- YUAN J H, LIU R, LIANG H, et al. Red fire ant nest classification model based on SE-ResNet34 [J]. *Electronic Measurement Technology*, 2024, 46(23): 97-104.

## 作者简介

章启平, 硕士研究生, 主要研究方向为算法优化、算法应用研究。

E-mail: 1374267174@qq.com

谢小云(通信作者), 教授, 主要研究方向为工业过程智能控制与数字孪生。

E-mail: xiaoyunxie@126.com