

文章编号 1000 5013(2004) 01-0041-04

可视化优化方法在填料配比中的应用

华 丽^① 肖美添^① 鄢烈祥^②

(① 华侨大学材料科学与工程学院, 福建 泉州 362011; ② 武汉理工大学化学工程研究所, 湖北 武汉 430070)

摘要 针对均匀设计在材料多因素试验中数据离散性大的问题, 提出可视化优化方法. 通过对均匀设计实验数据的处理, 找出满足一定抗压强度的填充材料的最佳配比. 实际应用证明该方法是有效的, 可以节省大量试验, 又可克服数据离散性大的问题. 同时, 它能挖掘出数据中所隐藏的有用信息, 快速准确地得出最优配方.

关键词 填充材料, 可视化优化方法, 均匀设计法, 数据处理, 最优配比

中图分类号 TU 503: O 232 **文献标识码** A

梅川水库挡潮闸建于 60 年代, 竣工运行后闸室均产生不同程度的不均匀沉陷. 究其原因, 主要是左侧混凝土岸墙及其上下游浆砌石翼墙地基应力, 远大于通航孔地基应力(前者约为后者的 3 倍). 同时, 在充分考虑各种受力条件下, 试从减轻上部边荷载来解决不均匀沉降问题. 经多方案比选, 拟采用泡沫轻质材料作为挡墙填料. 它用于土工填筑材料时, 主要设计指标是抗压强度. 一般来说, 强度越大, 湿容重也越大. 但是大多数工程要求轻质材料湿容重较小, 强度较大. 试验的目的是要寻求满足工程要求的最优配比. 由于各种因素对强度和湿容重的影响比较复杂, 且具有交叉影响. 因此, 配方优化需进行大量的试验. 对于离散性大的试验数据处理, 简单地用回归方法, 其精度很差, 难以准确地得出各因素与强度的关系. 可视化优化方法, 采用三层前馈神经网络映射模型. 它能够很准确地将空间样本矢量的拓扑结构非线性映射到二维平面上, 产生可视化图像. 这样, 就可很直观地从可视化图像中, 得出满足工程设计要求的最优配比. 它在实际应用中能够达到预期效果, 取得一定的经济效益.

1 可视化优化方法的基本原理

可视化优化方法的基本原理, 是通过一种神经网络把多维空间的样本数据映射到二维平面上, 并在平面上自动生成目标函数的等值线. 由此, 可直观地确定出最优点或最优操作方向. 然后, 通过逆映射算法, 把平面上定出的最优点和优化区域, 逆映射到多维空间, 用原始变量表示, 进而指导实际生产操作.

1.1 人工神经网络模型

图 1 所示的是可视化优化方法的人工神经网络模型. 这是一个典型三层前馈神经网络模型. 输入向量 X 首先映射到二维平面, 然后通过非线性扩展和迭加, 最后到输出. 该网络的信息传递过程可分为两个步骤. (1) 输入到映射平面, 即

$$z_1 = W_1 X^T, \quad z_2 = W_2 X^T. \tag{1}$$

(2) 从映射平面到输出, 即

$$Y = VP^T. \tag{2}$$

其中, $X = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_m \ 1]^T$, $W_j = [w_{0j} \ w_{1j} \ \dots \ w_{mj}]$, $j = 1, 2$, $Y = [y_1 \ y_2 \ \dots \ y_n]^T$, $P = [1 \ z_1 \ z_2 \ z_1 z_2 \ z_1^2 \ z_2^2]^T$, $V = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n]^T_{n \times p}$, $V_k = [v_{k1} \ v_{k2} \ \dots \ v_{k(p+1)}]$, $k = 1, 2, \dots, n$. 式 (2) 中, P 称为非线性函数扩展向量, 其作用是增强网络的非线性映射和逼近能力. 它实质上是 z_1, z_2 二

次展开形式. 这里之所以采用二次扩展向量, 因为许多文献表明, 二次扩展向量的非线性映射能力很强, 能够解决一般的非线性映射问题. 在上述网络中, m 维输入向量 X 首先经权向量 W 作用映射到向量 Z 上. 然后, Z 通过非线性扩展向量 P 、网络权矩阵 V 的作用, 与输出向量 Y 建立起一种非线性映射关系. 由此可在二维平面上, 用二维向量 Z 描绘出输出向量 Y 的特征规律.

1.2 网络权向量的确定

网络权向量 W, V 的确定过程是核心, 它决定着网络映射输出结果值是否准确、可靠. 因此, 必须采用可行的算法对网络进行学习、训练. 在学习过程中, 需要不断地调整权系数使网络的输出与希望的输出误差达到最小. 也即

$$E = \min \frac{1}{2} \left[\sum_{t=1}^n \sum_{k=1}^l (d_k(t) - y_k(t))^2 \right], \quad (3)$$

式(3)中, n 为样本数据总数, t 为样本模式, d_k

(t), $y_k(t)$ 分别为第 k 个函数在 t 模式下给定的输出和网络输出. 此处 W, V 权系数是运用“列队竞争算法”和“最速下降法”结合起来的混合算法^[1]来确定. 列队竞争算法是实现全局寻优, 而最速下降法是实现局部寻优. 列队竞争算法是一种群体搜索的进化算法^[2,3]. 它在求解非凸非线性规划、混合整数非线性规划和组合优化的全局最优解方面, 具有优良的特性^[4]. 在梯度法中, W, V 初始值, 由列队竞争算法计算的中间结果提供. W, V 修正量公式为

$$\Delta v_{ki} = - \eta \partial E / \partial v_{ki}, \quad \Delta w_{ij} = - \eta \partial E / \partial w_{ij}, \quad (4)$$

$$\partial E / \partial v_{ki} = - \sum (d_k(t) - y_k(t)) p_i, \quad i = 0, 1, \dots, 5, \quad (5)$$

$$\partial E / \partial w_{i1} = - \sum \Sigma (d_k(t) - y_k(t)) (v_{k1} + 2v_{k3z1} + v_{k5z2}) x_j, \quad (6)$$

$$\partial E / \partial w_{i2} = - \sum \Sigma (d_k(t) - y_k(t)) (v_{k2} + 2v_{k4z2} + v_{k5z1}) x_j. \quad (7)$$

其修正公式为

$$V(K+1) = V(K) + \Delta V + \alpha (V(K) - V(K-1)), \quad (8)$$

$$W(K+1) = W(K) + \Delta W + \alpha (W(K) - W(K-1)). \quad (9)$$

上面几个式子中, η, α 分别为学习速率和动量因子. 梯度法在进行局部搜索时, 具有较强的寻优能力, 是一种比较理想的局部寻优方法^[5]. 用列队竞争算法在全局范围内进行搜索, 找出大致优化方向或次优点. 然后, 在有希望点上用梯度法进行局部搜索, 同时收敛搜索空间, 直到最后找出最优点. 这样全局搜索与局部搜索交替进行, 相互补充, 可以避免仅全局搜索可能会使某些局部点未搜索到情形. 同时, 也不会使局部搜索陷入一个极值状态无法求解最值, 使全局搜索与局部搜索达到较好地均衡统一. 所以, 其最终的优化效果明显.

1.3 逆映射计算

将样本数据映射到二维平面生成目标函数等值线后, 即可识别出最优点或最优化区域. 如何将此最优点或区域返回到原始空间, 这是一个逆映射问题^[6].

定理 已知映射平面上 a, b 两点, 以及它们在高维空间相对应的点 x^a, x^b . 通过此两点直线上的任一点 c 在高维空间坐标为

$$x^c = x^a + \beta (x^b - x^a), \quad (10)$$

式中 β 为内插、外推步长, 其值等于 a, c 两点间的距离与 a, b 两点间距离之比. 上式中, 外推方向是从 $a \rightarrow b$ 到 c ; 而如从 $b \rightarrow a$ 到 c , 上式中的 a, b 两点要交换位置.

2 可视化优化方法处理试验数据

水库挡潮填料中, 影响泡沫材料性能的主要因素有材料中水泥(x_1)、土(x_2)、砂(x_3)、水(x_4)组成.

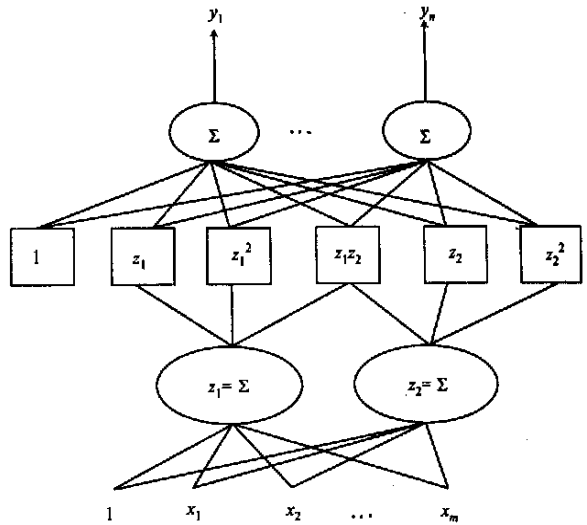


图 1 可视化优化方法的人工神经网络模型

尚有砂灰比 x_5 、泡沫剂 x_6 、湿密度 x_7 及含气量 x_8 和抗压强度 E . 原始数据^[7]如表1所示. 从表可以

表 1 轻质材料均匀设计试验数据及结果

编号	$x_1/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$x_2/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$x_3/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$x_4/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	x_5	$x_6/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$x_7/\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$	$x_8/(\%)$	E/MPa
1	150.0	5.0	419.0	174.0	2.8	1.90	0.750	0.620	0.213
2	154.0	7.5	532.0	185.0	3.5	1.50	0.880	0.560	0.202
3	260.0	6.5	476.0	218.0	1.8	1.90	0.960	0.520	0.886
4	220.0	8.5	541.0	203.0	2.5	1.10	0.970	0.520	0.839
5	152.0	2.9	457.0	167.0	3.0	1.50	0.780	0.610	0.310
6	239.0	7.4	414.0	182.0	1.7	1.80	0.840	0.580	0.580
7	216.0	3.1	486.0	183.0	2.3	1.30	0.890	0.570	0.672
8	380.0	9.7	447.0	231.0	1.2	1.60	1.070	0.480	1.970
9	263.0	2.9	438.0	178.0	1.7	2.00	0.880	0.570	0.819
10	200.0	4.2	421.0	177.0	2.1	1.30	0.800	0.600	0.440
11	367.0	3.1	441.0	230.0	1.2	1.80	1.040	0.490	1.649
12	295.0	5.1	477.0	196.0	1.6	1.10	0.970	0.530	1.132

看出, 12 组初选数据中各参数之间有交叉影响, 致使实验因素与结果之间具有较强的离散性, 难以从中得出规律性的信息. 因此, 将各组数据输入给网络, 通过对网络模型的学习、训练, 产生映射输出结果, 从输出映射图中找出优化规律.

2.1 函数拟合

从表2各样点拟合值中可看出, 拟合误差很小, 相对误差(σ)平均值为0.044. 说明抗压强度的网络

表 2 网络输出结果

编号	$E_{\text{网}}/\text{MPa}$	$E_{\text{真}}/\text{MPa}$	σ	映射降维平面坐标	
				z_1	z_2
1	0.213 0	0.218 3	0.024 9	- 0.007 1	1.081 3
2	0.202 0	0.217 8	0.078 2	- 0.188 9	0.957 4
3	0.886 0	0.864 6	0.024 1	- 0.246 7	0.393 7
4	0.839 0	0.845 6	0.006 6	- 0.408 1	0.573 7
5	0.310 0	0.277 4	0.105 1	- 0.115 0	0.969 1
6	0.580 0	0.552 9	0.046 7	- 0.046 7	0.873 0
7	0.672 0	0.638 8	0.049 4	- 0.312 6	0.696 1
8	1.970 0	1.965 5	0.022 8	- 0.816 3	0.352 3
9	0.819 0	0.849 0	0.036 6	0.024 9	0.731 1
10	0.440 0	0.494 4	0.123 6	- 0.258 7	0.791 2
11	1.649 0	1.658 8	0.005 9	- 0.690 7	0.059 1
12	1.132 0	1.127 5	0.004 5	- 0.533 5	0.461 3

计算值 $E_{\text{网}}$ 与实验真实值 $E_{\text{真}}$ 非常接近, 所以, 该方法中映射模型能准确地预测优化操作方向.

2.2 产生目标函数等值线

目标函数映射等值线, 如图 2 所示. 图中各样本点分别标识为 1, 2, ..., 12, 黑色实线表示目标函数等值线. 从等值分布曲线中可以看出目标函数发展的大致趋向, 其值增大的方向是左下方. 为了进一步验证这个结果, 沿着该方法选定编号“12”, “8”两个样本点, 朝“12”→“8”方向外推, 分别取步长(β)为 1.2 和 1.6, 得到图中两个星号点, 预测结果如表 3 所示. 表中第 2 个点的抗压强度(E)为 2.700 7 MPa, 比均匀设计试验得到的最优值(1.978 MPa)还要高出 3.6 个百分点. 如果进一步以此两点为基准外推, 可以找出新的较优点. 如此周而复始, 最终总可找到全局最优值或接近全局最优值. 而均匀设计

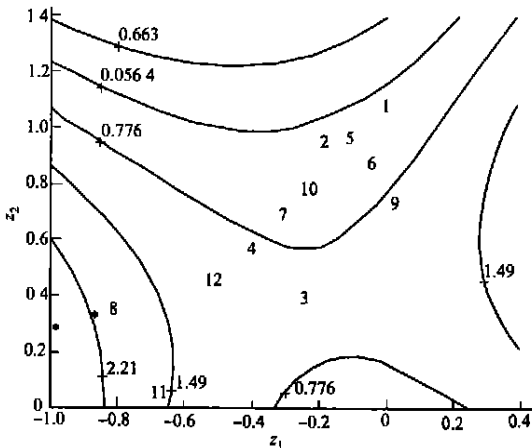


图 2 目标函数等值线

法在寻找最优点时, 还需要在均匀分散的不同水平点上不断地试验, 有时试验量可高达上百次, 而且所求的最优点并不一定就是全局最优解. 也就是说, 可视化优化方法比目前公认效果较好地均匀设计法优化效果更好, 找出优化点更接近于真实最优点. 这种方法只需通过从二维平面等值线中找出使目标值增大的趋势方向, 沿着该方向外推, 在微机上几秒钟时间就可找到最优点或接近最优点. 其操作简便、快捷, 可以节省了大量的人力、物力、财力. 同时, 将此方法的优化结果应用到梅川水库挡潮填料中, 得出了高耐压强度填料配比. 因此, 可视化方法不失为一种很好的优化方法, 优化效果显著, 有一定的工程应用价值.

表 3 预测结果(参照点 $12^{\rightarrow} 8$)

β	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
1. 2	397. 0	10. 62	441. 00	238. 00	1. 12
1. 6	431. 0	12. 46	429. 00	252. 00	0. 96
x_6	x_7	x_8	y	z_1	z_2
1. 70	1. 09	0. 47	2. 191 2	- 0. 872 8	0. 330 5
1. 90	1. 13	0. 45	2. 700 7	- 0. 985 9	0. 286 9

3 结束语

由此可见, 可视化优化方法通过对有限试验数据进行分析、处理, 挖掘数据中所隐藏的有用信息, 就可快捷地找到满足工程设计指标要求的优化操作方向. 沿着该方向进一步内插或外推, 总可找到全局最优解或接近全局最优解. 这种微机操作处理方式, 只需几秒钟的时间就可完成大量的数值计算, 特别适用于处理离散性较大的试验数据, 可以节省大量的人力、物力、财力. 实例证明, 这是一种行之有效的优化方法. 它具有一定的工程应用价值.

参 考 文 献

1 华 丽. 可视化优化方法及其应用的研究[D]. [学位论文]. 武汉: 湖北工业大学化学工程系, 2003. 5~ 15
2 Yan Niexiang. Global optimization of nonconvex nonlinear programs using line up competition algorithm[J]. Computer & Chemical Engineering, 2001, (9): 43~ 52
3 Yan Niexiang. Global optimization for process system via line up competition algorithm[J]. Proceeding of Third Joint China/USA Chemical Engineering Conference, 2000, (12): 36~ 44
4 鄢烈祥, 华 丽. 工业过程操作优化可视化方法——降维分析法[J]. 武汉理工大学学报(自然科学版), 2002, 21(3): 276~ 279
5 张瑞生, 王弘轶, 宋宏宇. 过程系统工程概论[M]. 北京: 科学出版社, 2001. (9): 79~ 84
6 鄢烈祥, 麻德贤. 过程系统寻优新方法——非线性映射主轴分析法[J]. 系统工程理论与实践, 1999, (9): 79~ 84
7 Raman H, Sunilkumar N. Multivariate modelling of water resources time series using artificial neural networks[J]. Hydrological Sciences Journal, 1995, 40(2): 145~ 163

Application of Visualized Optimization Method
to the Proportioning of Filler

Hua Li^① Xiao Meitian^① Yan Liexiang^②

(① College of Mater. Sci. & Eng., Huaqiao Univ., 362011, Quanzhou China;

② Ins. of Chem. Eng., Wuhan Univ. of Tech., 430070, Wuhan, China)

Abstract Directing against the wide discreteness of data from multifactor material test by uniform design method, the authors propose to adopt visualized optimization method for processing data of uniform design experiment; and to find optimum proportioning of filler meeting with certain compression strength. The method is proved by practical application to be effective. By which enormous experiments can be saved, the wide discreteness of experimental data can be overcome, the useful information hidden behind data can be revealed, and the optimum prescription can be fastly and accurately obtained.

Keywords uniform design method, visualized optimization method, uniform design, data processing, optimum proportioning