第 27 卷 第 4 期 北 京 化 工 大 学 学 报 Vol. 27, No. 4
2000 年 JOURNAL OF BEIJING UNIVERSITY OF CHEMICAL TECHNOLOGY 2000

改进遗传算法在过程系统工程中的求解策略

张慧平 刘洪谦 麻德贤
(北京化工大学化学工程学院, 北京 100029)

摘 要: 针对过程系统综合问题的多峰、奇异等特性,将遗传算法同可行域序贯搜索技术结合起来,实现对混合整数非线性规划问题(MINLP)的有效求解。为克服遗传算法在可行域边界搜索效率较为低下的弊病,将惩罚函数同个体的生成函数有机地结合起来,利用惩罚函数将跨越可行域的不可行点拉回到可行域内。对过程系统综合中典型的 MINLP 问题的求解,表明该方法在求解过程中能有效地实现全局浏览,得到全局最优解或近优解。

关键词: MINLP; 遗传算法; 全局优化; 过程系统工程; 过程设计; 过程优化
中图分类号: TQ 021.8

过程系统综合问题大多属于混合整数非线性规划(MINLP)范畴,该类问题通常是非凸、奇异的。用分枝定界方法处理该类问题时,在确定分枝方向时,由于使用了拟线性方法,很容易使搜索过程陷入局部极值陷井。人们通常根据问题的实质,增加一些约束,使系统能在特定的范围内得到求解。在该类问题的求解过程中,为避免搜索过程陷入局部极值陷井,我们将遗传算法同可行域序贯搜索方法结合起来,以提高搜索过程的全局浏览能力。

1 MINLP 问题遗传算法求解策略

MINLP 模型[1]可以表示为

$$\max\ f(\mathrm{m}, \mathrm{x})$$

$$\text{s.t.}\quad g_i(\mathrm{m}, \mathrm{x}) = \sum_j^t a_{ij} m_i \le b_i \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

$$m_j^L \le m_j \le m_j^U,\ m_j \text{ 为整数},\ j = 1, 2, \cdots, t$$

$$x_k^L \le x_k \le x_k^U, \quad k = 1, 2, \cdots, t$$

$$\mathrm{m} = [m_1 m_2 \cdots m_t]^{\mathrm{T}}$$

$$\mathrm{x} = [x_1 x_2 \cdots x_t]^{\mathrm{T}}$$

$g_i(\mathrm{m})$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$ 是非线性实型函数,目标函数可以是可分离的、凸的、微分的和线性的。

遗传算法是目前一种较为有效的全局优化方法,它可以有效地解决诸如工作安排、机器学习、旅行商、模式识别和分类系统等优化问题[2,3]。用以下伪代码表示该类方法的基本步骤:

```
void GeneticAlgorithms::GAs(void)
{
    k = 0;
    Initialization ();
    Evaluation ();
    while( 不满足停止准则)
    {
        k++;
        Dynamic_Sampling();
        Crossover();
        Evaluation ();
        Sort();
        Mutation();
        Evaluation ();
        Sort();
        People = newpeople;
    }
}
```

针对 MINLP/NIP 问题,作下述改进。

1.1 个体的构成与初始化

用 V_k 代表种群中第 k 个个体的基因数串:

$\mathrm{V}_k = [v_{k1}, v_{k2}, \cdots, v_{kt}]$, $k = 1, 2, 3, \cdots, p$, $j = 1, 2, 3, \cdots, t$。其中, p (pop-size) 是种群中个体数目。针对 MINLP 问题中存在着整形、实型变量,做以下变换:

$$\mathrm{m} = [v_{kj}^{(m)}]$$

$$\mathrm{x} = [v_{kj}^{(x)}]$$

$$v_{kj} = (v_{kj}^{(m)}, v_{kj}^{(x)}), \ \forall k, j$$

这样,基因数串就能有效地表示实型、整形变量,种群中的个体可以用随机方法生成。

收稿日期: 2000-03-16
第一作者: 男,1965 年生,博士生

1.2　进化函数[3]

用以下方法构造进化函数 Evaluation(V_k),对 MINLP 问题中的第 i 个约束,作如下转换:

$$d_i = \begin{cases} 0 & g_i(m) \le b_i \\ (g_i(m) - b_i)/b_i & \text{if not} \end{cases}$$

d_i 代表 V_k 对第 i 个约束函数的满足程度。可以得到:

$$\text{Evaluation}(V_k) = \begin{cases} f(m) & \text{if feasible} \\ f(m)\left(1 - \left(\sum_{i \in I_c} d_i\right) / n_c\right) & \text{if infeasible} \end{cases}$$

$$I_c = \{ i \mid g_i(m) > b_i, i = 1, 2, \cdots, n\}$$

其中,n_c 是不被满足的约束函数数目。

罚函数可将进化过程中跨越出可行域的个体,依据它们适应度大小,逐渐拉回可行域。利用进化函数,能有效地将不可行个体转化为可行个体,并克服简单 GAs 在可行域边界附近搜索能力较弱的弊端。通过排序,可以得到种群中适应度较高的个体:

$$V^{\max} = \max\{\text{Evaluation}(V_k) \mid_{k=1,2,\cdots,p}\}$$

1.3　遗传操作

遗传操作主要有杂交操作、变异操作和选择等几种。

选择以下杂交方式[3]:

设 V_i^{gen}、V_j^{gen} 为种群中随机选择出的 2 个个体,λ 为 $[0,1]$ 上的随机数。

$$V_j' = \lambda V_j^{\text{gen}} + (1 - \lambda) V_i^{\text{gen}}$$

$$V_i' = \lambda V_i^{\text{gen}} + (1 - \lambda) V_j^{\text{gen}}$$

其中,V_i',V_j' 分别为杂交操作产生出的后代。

遗传搜索过程实质上是一个 Markov 链稳定过程,根据信息熵原理,将变异操作看作是一个时序系列的变异过程[3]。

2　可行域序贯搜索策略

遗传算法的自适应搜索虽能有效地实现问题求解,但是,在较大的可行域内进行“伪穷举搜索”,会局限 GAs 的搜索效率。人们将 GAs 同模拟退火方法(SA)结合起来对 MINLP 问题进行求解。但是,SA 的随机性局限了算法的求解效率[4]。笔者将可行域序贯搜索策略同 GAs 有机地结合起来,实现对 MINLP 问题的求解。其基本原理是:在 s 维搜索空间 R^s 内,由 s 维变量构成一个矩形空间 $D = [a, b]$,MINLP 问题的可行域是它的子集。用 max a (min a) 表示 $\max_{1 \le i \le s} a_i$ ($\min_{1 \le i \le s} a_i$),其中,$a = (a_1, a_2, \cdots, a_s)$,s 为 a 的维数

步骤 0:令 $T = 0$,$D^{(0)} = D$,$a^{(0)} = a$,$b^{(0)} = b$。

步骤 1:在 $D^{(T)} = [a^{(T)}, b^{(T)}]$ 上进行 GAs 搜索,得到可行解 $x^{(T)} \in D^{(T)} \cup \{x^{(T-1)}\}$ 和 $M^{(T)}$ 使得:

$$M^{(T)} = f(x^{(T)}) \ge f(y),\ \forall y \in D^{(T)} \cup x^{(T-1)},$$

此处 $x^{(-1)} = \{\varnothing\}$ 为空集,$x^{(T)}$ 和 $M^{(T)}$ 是当前 x^* 和 M 的最好的近似值。

步骤 2 停止准则:令 $r^{(T)}$ 为当前搜索空间的半径。若 $r^{(T)} < \delta$,这里 δ 为预先给定的小正数,则 $D^{(T)}$ 以足够小,$x^{(T)}$ 和 $M^{(T)}$ 被接受为近似解,停止计算。若 $r^{(T)} \ge \delta$,进入下一步。

步骤 3:以 $x^{(T)}$ 为中心、$r^{(T)}$ 为半径,以一定的空间收缩比率定义新的搜索空间 $D^{(T+1)}$。令 $T = T + 1$,返回步骤 1。

3　方法的验证

在过程系统综合中,工艺流程的合成、排产调度和规划等问题大多属于典型的 MINLP 问题。实际过程的特殊性,使得人们在求解过程中,不得不使用超结构的建模形式。这种模型含有大量整形和实型变量的约束方程,很难进行有效的求解。

问题一:过程系统最优设计[5]

在该问题中,系统有 4 个候选操作单元,每个单元含有 4 个候选级,它们用来处理同一股物料。该问题的 MINLP 模型如下:

$$\min f(x, y) = \sum_{i=1}^{4} (a_i \exp(y_i) - b_i \ln(11 x_i))$$

$$\begin{aligned} \text{s.t. } & x_1 + x_2 = c \\ & x_1 + x_2 - x_3 - x_4 = 0 \\ & y_1 + y_2 > 4 \\ & 4 x_i \le 4 \\ & x_i > 0 \\ & y_i = \{0, 1, 2, 3, 4\},\ i = 1, 2, 3, 4 \end{aligned}$$

其中,$a_1 = 2.1$,$a_2 = 0.1$,$a_3 = 4.1$,$a_4 = 0.1$,$b_1 = 3$,$b_2 = 1$,$b_3 = 3$,$b_4 = 4$,$c = 1$。

文献[5]得到的最优结果为 $\{y_1, y_2, y_3, y_4, x_1, x_2, x_3, x_4\} = \{1, 3, 0, 4, 0.25, 0.75, 0, 1\}$,目标函数为 $f = 13.28$。因目标函数在 $x_3 = 0$ 处无意义,所以上述结果不正确。用遗传算法 + 可行域序贯搜索方法对该问题进行了求解。为便于比较,取计算精度为 0.001,$p = 14$,$p_c = 0.3$,$p_m = 0.1$,maxgen =

500,初始样本用随机方法生成,4 次计算结果如表 1 所示。

表 1 问题 1 的计算结果

Table 1 The computing result of test 1

序号	y_1	y_2	y_3	y_4	x_1	x_2	x_3	x_4	$f(x,y)$
1	1	3	1	3	0.499 999	0.500 001	0.436 963	0.563 037	2.025 611
2	1	3	1	3	0.499 986	0.500 014	0.380 904	0.619 096	2.057 542
3	2	2	1	3	0.749 965	0.250 035	0.428 457	0.571 543	10.040 305
4	2	2	2	2	0.749 928	0.250 072	0.428 721	0.571 279	27.920 832

问题二:过程综合[6~8]

$$\min f(x,y)=(y_1-1)^2+(y_2-2)^2+(y_3-1)^2-\ln(y_4+1)+(x_1-1)^2+(x_2-2)^2+(x_3-3)^2$$

$$\text{s.t. } y_1+y_2+y_3+x_1+x_2+x_3\le 5$$

$$y_3^2+x_1^2+x_2^2+x_3^2\le 5$$

$$y_1+x_1\le 1.2 \quad y_2+x_2\le 1.8$$

$$y_3+x_3\le 2.5 \quad y_4+x_1\le 1.2$$

$$y_2^2+x_2^2\le 1.64 \quad y_3^2+x_3^2\le 4.25$$

$$y_2^2+x_3^2\le 4.64 \quad x\ge 0,\ y\in\{0,1\}$$

在上述 MINLP 问题中,含有整数变量和连续变量的约束条件基本上是非线性的。该问题的全局最优解为$\{y_1, y_2, y_3, y_4, x_1, x_2, x_3\}=\{1, 1, 0, 1, 0.2, 0.8, 1.908\}$, $f=4.579\ 6$。该问题有多个局部极小解,常被用作混合整数非线性规划问题的测试函数,文献[7]用随机搜索方法求解该问题时,共花费了 68CPUs(Apple Macintosh SE PC),文献[8]用模拟退化方法求解该问题时,共进行了63 751 次函数计算。本文初始样本用随机方法生成,只需迭代 66 次,进行 3 376 次计算就可以得到问题的最优值,表 2 为 4 次计算结果。从表 1、表 2 可以看出,第四次计算结果不甚令人满意,这说明在小样本条件下,系统因信息的分布不均匀或者不关键,很容易产生“漂移”造成计算结果“失真”。这表明在种群初始化搜索过程中,信息交换方式(杂交、选择、变异等)对搜索效率和计算精度起着决定性作用,并行和自适应搜索机制有可能克服这种缺陷。

表 2 问题 2 的计算结果

Table 2 The computing result of test 2

序号	y_1	y_2	y_3	y_4	x_1	x_2	x_3	$f(x,y)$
1	1	1	0	1	0.719 481	1.280 597	1.999 830	2.903 424
2	0	1	1	1	0.679 942	1.205 525	1.893 193	3.265 502
3	1	1	0	0	0.718 300	1.280 420	1.999 807	3.597 536
4	1	0	1	1	0.614 356	1.332 280	1.829 562	5.271 349

4 结 论

笔者将可行域序贯搜索同遗传算法有机地结合起来,避免了遗传算法+模拟退火(SA)方法中的抽样策略造成的系统重要信息丢失,为获得系统的全局最优解或全局近优解提供了可能。该求解方法可以有效地处理 MINLP 问题中的整型变量和实型变量。实型杂交、变异操作能确保 GAs 在其可行域内的有效搜索。在过程系统综合中,多点、非线性杂交和变异技术能有效地处理具有多峰、奇异特征的系统综合问题,进化过程中的惩罚函数能有效地将跨越约束边界的个体拉回到可行域内,可行域序贯收缩策略加速了搜索过程。计算实例表明,笔者采用的遗传算法+可行域序贯方法是有效的。

参 考 文 献

[1] Costas D, Marananas C A. Global optimization in generalized geometric programming. Computers Chem Engng, 1997,21(4):351～369

[2] GoldBerg D E. Genetic algorithms in search, optimization and machine learning. New York: Addison-Wesley, 1989

[3] Michalewicz Z. Genetic Algorithms + data structures =

evolution programs. New York: Springer-Verlag, 1992
[4] Kirpatrick S C, Gelant M P. Optimization by simulation annealing. Science, 1983, 220:671～680
[5] 袁希钢. 混合整数非线性规化与化学工程系统最优化设计(I):一个用于工程系统最优化设计的混合非线性规化方法. 化工学报, 1991, 42(1):33～39
[6] Salcedo R L. Solves non-convex nonlinear programming and mixed-integer nonlinear programming problems with adaptive random search. Industry Engng Chem Research, 1992, 31:262～273
[7] Cradoso M F, Salcedo R L. A simulated annealing approach to the solution of MINLP problems. Computers Chem Engng, 1996, 20:1065～1364
[8] Ryoo H S, Sahinidis N V. Global optimization of non-convex NLPs and MINLPs with applications in process design. Computers Chem Engng, 1995, 19:551～556

The solution strategy based on modified genetic algorithms for process system engineering

ZHANG Hui-ping　LIU Hong-qian　MA De-xian
(College of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: Many problems are in the mixed integer non-linear program (MINLP) category in the processing system synthesis and they almost are singular, multi-peaks and rigid. There is not effective means to get their stable global-optimal. In this paper, genetic algorithms (GAs) + feasible domain condensing was proposed for solving MINLP to get a global optimal or near global optimal solution. The penalty function was combined with genetic reproduction to overcome the drawback of genetic algorithms searching inefficiently in feasible domain boundary. Some numerical experiments of MINLP test functions and the optimization problems of system synthesis, which belong to MINLP domain, were illustrated the efficiency of that method. In addition, this method was also applied to solve several optimization problems on process system engineering and the results were useful and efficient.

Key words: MINLP; genetic algorithms; global optimization; process system engineering; process design; process optimization

---

《工程索引》简介

《工程索引》(The Engineering Index, 简称 EI)是一种报道工程技术方面的期刊式检索工具。1840 年 10 月由美国工程协会联合创办。属简介性文摘刊物。

EI 收录世界上近 50 个国家和地区的 3 000 多种核心期刊和世界范围的会议录、各种机构的论文集、专题报告以及科技图书、年鉴、标准等出版物, 年报道量在 10 万篇以上。

EI 由两个部分组成, 即主题索引和著者索引, 还有配合使用 EI 的辅助说明。主题索引是 EI 的主体, 它是按主题词编排的;著者索引是按著者姓氏字顺编排的, 由著者和文摘号组成;辅助说明包括团体著者索引, 机构名称字首缩写, 简语、缩语、略语及全称对照表, 工程出版物索引和文摘号对照索引。