

# 基于 GA-NN 的复杂工艺生产过程多目标优化研究

程 静 邱玉辉

(西南大学计算机与信息科学学院 重庆 400052)

**摘 要** 在复杂非线性多目标优化问题求解中,非线性模型结构很难事先给定,需要检验的参数也非常繁多,应用传统的建模方法和优化模型已难以解决更为复杂的现实问题。人工神经网络技术为解决复杂非线性系统建模问题提供了一条新的途径。将神经网络响应面作为目标函数或者约束条件,加上其他常规约束条件进行系统模型的建立,再应用遗传算法进行优化,从而实现设计分析与设计优化的分离。以某化工企业的生产过程优化问题为例,利用 BP 神经网络建立了工艺参数与性能目标之间的模型,然后利用遗传算法搜索最优工艺参数,获取了用于指导生产的样本点数据。研究表明,该方法能够获得高精度的多目标优化模型,从而使优化效率大为提高。

**关键词** 神经网络,遗传算法,多目标优化,建模

**中图分类号** TP391.4 **文献标识码** A

## Multi-objective Optimization Design of Complex Production Processing Based on Genetic Algorithm and Neural Network

CHENG Jing QIU Yu-hui

(School of Computer and Information Science, Southwest University, Chongqing 400052, China)

**Abstract** In the problem solving processing of complex non-linear multi-objective optimization, it is very difficult to getting the non-linear structure model beforehand and the considered parameters become more and more. The conventional modeling method and optimal model have many shortcomings, and are difficult to solve currently complicated engineering practical problems. Artificial neural network provides a novel approach for solving the complex nonlinear system modeling problems. The trained neural network response surfaces can either be objective function or constraint conditions, and together with other conventional constraints, a system model is then set up and it can be optimized by genetic algorithm. This allows the separation between design analysis modeling and optimization searching. Through an example of the production process optimization problem of a chemical enterprise, the model of process parameters and performance target based on Backward Propagation neural network response surface was constructed, and the optimal process parameters and sample data were gained by genetic algorithm. The experiment results illustrate that the proposed method can get multi-objective optimal model with high accuracy, thus greatly raising the efficiency of optimization process.

**Keywords** Neural network, Genetic algorithm, Multi-objective optimization, Modeling

## 1 前言

稳健性优化设计往往需要考虑多个优化目标,而且这些目标往往相互冲突,一些目标的改善会造成另一些目标的恶化,各目标不能同时达到各自最优值。这种多个相互冲突目标的优化问题被称为多目标优化。多目标优化问题也就不存在绝对意义的最优解。令  $m$  为优化目标个数,  $n$  为设计变量个数,  $p$  为不等式约束个数,  $q$  为等式约束个数,有极小化多目标优化问题:

$$\begin{aligned} \min_x F(X) &= \{f_1(X), f_2(X), \dots, f_m(X)\} \\ \text{s. t. } &\begin{cases} g_j(X) \geq 0, & j=1, \dots, p \\ h_l(X) = 0, & l=1, \dots, q \\ x_k^* \leq x_k \leq \bar{x}_k^*, & k=1, \dots, n \end{cases} \end{aligned}$$

Pareto 解的定义为:对可行解  $X^*$ , 当且仅当不存在可行解  $X'$ , 满足

$$f_i(X') \leq f_i(X^*), (i=1, \dots, m)$$

时,则称可行解  $X^*$  为多目标优化问题的有效解,或称 Pareto 解,也称非劣解。包含全部 Pareto 解的集合称为 Pareto 前沿<sup>[1]</sup>。Pareto 解和 Pareto 前沿是多目标优化最重要的概念之一。多目标优化方法既要保证优化结果都是 Pareto 解,而不包含非支配解,即无冗余性,又要保证优化结果为均匀分布的 Pareto 解集,即均匀性。满足上述两项要求的 Pareto 解集为有效 Pareto 解集。

多目标优化的目的就是要得到 Pareto 前沿上的有效 Pareto 解集,以供设计者选择符合偏好要求的设计方案。多目标优化方法的主要研究内容包括多目标优化模型构造方法和

到稿日期:2011-07-01 返修日期:2011-09-09 本文受重庆自然科学基金项目(CSTC2010BB2285),西南大学基本科研业务专项资金项目(XDJK2009C027)资助。

程 静(1977—),女,博士生,讲师,主要研究方向为情感计算、多目标优化,E-mail:cjcat@swu.edu.cn;邱玉辉(1938—),男,教授,博士生导师,主要研究方向为语义网络、多目标优化。

多目标优化算法。求解多目标优化问题的关键是多目标优化算法。多目标优化算法既要保证优化结果都是 Pareto 解,不包含非支配解,又要保证优化结果为均匀分布的 Pareto 解集。

为得到 Pareto 前沿上均匀分布的 Pareto 解集,在过去几十年中,此方面的研究已吸引了很多学者,取得不少研究成果<sup>[2-6]</sup>。在多目标优化研究的诸多方法中,响应面法是一种应用最为广泛的方法。其基本思想是:通过一系列确定性实验,用响应面函数来近似隐式极限状态函数,通过合理地选取试验点和迭代策略,来保证多项式函数能够在失效概率上收敛于真实的隐式极限状态函数的失效概率,响应面法主要包括基于多项式的响应面法和基于神经网络的响应面法。在基于多项式的响应面法中,Bucher 等提出了一个迭代响应面法用于可靠性分析<sup>[7]</sup>,该方法使用一个二阶多项式作为近似的响应面函数。Kim 等采用梯度投影技术选择样本点,提出了一种改进的顺序响应面法<sup>[8]</sup>。当极限状态函数极其复杂,非线性程度很高时,简单地用多项式函数来模拟就不能保证计算精度。对于大型复杂系统,极限状态函数非常复杂,无法用数学函数进行描述,因此其可靠性分析极为困难。针对这一问题,基于神经网络的响应面法得到了迅速发展。Elhewy 等对基于神经网络的响应面法和基于多项式的响应面法进行了对比分析<sup>[9]</sup>。结果显示,基于神经网络的响应面法比基于多项式的响应面法更加准确和有效。Deng 等提出了 3 种基于神经网络的响应面方法(基于神经网络的一阶可靠性方法、基于神经网络的二阶可靠性方法和基于神经网络的蒙特卡罗仿真),并将其应用于结构可靠性分析<sup>[10]</sup>。

氰化氢(HCN)亦名氢氰酸,用途很广,可用于尼龙、杀虫剂、丙烯腈和丙烯酸树脂的制造,金银铜等的电镀,金银等的开采,制药,等离子蚀刻等。当前,HCN 生产的常用方法是 Andrussov 法<sup>[11]</sup>,亦称安氏法或直接法,采用的主要原料是甲烷、氨气和氧气,这 3 种原料气经过净化、混合、氧化和酸洗 4 个工段,得到纯净的 HCN 气体,由于安氏法在生产 HCN 的过程中,氨的利用率只有 60%~70%,对各个工段的优化以及对剩余氨的循环利用成为必须解决的问题。本文充分利用神经网络能够实现对高度非线性函数任意连续映像的特点,采用神经网络响应面法对氢氰酸生产工艺进行建模研究。同时,针对神经网络响应面法建立的模型为黑箱模型,无法用数学方法求最优解,采用遗传算法搜索最优工艺参数,对氢氰酸生产过程中的诸多参数进行优化,以发现最优的工艺参数设置,获取 Pareto 有效解,从而提高其转化率、改善投入产出比。

## 2 神经网络响应面模型构建

在工程应用中经常会遇到一些复杂的非线性系统,这些系统状态方程复杂,难以用数学方法准确建模。在这种情况下,可以建立 BP 神经网络(Backward Propagation Neural Network, BPNN)表达这些非线性系统,该方法把未知系统看成是一个黑箱,首先用系统输入输出数据训练 BP 神经网络,使网络能够表达该未知函数,然后可以用训练好的 BP 神经网络预测系统输出。一个典型的 BP 神经网络拓扑结构图如图 1 所示。

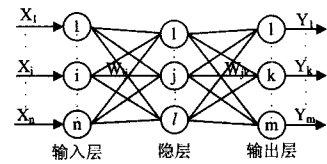


图 1 BP 神经网络拓扑结构图

通过训练,BP 神经网络能够具有联想记忆和预测能力,其训练过程包括如下几个步骤:

步骤 1 网络初始化。根据系统输入输出序列  $(X, Y)$  确定网络输入节点数  $n$ 、隐层节点数  $l$ 、输出节点数  $m$ ,初始化输入层、隐层和输出层神经元之间的连接权值  $\omega_{ij}$  和  $\omega_{jk}$ ,初始化隐层阈值  $a$ 、输出层阈值  $b$ ,给定学习速率和神经元激励函数。

步骤 2 计算隐层输出。根据输入向量  $X$ 、输入层和隐层间连接权值  $\omega_{ij}$  以及隐层阈值  $a$ ,计算隐层输出  $H$ 。

$$H_j = f\left(\sum_{i=1}^n \omega_{ij} x_i - a_j\right) \quad j=1, \dots, l \quad (1)$$

式中,  $l$  为隐层节点数,  $f$  为隐层激励函数。

步骤 3 计算输出层输出。根据隐层输出  $H$ 、连接权值  $\omega_{jk}$  和阈值  $b$ ,计算预测输出  $O$ 。

$$O_k = \sum_{j=1}^l H_j \omega_{jk} - b_k \quad k=1, \dots, m \quad (2)$$

步骤 4 计算误差。根据网络预测输出  $O$  和期望输出  $Y$ ,计算网络预测误差  $e$ 。

$$e_k = Y_k - O_k \quad k=1, \dots, m \quad (3)$$

步骤 5 更新权值。根据网络预测误差  $e$ ,更新网络连接权值  $\omega_{ij}$  和  $\omega_{jk}$ 。

$$\omega_{ij} = \omega_{ij} + \eta H_j (1 - H_j) x(i) \sum_{k=1}^m \omega_{jk} e_k \quad i=1, \dots, n; \quad j=1, \dots, l$$

$$\omega_{jk} = \omega_{jk} + \eta H_j e_k \quad j=1, \dots, l; k=1, \dots, m \quad (4)$$

式中,  $\eta$  为学习速率。

步骤 6 更新阈值。根据网络预测误差  $e$ ,更新网络节点阈值  $a$  和  $b$ 。

$$a_j = a_j + \mu H_j (1 - H_j) \sum_{k=1}^m \omega_{jk} e_k \quad j=1, \dots, l$$

$$b_k = b_k + e_k \quad k=1, \dots, m \quad (5)$$

步骤 7 判断算法迭代是否结束,若未结束,返回步骤 2,继续执行步骤 2—步骤 6。

本文中,对氢氰酸生产过程参数优化问题,采用多输出、单输出的神经网络,隐层激励函数选择 tansig 函数。

## 3 基于遗传算法的系统优化

遗传算法是模拟达尔文生物进化论的自然选择和遗传学机理的生物进化过程的计算模型,是一种通过模拟自然进化过程搜索最优解的方法<sup>[12]</sup>。

本文的目的是寻找最优的氢氰酸生产工艺参数,使得氨气的转化率最大。由于人工神经网络建立的是一个黑箱模型,无法用数学方法求最优解,利用遗传算法寻优不需要目标函数具备明确的数学方程和导数表达式,因此可以利用遗传算法来进行寻优计算。

在人工神经网络建立函数关系后,用遗传算法求输出的最优值,其思路如下:①在一定的编码方案下,随机产生一个初始种群;②用相应的解码方法,将编码后的个体转换成问题空间的决策变量,并求得个体的适应度值;③按照个体适应

度值的大小,从种群中选出适应度值较大的一些个体构成交配池;④由交叉和变异这两个遗传算子对交配池中的个体进行操作,并形成新一代的种群;⑤反复执行上述第2-4个步骤,直至满足收敛判据为止。

## 4 实例分析

### 4.1 数据选取及预处理

在上述理论分析的基础上,本文以某化工企业氢氰酸生产过程中积累的实际生产数据为研究对象,实施生产参数的建模及优化研究。实验数据选取的是2010年7月到2011年2月间的3000组有效数据,每组数据包括10个量化特征(天然气氨气体积比CN、空气氨气体积比AN、氨气补偿压力 $P_N$ 、天然气补偿压力 $P_C$ 、空气补偿压力 $P_A$ 、氨气补偿温度 $T_N$ 、汽包压力 $P_p$ 、反应器出口温度 $T_f$ 、大混合物出口温度 $T_d$ 、氨气补偿流量 $F_N$ )和一个性能指标(氨的转化率 $\alpha$ ),部分实验数据如表1所列。

表1 实验数据(部分)

记录	CN	AN	$P_N$	$P_C$	$P_A$	$T_N$	$P_p$	$T_f$	$P_d$	$F_N$	$\alpha$
1	1.184	5.995	2	2	2.01	36.6	3	225	80	1199	70.788
2	1.193	6.061	2	2	2.01	38	2.99	227	79	1246	71.487
.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....
3000	1.182	6.018	2	2	2.01	29.2	3	227	80	1248	70.387

由于神经网络的输入、输出常具有不同的物理意义和不同量纲,故需对数据进行归一化处理,使所有的分量在0~1之间变化,归一化处理选用文献[13]中的方法,归一化公式表示如下。

$$p_i' = 0.002 + \frac{0.95 \times (p_i - p_{\min})}{p_{\max} - p_{\min}} \quad (6)$$

$$t_i' = 0.05 + \frac{0.9 \times (t_i - t_{\min})}{t_{\max} - t_{\min}} \quad (7)$$

式中, $p_i$ 为归一化前的工艺参数, $t_i$ 为归一化前的性能指标, $p_i'$ 为归一化后的工艺参数, $t_i'$ 为归一化后的性能指标, $p_{\max}$ 和 $p_{\min}$ 表示工艺参数的最大值和最小值, $t_{\max}$ 和 $t_{\min}$ 表示性能指标的最大值和最小值,根据生产经验,分别取80和50。归一化后的数据如表2所列。

表2 归一化处理后的实验数据(部分)

1	2	3000	1	2	3000	
CN	0.35103	0.36794.....	0.382	$P_p$	0.67976 0.67012.....	0.67596
AN	0.11343	0.13791.....	0.11784	$P_f$	0.46797 0.52332.....	0.48157
$P_N$	0.43382	0.43382.....	0.43382	$P_d$	0.48796 0.56037.....	0.34739
$P_C$	0.43313	0.43675.....	0.42345	$F_N$	0.63317 0.70116.....	0.71041
$P_A$	0.45057	0.45299.....	0.44954	$\alpha$	0.67499 0.68927.....	0.66623
$T_N$	0.69558	0.73128.....	0.59588			

### 4.2 神经网络响应面模型训练

#### 4.2.1 选择样本数据

学习训练的样本对神经网络的泛化能力也有很大的影响。如果数据样本数目太少,则网络就很难学习到数据潜在的规律,只能起到记忆数据的作用,有时甚至学习到错误的规律;如果数据样本数目太多,网络的学习训练速度就会受到影响,而且在应用时,其泛化能力不一定很好。选择数据样本数据时,采用文献[14]提出的基于最近邻规则的神经网络训练样本选择方法进行选择,取样本数据的三分之一作为训练样本、三分之一作为测试样本。

#### 4.2.2 设计BP神经网络

设计BP神经网络需要确定网络层数、传递函数、每层节点数、初始权系数、学习算法等。一般情况下,输入层的节点数等于输入变量的个数,输出层的节点数等于输出变量的个数。在设计网络结构时,增加层数可以降低误差,提高精度,但同时也使网络复杂化,从而增加网络权值的训练时间,而误差精度的提高可以通过增加隐层节点数来达到,其训练效果也比增加层数更容易观察和调整。因此,本实验采用三层网络结构,即采用一个包含10个节点的输入层、一个隐含层、一个单输出的输出层。

隐层节点的作用是从样本中提取并存储其内在规律,每个隐层节点有若干个权值,而每个权值都是增强网络映射能力的一个参数。若隐层节点数太少,则网络不能建立复杂的映射关系,网络预测误差较大。若隐层节点数过多,则网络学习时间将增加,并且可能引起“过拟合”现象<sup>[15]</sup>。

本文中,参考如下公式来确定最佳隐层节点数:

$$l < \sqrt{(m+n)} + \alpha \quad (8)$$

式中, $n$ 为输入层节点数, $l$ 为隐层节点数, $m$ 为输出层节点数, $\alpha$ 为1~10之间的常数。首先利用公式确定隐层节点数的范围,然后用试凑法确定最佳隐层节点数。本文中, $n=10$ , $m=1$ ,所以隐层节点的取值范围为4~14。

选择均方误差MSE作为BP神经网络的误差,隐层节点数分别选择4~14进行训练,均方误差与隐层节点数之间的关系如图2所示。

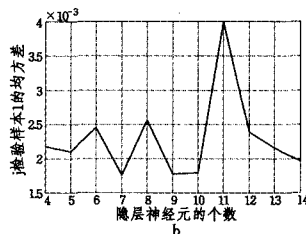


图2 隐层节点数与训练误差曲线图

由图2可知,隐层节点数为7、9、10时,误差较小,为简单起见,选择隐层节点数为7。所以,最终确定的BP神经网络结构为10-7-1,即输入层有10个节点,隐层有7个节点,输出层有1个节点。

#### 4.2.3 训练BP神经网络

根据式(1)~式(8),用训练样本对设计的BP神经网络进行训练,并用测试样本对网络进行测试,测试样本的数据拟合效果如图3所示,相对误差如图4所示。

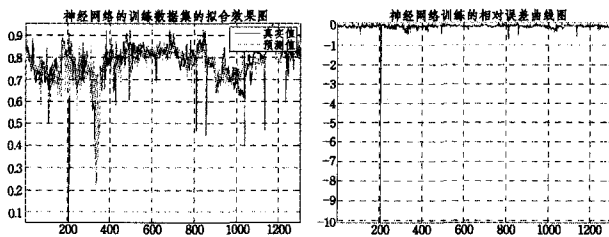


图3 测试样本的拟合效果和相对误差 图4 测试样本的拟合效果和相对误差

由图3和图4可知,最终获取的BP神经网络具有较佳的性能,可以用于氢氰酸生产过程工艺参数的建模。得到的BP神经网络的权值和阈值矩阵分别为:

$$W_1' = \begin{pmatrix} -29.635 & -8.2638 & -9.1668 & -10.914 & 8.2139 & -6.6311 & -7.1213 \\ 150.48 & -16.657 & -7.7337 & 29.435 & 16.77 & 1.9226 & 0.68311 \\ 220.85 & 10.959 & 102.62 & 14.378 & -10.947 & 3.5398 & -39.167 \\ 351.38 & 1.8543 & -118.24 & 36.922 & -1.7678 & -18.017 & 7.7594 \\ 360.29 & 33.382 & 91.431 & 6.4474 & -33.202 & 6.3774 & -27.796 \\ -119.36 & -25.779 & 480.25 & -50.627 & 25.816 & 14.303 & 41.117 \\ 123.8 & -9.3654 & -123.64 & -0.53222 & 9.1852 & 9.7337 & 23.908 \\ 689.69 & 14.854 & 287.96 & -40.4 & -14.787 & 13.642 & 7.9817 \\ -143.91 & 15.582 & 25.62 & -23.131 & -15.715 & 1.9099 & 0.21513 \\ -31.422 & 0.83294 & -10.945 & 2.0136 & -0.82173 & -1.7178 & -1.9727 \end{pmatrix}$$

$$B_1 = \begin{pmatrix} -752.77 \\ -8.1601 \\ -414.72 \\ 40.178 \\ 8.1227 \\ -20.14 \\ -9.6836 \end{pmatrix} \quad W_2' = \begin{pmatrix} 0.09908 \\ -36.457 \\ 0.14475 \\ 0.1921 \\ -36.456 \\ -0.38544 \\ 47.495 \end{pmatrix}$$

$$B_2 = \{47.792\}$$

其中,  $W_1'$  为隐层权值矩阵,  $W_2'$  为输出层权值矩阵,  $B_1$  为隐层阈值矩阵,  $B_2$  为输出层阈值矩阵。

### 4.3 遗传算法优化结果

本研究的目的是寻找最优的工艺参数,使得氨的转化率最大。这里,设定遗传算法的个体数目  $NIND=60$ ,最大遗传代数  $MAXGEN=200$ ,变量的二进制位数  $PREC=15$ ,代沟  $GGAP=0.9$ ,交叉率  $P_c=0.7$ ,选择策略为随机遍历选择,输出值  $f$  为适应度函数,编写 Matlab 程序,用遗传算法搜索最优工艺参数。遗传算法优化过程中最优个体适应度值变化如图 6 所示。

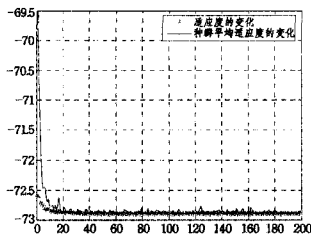


图 6 个体适应度变化情况

由图 6 可知,随着进化代数增加,种群的平均适应度和最优适应度均呈现下降趋势。搜索到的氨的最大转化率为 100%,获得的最佳工艺参数组合如表 3 所列。

表 3 遗传算法搜索到的最佳工艺参数

CN	AN	PN	PC	PA	TN	PP	Tr	Pd	FN
1.5	6.149	2.04	2.1	2.27	12.52	3.16	210	78.7	605

把表 3 的工艺参数代入到 BP 网络模型中,用该模型预测氨的转化率为 81.667%,原样本的转化率  $\alpha$ 、遗传算法搜索到的最大转化率  $\alpha_{max}$  和采用表 3 中的工艺参数时用 BP 神经网络模型预测的转化率  $\alpha_{max}'$  的散点图如图 7 所示。

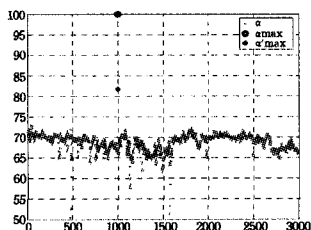


图 7 氨的转化率

由图 7 可知,使用遗传算法搜索到的最佳工艺参数提高了氨的转化率。但是,由于副反应的存在,氨的转化率不可能达到 100%,这种生产实际存在的问题仅仅依靠建立工艺模型是无法改变的。

**结束语** 本文通过对非线性多目标优化问题的研究,利用 BP 神经网络建立了工艺决策变量与产品性能目标之间的模型,并且用遗传算法搜索其最优工艺参数,获得了用于指导生产的样本点数据。实验结果证明本方法搜索到的最优工艺参数能够用于指导企业生产,对企业的实际生产具有重要的参考价值。

但是,利用神经网络建模时需要依赖已有的准确样本数据,并且对粗大噪声较为敏感,如何剔除粗大噪声数据,获取更加精确的数据模型,将是我们下一步工作的焦点。

### 参考文献

- [1] Messac A, Ismail-Yahaya A. Required Relationship between Objective Function and Pareto Frontier Orders; Practical Implications[J]. AIAA Journal, 2001, 39(11): 2168-2174
- [2] Logist F, Houska B, Dieh M, et al. Robust multi-objective optimal control of uncertain (bio)chemical processes[J]. Chemical Engineering Science, 2011, 66(20): 4670-4682
- [3] Moon Y, Yao T. A robust mean absolute deviation model for portfolio optimization[J]. Computers & Operations Research, 2011, 38(9): 1251-1258
- [4] 周永务, 王圣东. 非对称信息下供应链库存系统 Pareto 优化模型[J]. 控制与决策, 2008, 23(10): 1163-1167
- [5] 方其庆, 刘庆华, 彭晓明, 等. QoS 全局最优的多目标 Web 服务选择算法[J]. 计算机应用研究, 2009, 26(12): 4442-4445, 4448
- [6] 李献礼. 利用遗传算法解决非线性系统优化问题[J]. 计算机科学, 2007, 34(10): 271-218, 232
- [7] Bucher C G, Bourgund U. A fast and efficient response surface approach for structural reliability problems[J]. Structural Safety, 1990, 7(1): 57-66
- [8] Kim S, Na S. Response surface method using vector projected sampling points[J]. Structural Safety, 1997, 19(1): 3-19
- [9] Elhewy A H, Mesbahi E, Pu Y. Reliability analysis of structures using neural network method[J]. Probabilistic Engineering Mechanics, 2006, 21(1): 44-53
- [10] Cheng Jin, Li Q S, Xiao Ru-cheng. A new artificial neural network-based response surface method for structural reliability analysis[J]. Probabilistic Engineering Mechanics, 2008, 23(1): 51-63
- [11] Lukas V H, Andreas G. Method of producing hydrogen cyanide: US, 6096173[P]. 2000-08-01
- [12] 徐宗本, 张讲社, 郑亚林. 计算智能中的仿生学: 理论与算法[M]. 北京: 科学出版社, 2003
- [13] 杨晓华. 智能算法及其在资源环境系统建模中的应用[M]. 北京: 北京师范大学出版社, 2005
- [14] 郝红卫, 蒋蓉蓉. 基于最近邻规则的神经网络训练样本选择方法[J]. 自动化学报, 2007, 33(12): 1247-1251
- [15] 李鸿儒, 王晓楠, 何大阔, 等. 一种优化计算确定神经网络结构的方法[J]. 系统仿真学报, 2009, 21(1): 104-107
- [16] 陈美, 朱琦. 基于改进神经网络的自动制识别研究[J]. 重庆邮电学院: 自然科学版, 2009, 21(6): 764-770