

文章编号: 1001-0920(2004)06-0626-05

## 基于代理模型和遗传算法的仿真优化研究

王 凌<sup>1</sup>, 吉利军<sup>2</sup>, 郑大钟<sup>1</sup>

(清华大学 自动化系, 北京 100084; 2. 中国科学院 自动化研究所, 北京 100080)

**摘 要:** 首先由已知样本建立神经网络作为代理模型, 替代费时的仿真评价而快速给出近似目标值; 然后基于代理模型, 采用 GA 进行决策量寻优. 为增强优化结果的可靠性和一致性, 讨论了按问题信息选取样本和多模型方法. 基于典型压力管设计问题的数值仿真, 验证了所提出方法的可行性和有效性, 其结果明显优于现有文献结果.

**关键词:** 代理模型; 神经网络; 遗传算法; 仿真优化

**中图分类号:** TP183 **文献标识码:** A

## Simulation optimization based on surrogate model and genetic algorithm

WANG Ling<sup>1</sup>, JI Li-jun<sup>2</sup>, ZHENG Da-zhong<sup>1</sup>

(1. Department of Automation, Tsinghua University, Beijing 100084, China; 2. Institute of Automation, Chinese Academy of Science, Beijing 100080, China. Correspondent: WANG Ling, E-mail: wangling@tsinghua.edu.cn)

**Abstract:** A neural network is established based on available samples which is taken as surrogate model to provide approximate objective value by replacing time-consuming simulation evaluation. Based on surrogate model, GA is applied to search optimal solution. Moreover, samples choosing according to problem information and multiple-model methods are discussed to enhance the reliability and consistence of optimization results. Numerical simulation based on typical pressure vessel design problem demonstrates the feasibility and effectiveness of the proposed method.

**Key words:** surrogate model; neural network; genetic algorithm; simulation optimization

### 1 引 言

遗传算法<sup>[1]</sup>是一种“产生-评价”型的通用性群体并行迭代优化算法, 近年来得到了广泛关注和应用. GA 的优化过程仅依赖于目标函数值, 通常对问题无特殊要求. 然而, 许多实际工程问题不存在目标函数的明确表达式, 机理模型的建立依赖于大量的工艺知识、数据和实践经验, 因此性能评价通常由耗时的系统仿真给出. 对于这类复杂的仿真优化问题<sup>[2]</sup>, 尤其当搜索空间很大且存在多极小点时, 基于 GA 的优化过程大部分时间花费在评价过程, 而

产生(即搜索)过程的比例则很小, 因而算法的性能和效率较差.

本文首先由已知样本建立神经网络作为代理模型, 从而由代理模型给出性能评价, 而不再依靠费时的系统仿真, 然后基于代理模型采用 GA 进行决策量寻优, 并可采用多代理模型和按问题信息选取样本的方法, 以提高优化结果的可靠性和一致性. 基于典型压力管设计问题的数值仿真, 验证了方法的可行性和有效性, 其结果大大优于现有文献结果.

收稿日期: 2003-06-26; 修回日期: 2003-08-14.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(60204008, 60374060); 国家 973 计划项目(2002CB312200).

作者简介: 王凌(1972 →), 男, 江苏武进人, 副教授, 博士, 从事优化理论与方法的研究; 郑大钟(1935 →), 男, 浙江绍兴人, 教授, 博士生导师, 从事 HDS 和调度等研究.

### 2 算法原理

仿真优化问题的难点在于不存在优化目标的显式表达式,性能评价依赖于费时的系统仿真,并且优化曲面存在多极小解<sup>[2]</sup>. GA 是仿真优化领域应用较广的一类优化算法,文献[3]的适配值指定和适配值继承方法,以及文献[4]的模型管理方法,可在一定程度上减少个体的真实性能评价次数,但优化过程仍需要对真实性能评价进行修正.本文采用代理模型的方法,替代真实系统仿真进行性能评价的估计,从而大大缩短了 GA 的评价过程;进而基于代理模型给出的评价,利用 GA 在全空间进行进化搜索.算法原理如图 1 所示.

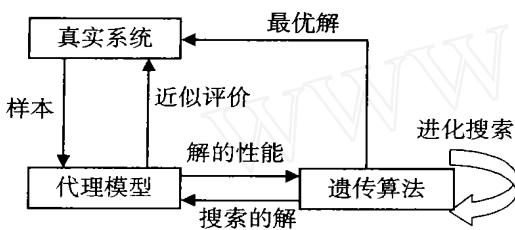


图 1 基于代理模型和 GA 的仿真优化算法原理

由图 1 可见,算法基于真实系统的样本构造代理模型,替代真实系统以快速给出近似性能评价,算法通过 GA 的进化操作不断地搜索解空间,并随时由代理模型给出解的性能评价,最后对所得的最优解由原系统仿真给出确切的性能评价.

鉴于神经网络具有较好的拟合和分类能力,本文采用三层感知器来建立代理模型,训练算法采用带动量项的误差反向传播算法(BPM)<sup>[1,5]</sup>.为增加性能估计的准确性和可靠性,本文尝试根据问题信息选取样本以及多模型的方法.文献[6]从最优点位置的准确性、曲面的整体形状、局部极值个数等几方面讨论了模型的评价问题.尽管平均平方误差是建立神经网络最常用的目标函数,但对于整个问题的优化过程而言,神经网络仅起到代理模型的作用.因此,代理模型对应的优化曲面没有必要与原问题完全吻合,只要抓住代理模型的主要特征(比如最优点的位置,各解性能序的一致性),就能利用 GA 基于代理模型搜索到最优解.

本文采用传统的保优 GA 算法<sup>[1]</sup>,仿真采用实数编码、算术交叉和高斯变异,交叉概率取 0.9,变异概率取 0.8,种群数目与问题相关,以最优解连续 50 代不变为终止条件.

### 3 算例仿真与分析(样本选取)

首先考虑如下双极值算例:

$$f(x) = -x(x^2 - 3.2x + 2.89)(x - 3)/2, \quad x \in [0, 3]. \quad (1)$$

其最优值为  $x^* = 0.537, f(x^*) = 0.9655$ .

在解空间均匀取 20 个样本建立神经网络,学习速率为 0.2,动量项为 0.4,隐节点数为 5,训练步数为 10 000.假设 GA 搜索过程中目标函数未知,而以所得神经网络为代理模型进行性能评价,GA(种群规模为 10)10 次随机仿真的搜索性能与  $f(x^*)$  的相对误差不超过 0.27%,均方差为  $2.15 \times 10^{-5}$ .可见,对于较简单的问题,用较少的样本便可建立较好的代理模型,并取得良好的优化结果.

其次考虑如下六驼峰函数<sup>[3]</sup>:

$$f(x_1, x_2) = 10 / [11(4x_1^2 - 2.1x_1^4 + x_1^6/3 + x_1x_2 - 4x_2^2 + 4x_2^4 + 2)], \quad x_i \in [-3, 3]. \quad (2)$$

该函数存在 4 个局部极大解和 2 个局部极小解,两主峰的位置分别在 (0.09, -0.71) 和 (-0.09, 0.71),最优值均为 0.9387.

在解空间均匀取 200 个样本建立神经网络模型,学习速率为 0.1,动量项为 0.4,隐节点数为 7,训练步数为 15 000.以所得神经网络为代理模型,GA(种群规模为 30)10 次搜索的平均性能与最优性能的相对误差为 15.71%.对比原问题与代理模型的等高线图(略),误差大的原因在于代理模型的最优解位置与真实最优解的位置相差较远.由于 BPM 本身收敛速度较慢,单纯增大训练步数对提高代理模型的质量很有限;而当样本数增大时,训练步数一般也会增大,从而导致训练时间增大.下面探讨按问题信息选取的样本建立代理模型的方法.

观察驼峰函数的三维图像,发现 6 个峰都集中在中间的区域,而峰的四周则很平坦.因此设定一个特征区域,在该区域内取相对较多的样本,从而使选取的样本带有一定的问题信息.令特征区域为  $x_1 \in [-2, 2], x_2 \in [-1, 1]$ ,在该区域选取 100 个样本,并在全空间均匀采样 100 个点,用 200 个样本建立神经网络模型,参数同上.遗传算法 10 次搜索的平均性能与最优性能的相对误差为 0.21%,均方差为  $3.59 \times 10^{-4}$ ,可见算法性能得以大大提高.该算例表明,样本的选取很重要,它影响到代理模型的特性,尤其是极值点的位置.考察原问题与代理模型的等高线图(略),二者最优解的位置很接近,因而优化结果较好.

### 4 压力管设计问题的仿真与分析

选取带问题信息的样本可提高算法性能,但当问题维数较高时,难以直观判断问题的特征区域,况且仿真优化问题通常事先缺乏问题信息.为提高由均匀分布样本所建立的代理模型的质量,下面以著名的压力管设计问题为例,进行多模型方法的探讨.

所谓多模型,就是由给定的同一组样本建立多个代理模型(这些代理模型可以是相同或不同的类型和结构),然后以各模型的统计性能作为解的评价.令

$$f_{s_i}(X) = f(X) + n_i(X), i = 1, 2, \dots, k. \quad (3)$$

其中: $f_{s_i}(X)$ 和 $f(X)$ 分别为第*i*个代理模型和真实系统对解*X*的性能评价, $n_i(X)$ 为评价偏差.假设 $n_i(X)$ 为均值为零的独立同分布随机变量, $i = 1, 2, \dots, k$ ,则以*k*个代理模型的平均评价作为解的性能估计,可将方差降低为原来的 $1/k$ ,从而提高了性能估计的一致性.

压力管设计问题是一个 benchmark 问题,它同时包含离散量和连续量的搜索,并且属于约束优化问题.已有大量优化算法对此问题进行尝试<sup>[3~16]</sup>,包括混合整数规划、遗传算法、增广 Lagrange 方法、两阶段方法等.该问题要求在规定尺寸范围内设计一个耐高压的压力管容器,它由一个圆柱形壳体和两端半球形头部组成,壳体由两块钢板卷制而成,并由两条焊缝连接,头部与壳体也由焊缝连接.要求设计材料费用、成型费用和焊接费用最小.

该问题的数学模型如下:

$$\begin{aligned} \min f(X) = & \\ & 37\,982.2x_1x_3x_4 + 108\,506.3x_2x_3^2 + \\ & 193\,207.3x_1^2x_4 + 1\,210\,711x_1^2x_3; \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \text{s.t. } g_1(X) &= 0.000\,490\,22x_3/x_1 - 1 \leq 0, \\ g_2(X) &= 0.000\,242\,316x_3/x_2 - 1 \leq 0, \\ g_3(X) &= (-4x_3^3/3 + 21.24)/ \\ & (x_3^2x_4) - 1 \leq 0. \end{aligned} \quad (5)$$

其中: $x_1$ 表示半球形头部的钢板厚度, $x_2$ 表示圆筒形管身的钢板厚度, $x_3$ 表示压力管内径, $x_4$ 表示管身长度(四变量单位均为 m).通常规定 $x_1$ 和 $x_2$ 为离散变量(0.001 587 5的整数倍), $x_3$ 和 $x_4$ 为连续变量.在此约定搜索空间为 $x_1/0.001\,587\,5 \in [12, 20]$ , $x_2/0.001\,587\,5 \in [6, 12]$ , $x_3 \in [0.8, 1.4]$ , $x_4 \in [2, 6]$ .

由于问题存在约束,采用如下罚函数建立目标函数:

$$f(X) = f_s(X) + \sum_{i=1}^3 100[\max(g_i(X), 0)]^2, \quad (6)$$

其中 $f_s(X)$ 为代理模型给出的评价.

在搜索空间均匀产生 50 个样本,用 BPM 法建立两个神经网络模型(学习速率为 0.05,动量项为 0.4,隐节点数为 7,训练步数为 10 000,两模型的初始权值随机产生且不同).取 GA 种群为 30,基于代理模型 1 的 10 次搜索结果如表 1 所示,代理评价的均值和均方差分别为 5 066.52 和 16.33,真实评价的均值和均方差分别为 5 862.35 和 502.93;基于代理模型 2 的 10 次搜索结果如表 2 所示,代理评价的均值和均方差分别为 6 162.25 和 7.66,真实评价的均值和均方差分别为 5 809.81 和 626.87.

由表 1 和表 2 可以看出:

1) 基于同一代理模型 10 次搜索结果的代理评价性能较一致,说明 GA 已基本搜索到代理模型

表 1 基于模型 1 的 GA 搜索结果

次数	$x_1/m$	$x_2/m$	$x_3/m$	$x_4/m$	可行性	代理评价	真实评价
1	0.022 225	0.014 288	1.199 5	3.139 8	可行解	5 068.14	6 426.67
2	0.020 638	0.009 525	1.199 8	3.186 4	可行解	5 056.44	5 365.18
3	0.019 050	0.011 113	1.199 8	3.180 2	可行解	5 050.43	5 246.72
4	0.022 225	0.012 700	1.198 6	3.111 4	可行解	5 092.09	6 141.43
5	0.019 050	0.009 525	1.199 9	3.119 3	可行解	5 049.94	<b>4 942.20</b>
6	0.022 225	0.012 700	1.199 2	3.177 1	可行解	5 074.42	6 218.12
7	0.025 400	0.009 525	1.198 7	3.201 1	可行解	5 096.95	6 522.02
8	0.020 638	0.014 288	1.199 8	3.159 9	可行解	5 056.17	6 081.86
9	0.019 050	0.014 288	1.199 9	3.115 6	可行解	5 050.23	5 682.77
10	0.022 225	0.011 113	1.199 4	3.199 5	可行解	5 070.37	5 996.54

表 2 基于模型 2 的 GA 搜索结果

次数	$x_1/m$	$x_2/m$	$x_3/m$	$x_4/m$	可行性	代理评价	真实评价
1	0.019 05	0.009 525	1.200 0	3.149 0	可行解	6 150.04	<b>4 970.52</b>
2	0.025 40	0.009 525	1.199 9	3.247 2	可行解	6 162.85	6 588.75
3	0.023 81	0.012 700	1.199 7	3.216 5	可行解	6 161.68	6 649.35
4	0.023 80	0.011 113	1.199 0	3.155 4	可行解	6 169.50	6 324.18
5	0.019 05	0.009 525	1.199 6	3.157 9	可行解	6 155.40	4 976.78
6	0.019 05	0.009 525	1.198 8	3.251 0	可行解	6 169.79	5 060.05
7	0.020 64	0.014 288	1.199 6	3.078 9	不可行	6 162.95	5 998.53
8	0.019 05	0.012 700	1.198 7	3.295 4	可行解	6 177.00	5 596.01
9	0.020 64	0.011 113	1.199 7	3.178 8	可行解	6 156.58	5 604.81
10	0.023 81	0.011 113	1.199 9	3.154 6	可行解	6 156.75	6 329.09

表 3 基于双模型的 GA 搜索结果

次数	$x_1/m$	$x_2/m$	$x_3/m$	$x_4/m$	可行性	代理评价	真实评价
1	0.023 81	0.009 525	1.199 8	3.179 2	可行解	5 611.33	6 109.76
2	0.020 64	0.012 700	1.199 1	3.287 2	可行解	5 628.49	5 959.95
3	0.020 64	0.009 525	1.199 9	3.094 0	不可行	5 607.86	5 271.30
4	0.019 05	0.011 113	1.199 2	3.228 5	可行解	5 614.60	5 288.84
5	0.019 05	0.011 113	1.199 7	3.189 8	可行解	5 603.51	5 255.25
6	0.019 05	0.014 288	1.199 3	3.137 7	可行解	5 611.43	5 699.68
7	0.022 23	0.012 700	1.200 0	3.130 6	可行解	5 606.11	6 171.94
8	0.019 05	0.009 525	1.199 3	3.222 6	可行解	5 612.04	<b>5 036.12</b>
9	0.019 05	0.011 113	1.199 9	3.162 7	可行解	5 599.08	5 231.07
10	0.019 05	0.011 113	1.200 0	3.306 1	可行解	5 613.09	5 365.91

表 4 与部分文献结果的比较

方 法	$x_1/m$	$x_2/m$	$x_3/m$	$x_4/m$	最优性能
文献[7]	0.028 58	0.015 88	1.212	2.990	8 129.80
文献[8]	0.028 58	0.015 88	1.229	2.838	8 048.60
文献[9]	0.028 58	0.015 88	1.481	1.132	7 238.83
文献[10]	0.028 58	0.015 88	1.481	1.198	7 198.20
文献[11]	0.025 40	0.015 88	1.302	2.311	7 127.30
文献[12]	0.020 64	0.011 11	1.024	5.080	6 288.74
文献[13]	0.025 40	0.015 88	1.316	2.148	7 006.90
文献[14]	0.025 40	0.015 88	1.316	2.148	7 006.80
文献[15]	0.019 05	0.009 525	0.986	5.651	5 862.27
文献[16]	0.020 64	0.011 11	1.069	4.487	6 059.94
本文方法	<b>0.019 05</b>	<b>0.009 525</b>	<b>1.199 9</b>	<b>3.119 3</b>	<b>4 942.20</b>

的优良解；

2) 所得解的真实评价性能差异较大,说明代理模型对真实模型的逼近效果(指性能值的逼近)不够理想,但本文方法并不过分要求高精度的函数值逼近,而侧重于代理模型与原问题优良解位置的一

致性以及函数值大小序的一致性;

3) 基于代理模型的 GA 搜索质量较满意,说明代理模型对应的优化曲面基本上没有改变原问题优良解的位置.

鉴于基于单一代理模型的搜索性能波动性较

大,本文尝试采用双模型的方法.基于双模型的 GA 的 10 次随机搜索结果如表 3 所示,代理评价的均值和均方差分别为 5 610.75 和 7.46,真实评价的均值和均方差分别为 5 538.98 和 390.11.

由表 3 可见,基于双模型的 GA 搜索结果相对单模型结果波动性较小,搜索结果的性能均值和均方差有所降低,这说明搜索结果的一致性或可靠性得以提高.

为进一步说明本文算法的有效性,将本文方法得到的最优解与一些文献算法得到的最好解进行比较.由表 4 可见,本文方法明显优于现有文献结果.

## 5 结 语

针对仿真优化问题不存在显式目标函数或评价费时的难点,本文提出了基于代理模型和遗传算法的优化方法,并讨论了样本选取和多模型方案.基于典型算例的仿真结果表明了本文方法的可行性和有效性,尤其在压力管设计问题上取得了优于已有文献的结果.代理模型的建立具有随机性(比如神经网络训练时初始化的随机性),在多代理模型的基础上结合序优化的思想进一步改善优化性能,将是下一步研究工作的重点.

## 参考文献 (References):

- [1] 王凌. 智能优化算法及其应用[M]. 北京: 清华大学 & Springer 出版社, 2001.
- [2] 王凌, 张亮, 郑大钟. 仿真优化研究进展[J]. 控制与决策, 2003, 18(3): 257-262, 271.  
(Wang L, Zhang L, Zheng D Z. Advances in simulation optimization[J]. *Control and Decision*, 2003, 18(3): 257-262, 271.)
- [3] Salami M, Hendtlass T. A fast evaluation strategy for evolutionary algorithm[J]. *Applied Soft Computing J*, 2003, 2(3): 156-173.
- [4] Jin Y, Olhofer M. A framework for evolutionary optimization with approximate fitness functions[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2002, 6(5): 481-494.
- [5] Rumelhart D E, McClelland J L. *Parallel Distributed Processing*[M]. Cambridge: MIT Press, 1986.
- [6] Keys A C, Rees L P, Greenwood A G. Performance measures for selection of metamodels to be used in simulation optimization[J]. *Decision Sciences*, 2002, 33(1): 31-57.
- [7] Sandgren E. Nonlinear integer and discrete programming in mechanical engineering systems[J]. *J of Mechanical Design*, 1990, 112(1): 223-229.
- [8] Fu J, Fenton R G, Cleghorn W L. A mixed integer-discrete-continuous programming method and its application to engineering design optimization [J]. *Engineering Optimization*, 1991, 19(4): 263-280.
- [9] Qian Z, Yu J, Zhou J. A genetic algorithm for solving mixed discrete optimization problems[J]. *Advances in Design Automation*, 1993, 65(1): 499-503.
- [10] Kannan B K, Kramer S N. An augmented Lagrange multiplier based method for mixed integer discrete continuous optimization and its applications to mechanical design[J]. *J of Mechanical Design*, 1994, 116(2): 405-411.
- [11] Li H L, Chou C T. A global approach for nonlinear mixed discrete programming in design optimization [J]. *Engineering Optimization*, 1994, 22(2): 109-122.
- [12] Coello C A C. Use of a self-adaptive penalty approach for engineering optimization problems[J]. *Computers in Industry*, 2000, 41(2): 113-127.
- [13] Thierauf G, Jianbo C. Parallel evolution strategy for solving structural optimization [J]. *Engineering Structures*, 1997, 19(4): 318-324.
- [14] Augusto O B, Kawano A. A mixed continuous and discrete nonlinear constrained algorithm for optimizing ship hull structural design [J]. *Ocean Engineering*, 1998, 25(9): 793-811.
- [15] Nakayama H, Arakawa M, Sasaki R. Simulation-based optimization using computational intelligence [J]. *Optimization and Engineering*, 2002, 3(2): 201-214.
- [16] Coello C A C, Montes E M. Constraint-handling in genetic algorithms through the use of dominance-based tournament selection [J]. *Advanced Engineering Informatics*, 2002, 16(3): 193-203.