

研究论文

基于优进策略的差分进化算法及其化工应用

方 强 陈德钊 俞欢军 吴晓华

(浙江大学化学工程与生物工程学系仿真中心, 浙江 杭州 310027)

摘 要 鉴于常规差分进化算法容易“早熟”, 全局寻优能力有待提高, 提出了基于优进策略的差分进化算法, 利用种群繁衍的有用信息改进子代分布, 并引入确定性寻优操作, 以提高寻优性能. 设计了单纯形寻优操作和重布操作, 并调整有关概率等. 测试表明新算法的全局寻优性能有明显改善, 已成功地应用于铯-铷-钒系低温硫酸催化剂上 SO_2 氧化反应模型参数的估计, 效果良好.

关键词 差分进化 优进策略 化学反应速率 参数估计 建模

中图分类号 TQ 021.8

文献标识码 A

文章编号 0438-1157 (2004) 04-0598-05

DIFFERENTIAL EVOLUTION ALGORITHM BASED ON EUGENIC STRATEGY AND ITS APPLICATION TO CHEMICAL ENGINEERING

FANG Qiang, CHEN Dezhaoh, YU Huanjun and WU Xiaohua

(Center of Simulation, Department of Chemical and Biochemical Engineering,
Zhejiang University, Hangzhou 310027, Zhejiang, China)

Abstract In this study a modified evolution algorithm (MDE) was proposed to improve the searching efficiency of simple differential evolution algorithm (DE). The modified evolution algorithm advanced the performance of global optimization through collecting population information during evolution and at the same time introducing deterministic operation, amending distribution of individuals adaptively. The methods proposed include maintaining population diversity, adding new deterministic simplex searching operation, modifying the probability operation, and others. A typical example indicated good performance of this algorithm. Finally, the MDE has been successfully applied to nonlinear parameter estimation of the model of low temperature SO_2 oxidation with Cs-Rb-V sulfuric acid catalyst.

Keywords differential evolution, eugenic strategy, rate of chemical reaction, parameter estimation, modeling

引 言

化学反应的速率通常与反应物的浓度、压力、温度以及所用的催化剂等有关, 建立反应速率模型, 进而可用于预测与优化, 也可深入研究化学反应的内涵. 建模可从机理出发, 也可基于经验数

据. 先依据机理导出模型的函数形式, 其中尚有待定参数, 然后以样本数据为基础估计这些参数, 这种半机理半经验的模型往往是较好的选择.

参数估计是使偏差平方和最小, 非线性模型回归的实质为优化. 经典方法有 Powell 法、Newton 法、Marquardt 法等, 它们对优化函数有一定的要

2002-11-29 收到初稿, 2003-03-21 收到修改稿.

联系人: 陈德钊. 第一作者: 方强, 男, 25岁, 硕士研究生.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (No. 20076041).

Received date: 2002-11-29.

Corresponding author: Prof. CHEN Dezhaoh. E-mail: dzc@cmsce.zju.edu.cn

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 20076041).

求,且易陷入局部极小.遗传等随机算法可以实现全局搜优.Storn和Price提出差分进化算法^[1,2],实施随机、并行、直接的全局搜索,简单易用,稳健性好,在多个领域取得了成功^[3].常规的差分进化算法(differential evolution, DE)由父代间的差异产生子代,易“早熟”,它以随机的概率转换代替确定的机理转换,搜优缓慢.本文提出基于优胜策略(eugenic evolution)的差分进化算法,简称修正的差分进化算法(modified differential evolution, MDE),它借鉴生物优生思想,将机理转换与概率转换相结合,在随机的“自然进化”的进程中融合进确定的“能动”因素,克服DE的弱点.实例表明MDE的全局搜优性能有明显提高,效果良好.

1 用于参数估计的DE

非线性模型的一般形式为^[4]

$$y=g(\mathbf{x},\mathbf{w})+e \quad [e\sim N(0,\sigma)] \quad (1)$$

式中 \mathbf{x} 为自变矢量, y 为因变量, \mathbf{w} 为 p 维参数矢量.有观测数据集 $\{(\mathbf{x}_i, y_i), i=1, 2, \dots, n\}$,参数估计需求解绝对或相对偏差平方和 $q(\mathbf{w})=\sum_{i=1}^n [y_i - g(\mathbf{x}_i, \mathbf{w})]^2$ 或 $\sum_{i=1}^n \left[\frac{y_i - g(\mathbf{x}_i, \mathbf{w})}{y_i}\right]^2$ 为最小的 \mathbf{w} 值.鉴于其复杂性,经典方法难求全局最优.

可用DE法,其步骤为:先确定 \mathbf{w} 的定义域为 Ω ,它的第 i 个分量的宽度范围为 h_i ,以 \mathbf{w} 为个体, $q(\mathbf{w})$ 为适应度函数,然后执行以下各步.

(1) 选定种群规模 NP ,加权因子 $F\in[0, 2]$,最大进化代数 NM 和杂交率 $CR\in[0, 1]$.

(2) 生成初始种群 W^0 : $\{\mathbf{w}_i^0 (i=1, 2, \dots, NP)\}$,令进化代数 $G=0$.

(3) 算出 G 代各个体的适应值 $PE(\mathbf{w}_i^G)$ 与该代的最优个体 \mathbf{w}_0^G .

(4) 对 $\mathbf{w}_i^G (i=1, 2, \dots, NP)$ 执行(5)~(7)步,生成第 $G+1$ 代种群.

(5) 变异操作:由式(2)生成临时变异个体 $\tilde{\mathbf{w}}_i^{G+1}$,其中 $1\leq j, k, l\leq NP$,且 i, j, k, l 互异, F 将控制差分项 $\mathbf{w}_0^G + \mathbf{w}_j^G - \mathbf{w}_k^G - \mathbf{w}_l^G$ 对 \mathbf{w}_i^G 的变异程度^[5].

$$\tilde{\mathbf{w}}_i^{G+1} = \mathbf{w}_i^G + F(\mathbf{w}_0^G + \mathbf{w}_j^G - \mathbf{w}_k^G - \mathbf{w}_l^G) \quad (2)$$

(6) 杂交操作:按式(3)将 $\tilde{\mathbf{w}}_i^{G+1}$ 和本代个体杂交,生成下一代个体,其中 ω_{ij}^G 为第 G 代第 i 个

个体的第 j 个基因, CR 为杂交率,随机数均匀取自 $[0, 1]$.

$$\omega_{ij}^{G+1} = \begin{cases} \omega_{ij}^G & (\text{random number} > CR) \\ \tilde{\omega}_{ij}^{G+1} & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (3)$$

(7) 选择操作:按式(4)子代与父代个体相互竞争,选择下一代个体.

$$\mathbf{w}_i^{G+1} = \begin{cases} \mathbf{w}_i^{G+1} & [PE(\mathbf{w}_i^{G+1}) \leq PE(\mathbf{w}_i^G)] \\ \mathbf{w}_i^G & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (4)$$

(8) $G+1 \rightarrow G$.

(9) 若 G 超过了最大进化代数 NM ,或者第 G 代和第 $G+k$ 代的最优适应值之差不大于 eps ,则转到第(10)步,否则返至第(3)步.其中 k 为非负整数, eps 为小正数. k 和 eps 可由用户根据精度要求设置.

(10) 将最后一代种群中具有最优适应值的个体 \mathbf{w}_0^G 作为参数估计值.

2 修正的差分进化算法(MDE)

差分进化算法弥补了遗传算法编码烦琐、实现复杂的欠缺,但搜优进程缓慢,并易“早熟”.本文引入优胜策略,在随机操作中嵌入确定性算子,加快寻优进程.又增添重布操作,维持物种多样性,以防“早熟”^[6].

2.1 物种多样性的维持

近亲繁衍将导致退化,若进化收缩速度过快,易使个体向某一局部最优靠近^[6],造成下一代近亲繁衍.为维持物种多样性,本文保留优秀个体,重新初始化其他个体,此为重布(afresh distribution)操作,并设计度量子代分布范围的参数,如式(5)所示.

$$\lambda^G = \sum_i \frac{\sum_j (\omega_{ij}^G - \omega_i^G)}{h_i \cdot NP} \quad (5)$$

其中

$$\omega_i^G = \frac{1}{NP} \sum_j \omega_{ij}^G$$

当 λ^G 小于下限 λ_{\min} 时,即调用重布操作.将保留最优个体 \mathbf{w}_0^G ,并按正态分布在其周围产生若干个体.

2.2 寻优操作的设计

引入寻优操作旨在利用进化信息,按适应度函数的变化趋势适时地执行确定性搜优.该操作应避免繁杂计算,简便地产生优秀个体.单纯形法是较好的选择,它搜优能力较强,无需计算导数,易于实现^[7].设计单纯形寻优操作,即从一个体出发用

单纯形方法寻优，并以可变概率（称为寻优率）调用，在收缩速度较快时降低寻优率，反之则提高。为此比较两代种群的分布范围，按式（6）改变寻优率，其中参数 $s_1 > s_2 > 0$ 。

$$p_x = \begin{cases} p_x + 0.05(1 - p_x) & [(\lambda^G / \lambda^{G-1}) \geq s_1] \\ p_x - 0.05 p_x & [s_1 > (\lambda^G / \lambda^{G-1}) \geq s_2] \\ p_x & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (6)$$

2.3 MDE 的实施

将优化目标设置为适应值函数 $PE(w)$ ，MDE 实施步骤的前 6 步与 DE 基本相同，仅在第（1）步还应选定下限 λ_{\min} 和寻优率初值 p_x ，第（4）步的循环范围为（5）~（8）步。第（7）步后如下。

（7）单纯形寻优操作：在 $[0, 1]$ 内均匀地取随机数 r ，若 $r > p_x$ 则转至第（8）步，否则执行本操作，先由 w_i^G 与 2 个随机选取的个体 w_j^G 和 w_k^G 形成寻优初始型，用单纯形寻优，得最优个体 w_{best}^{G+1} ，替代 w_i^G 。在定义域二维子空间上设计单纯形，可确保为凸型。

（8）选择操作：与 DE 的第（7）步相同。

（9） $G+1 \rightarrow G$ 。

（10）重布操作：按式（5）计算 λ^G 值，若 $\lambda^G \leq \lambda_{\min}$ 则执行重布操作。

（11）按式（6）改变寻优率。

（12）若 G 超过最大进化代数 NM ，或者第 G 代和第 $G+k$ 代的最优适应值之差 $\leq eps$ ，则转至第（13）步，否则返至第（3）步。其中 k 、 eps 与 DE 的相同。

（13）将最后一代种群的最优个体 w_{best}^G 作为参数估计值。

2.4 性能测试

采用式（7）所示的测试函数^[8]验证修正的差分进化算法的有效性。

$$f(x) = \sum_{j=0}^9 \frac{x_j^2}{4000} - \prod_{j=0}^9 \cos\left(\frac{x_j}{\sqrt{j+1}}\right) + 1 \quad (7)$$

$$(x_j \in [-400, 400])$$

该函数在 $x=0$ 处有最小值 0，在其周围存在很多局部最小。分别用 DE 和 MDE 搜优，两种算法所用的参数值为 $NP=30$ 、 $CR=0.05$ 、 $F=0.6$ 、 $k=30$ 、 $NM=1000$ 和 $eps=10^{-6}$ ，另外 MDE 还有 $\lambda_{\min}=0.01$ 和 $p_x=0.05$ 。为减少偶然性共运行 30 次，两种算法每次的初始种群相同。各代的最优适应值（为 30 次的平均值）随代数的变化如图 1 所示，它清晰地显示出 MDE 的寻优速度和寻优质量均优

于 DE。

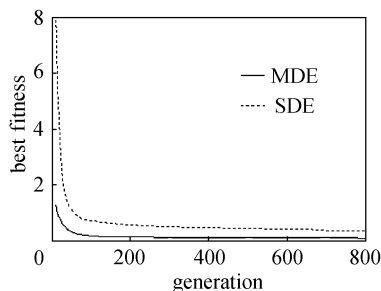


Fig. 1 Optimize process comparison of MDE versus DE

设 $f(x) \leq 10^{-6}$ 时，认为已得到最优解。两种算法在 30 次运行中所得最优解的次数、最小代数、平均代数、平均最优适应值及平均 CPU 运行时间（所用机型为 Pentium III 866 MHz，256 MB 内存）等列于表 1。显然，MDE 比 DE 更快、更易于搜索到更好的最优解。

Table 1 Comparison of results by DE and MDE

Method	Times of finding global minimum	Minimal generation of finding global minimum	Average generation of finding global minimum	Average value of all global minimum	Average CPU time/s
MDE	21	84	568	4.26×10^{-9}	32.81
DE	9	1132	1564	7.54×10^{-9}	54.05

3 铈-铷-钒系低温硫酸催化剂上 SO_2 氧化反应的参数估计

3.1 反应简述

铈-铷-钒系催化剂是新型低温硫酸催化剂，起燃温度较常用的低 $30 \sim 50 \text{ }^\circ\text{C}$ ，且生产工艺简单，成本低廉，对于用低、高浓度冶炼烟气制酸，提高 SO_2 总转化率，保护环境均具有重要意义。研究 SO_2 在该催化剂上的反应动力学可为反应器设计提供依据^[9]。

文献 [9] 对此进行了深入探讨，提出反应机理模型，如式（8）所示。

$$r = \frac{k_1 p_{O_2}^{1/2}}{k_2 + k_3 p_{SO_3} + \frac{p_{SO_3}}{p_{SO_2}}} \left(1 - \frac{p_{SO_3}}{p_{SO_2} p_{O_2}^{1/2} K_P} \right) \quad (8)$$

k_β 由指前因子 $k_{0\beta}$ 与活化能 E_β 计算

$$k_\beta = k_{0\beta} \exp\left(-\frac{E_\beta}{RT}\right) \quad (\beta=1, 2, 3)$$

$$K_P = \exp\left[2.3026 \times \left(\frac{4812.3}{T} \times 2.8254 \lg T\right) + 2.284 \times 10^{-3} T - \right]$$

$$7.012 \times 10^{-7} T^2 + 1.197 \times 10^{-10} T^8 + 2.23 \Big]$$

$k_{0\beta}$ 、 E_{β} ($\beta=1, 2, 3$) 为 6 个待定参数, 可由样本数据估计. 实验将测定气体组分的分压 p_{SO_2} 、 p_{O_2} 、 p_{SO_3} , 反应温度 T 和反应速率 r .

3.2 MDE 对参数的估计

应用 MDE 估计上述待定参数, 样本数据取自文献 [9], 容量为 32, 同样以拟合相对偏差平方和最小为目标寻优. MDE 的参数设置为: $NP=60$, $CR=0.05$, $F=0.6$, $k=20$, $eps=10^{-8}$, $\lambda_{\min}=0.01$ 和 $p_x=0.10$. 随机产生不同的初始种群, 共运行 5 次, 这 5 次的拟合相对偏差平方和即最优适应值均为 2.5394, 对应的动力学方程见式 (9).

$$r = \frac{43.391 \exp(85440/RT) p_{\text{O}_2}^{1/2}}{16.722 + 1.7321 \times 10^{14} \exp(204364/RT) p_{\text{SO}_3} + \frac{p_{\text{SO}_3}}{p_{\text{SO}_2}}} \times \left(1 - \frac{p_{\text{SO}_3}}{p_{\text{SO}_2} p_{\text{O}_2}^{1/2} K_P}\right) \quad (9)$$

文献 [9] 应用 Powell 方法优化, 所得的动力学方程见式 (10).

$$r = \frac{0.152 \exp(62073/RT) p_{\text{O}_2}^{1/2}}{8.18 \exp(2384/RT) + 0.221 \exp(18949/RT) p_{\text{SO}_3} + \frac{p_{\text{SO}_3}}{p_{\text{SO}_2}}} \times \left(1 - \frac{p_{\text{SO}_3}}{p_{\text{SO}_2} p_{\text{O}_2}^{1/2} K_P}\right) \quad (10)$$

该式的拟合相对偏差平方和为 6.677, 约为 MDE 的 2.63 倍. 换算为拟合相对平均偏差, MDE 下降了 17% 左右, 可见 MDE 的寻优性能比确定性经典方法强得多, 导出的模型更为精确.

3.3 与 DE 的比较

为作对照比较, 分别对 30 个随机产生的不同的初始群体对等地执行 MDE 与 DE 算法, 即它们还有相同的种群规模、加权因子、杂交率、最大进化代数 and k 与 eps 参数, 分别为 60、0.6、500、0.05、20 和 10^{-8} . 另外, MDE 有 $p_x=0.10$, $\lambda_{\min}=0.005$. 常定义寻优离线性能为

$$v^{\text{off-line}}(T) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T v^*(t) \quad (11)$$

式中 $v^*(t)$ 为 t 代的最优适应值, 它反映了搜索最优值的进程. 为减少偶然性, 将计算运行 30 次离线性能的均值, 它们随进化代数的演变曲线如图 2 所示. 该图显示出 MDE 的寻优性能优于 DE, MDE 的最优适应度有较大提高. 在 30 次运行中, MDE 各次最优优点几乎相同, 其拟合相对偏差平方

和均为 2.5394; 而 DE 的各次拟合相对偏差平方和均不相同, 最小为 3.4594. 换算为拟合相对平均误差, MDE 约下降 4.7%, 其收敛性和寻优效率均优于 DE.

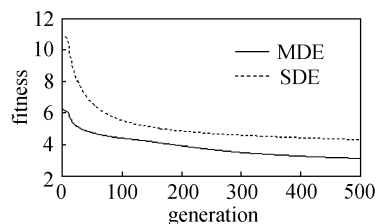


Fig. 2 Offline performance comparison of MDE versus DE

4 结 论

常规差分进化算法容易“早熟”, 其全局寻优能力有待提高. 本文基于优进策略改进差分进化算法, 获取种群繁衍的有用信息, 自适应地改善子代分布, 适时引入确定性寻优操作, 以改善 DE 的性能, 由此设计了单纯形寻优操作、重布操作和有关概率的调整规则. 测试表明, MDE 的寻优性能有明显提高. 它已成功地应用于铯-铷-钽系低温硫酸催化剂上 SO_2 氧化反应模型参数的估计, 效果良好, 对其他化工优化问题也有借鉴意义.

符 号 说 明

- E_{β} ——活化能, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
- h_i ——定义域第 i 个自变量的宽度范围
- K_P —— SO_2 氧化反应平衡常数, $\text{kPa}^{-0.5}$
- k_1 ——速率常数, $\text{kmol} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{kPa}^{-0.5} \cdot \text{s}^{-1}$
- k_2 ——速率常数, $\text{kmol} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
- k_3 ——速率常数, $\text{kmol} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{kPa}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
- p_j ——气体组分 j 的分压, kPa
- R ——气体常数, $8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
- r —— SO_2 氧化反应速率, $\text{kmol} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
- T ——反应温度, K

$v^*(t)$ ——第 t 代最优适应值

References

- 1 Storn R, Price K. Differential Evolution—A Simple and Efficient Adaptive Scheme for Global Optimization over Continuous Spaces. Technical Report TR-95-012, ICSI
- 2 Storn R, Price K. Minimizing the Real Functions of the ICEC'96 Contest by Differential Evolution. In: IEEE Conference on Evolutionary Computation, Nagoya, Japan, 1996. 842—844
- 3 Shih-Lian Cheng, Chyi Hwang. Optimal Approximation of Linear Systems by a Differential Evolution Algorithm, Systems,

- Man and Cybernetics, Part A. *IEEE Transactions on*, 2001, **31** (6): 698—707
- 4 Hu Shangxu (胡上序), Chen Dezhaoh (陈德钊). Analysis and Dispose on Data by Observation (观测数据的分析与处理). Hangzhou: Zhejiang University Press, 2002. 150—151
- 5 Storn R. On the Usage of Differential Evolution for Function Optimization. Berkeley: NAFIPS, 1996. 519—523
- 6 Chen Chongwei (陈翀伟). Prior-knowledge Based Neural Network Modeling and Application: [thesis] (学位论文). Hangzhou: Zhejiang University, 2002
- 7 Fan Mingyu (范鸣玉), Zhang Ying (张莹). Base Technology of Optimization (最优化技术基础). Beijing: Tsinghua University Press, 1982. 156—172
- 8 Price K. Differential Evolution: A Fast and Simple Numerical Optimizer. Berkeley: NAFIPS, 1996. 524—527
- 9 Chen Zhenxing (陈振兴), Ye Hua (叶华), Liu Jin (刘今). Study on the Mechanis for the Low Temperature SO₂ Oxidation with Cs-Rb-V Sulfuric Acid Catalyst. *Chemical Reaction Engineering and Technology* (化学反应工程与工艺), 2001, **21** (2): 119—124

《化工学报》 赞助单位

四川大学化工学院

浙江大学化学工程与生物工程学系

大连理工大学化工学院

北京化工大学

浙江工业大学化工学院

湘潭大学化工学院

上海化工研究院

上海交通大学化学化工学院

华南理工大学化工学院

武汉化工学院

石油大学 (北京)