求解带有等式约束的混合整数非线性规划问题的粒子群算法

罗祎青　袁希钢
(天津大学化工学院化学工程研究所,化学工程联合国家重点实验室,天津 300072)

摘要:针对带有等式约束的混合整数非线性规划(MINLP)问题,建立了一种改进的粒子群优化(PSO)算法——简约空间法。利用等式约束将问题的维数降低,使带有等式约束的优化问题转化为无等式约束优化问题。通过测试函数和过程综合的实例对该算法进行了测试并与其他算法所得的结果进行了比较,结果表明,PSO 算法在使用的普遍性、求解的准确性等方面都优于一般的算法,尤其对于非凸的 MINLP 问题,PSO 算法是一种有效的求解方法。

关键词:混合整数非线性规划(MINLP);粒子群优化(PSO);等式约束;简约空间
中图分类号:TQ015　**文献标识码**:A　**文章编号**:0253-4320(2004)S2-0124-04

An improved PSO algorithm for solving MINLP problems with equality constraints

LUO Yi-qing, *YUAN Xi-gang*
(State Key Laboratory of Chemical Engineering, Chemical Engineering Research Center, School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin 300072, China)

Abstract: An improved particle swarm optimization (PSO) algorithm, *i.e.* reduced space algorithm is developed for solving mixed-integer nonlinear programming (MINLP) problem with equality constraints. The mixed variables are partitioned and reduced variables for optimization are identified by analyzing and tearing the equality constraints. Then the original problem is transformed into that without equality constraints. The transformation is implicitly implemented in a PSO algorithm. The proposed algorithm is tested by several MINLP problems including a process synthesis problem. For the test problems, the proposed algorithm demonstrates advantages in applicability and efficiency for solving non-convex MINLP problems.

Key words: mixed-integer nonlinear programming (MINLP); particle swarm optimization (PSO); equality constraint; reduced space algorithm

化工过程设计、综合等过程系统最优化问题通常可归结为混合整数非线性规划(mixed-integer nonlinear programming, MINLP)问题。这一问题一般具有非凸性,存在许多局部解,同时由于涉及流程结构的优化,通常又是复杂的大规模组合最优化问题。对这一问题,基于数学规划的方法研究虽有进展,但现有的方法远不能满足求解的需要。近年来,模拟物理(自适应随即搜索法、模拟退火法)或生物(遗传算法及进化算法)等自然过程的智能化算法受到了很大的关注,其随机性搜索的属性使得该类方法在处理复杂问题方面具有诸多优势。但这些算法一般都具有收敛速度慢、易早熟和解约束问题性能较差的缺点。因此发展新的仿生算法,克服上述缺点的研究是十分有价值的。

粒子群优化(particle swarm optimization, PSO)算法是由 Kennedy 和 Eberhart[1] 于 1995 年提出的一种新的基于群体智能方法的进化计算技术。与遗传算法类似,PSO 算法是多个体同时进化的方法,所不同的是,它通过模拟鸟类或鱼类群集现象中每个个体的社会行为,来实现对问题最优解的随机搜索。其智能性体现在群体中每个粒子(问题的一个解)可以从邻近个体以及自身以往的经验中获得信息,通过个体之间的合作与竞争逐步逼近最好位置,从而实现进化。PSO 算法一经提出,即引起广泛关注,短期内出现了大量的研究报道,已提出了多种 PSO 改进算法,目前 PSO 算法已被“国际进化计算会议”(CEC)列为讨论专题之一。PSO 方法在工程问题上的应用处于起步阶段,直接用于求解 MINLP 问题尚面临诸多问题,包括对约束方程的有效处理方法,特别是对等式约束的处理还没有可行的方法。

笔者建立了一种有效处理等式约束的 PSO 算法——简约空间法,对带有等式及不等式约束的 MINLP 问题进行求解。在通过算例对方法进行验证的同时,还建立了工业水分配网络综合问题的非凸

作者简介:罗祎青(1966-),女,博士,副研究员,现从事过程系统工程及传质分离工程研究;袁希钢(1955-),男,博士,教授,从事过程系统工程及传质分离工程研究,通讯联系人,022-27404732,yuanxg@tju.edu.cn。

MINLP 模型,并应用该算法进行了求解。

1　可处理等式约束的粒子群优化算法

1.1　基本算法

PSO 算法的粒子群中每个粒子代表优化问题解空间内的一个解。粒子个数记为 p,第 i 个粒子在 D 维空间里的位置为 $\boldsymbol{x}^i=(x^{i1},x^{i2},\cdots,x^{iD})$,移动速度为 $\boldsymbol{v}^i=(v^{i1},v^{i2},\cdots,v^{iD})$。每个粒子都对应一个适应值,并且知道本身到目前为止的最好位置和现在的位置。其当前最好位置记为 $\boldsymbol{p}^i=(p^{i1},p^{i2},\cdots,p^{iD})$。除此之外,还知道每个粒子到目前为止整个群体中所有粒子的最好位置,记为 $\boldsymbol{p}^g=(p^{g1},p^{g2},\cdots,p^{gD})$。每个粒子根据下列信息改变自己的当前位置:①粒子本身的当前位置;②粒子本身的当前速度;③粒子本身的当前位置与自己最好位置之间的距离;④当前位置与群体最好位置之间的距离。粒子位置按下式更新:

$$\boldsymbol{x}_{k+1}^i=\boldsymbol{x}_k^i+\boldsymbol{v}_{k+1}^i \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{v}_{k+1}^i$为粒子运动速度:

$$\boldsymbol{v}_{k+1}^i=w_k\boldsymbol{v}_k^i+c_1\boldsymbol{r}_1(\boldsymbol{p}_k^i-\boldsymbol{x}_k^i)+c_2\boldsymbol{r}_2(\boldsymbol{p}_k^g-\boldsymbol{x}_k^i) \tag{2}$$

k 为迭代次数,$\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2$ 为在[0,1]范围内变化的随机数,w 为惯性权重,c_1、c_2 为 2 个正的常数。惯性权重 w 使粒子保持运动惯性,代表保持运动、扩展搜索空间和探索新区域的倾向权重;加速常数 c_1 和 c_2 分别代表将每个粒子推向自身最好位置和群体最好位置的统计加速项的权重。

由式(1)和式(2)定义的进化方法仅适用于连续变量问题。针对 0-1 变量(最常见的离散变量)问题,Kennedy 和 Eberhart[4] 提出采用 sigmoid 函数把由式(2)计算的速度值转化成[0,1]区间数值,这个数值与一个[0,1]区间内的随机数进行比较,若大于这个随机数,则粒子取值 1,否则取值 0。即

$$\mathrm{sig}(\boldsymbol{v}_{k+1}^i)=\frac{1}{1+\exp(-\boldsymbol{v}_{k+1}^i)} \tag{3}$$

若 $\rho_{k+1}^i<\mathrm{sig}(\boldsymbol{v}_k^i)$,则 $\boldsymbol{x}_{k+1}^i=1$,否则 $\boldsymbol{x}_{k+1}^i=0$　(4)

其中 ρ_{k+1}^i为[0,1]间的随机数。

1.2　处理等式约束的简约空间法

MINLP 问题可以表示成如下形式:

$$\begin{aligned}
&(\mathrm{P})\quad \min \quad && f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) && (5)\\
&\qquad\ \ \mathrm{s.t.} && \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\leqslant 0, && (6)\\
& && \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=0 && (7)\\
& && \boldsymbol{x}\in X,\boldsymbol{y}\in Y && (8)
\end{aligned}$$

其中 $\boldsymbol{x}$ 为连续变量,$\boldsymbol{y}$ 为整数变量,$X\subset\mathbf{R}^n$ 和 $Y\subset\mathbf{N}^m$ 分别为 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的可行域,$f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$为目标函数,$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\leqslant 0$ 和 $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=0$ 分别为不等式及等式约束方程组,维数分别为 p 和 q。惩罚函数法可把有约束的问题转换为一个或一系列无约束问题进行求解。但对于等式约束问题,惩罚函数法并不总是可以达到预期的目的。

实际上,若对变量进行分解,即将连续变量和整数变量分别表示为:

$$\boldsymbol{x}=[\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\zeta}]^{\mathrm{T}}\text{ 和 }\boldsymbol{y}=[\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\Psi}]^{\mathrm{T}}$$

其中 $\boldsymbol{\upsilon}\in\Xi\subset\mathbf{R}^{\upsilon}$ 和 $\boldsymbol{\omega}\in\Omega\subset\mathbf{N}^{\mu}$ 称简约优化变量,且

$$\upsilon+\mu=n+m-q,$$

对于最优化问题有 $\upsilon+\mu\geqslant 1$,则通过等式约束方程组(7),可将 $\boldsymbol{\zeta}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 分别表示为:$\boldsymbol{\zeta}=\boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{v},\boldsymbol{\omega})$和$\boldsymbol{\Psi}=\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{v},\boldsymbol{\omega})$。若令

$$f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=f(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\Psi})=f(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\omega}),\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\omega}))\equiv F(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\omega})$$

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\boldsymbol{g}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\Psi})=\boldsymbol{g}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\omega}),\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\omega}))\equiv \boldsymbol{G}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\omega})$$

$$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\boldsymbol{h}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\Psi})=\boldsymbol{h}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\omega}),\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\omega}))\equiv \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\omega})$$

同时令 $V=\{(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\omega}):\boldsymbol{h}(\boldsymbol{\upsilon},\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\Psi})=0$,有 $\boldsymbol{\zeta}\in\mathbf{R}^{n-\upsilon}\cap X$,$\boldsymbol{\Psi}\in\mathbf{R}^{m-\mu}\cap Y\}$,则由式(5)~式(7)表示的问题(P)可等价地表示为:

$$\begin{aligned}
&(\mathrm{R})\quad \min \quad && F(\boldsymbol{v},\boldsymbol{\omega})\\
&\qquad\ \ \mathrm{s.t.} && \boldsymbol{G}(\boldsymbol{v},\boldsymbol{\omega})\leqslant 0,\\
& && \upsilon\in\Xi\cap V,\omega\in\Omega\cap V && (1)
\end{aligned}$$

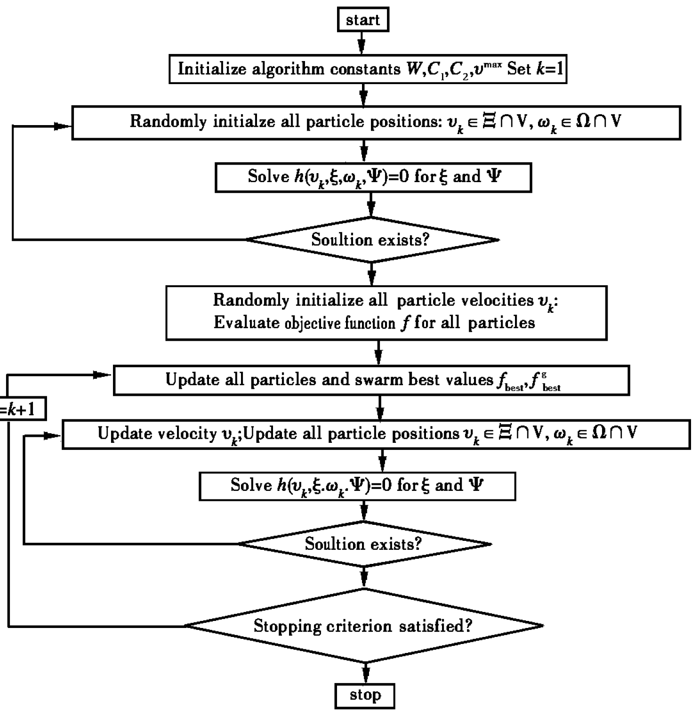

图 1　可处理等式约束的简约空间法计算框图

问题(R)为仅含不等式约束的 MINLP 问题,在应用 PSO 进行求解中可利用罚函数法进行处理。应该指出,在 PSO 方法的实施中,可首先选定简约优化变量($\boldsymbol{\upsilon}$, $\boldsymbol{\omega}$),对其每个固定值,应用等式方程(7)进行验证,以隐式表达 F, $\boldsymbol{G}$ 以及 V。通过简约问题求解 MINLP 问题的 PSO 算法可由框图表示(见图 1)。

2 算例

2.1 测试算例

算例 1 取自 Kocis 和 Grossmann[3]。含有 2 个连续变量、1 个离散变量的 MINLP 问题。

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(x_1,x_2,y) = -y + 2x_1 + x_2 \\
\text{s.t.} \quad & x_1 - 2\exp(-x_2) = 0 \\
& -x_1 + x_2 + y \leqslant 0 \\
& 0.5 \leqslant x_1 \leqslant 1.4 \\
& y \in \{0,1\}
\end{aligned}
$$

全局最优解为$(x_1, x_2, y; f) = (1.375, 0.375, 1; 2.124)$。

算例 2 取自 Kocis 和 Grossmann[2]。含有 2 个离散变量、3 个连续变量的 MINLP 问题。

$$
\begin{aligned}
\min f(x,y_1,y_2,v_1,v_2) &= 7.5y_1 + 5.5y_2 + 7v_1 + 6v_2 + 5x \\
\text{s.t.} \quad & y_1 + y_2 = 1 \quad z_1y_1 + z_2y_2 = 10 \\
& z_1 = 0.9[1-\exp(-0.5v_1)]x_1 \quad v_1 \leqslant 10y_1 \\
& z_2 = 0.8[1-\exp(-0.4v_2)]x_2 \quad v_2 \leqslant 10y_2 \\
& z_1 + z_2 = 10 \quad x_1 \leqslant 20y_1 \\
& x_1 + x_2 = x \quad x_2 \leqslant 20y_2 \\
& x_1, x_2, z_1, z_2, v_1, v_2 \geqslant 0 \\
& y_1, y_2 \in \{0,1\}
\end{aligned}
$$

全局最优解为$(x, y_1, y_2, v_1, v_2; f) = (13.36227, 1, 0, 3.514237, 0; 99.245209)$。

对于算例 1 和 2,将本文同文献[5]中遗传算法(GA)和单纯形模拟退火算法(M-SIMPSA)的计算结果进行了比较,结果见表 1。

表 1 不同算法对算例 1 和算例 2 计算结果的比较

算例	NFE/NRC		
	遗传算法	单纯形模拟退火算法	粒子群优化算法
1	13939/100	10582/83	2000/100
2	22489/100	14738/100	6000/100

表 1 中 NFE 为函数值的更新次数,即迭代次数与粒子个数的乘积。NRC 为在进行 10 次计算(每次的初始点不同,随机产生)中,收敛于最优值的次数所占的百分数。由计算结果可见,PSO 算法计算的效率及可靠性优于遗传算法和单纯形模拟退火算法。

2.2 水分配网络的最优化

算例 3 本算例是一个单组分水分配网络优化问题,包括 4 个用水过程。目标是确定网络结构,使用水网络年总费用最小。各过程的已知条件如表 2 所示。

表 2 4 个用水过程已知条件

过程	需移出的污染物负荷 L/kg·h^{-1}	最大出口质量分数/%
1	2.0	0.01
2	5.0	0.01
3	30.0	0.08
4	4.0	0.08

由物料平衡可知,对每个用水过程,若需要移出的污染物负荷一定,在最大出口浓度固定的情况下,过程的进口浓度决定了该过程的用水流量。用水量越大,则设备费以及操作费用越大,反之越小。因此,小的进口浓度有利于降低过程的用水量,即有利于降低设备费及操作费用。但另一方面,小的进口浓度势必增加新鲜水的用量,这就使新鲜水的费用增加。除此之外,过程之间水的回用可以减少新鲜水的用量(例如,从过程 1 和 2 出来的废水可用于过程 3 和 4);设备之间少的回用连接数可降低操作费用。因此该问题的优化需权衡各因素,使最终的年总费用最小。

图 2 为任一用水过程网络结构。$F_{i,j}$过程 i 到过程 j 水的回用量,FR_j 为过程 j 需要的新鲜水量,$F_{j,k}$为过程 j 到过程 k 水的回用量,$F_{j,\text{out}}$为过程排放的废水量。

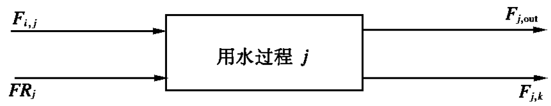

图 2 用水过程 j 的网络结构

以 $C_{j,\text{in}}$和 $C_{j,\text{out}}$分别表示过程 j 的进出口浓度。则用水网络的模型可以表示为:

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \text{COST} = A\sum_{j=1}^{N}\Big(\sum_{i=1}^{N}F_{i,j} + FR_j\Big)^{\alpha} + \\
& B\sum_{j=1}^{N}\Big(\sum_{i=1}^{N}F_{i,j} + FR_j\Big) + C\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}Y_{i,j} + D\sum_{j=1}^{N}FR_j \\
\text{s.t.} \quad & FR_j + \sum F_{i,j} - \sum F_{j,k} \geqslant 0 \qquad \forall\, i,j \in \mathbf{N} \\
& \Big(\sum F_{i,j} + RF_j\Big)C_{j,\text{out}}^{\max} - \sum\big(F_{i,j}C_{i,\text{out}}^{\max}\big) = L_j \\
& \qquad \forall\, i,j \in \mathbf{N}
\end{aligned}
$$

$$\sum(F_{i,j}C_{i,\mathrm{out}}^{\max}) = (\sum F_{i,j} + FR_j)C_{j,\mathrm{in}} \quad \forall\ i,j \in \mathbf{N}$$
$$F_{i,j} - UY_{i,j} \leqslant 0 \quad \forall\ i,j \in \mathbf{N}$$
$$Y_{i,j} = \{0,1\} \quad \forall\ i,j \in \mathbf{N}$$
$$C_{j,\mathrm{in}}, FR_j, F_{i,j}, F_{j,k} \geqslant 0 \quad \forall\ i,j \in \mathbf{N}$$

目标函数中的第一项为运输新鲜水及回用水的设备费用,第二项为运输新鲜水及回用水的操作费,第三项为存在的回用连接费,第四项为新鲜水的费用。A、α、B、C、D 为常数,在本例中分别取值 0.3、0.6、0.6、0.2、0.36。不难看出这是一个非凸的 MINLP 问题,包括 4 个线性的不等式约束($N=4$),16 个逻辑限制,8 个非线性等式约束,24 个上界,24 个连续变量和 16 个离散变量。使用 PSO 算法得到的最优解如表 3 和表 4 所示,年总费用 COST = 105.40 万元/a。

表 3　新鲜水 FR_j 及各过程进口质量分数 $C_{j,\mathrm{in}}$最优值

过程	1	2	3	4
$FR/\mathrm{kg\cdot h^{-1}}$	20.0	50.0	0.0	0.0
$C_{\mathrm{in}}/\%$	0.0	0.0	0.1	0.1

表 4　各过程回用连接 $Y_{i,j}(F_{i,j})$最优值

$Y_{i,j}(F_{i,j})$	1	2	3	4
1	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)
2	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)
3	0(0.0)	1(42.857)	0(0.0)	0(0.0)
4	1(5.714)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)

注:括号外的数字代表过程 i(行)到过程 j(列)的回用连接是否存在,1 代表存在,0 代表不存在;括号内的数字为这一连接的回用水流量,kg/h。

对于算例 5,笔者使用 GAMS(general algebraic modeling system)计算软件中解决 MINLP 的解法器求解此问题,由于此问题的非凸性,GAMS 不能给出可行解。

3　结论

针对带有等式约束及不等式约束的混合整数非线性规划问题,提出了求解过程综合中 MINLP 问题的改进的 PSO 算法——简约空间法。在基本 PSO 算法的基础上,利用等式约束将问题的维数降低,使带有等式约束的优化问题转化为仅含不等式约束的优化问题。利用 5 个算例对该算法进行了测试并与其他算法所得的结果进行了比较。结果表明,PSO 算法在使用的普遍性、求解的高效性等方面都优于一般的算法,尤其对于非凸的 MINLP 问题,该算法是一种更有效的求解方法。

参考文献

[1] Kennedy J, Eberhart R C. Particle swarm optimization[A]. In: Proc IEEE International Conference on Neural Networks, vol 4[C]. Piscataway: IEEE, 1995. 1942 - 1948.
[2] Kocis G R, Grossmann I E. [J]. Computers & Chemical Engineering, 1989, 13(7): 797 - 819.
[3] Kocis G R, Grossmann I E. [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 1987, 26(9): 1869 - 1880.
[4] Kennedy J, Eberhart R C. A discrete binary version of the particle swarm algorithm[A]. Proc IEEE Int Conf on Systems, Man, and Cybernetics [C]. Piscataway: IEEE, 1997.
[5] Costa L, Olivera P. Evolutionary algorithms approach to the solution of mixed integer no-linear programming problems[J]. Computers & Chemical Engineering, 2001, 25(2 - 3): 257 - 266. ■

(上接第 123 页)

S_{gross}—所有可能的操作序列的集合,对于含有 n 个操作的用水过程,可能的操作序列总数为全排列数 P_n^n 个;
S_l—第 l 个操作序列;
W_1—除新鲜水以外的水源集合。

参考文献

[1] Wang Y P, Smith R. [J]. Chem Eng Sci, 1994, 49(7): 981 - 1006.
[2] Rossiter A P, Nath R. Wastewater Minimization Using Nonlinear Programming[M]. NewYork: McGraw-Hill, 1995. 225 - 244.
[3] Doyle S J, Smith R. [J]. Transactions of International Chemical Engineering Part B, 1997, 75(3): 181 - 189.
[4] Alva-Argáez A, Vallianatos A, Kokossis A. [J]. Comp Chem Eng, 1999, 23(10): 1439 - 1453.
[5] Bagajewicz M J, Rivas M, Savelski M J. [J]. Comp Chem Eng, 2000, 24(7): 1461 - 1466.
[6] Bagajewicz M. [J]. Comp Chem Eng, 2000, 24(10): 2093 - 2113.
[7] Wang Bin, Feng Xiao, Zhang Zaoxiao. [J]. Comp Chem Eng, 2003, 27(7): 903 - 911.
[8] 胡仰栋,徐冬梅,韩方煜,等. [J]. 化工学报, 2002, 53(1): 66 - 71.
[9] Xu Dongmei, Hu Yangdong, Hua Ben, *et al*. Optimum design of water-utilize systems featuring regeneration re-use for multiple contaminants. [A]. In: Westerberg A W, Chen Bingzhen, Westerberg A. Process Systems Engineering 2003: 8th International Symposium on Praess Systems Engineering[M]. Amsterdom: Elsenier, 2003. ■