

用于工程系统设计的一个二层优化方法*

A Two-level Optimization Method for the Design of Engineering Systems

韦日钰

Wei Riyu

程耿东

Cheng Gengdong

(广西计算中心 南宁市星湖路 32 号 530022)

(Computer Center of Guangxi, 32

Xinghu Road, Nanning, Guangxi, 530022)

(大连理工大学 辽宁省大连市 116023)

(Dalian University of Technology,

Dalian, Liaoning, 116023)

摘要 结合线性分解法和模型协调法提出了一个适用于一般工程系统设计的优化方法。该法将原系统分解为若干较小的子系统和一个协调系统,使在原系统内形成一个二层(分别称为系统层和子系统层)结构关系。每个子系统有自己的目标函数、设计变量和约束条件。对给定的系统层设计变量,各子系统可以单独进行优化设计。各子系统的优化结果通过协调系统协调最终获得原问题的最优解。该法可以在平行计算机或分布式计算机上实现,其正确性和有效性通过 3 个优化实例得到了验证。

关键词 工程系统 二层分解 优化设计

Abstract An optimization method based on the linear decomposition and the model coordination for the design of engineering systems is described. The original system is decomposed into a number of smaller subsystems and a coordination system, and to be a two-level hierarchy. Each subsystem with its own goal and constraints as well as local design variables is optimized seperatively for fixed system variables. The coordination optimization is performed by minimizing the weighted sum of all subsystem objective minima. An iterative procedure is necessarily converged to original problem. Three examples are also given to demonstrate the effectiveness of the method which can be used on networks of distributed computers or parallel processors.

Key words engineering system, two-level decomposition, optimization

工程系统的设计通常包含着多个互相耦合的学科,并涉及到大量各种类型的设计变量和约束,采用传统的单层(整体)优化方法求解这样一个大型设计问题,不仅难于处理而且很费时。一个替代办法是将大型优化设计问题分解为若干较小的子问题和一个协调问题,它们之间组成一个层次结构关系。

1975 年, Kirsch^[1]提出了一个求解结构优化问题的二层优化方法——模型协调法。该法中,每个子系统有自己的目标函数、约束条件和设计变量;协调系统的目标函数是所有子系统目标函数之和,没有性能约束,只有设计变量边界约束。该法有如下局限性和缺点:①只适用于目标函数可加型的系统;②不能处理全局约束;③协调问题目标函数的计算要求对所有子系统进行重优化,计算工作量大。

1982 年, Sobieski^[2]提出了一个适用于一般工程系统设计的多层优化方法——线性分解法。该法解决了模型协调法适用面不广、需大量重优化的问题,大大提高了多层优化方法的效率。但它仍有如下需改进之处:①子系统设计变量最优敏度的计算涉及到计算子系统目标函数和约束的二阶偏导数,而二阶偏导数的计算比较复杂;②子系统的目标函数不能根据具体问题的特点灵活选择;③协调优化问题的约束包括所有子系统的局部约束,使协调问题的约束数量大为增加。

本文结合线性分解法和模型协调法提出的二层优化方法,具有线性分解法的优点,但不需计算二阶偏导数,不增加协调问题的约束数,子系统的目标函数也可视具体情况灵活选择,克服了线性分解法的缺点。

1 优化设计数学模型

将要设计的工程系统假定分解为图 1 所示的二

1994-03-14 收稿。

* 韦日钰博士论文“工程系统层次/网状分解优化设计方法研究”的部分成果。

层系统，图中， N 为子系统的个数，顶层和底层分别称为系统层和子系统层。

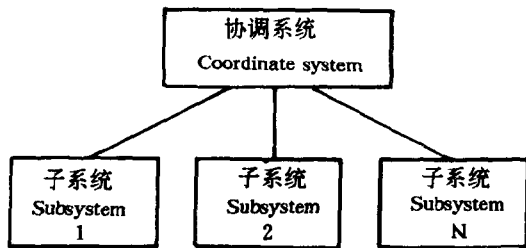


图1 二层分解系统

Fig. 1 Two-level system

系统的单层优化设计数学模型可表述如下：

$$\text{求 } Y, X = \{X_1, \dots, X_n\}^T$$

$$\text{使 } F(Y, X) = F_0(Y) + \sum_{i=1}^N a_i F_i(Y, X_i) \Rightarrow \min \quad (1a)$$

$$\text{s. t. } g(Y) \leq 0 \quad (1b)$$

$$g_i(Y, X_i) \leq 0; \quad i = 1, \dots, N \quad (1c)$$

$$Y^l \leq Y \leq Y^u \quad (1d)$$

$$X_i^l \leq X_i \leq X_i^u; \quad i = 1, \dots, N \quad (1e)$$

其中， F 是总的目标函数， F_0 和 F_i 分别是协调系统和子系统 i 的目标函数， a_i 是一个加权因子， g 是系统层的约束向量， g_i 是子系统 i 的约束向量， Y 是系统层设计变量向量， X_i 是子系统 i 的设计变量向量，上标 l 和 u 分别表示设计变量的下限和上限。 Y 和 g 分别称为全局变量和全局约束， X_i 和 g_i 分别称为局部变量和局部约束。

模型(1)中， Y 和 X_i 既可以是同类型的变量，也可以是不同类型的变量，例如，在结构优化问题中， Y 和 X_i 可以同为截面类变量，也可以分别是几何和截面类变量。如果所有子系统的目标函数与整体系统的目标函数一致，如均为结构重量最轻，则所有的加权因子均为 1，此时，式(1a)变为

$$F(Y, X) = F_0(Y) + \sum_{i=1}^N F_i(Y, X_i) \quad (2)$$

2 单层优化

将变量 Y 和 X_i 合成一个向量 Z 为

$$Z = \{Y, X_1, X_2, \dots, X_n\}^T$$

则模型(1)的一个典型的单层优化过程如下：

① 给定一个初始设计 Z^0 ；

② 分析模型，求出目标函数、约束及它们对变量 Z 的导数；

③ 构造并求解近似规划问题；

④ 转②继续进行，直至收敛。

以上优化过程需要在由所有设计变量和约束组成的超空间中进行搜索，这对于大型工程系统是难于处理和费时的。

3 二层优化

下面为求解模型(1)的一个二层优化方法，其中，每个子系统只涉及到少量的设计变量和约束。

3.1 子系统层

系统分解后，输入到子系统 i 的量有 ① 子系统 i 的局部设计变量 X_i ；② 从系统层传递来的变量 Y ；③ 子系统 i 的性能变量 Q_i ；它是系统层变量 Y 的函数，则 $Q_i = Q_i(Y)$ ，如对结构系统，性能变量为作用在子系统上的节点力。

子系统 i 的优化设计问题为：

求 X_i ；

$$\text{使 } F_i(Y, Q_i, X_i) \Rightarrow \min \quad (3a)$$

$$\text{s. t. } g_i(Y, Q_i, X_i) \leq 0 \quad (3b)$$

$$X_i^l \leq X_i \leq X_i^u \quad (3c)$$

这里， Y 和 Q_i 为给定的量，在子系统 i 的优化设计过程中保持不变。值得指出的是，性能变量 Q_i 并不总是存在的，对某些系统没有性能变量。

问题(3)的解与系统层变量 Y 的取值有关，对应于某个 Y 的值，问题可能没有可行最优解，此时将会终止优化设计过程。为了避免这种情况发生，引入松弛变量 ω_i ，将子系统 i 的优化设计问题变为：

求 X_i, ω_i

$$\text{使 } C_i(Y, Q_i, X_i, \omega_i) \Rightarrow \min \quad (4a)$$

$$\text{s. t. } g_i(Y, Q_i, X_i) - \omega_i \leq 0 \quad (4b)$$

$$X_i^l \leq X_i \leq X_i^u \quad (4c)$$

$$\omega_i \geq 0 \quad (4d)$$

其中 $\omega_i = \{\omega_i, \omega_i, \dots\}^T$ 。

由式(4b)和式(4d)可见，引入松弛变量后，放松了子系统的约束。为使子系统获得“最好”的设计，应使松弛变量 ω_i 尽量小，为此，将 ω_i 和 F_i 组成一个复合目标函数 C_i ，如下：

$$C_i(Y, Q_i, X_i, \omega_i) = F_i(Y, Q_i, X_i) + b\omega_i \quad (5)$$

式中， b 是一个惩罚因子，正常数。 b 值越大，对违反约束的惩罚越重。

使复合目标函数 C_i 最小，即式(4a)，可使 ω_i 尽量小。若 ω_i 等于 0，则问题(4)与问题(3)等价，问题(4)的解即是最优解。

3.2 目标函数最优敏度分析

问题(4)可以采用任何非线性规划算法求解，得出设计变量和目标函数最优值 X_i^* 、 ω_i^* 和 C_i^* ，它们均为系统层变量 Y 和性能变量 Q_i 的函数。利用文献[4]给出的最优敏度分析方法，可求出复合目标函数最小值 C_i^* 的一阶敏度 $\frac{dC_i^*}{dY_j}$ 和 $\frac{dC_i^*}{dQ_{i,r}}$ ，这里， Y_j 和 $Q_{i,r}$ 分别为向量 Y 和 Q_i 的元素。

利用所获得的一阶敏度信息,并注意到 $Q_i = Q_i(Y)$,可构造目标函数最小值 C_i^* 随变量 Y 变化的线性近似如下:

$$\bar{C}_i(Y) = C_i^* + \sum_i \frac{dC_i^*}{dY_i} (Y_i - Y_i^0) + \sum_i \sum_j \frac{dC_i^*}{dQ_{ij}} \cdot \frac{\partial Q_{ij}}{\partial Y_i} (Y_i - Y_i^0) \quad (6)$$

式中,上标 0 表示参考值。偏导数 $\frac{\partial Q_{ij}}{\partial Y_i}$ 根据系统分析求出。

3.3 系统层

所有子系统的优化及最优敏度分析完成后,则转到系统层优化问题,其数学模型为:

$$\text{求 } Y$$

$$\text{使 } F(Y) = F_0(Y) + \sum_{i=1}^n a_i \bar{C}_i(Y) \Rightarrow \min \quad (7a)$$

$$\text{s. t. } g(Y) \leq 0 \quad (7b)$$

$$Y^l \leq Y \leq Y^u \quad (7c)$$

$$(1 - \delta)Y^0 \leq Y \leq (1 + \delta)Y^0 \quad (7d)$$

这里,式(7d)为运动极限约束,它是为了保证式(6)的线性化精度而引入的。 δ 为运动极限系数, $0 \leq \delta \leq 1$ 。

3.4 优化迭代过程

由于子系统目标函数的线性化,以上二层优化设计需进行迭代,以收敛到原问题的解。迭代过程如下:

①给 Y 和 $X_i, \omega_i (i = 1, \dots, N)$ 赋初值;

②分析整个系统,求出各子系统的性能变量 $Q_i (i = 1, \dots, N)$ 及其对系统层设计变量的一阶偏导数;

③固定 Y 和 $Q_i (i = 1, \dots, N)$,求解 N 个独立的子系统优化问题,并计算各子系统的目标函数最优敏度;

④求解协调系统的优化问题;

⑤转②继续进行迭代,直至收敛。

当①原问题(1)的所有约束条件得到满足;②目标函数 F 不再进一步减小时,以上优化迭代过程收敛。此时,所有子系统的松弛变量应为 0。

以上优化过程中,各子系统的优化可同时进行。

3.5 设计变量运动极限的确定

从提高优化设计效率的角度,式(7d)中运动极限系数 δ 应取尽可能大的值,但 δ 值取得过大,则可能引起优化迭代不收敛。 δ 值应取多大为宜依具体问题而定。 δ 值的选取应考虑如下两个因素:①目标函数线性化(式(6))的精度,它与问题的非线性程度有关。非线性程度低,则即使取较大的 δ 值也能获得满意的精度,反之,除非 δ 值取得足够小,否则难以保证线性化精度;②不应引起子系统有效约束的改变。子系统的最优敏度分析是以变量 Y 的微小变化不引起

子系统有效约束的改变为前提,若由于较大的 δ 值而引起了有效约束的改变,将导致最优敏度的计算出现较大误差,从而最终影响到目标函数线性化的精度。

若由于 δ 值取得过大而降低了目标函数线性化的精度,直接反映是优化迭代出现摆动现象,此时可减少 δ 值以使优化迭代收敛。一般来说,开始迭代时, δ 值可取得大些,随着迭代的进行,不断减小 δ 值。

4 优化实例及结果分析

以下将给出三个优化实例,以证明本文所提出的方法的正确性和有效性。

在这些实例中,各子系统及协调系统本身的优化设计采用序列线性规划法求解。如不特别加以说明,所有设计变量运动极限系数初值均取为 50%,并随着优化迭代进行加以调整,但不能小于 5%。所有实例的目标函数加权因子均取为 1。

4.1 减速器优化设计

图 2 为一个齿轮减速器简图。本例中,目标函数为减速器体积最小或重量最轻,受到齿的弯曲和接触应力以及轴的扭转变形和应力等约束。设计变量为: X_1 ——齿宽, X_2 ——齿轮模数, X_3 ——小齿轮齿数, X_4 ——轴承 1 之间的距离, X_5 ——轴承 2 之间的距离, X_6 和 X_7 ——轴 1 和轴 2 的直径。

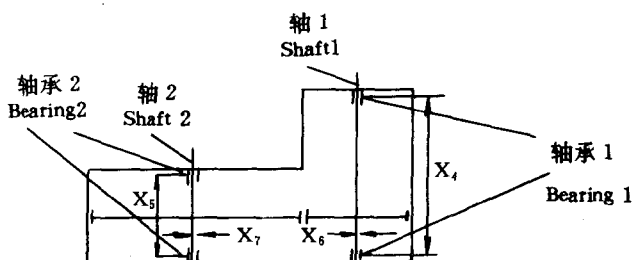


图 2 齿轮减速器

Fig. 2 Gear reducer

该减速器的单层优化数学模型由 Golinski^[6]于 1970 年给出,这里直接引用如下:

$$\text{求 } X = \{X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6, X_7\}^T$$

$$\text{使 } F(X) = 0.7854X_1X_2^2(3.3333X_3^3 + 14.9334X_3 - 43.0934) - 1.508X_1(X_6^2 + X_7^2) + 7.477(X_6^3 + X_7^3) + 0.7854(X_4X_5^2 + X_5X_7^2) \Rightarrow \min$$

$$\text{s. t. } 27X_1^{-1}X_2^{-2}X_3^{-1} - 1 \leq 0$$

$$397.5X_1^{-1}X_2^{-2}X_3^{-2} - 1 \leq 0$$

$$1.93X_2^{-1}X_3^{-1}X_4^3X_6^{-4} - 1 \leq 0$$

$$1.93X_2^{-1}X_3^{-1}X_5^3X_7^{-4} - 1 \leq 0$$

$$A_1/B_1 - 1100 \leq 0$$

$$A_1 = [(\frac{745X_4}{X_2X_3})^2 + (16.9)10^6]^{0.5}$$

$$B_1 = 0.1X_6^3$$

$$A_2/B_2 - 850 \leq 0$$

$$A_2 = [(\frac{745X_5}{X_2X_3})^2 + (157.5)10^6]^{0.5}$$

$$B_2 = 0.1X_7^3$$

$$X_2X_3 - 40 \leq 0$$

$$X_1/X_2 - 12 \leq 0$$

$$5 - X_1/X_2 \leq 0$$

$$(1.5X_6 + 1.9)X_4^{-1} - 1 \leq 0$$

$$(1.1X_7 + 1.9)X_5^{-1} - 1 \leq 0$$

$$2.6 \leq X_1 \leq 3.6$$

$$0.7 \leq X_2 \leq 0.8$$

$$17 \leq X_3 \leq 28$$

$$7.3 \leq X_4 \leq 8.3$$

$$7.3 \leq X_5 \leq 8.3$$

$$2.9 \leq X_6 \leq 3.9$$

$$5.0 \leq X_7 \leq 5.5$$

将此减速器优化问题分解为两个子问题,分别对应于轴和轴承 1 及轴和轴承 2 两个子系统的优化。两个子系统的局部设计变量分别为 X_4, X_6 和 X_5, X_7 , 系统层的全局设计变量为 X_1, X_2 和 X_3 。每个子系统有三个局部约束,系统层有 5 个全局约束。没有性能变量。

表 1 齿轮减速器优化设计结果

Table 1 Results for gear reducer

参数 Parameters	初值 (不可行)			初值 (可行)		
	Initial values (Infeasible)	单层 One-level	二层 Two-level	Initial values (Feasible)	单层 One-level	二层 Two-level
X_1	3.0	3.5	3.5	3.6	3.5	3.5
X_2	0.7	0.7	0.7	0.72	0.7	0.7
X_3	28	17	17	28	17	17
X_4	7	7.3	7.3	8	7.3	7.3
X_5	7	7.715	7.715	8	7.715	7.715
X_6	3	3.35	3.35	3.5	3.35	3.35
X_7	5	5.287	5.287	5.5	5.287	5.287
目标 Objective	4619.8	2994.5	2994.5	5981.0	2994.5	2994.5

表 1 为所求出的相应于初始可行和初始不可行设计的二层优化设计结果,并与相应的单层优化设计结果加以比较。图 3 和图 4 为相应于初始可行和初始不可行设计的优化迭代历史。由表 1 可见,不管初始设计是否可行,二层和单层的优化结果一致。再由图 3 和图 4 可见,两种情况下,单层和二层优化迭代次数基本相同。

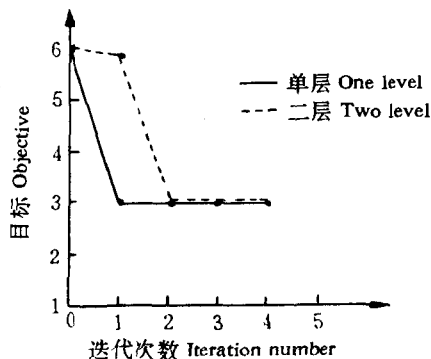


图 3 齿轮减速器迭代历史 (初始可行)

Fig. 3 Gear reducer iteration history, initially feasible

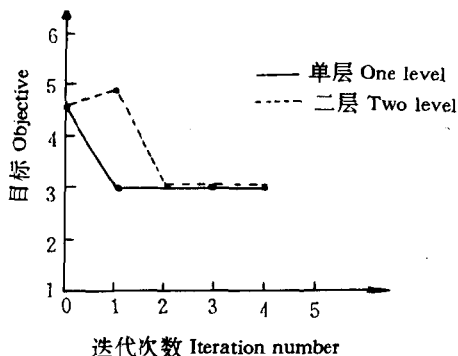


图 4 齿轮减速器迭代历史 (初始不可行)

Fig. 4 Gear reducer iteration number, initially infeasible

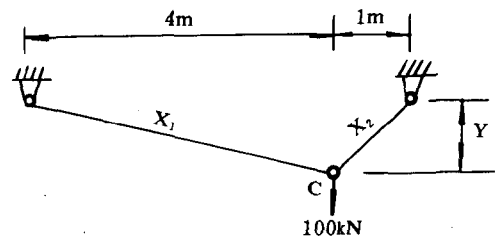


图 5 二杆桁架

Fig. 5 Two-bar truss

4.2 二杆桁架优化设计

图 5 所示为一个 2 杆桁架,在结点 C 处作用有 100 kN 的垂直载荷。此问题的设计变量为杆的横截面面积 X_1, X_2 以及结点 C 的垂直坐标 Y , 约束包括: 杆的应力不超过 100 000 kN/m², Y 的变化范围 1~3 m, 杆的横截面面积大于 0。

以体积最小为目标函数的二杆桁架单层优化设计数学模型如下:

$$\text{求 } X_1, X_2, Y$$

$$\text{使 } F(Y, X_1, X_2) = X_1 \sqrt{16 + Y^2} + X_2 \sqrt{1 + Y^2} \Rightarrow \min$$

$$\text{s.t. } 20 \sqrt{16 + Y^2} - 100\,000 Y X_1 \leq 0$$

$$80\sqrt{1+Y^2} - 100000YX_2 \leq 0$$

$$1 \leq Y \leq 3$$

$$X_1, X_2 > 0$$

将此问题分解为两个子问题,分别对应于两根杆的优化。每个子问题有一个局部设计变量(X_1 或 X_2) 和一个局部约束。全局变量是 Y , 没有全局约束和性能变量。

表2 二杆桁架优化结果

Table 2 Results for two-bar truss

参数	初值 (不可行)	单层	二层	初值 (可行)	单层	二层
Parameters	Initial values (Infeasible)	One-level	Two-level	Initial values (Feasible)	One-level	Two-level
Y	1.0	1.999	1.999	3.0	1.999	1.999
X_1	2.0×10^{-4}	4.473×10^{-4}	4.478×10^{-4}	5.0×10^{-4}	4.473×10^{-4}	4.478×10^{-4}
X_2	2.0×10^{-4}	8.944×10^{-4}	8.948×10^{-4}	1.0×10^{-3}	8.944×10^{-4}	8.948×10^{-4}
体积 Volume (m^3)	1.107×10^{-3}	3.999×10^{-3}	4.002×10^{-3}	5.662×10^{-3}	3.999×10^{-3}	4.002×10^{-3}

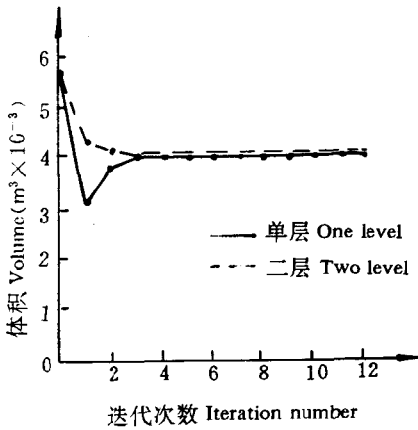


图6 二杆桁架优化迭代历史 (初始可行)

Fig. 6 Two-bar truss iteration, initially feasible

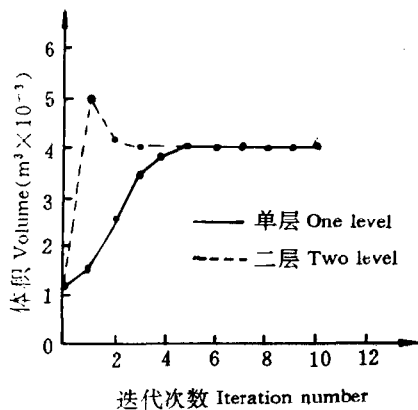


图7 二杆桁架优化迭代历史 (初始不可行)

Fig. 7 Two-bar truss iteration history, initially infeasible

4.3 十杆桁架优化设计

图8 所示为10杆桁架,杆件横截面为圆筒形,横截面尺寸由圆筒中心直径 d 和圆筒厚度 t 表示。优化设计问题为:求桁架所有杆件的横截面尺寸,使桁架

表2为二杆桁架二层优化设计结果,并与单层优化设计结果进行比较。由表2可见,不管初始设计是否可行,二层和单层的优化结果几乎一致。相应于初始可行和初始不可行设计的优化迭代历史分别示于图6和图7,由图可见,二层优化和单层优化的迭代次数基本相同。

架体积最小,受到每根杆件的应力、局部屈曲、压杆稳定性以及桁架的位移约束,此外还有设计变量边界约束。已知桁架的弹性模量、局部屈曲常数以及最大厚度/直径比分别为: $E_i = 2.2 \times 10^{11} \text{ N/m}^2$, $K_i = 0.2$, $D_s = 0.2$,所有直径和厚度的上、下限分别为: $d_{\max} = t_{\max} = 1 \text{ m}$, $d_{\min} = t_{\min} = 1.0 \times 10^{-3} \text{ m}$,杆件的许用应力为 $\sigma_{\max} = 3.0 \times 10^8 \text{ N/m}^2$ 。桁架所承载荷为 $Y = 5.0 \times 10^5 \text{ N}$,在桁架右下角允许的最大垂直位移为 $u_{\max} = 0.03 \text{ m}$ 。

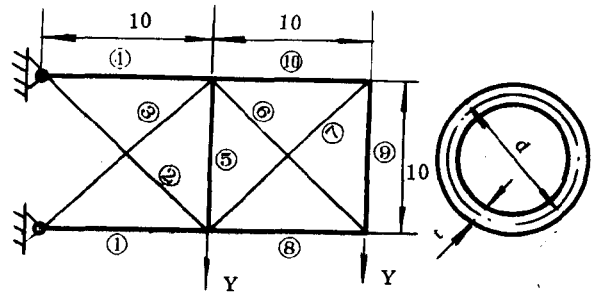


图8 十杆桁架

Fig. 8 Ten-bar truss

此问题中,系统层的目标函数为桁架体积最小,设计变量为杆件横截面面积,受到桁架节点位移约束及杆件的应力约束。子系统层中,每一根杆为一个子系统,因此,共有10个子系统。子系统目标函数为杆的约束违反量最小,用松弛变量最小来表示,设计变量只有一个,即圆筒中心直径;约束包括:杆的局部屈曲约束、压杆稳定约束、厚度/直径比约束以及直径、厚度的边界约束。

系统层向每个子系统输入量为杆的横截面面积及应力, 杆的应力为性能变量, 它是桁架所有杆件横截面面积的函数。

各子系统及协调系统的约束函数表达式详见文献 [10], 这里从略。

表 3 10 杆桁架优化设计结果

Table 3 Results for ten-bar truss

参数 Parameters	初值 (可行) Initial values (Feasible)	单层 One-level	二层 Two-level	初值 (不可行) Initial values (Infeasible)	单层 One-level	二层 Two-level
A ₁	0.0314	0.0077	0.0092	0.0016	—	0.0103
d ₁	0.5	0.2155	0.2047	0.1	—	0.2074
A ₂	0.0314	0.0077	0.0080	0.0016	—	0.0081
d ₂	0.5	0.1224	0.1122	0.1	—	0.1122
A ₃	0.0314	0.0094	0.0080	0.0016	—	0.0043
d ₃	0.5	0.2425	0.2462	0.1	—	0.2859
A ₄	0.0314	0.0094	0.0080	0.0016	—	0.0092
d ₄	0.5	0.1224	0.1122	0.1	—	0.1195
A ₅	0.0314	0.0077	0.0078	0.0016	—	0.0001
d ₅	0.5	0.1224	0.1122	0.1	—	0.0147
A ₆	0.0314	0.0077	0.0080	0.0016	—	0.0083
d ₆	0.5	0.1224	0.1122	0.1	—	0.1155
A ₇	0.0314	0.0077	0.0078	0.0016	—	0.0077
d ₇	0.5	0.1625	0.1632	0.1	—	0.1526
A ₈	0.0314	0.0077	0.0078	0.0016	—	0.0077
d ₈	0.5	0.1224	0.1177	0.1	—	0.1229
A ₉	0.0314	0.0077	0.0078	0.0016	—	0.0077
d ₉	0.5	0.1224	0.1122	0.1	—	0.1120
A ₁₀	0.0314	0.0077	0.0078	0.0016	—	0.0077
d ₁₀	0.5	0.1224	0.1122	0.1	—	0.1120
目标 (m ³) Objective	3.662	0.9379	0.9353	0.1831	—	0.8288

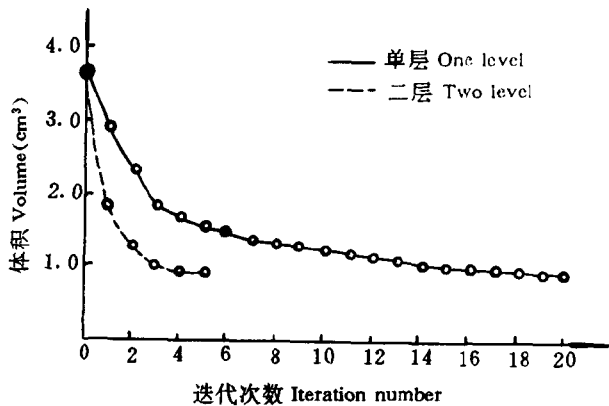


图 9 十杆桁架优化迭代历史 (初始可行)

Fig. 9 Ten-bar truss iteration history, initially feasible

本例中, 对初始可行设计, 设计变量运动极限系数取为 50%, 而对初始不可行设计为 20%。表 3 为十杆桁架二层优化设计结果, 并与单层优化结果加以比较。由表 3 可见, 对初始可行设计, 二层和单层的优化设计结果基本一致; 对初始不可行设计, 二层优化的目标函数值与初始可行设计的相比低 12% 左右, 这主要是由于问题的非凸性引起的。另外, 对初

始不可行设计, 单层优化设计不收敛, 这可能与所采用的序列线性化优化方法有关。相应于初始可行和不可行设计的优化迭代历史分别示于图 9 和图 10。由图 9 可见, 对初始可行设计, 二层优化只经 5 次迭代即已收敛, 而单层优化的迭代次数则多达 20 次。

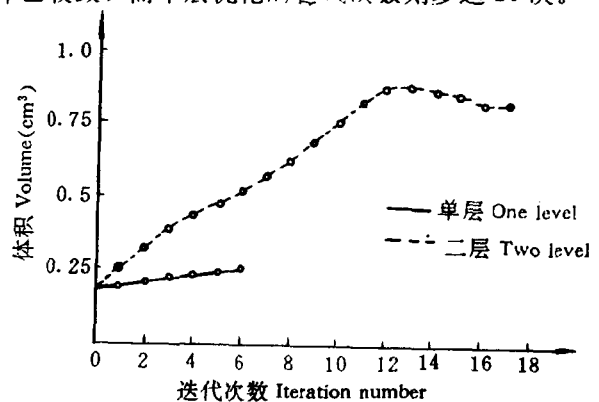


图 10 十杆桁架优化迭代历史 (初始不可行)

Fig. 10 Ten-bar truss iteration history, initially infeasible

5 讨论

本文所提出的二层优化方法, 具有如下一些特

点: ①各子系统的目标函数可以根据具体问题的特点加以选择; ②松弛变量的引入降低了各子系统对初始设计的要求, 无论初始设计是否可行都能获得满意的效果, 从而提高了方法的可靠性; ③利用最优敏度信息, 将各子系统目标函数最小值近似表示为系统层变量的线性函数, 并以迭加形式出现在系统层目标函数中, 既不增加系统层优化工作量, 又避免了在系统层优化设计过程中对子系统进行的重优化; ④只用到目标函数的一阶敏度, 因而无需像 Sobieski 的线性分解法那样进行费时的二阶偏导数计算; ⑤优化实例结果表明, 所提出的方法具有良好的收敛性质, 迭代次数少于或等于单层优化的迭代次数。

参考文献

- 1 Kirsch U. Multilevel approach to optimum structural design. *J Struc Div ASCE*, 1975, 101: 957~974.
- 2 Sobieszczanski-Sobieski J. A linear decomposition method for large optimization problems-blueprint for development. NASA TM-83248, 1982.
- 3 Sobieszczanski-Sobieski J, James B B, Dovi A R. Structural opti-

mization by multilevel decomposition. *AIAA J*, 1985, 23: 1775~1782.

- 4 Sobieszczanski-Sobieski J, Barthelemy J F, Riley K M. Sensitivity of optimum solutions to problem parameters. *AIAA J*, 1982, 20: 1291~1299.
- 5 Barthelemy J F M, Sobieszczanski-Sobieski J. Optimum sensitivity derivatives of objective function in nonlinear programming. *AIAA J*, 1983, 21: 913~915.
- 6 Golinski J. Optimal synthesis problems solved by means of nonlinear programming and random methods. *J Mech*, 1970, 5: 287~309.
- 7 Barthelemy J F M, Riley M F. Improved multilevel optimization approach for the design of complex engineering systems. *AIAA J*, 1988, 26: 353~360.
- 8 Azarm S, Li W C. A Two-level decomposition method for design optimization. *Eng Opt*, 1988, 13: 211~224.
- 9 Cheng G D, Wei R Y. A Multilevel optimization method for the design of complex engineering systems. *Proc APCOM*, Sydney, 1993: 911~915.
- 10 韦日钰. 工程系统层次/网状分解优化设计方法研究: [博士学位论文]. 大连: 大连理工大学, 1993.

(责任编辑: 蒋汉明)

(上接第 13 页 Continue from page 13)

浓度范围内只以规则或不规则的四方锥构型存在, 与生理 pH 下的结果^[1]明显不同。这是因配位环境差异所致。

配位环境差异对 Mn(II)-HSA 金属中心结构的影响表现在两个方面。一方面, 在等离子点时, 随着浓度升高, 金属中心的结构由规则的四方锥构型向不规则的四方锥构型转变, 这是因为较高浓度时, Mn(II)在 HSA 中的配位环境(分子内空间)比浓度较低时的拥挤导致金属中心的配位结构畸变而不能再以四方锥构型存在。另一方面, 与生理 pH 下的结果^[1]相比, 本文条件下, 在同样的较高浓度 ($>2.5 \times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$) 时, Mn(II)中心的结构并没取四方平面构型, 原因之一是 d^5 组态的 Mn(II)的配合物极少取四方平面构型, 但造成这一结构差异的主要原因是这两种不同 pH 条件下 Mn(II)在 HSA 中的配位环境(分子内空间)差异所致。文献报道^[5], 在生理 pH 下 HSA 以 N (native) 构象存在; 在等离子点时, HSA 发生向 F 构象(部分酸膨胀构象)的转变。可能正是这种转变, 使白蛋白的三级结构变得较松散, 而具有较

宽松的分子内空间(配位环境), 从而使得 Mn(II)配合物的立体化学习性得以基本保持而取畸变的四方锥构型。

参考文献

- 1 梁宏, 周永洽, 申泮文. Mn(II)-HSA 和 Mn(II)-BSA 金属中心的结构研究. *科学通报*, 1994, 39(11).
- 2 Shen Panwen, et al. Structural studies on metal-serum albumin I: An ultraviolet spectroscopic study of copper (II)-human serum albumin complexes. *Inorg Chim Acta*, 1990, 169: 161~169.
- 3 周永洽等. 金属-血清白蛋白的结构研究 I: Cu(II)-BSA 和 Ni(II)-BSA 的四方锥→四方平面结构. *化学学报*, 1991, 49: 59~64.
- 4 周永洽等. 金属-血清白蛋白的结构研究 IV: 等离子点附近 HSA 和 BSA 中 Cu(II)和 Ni(II)金属中心的结构. *无机化学学报*, 1992, 8(4): 382~386.
- 5 de Gruyter W. *Concise encyclopedia of biochemistry*, Berlin, 1983, P103~110.
- 6 Lever A B P. *Inorganic electronic spectroscopy*. Elsevier, Amsterdam. 2nd ed. 1984, P80.

(责任编辑: 蒋汉明)