

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

以人工智慧與實驗計劃法作高性能混凝土配比最佳化設計 (II) 研究成果報告(精簡版)

計畫類別：個別型
計畫編號：NSC 95-2221-E-216-046-
執行期間：95年08月01日至96年07月31日
執行單位：中華大學資訊管理學系

計畫主持人：葉怡成

計畫參與人員：碩士班研究生-兼任助理：張皓博、陳柏愷

處理方式：本計畫可公開查詢

中華民國 96年10月14日

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫 成果報告
 期中進度報告

以人工智慧與實驗計劃法作高性能混凝土配比最佳化設計(II)

計畫類別： 個別型計畫 整合型計畫

計畫編號：NSC-95-2221-E-216-046

執行期間：95年8月1日至96年7月31日

計畫主持人：葉怡成

共同主持人：

計畫參與人員：張皓博

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)： 精簡報告 完整報告

本成果報告包括以下應繳交之附件：

- 赴國外出差或研習心得報告一份
- 赴大陸地區出差或研習心得報告一份
- 出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份
- 國際合作研究計畫國外研究報告書一份

處理方式：除產學合作研究計畫、提升產業技術及人才培育研究計畫、
列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

涉及專利或其他智慧財產權， 一年 二年後可公開查詢

執行單位：中華大學

中 華 民 國 96 年 10 月 10 日

目錄

摘要	1
一、前言	1
二、文獻回顧.....	4
三、基於 D-Optimal 之配比實驗設計.....	17
四、基於自組織映射圖之配比實驗設計	29
五、基於分層聚類分析之配比實驗設計	37
六、配比實驗設計之比較	45
七、結論與建議	50
參考文獻.....	51
計畫成果自評.....	54

以人工智慧與實驗計劃法作高性能混凝土配比最佳化設計(II)

計劃編號：NSC-95-2221-E-216-046

執行期限：95/08/01~96/07/31

主持人：葉怡成 中華大學土木工程學系 教授

摘要

混凝土的強度與坍度是混凝土品質的重要因子，由於缺少數理模型，強度、坍度與配比的關係必須透過實驗收集數據，再以迴歸分析或類神經網路建立模型。一般土木材料的實驗設計缺少系統化的方法，因此本研究嘗試以實驗設計(Design of Experiment)來設計實驗。本研究除了採用傳統的 D-Optimal 設計方法外，提出二種新的實驗設計方法，(1)自組織映射圖(Self-Organizing Map)設計方法、(2)分層聚類分析(Hierarchical Cluster Analysis)設計方法。並以五種實驗數目各自以類神經網路建立強度、坍度預測模型，並與隨機法所建立的模型作比較，以分析三種設計方法的優劣。本研究結果顯示：(1)實驗數目的多寡對於預測模型有明顯的影響。(2)有進行實驗設計的模型相對於隨機法所產生的模型要來得好。(3)對於模型實驗點的配適，D-Optimal 設計方法比自組織映射圖設計方法與分層聚類分析設計方法要來得準確和穩健。

關鍵字：高性能混凝土、配比、實驗設計、D-Optimal 法

ABSTRACT

Strength and slump are the important measures of high performance concrete. Because there are no mathematical models, the relationships between strength and slump and proportion must be deduced from collecting experimental data, then establishing models by regression analysis or artificial neural networks. Generally, construction material experiment designs lack systematic methodology. Therefore, this research attempts to use design of experiments (DOE) to design the experiments. This study used the traditional D-Optimal design method, and five kinds of experimental numbers to establish strength and slump models by artificial neural networks, respectively. The results showed that (1) to establish an accurate forecast model, the strength model needs more than 100 mix proportion experiments; the slump model only needs 50 mix proportion experiments, and (2) the models produced by D-Optimal design method are much more accurate than those produced by random design.

Key Words: high performance concrete, proportion, design of experiments, D-Optimal.

一、前言

1-1 研究動機

隨著近代人口密度增加、土地有限的情況下，建築物不得不往高處發展，而傳統的混凝土已無法滿足趨勢，因此出現具有高強度、高工作性、高耐久性、體積穩定性，甚至備有特殊需求(如：高耐熱性、高抗硫)的高性能混凝土(High Performance Concrete)[1]。高性能混凝土選用的材料比傳統的混凝土多，一般除了水、水泥、粗骨材、細骨材外還添加工業副產品及化學攪料如飛灰、爐石粉以及強塑劑。

由於高性能混凝土並沒有像傳統混凝土有 ACI 配比設計的規範可循，因此在配比設計上極為複雜，而各國對於高性能混凝土的工作性質特性要求不一，在選用的材料也不盡相同，所研究出來的配方往往只適用於當地建築物。因此需要進行大量實驗來建構準確的材料行為模型，以設計適用的配比。為了要減少實驗數目但不影響模型的準確度必須採用實驗設計法(Design of Experiment)[9]。配比設計常用的實驗設計方法為單體形心設計(Simplex Centroid Design)。但因高性能混凝土的七種成份有成份上下限與比例限制，使得單體形心設計不再適用，故需要另尋其它的實驗設計方法。

當配比設計有複雜的成份上下限以及比例限制時，常使用最佳準則法(D-Optimal)。此法的基本原理是從一群候選實驗點中選取能夠優化某一準則的預設數目的實驗點。本研究提出兩種新的選取方法：自組織映射圖(Self-Organizing Map, SOM)[3]、分層聚類分析(Hierarchical Cluster Analysis, HCA) [3]等方法。在選取實驗點後，進行實驗，取得實驗值，再建立預測模型。

在建立模型的方法上，由於類神經網路(Artificial Neural Network, ANN)[2,3]發展至今已經有十多年的歷史，用在土木工程的預測方面也有良好的成效，故本研究採用類神經網路建立預測模型。

透過上述研究可以比較出哪種實驗設計方法對於配比設計問題能提供較佳的實驗設計，以建立較準確的預測模型。

1-2 研究方法

本研究的流程如下：

1. 收集文獻上的實驗數據。
2. 利用文獻上的實驗數據以類神經網路建立基準預測模型。
3. 產生能滿足成份上下限、比例限制的候選點。
4. 利用 D-Optimal、SOM、HCA 等方法選取實驗點。
5. 將步驟 4 的實驗點帶入基準預測模型模擬得到實驗值。
6. 利用步驟 5 的實驗值以類神經網路建立實驗預測模型。
7. 利用文獻上的實驗數據驗證步驟 6 產生的實驗預測模型。
8. 分析步驟 7 的結果，比較 D-Optimal、SOM、HCA 等方法之適用性。

1-3 研究內容

本文大致內容如下：

第一章為導論。主要介紹本文研究的動機、方法與內容。

第二章為文獻回顧。回顧國內有關高性能混凝土、實驗設計法、類神經網路等相關文獻。

第三章為基於 D-Optimal 之配比實驗設計。詳細介紹如何使用 D-Optimal 來建立模型，以及比較探討結果。

第四章為基於自組織映射圖之配比實驗設計。詳細介紹如何使用 SOM 來建立模型，以及比較探討結果。

第五章為基於分層聚類分析之配比實驗設計。詳細介紹如何使用 HCA 來建立模型，以及比較探討結果。

第六章為配比實驗設計之比較。將三種不同的設計方法所產生的結果進行評估，並探討結果。

第七章為結論。

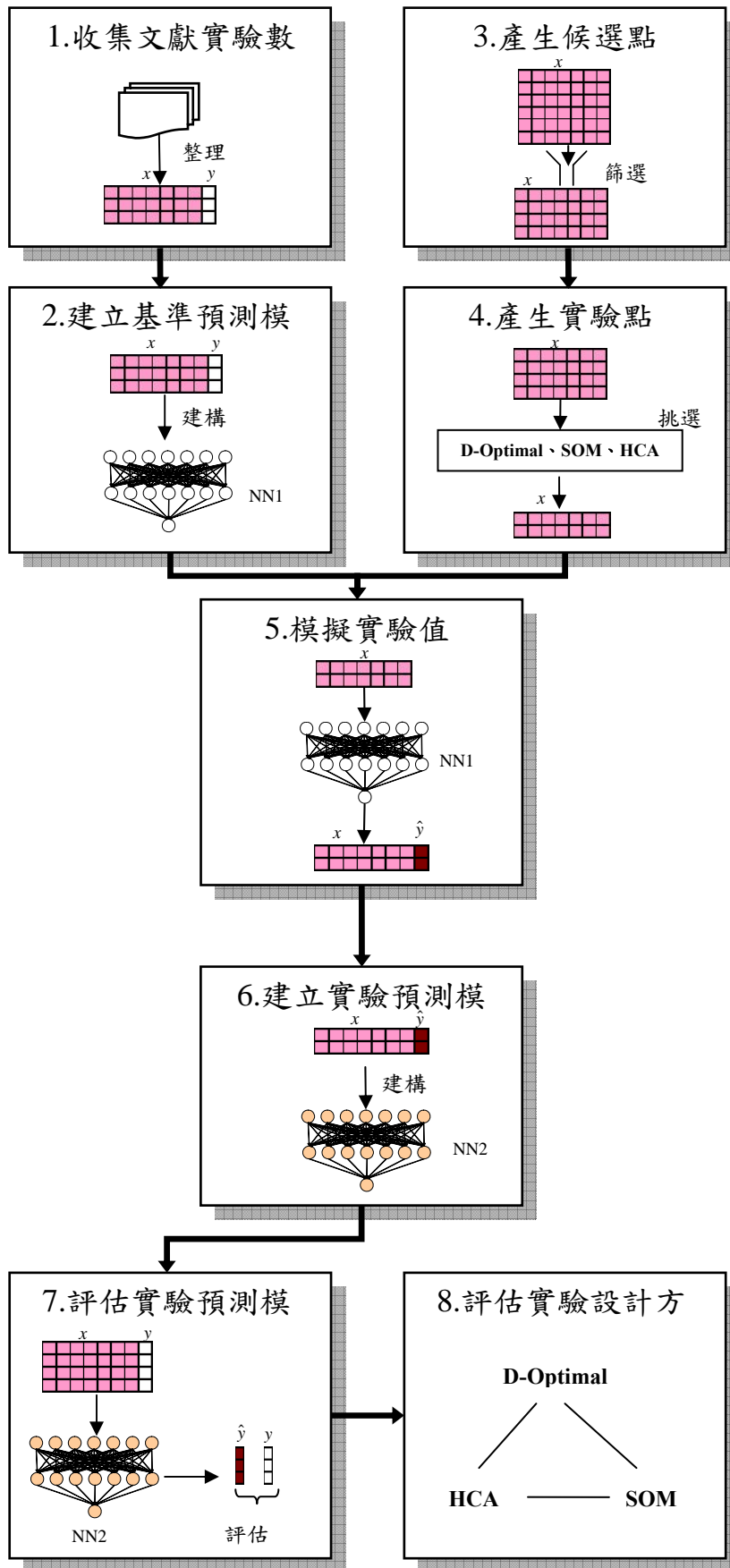


圖 1-1 研究流程

二、文獻回顧

2-1 高性能混凝土配比設計

傳統上，混凝土的製造方式通常是由水、水泥、粗骨材、細骨材所組成。絕大多數的設計方法都是依先前的經驗所累積而成的圖表或公式進行[4]。例如 ACI 混凝土配比設計多用圖表來選擇各種材料的用量、比例，以滿足特定混凝土所要求的強度及工作度[5]。

高性能混凝土 (High Performance Concrete, HPC) 是 1990 年 5 月，美國國家標準與技術研究院 (NIST) 與美國混凝土學會 (ACI) 在美國馬里蘭州之蓋茲堡城的研討會上首次提出來的[6]。在我國則有黃兆龍博士所訂定之高性能混凝土特別條款(草案)，在草案中對高性能混凝土所下的定義為「高性能混凝土係混凝土經過品質保證技術，確保品質一致性及穩定性，滿足營建工程優良品質之需求」[1]。所以，高性能混凝土的性能可依需要而定，可要求強度、流動性、自填性、免搗實…等一項或多項性能。

目前，高性能混凝土的組成大約有 4 至 10 種不同材料，而且材料的性質也不盡相同，例如水泥可能有不同的細度、化學組成；細骨材的級配及最大粒徑也不盡相同；粗骨材的料源是天然或經加工後的骨材；加上高性能混凝土中添加了許多攪料，如 SP、爐石粉、飛灰、矽灰甚至是纖維…等都不一樣，可供調整比例的數目也因此增加，使得整個混凝土配比組成成為一個多元且複雜的問題。然由於各國對高性能混凝土的品質要求並不相同，加上材料性質有所差異，因此高性能混凝土發展至今已有數十年之久，卻尚未有一套精確而通用之配比設計方法。因此各國的專家學者無不致力於研究高性能混凝土配比技術。

高性能混凝土或傳統混凝土的最佳配比設計方面，國外已經有學者提出研究成果。有學者使用部分因子實驗法針對混凝土最佳配比設計進行研究，並以迴歸分析建構出一個二次方程式的強度模型，及簡單三次方程式的工作度模型[5]。亦有學者建構黏度及用水量需求模型、強度模型及勁度模型，發展一套名為 BETONLAB 軟體，對高性能混凝土進行最佳化研究[7]。此外以最大理論堆積密度模型應用在高強度混凝土上的研究指出，設計最大漿量厚度的方法可以有效提高混凝土的抗壓強度[8]。

因為各國對於高性能混凝土的工程特性要求不一，以及使用的材料也不同，所以研究出來的配比設計方法往往僅限於當地使用。又在配比設計的過程當中必須經過大量的試拌，對於時間、材料及成本都是一大負擔。因此如何發展出一套可將試拌次數減至最少的高性能混凝土配比設計方法，是一個值得研究的課題。

2-2 基於 D-Optimal 之配比設計

實驗設計(Design of Experiment)的目的在於以最少的實驗次數，獲得最精確的模型。最精確的模型定義很多，D-Optimal 實驗設計即行列值最大化實驗設計[9]。舉例來說：

假設一因變數 y ，具有 k 個自變數 x_1, x_2, \dots, x_k ，已收集 n 組數據：

第一組： $x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1k}$ y_1

第二組： $x_{21}, x_{22}, \dots, x_{2k}$ y_2

：

第 n 組： $x_{n1}, x_{n2}, \dots, x_{nk}$ y_n

將上列寫成矩陣形式

$$y = X\beta + \varepsilon \quad (3-1)$$

其中

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix}$$

$$\beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

故

$$\varepsilon = y - X\beta \quad (3-2)$$

殘差平方和：

$$L = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \varepsilon' \varepsilon = (y - X\beta)'(y - X\beta) \quad (3-3)$$

將上式展開得

$$L = y'y - \beta' X'y - y' X\beta + \beta' X' X\beta \quad (3-4)$$

上式第三項 $y' X\beta$ 是一個 1×1 矩陣，即純量，其轉置亦為純量，故

$$y' X\beta = (y' X\beta)' = \beta' X'y \quad (3-5)$$

故第二項與第三項可合併，得

$$L = y'y - 2\beta' X'y + \beta' X' X\beta \quad (3-6)$$

由上式可知，殘差之平方和為迴歸係數的函數。依據極值定理，一函數在極值處之微分為 0，並以估計係數 \mathbf{b} 取代模型係數 β 得

$$-2X'y + 2X' X\mathbf{b} = 0 \quad (3-7)$$

$$X' X\mathbf{b} = X'y \quad (3-8)$$

解上述聯立方程式即可得使殘差之平方和最小之迴歸係數。

$$\mathbf{b} = (X' X)^{-1} X'y \quad (3-9)$$

由於數據具隨機性，因此從數據估計得到的迴歸係數也是隨機變數。首先定義 β 為模型之係數， \mathbf{b} 為估計之係數。估計之迴歸係數 \mathbf{b} 之期望值如下：

$$E(\mathbf{b}) = \beta \quad (3-10)$$

估計之係數 \mathbf{b} 之期望值恰為模型之係數 β ，故上節所推導之迴歸係數為不偏估計。

至於估計之係數之協方差 $\text{Cov}(\mathbf{b})$ 為

$$\text{Cov}(\mathbf{b}) = \sigma^2 (X' X)^{-1} \quad (3-11)$$

其中

σ^2 為殘差之變異數，即

$$\text{Var}(\varepsilon) = \sigma^2 \quad (3-12)$$

σ^2 代表模型誤差，此一誤差稱為模型相依誤差(model-dependent)，因其值與選用的模型有關。至於模型獨立誤差(model-independent)只能靠重複實驗才能得到。

估計係數變異 $\text{Var } b$ 即 $\text{Cov } b$ 的對角元素，由(3-11)式可知模型變異 $\text{Var } b$ 要越小，則 $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ 對角元素要越小； $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ 對角元素要越小，則 $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ 的行列值要越大。

2-3 基於距離之配比設計

除了用上節所談到的 D-Optimal 來做設計之外，另外還有其它幾方法，像是採用距離設計的「自組織映射圖」(Self-Organizing Map, SOM)、「分層聚類分析」(Hierarchical Cluster Analysis, HCA) 等方法。

2-3-1 自組織映射圖

自組織映射圖(Self-Organizing Map, SOM)是一種無監督式學習網路模式，早在 1980 年 T. Kohonen 即提出此模式，至今仍是無監督式學習網路模式的典範[2]。無監督式應用從問題領域中取得訓練範例，並從中學習範例的內在集群規則，以應用於新的案例，而需推論它與那些訓練範例屬同一集群的應用。這種應用與統計學上的聚類分析(cluster analysis)相似。

自組織映射圖網路的基本原理可溯自大腦結構的特性。大腦中具有相似功能的腦細胞聚集在一起，例如人類大腦中明顯地有專司視覺、聽覺、味覺等區塊，也就是說腦神經細胞有「物以類聚」的特性。自組織映射圖網路模仿這種特性，其輸出處理單元會相互影響。當網路學習完畢後，其輸出處理單元相鄰近者會具有相似的功能，也就是具有相似的連結加權值。

自組織映射圖網路的架構如圖 2-1 所示，包括：

輸入層：用以表現網路的輸入變數，即訓練範例的輸入向量，或稱特徵向量。

輸出層：用以表現網路的輸出變數，即訓練範例的聚類，其處理單元數目依問題而定，通常排列成二維正方形。

網路連結：每個輸出層單元與輸入層處理相連連結的加權值所構成的向量，表示一個訓練範例對映資料點聚類之形心座標。當網路學習完畢後，其輸出處理單元相鄰近者會具有相似的連結加權值。

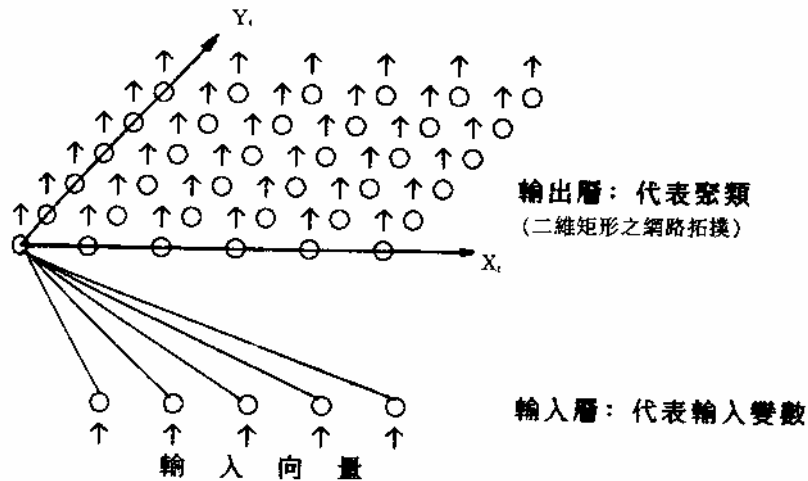


圖 2-1 自組織映射圖網路架構圖

自組織映射圖網路的重要概念如下：

網路拓撲：自組織映射圖網路與其它類神經網路模式有一點重要的差異，它的輸出層處理單元的相對位置具有意義，而一般的網路模式則否。通常它的輸出層處理單元以二維的型態排列居多，形狀以正方形居多。但實際上可以用三角形、圓形、甚至任意形狀，而且一維、三維排列均可。例如圖 2-2 顯示一個具二維正方形網路拓撲的輸出層。

拓撲座標：拓撲座標是指標定一輸出層處理單元在網路拓撲中位置的座標。對於一個二維的型態排列的網路拓撲，每一個輸出層處理單元具有一個二維的拓撲座標；如採一維或三維排列，則將具一維或三維的拓撲座標。例如如圖 2-2 顯示的具二維矩形網路拓撲的輸出層，可取左下方的單元為座標原點，每向上一橫列與每向右一直行其座標值增一單位，例如圖 2-2 上的 a 輸出處理單元的拓撲座標為(1,3)，而 b 為(3,1)。拓撲座標與樣本空間座標必須釐清，樣本空間座標的維次是由輸入層處理單元的數目決定，通常從數維到數十維都有可能，是用來標示一訓練範例的輸入向量，或稱特徵向量，在樣本空間中的位置，即訓練範例所對映的樣本點之位置。

鄰近區域：鄰近區域是指在網路拓撲中，以某一輸出處理單元為中心的區域，稱此一單元之鄰近區域。鄰近區域內的輸出處理單元會相互影響。鄰近區域會在網路學習過程中逐漸縮小(參考圖 2-3)。

鄰近中心：控制鄰近區域的中心位置的參數，即一輸出處理單元在網路拓撲的拓撲座標。

鄰近半徑：控制鄰近區域大小的參數。

鄰近距離：一輸出處理單元在網路拓撲中距鄰近中心的距離，由此一輸出處理單元的拓撲座標，與鄰近中心的拓撲座標來決定，以公式表示如下：

$$r_j = \sqrt{(X_j - X_c)^2 + (Y_j - Y_c)^2} \quad (2-13)$$

其中 X_j, Y_j = 第 j 個輸出處理單元拓撲座標； X_c, Y_c = 鄰近中心拓撲座標。

鄰近係數：控制鄰近區域內輸出處理單元相互影響程度的參數。鄰近係數是「鄰近半徑」與「鄰近距離」的函數。

鄰近函數：控制鄰近係數和「鄰近半徑 R」與「鄰近距離 r_j 」關係式的函數。圖 2-4 顯示幾種常用的鄰近函數，本章中將採下式(鐘形鄰近函數)：

$$K_j = e^{-(r_j/R)^2} \quad (2-14)$$

此式當 $r_j=0$ 時 $K=1$ ； $r_j = \infty$ 時 $K=0$ 。

鄰近區域收縮：鄰近區域會在網路學習過程中逐漸縮小，實際上即臨近半徑逐漸縮小，以公式表示如下：

$$R^{n+1} = \lambda \cdot R^n \quad (2-15)$$

其中 $\lambda < 1$ 為鄰近半徑縮小因子。通常以學習循環為單位，網路每執行一個學習循環鄰近半徑收縮一次。

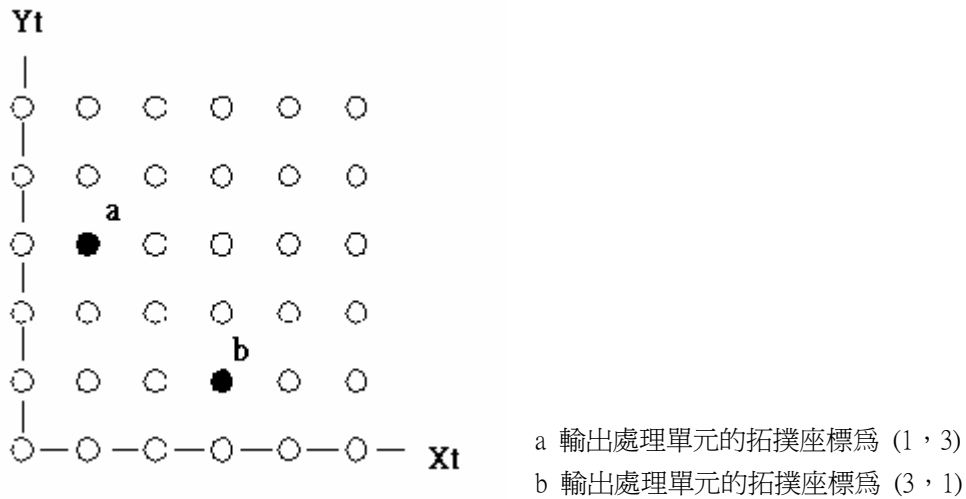


圖 2-2 自組織映射圖網路的「拓撲座標」觀念

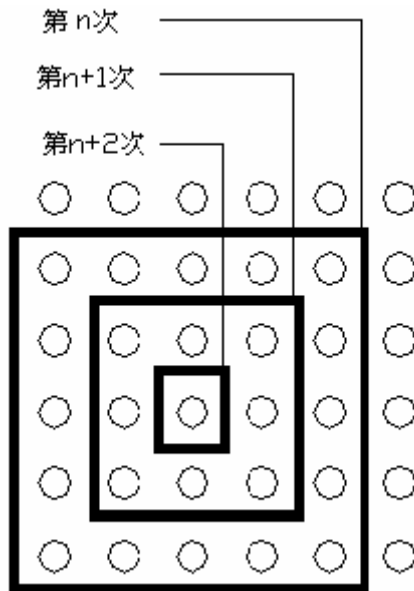


圖 2-3 自組織映射圖網路「鄰近區域」的觀念

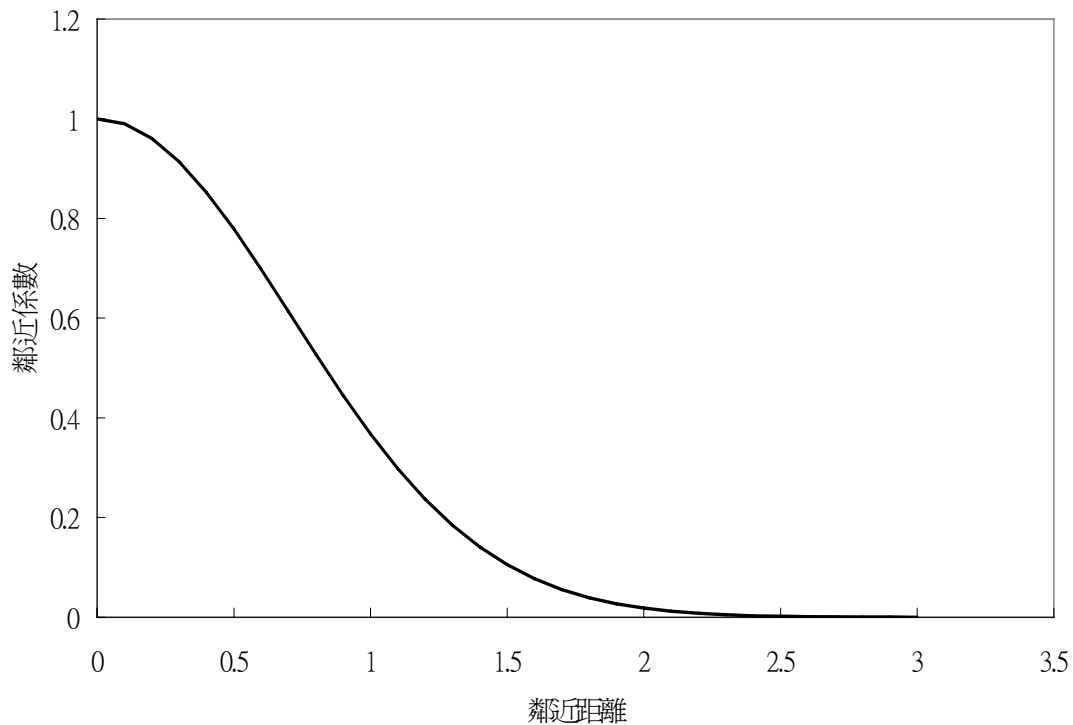


圖 2-4 自組織映射圖網路「鄰近函數」的觀念

2-3-2 分層聚類分析

分層聚類分析 (Hierarchical Cluster Analysis, HCA)，又譯為階層聚類分析，或層級聚類分析，是聚類分析中應用最廣泛的方法之一，凡具有數值特徵的變量和樣品都可以採用，選擇不同的距離和聚類方法可以獲得滿意的數值聚類效果。

階層聚類法是把個體逐個地合併成一些子集，直至整個整體都在一個集合之內為止。其聚類步驟如下：

1. 聚類前先對數據進行變換處理（假定在聚類處理之前，已經對變量進行了篩選。選擇了那些相關性不很顯著而且貢獻性很大的指標，而剔除了相關性很強的變量。）
2. 聚類分析處理的開始是各樣品自成一類（ n 個樣品一共有 n 類），計算各樣品之間的距離，並將距離最近的兩個樣品併成一類。
3. 選擇並計算類與類之間的距離，並將距離最近的兩類合併，如果類的個數大於 1，則繼續併類，直到所有樣品歸為一類為止。
4. 最後繪製階層聚類譜係圖，按不同的聚類標準或不同的聚類原則，得出不同的聚類結果。

階層聚類分析需要三個步驟的計算：

一、各數據的變換處理：

在聚類分析處理過程中，首先對原始數據矩陣進行變換處理。由於在抽取樣本對數據進行量度處理時，不同指標（變量）一般都有不同的量綱，並且有不同的數量級單位，為了使不同量綱、不同數量級的數據能放在一起比較，通常需要對數據進行變換處理。

不同變數型態的距離計算方式如下：

比率變數：先將比率變數取對數，再依區間變數方法處理。

區間變數：先將區間變數正規化成平均值為 0，分散度(標準差或平均絕對偏差)為 1。

順序變數：先將順序變數映射到[0,1]。

二元變數：先將二元變數表現成{0,1}。

名目變數：先將名目變數表現成二元的指標變數。

最常用的方法有

(1) 標準差正規化變換

首先對列進行中心化，然後用標準差進行標準化。即：

$$x'_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_j} \quad \begin{matrix} (i=1, 2, \dots, n) \\ (j=1, 2, \dots, m) \end{matrix} \quad (2-16)$$

其中：

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij} \quad ; \quad (2-17)$$

$$s_j = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_j)^2} \quad (j=1, 2, \dots, m) \quad (2-18)$$

通過變換處理後，每列數據的平均值為 0，方差為 1，使用標準化處理後，在抽樣樣本改變時，它仍保持相對穩定性。

(2) 平均絕對偏差正規化變換

首先對列進行中心化，然後用平均絕對偏差(mean absolute deviation)進行標準化。即：

$$s_j = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n |x_{ij} - \bar{x}_j| \quad (j=1, 2, \dots, m) \quad (2-19)$$

二、樣本間距離的計算：

聚類分析常用的距離有：

(1) 絕對值距離（即一階 Minkowski 距離，又稱 Manhattan 度量或網格度量）

$$d_{ij}(1) = \sum_{k=1}^m |x_{ik} - x_{jk}| \quad (i, j=1, 2, \dots, n) \quad (2-20)$$

(2) 歐氏距離（即二階 Minkowski 距離）

$$d_{ij}(2) = \left[\sum_{k=1}^m |x_{ik} - x_{jk}|^2 \right]^{1/2} \quad (i, j=1, 2, \dots, n) \quad (2-21)$$

(3) 明科夫斯基距離（即 q 階 Minkowski 距離）

$$d_{ij}(q) = \left[\sum_{k=1}^m |x_{ik} - x_{jk}|^q \right]^{1/q} \quad (i, j=1, 2, \dots, n) \quad (2-22)$$

(4) 相關係數

在 n 維空間中（ n 個樣品）向量 x_i 與 x_j 的角度為 x_{ij} ，則夾角餘弦為：

$$\gamma_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^n (x_{ki} - \bar{x}_i)(x_{kj} - \bar{x}_j)}{\left\{ \left[\sum_{k=1}^n (x_{ki} - \bar{x}_i)^2 \right] \left[\sum_{k=1}^n (x_{kj} - \bar{x}_j)^2 \right] \right\}^{1/2}} \quad (2-23)$$

當 $i = j$ 時， $\gamma_{ii} = 1$ ；當 $i \neq j$ 時， $-1 \leq \gamma_{ij} \leq 1$ 。

三、聚類間距離的計算

階層聚類法的基本算法是將 n 個樣品自成一類，先計算 $1/2(n-1)n$ 個相似性測度，並且把具有最小測度的量個樣品合併成兩個元素的類，然後按照某種聚類方法計算這類和其餘 $n-2$ 個樣品之間的距離，這樣一直持續下去，併類過程中，每一步所做的併類（樣品與樣品，樣品與類、類與類）都要使測度在系統中保持最小，這樣每次減少一類，直至所有樣品都歸為一類為止。

常用的聚類間距離的計算方法有五種，包括

1. Single Linkage (最小距離法)：一個聚類中的樣本與另一個聚類中的樣本的距離中之最小值。本法傾向形成帶狀聚類。此外，因聚類距離由所有樣本配對距離的最小值決定，故對例外樣本較敏感。
2. Complete Linkage (最大距離法)：一個聚類中的樣本與另一個聚類中的樣本的距離之最大值。本法傾向形成空間直徑相近的聚類。此外，因聚類距離由所有樣本配對距離的最大值決定，故對例外樣本較敏感。
3. Average Linkage (平均距離法)：一個聚類中的樣本與另一個聚類中的樣本的距離之平均值。本法因聚類距離由所有樣本配對距離的平均值決定，故對例外樣本較不敏感。
4. Median Linkage (中位距離法)：一個聚類中的樣本與另一個聚類中的樣本的距離之中位值。本法因聚類距離由所有樣本配對距離的中位值決定，故對例外樣本最不敏感。
5. Centroid Linkage (形心距離法)：一個聚類的形心與另一個聚類的形心的距離。本法因聚類距離由聚類形心間的距離決定，故對例外樣本較不敏感。
6. Ward Linkage (總合距離法)：二個聚類中的樣本與二個聚類的共同形心的距離的平方和。本法傾向形成樣本數目相近的聚類。本法因聚類距離由所有樣本對新聚類形心的距離平方和決定，故對例外樣本較不敏感。

以最小距離法為例，設 d_{ij} 表示樣品 x_i 與 x_j 之間的距離。設 D_{ij} 表示聚類 G_i 與 G_j 之間的距離。最小距離法是把兩個類之間的距離定義為一個類的所有個體與另一個類的所有個體之間的距離的最小者。即類 G_p 與類 G_q 之間的距離 D_{pq} 定義為：

$$D_{pq} = \min_{x_i \in G_p, x_j \in G_q} d_{ij} \quad (2-24)$$

最小距離法的聚類步驟是：

- (1) 計算樣品之間的距離，得一距離矩陣 $D(0)$ ，這時每個樣品自成一類，顯然有 $D_{pq} = d_{pq}$
- (2) 尋找 $D(0)$ 的非主對角線上的最小元素，設為 D_{pq} ，則將 G_p 與 G_q 合併成一新類，記為 G_r ，即 $G_r = \{G_p, G_q\}$ 。
- (3) 計算新類與其它類的距離：

$$D_{rk} = \min_{x_r \in G_r} d_{rj} = \min \left\{ \min_{x_i \in G_p} d_{ij}, \min_{x_i \in G_q} d_{ij} \right\} = \min \{ D_{pk}, D_{qk} \} \quad (2-25)$$

$$x_j \in G_k \quad x_j \in G_k \quad x_j \in G_k$$

所得到的距離矩陣記為 $D(1)$ 。

對 $D(1)$ 重複施行對於 $D(0)$ 的步驟得 $D(2)$ ，由 $D(2)$ 按同樣的步驟計算得 $D(3)$ … 這樣直到所有樣品都成一類為止。

2-4 類神經網路的模式

類神經網路 (Artificial Neural Networks)，是指模仿生物神經網路的資料處理系統。類神經網路較精確的定義為：「類神經網路是一種計算系統，包括軟體及硬體，它使用大量簡單的相連人工神經元來模仿生物神經網路的能力。人工神經元是生物神經元簡單的模擬，它是由外界環境或者其他人工神經元取得資訊，並加以非常簡單的運算，並輸出其結果到外界環境或者其他人工神經元。」

類神經網路是由許多人工神經元 (artificial neuron) 所組成，人工神經元又稱處理單元 (processing element)。每一個處理單元的輸出，成為許多單元的輸入。處理單元其輸出值與輸入值之間的關係式，一般可用輸入值的加權乘積和之函數來表示，公式如下：

$$Y_j = f\left(\sum_i W_{ij} X_i - \theta_j\right) \quad (2-26)$$

其中 Y_j = 模仿生物神經元模型的輸出訊號； f = 模仿生物神經元模型的轉換函數； W_{ij} = 模仿生物神經元模型的神經結強度，又稱連結加權值； X_i = 模仿生物神經元模型的輸入訊號； θ_j = 模仿生物神經元模型的閾值。

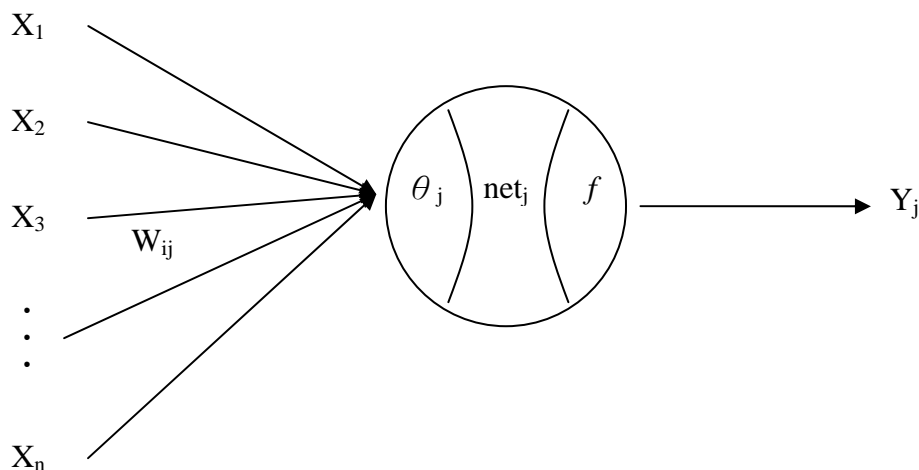


圖 2-5 人工神經元模型

介於處理單元間的訊號傳遞路徑稱為連結 (connection)。每一個連結上有一個數值的加權值 W_{ij} ，用以表示第 i 個處理單元對第 j 個處理單元之影響強度。一個類神經網路是由許多個人工神經元與其連結所組成，並且可以組成各種網路模式 (network model)。其中以「倒傳遞網路」 (Back-propagation Networks, BPN) 應用最為普遍。一個 BPN 包含許多層，每一層包含若干個處理單元。輸入層處理單元用以輸入外在的環境訊息，輸出層處理單元用以輸出訊息給外在環境。此

外，另包含一重要之處理層，稱為隱藏層(hidden layer)，隱藏層提供神經網路各神經元交互作用，與問題的內在結構處理能力。由於神經網路具有模擬平行處理、訊號分散式儲存、高度容錯性和自我學習能力等特性，目前已被廣泛地提出來研究與應用。

BPN 倒傳遞網路為目前應用最廣的類神經網路模型，且最具代表性的類神經網路模式，屬於前向式網路架構，為一種監督式網路。其基本原理是利用最陡坡降法(the gradient steepest descent method)的觀念，將誤差函數予以最小化。

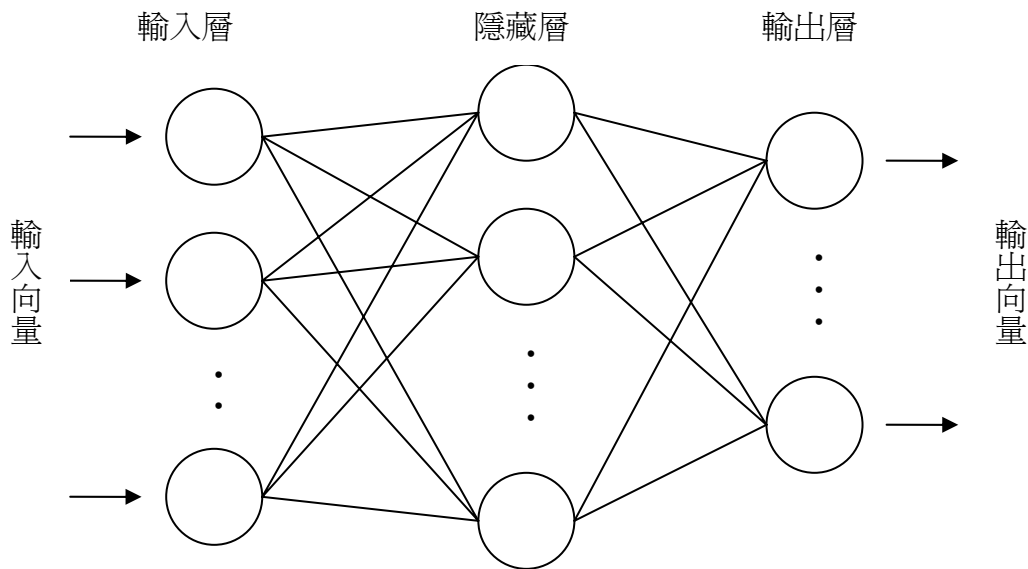


圖 2-6 BPN 倒傳遞網路模型

其中隱藏層及輸出層神經元之轉換函數為雙彎曲函數(sigmoid function)。

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2-27)$$

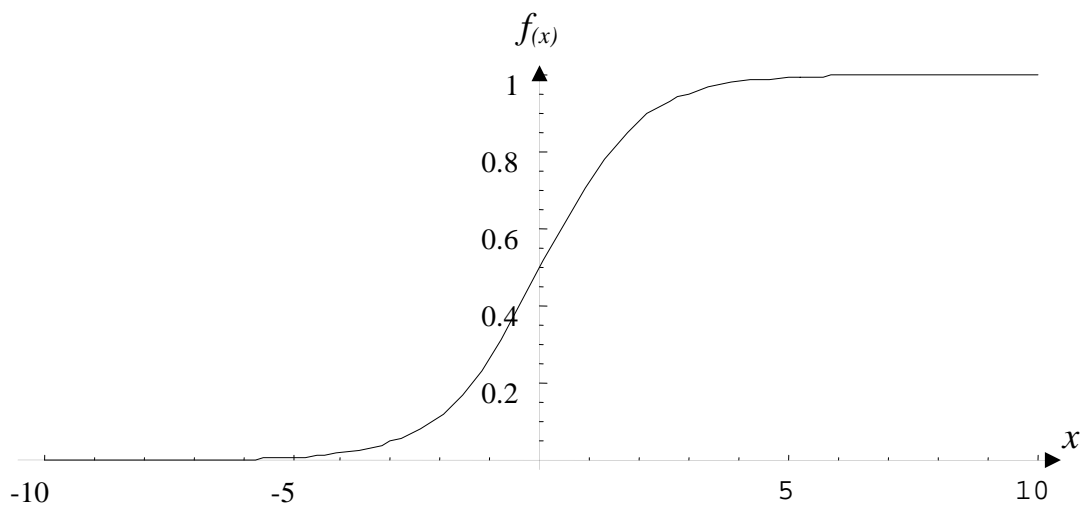


圖 2-7 隱藏層輸出層非線性轉換函數

2-5 混凝土最佳配比設計與材料行為建模問題

高性能混凝土或傳統混凝土的最佳配比設計方面，國內、外都有相當多的研究報告。近年來使用類神經網路於混凝土材料行為建模的研究相當多[10-21]，均指出類神經十分適合建構具有高度非線性性質的混凝土材料行為模型。以下將分別介紹國內外研究成果。

(一) 國外相關研究

Abbasi 等人[05]爲了最佳化混凝土配比，建立混凝土工作度及強度模型。爲了降低試驗的數量，但並不犧牲存在於因子間的交互作用，以因子設計法做爲模型的建構工具，探討的因子包括 W/C(水灰比)、CA/TA(粗骨材對總骨材比)、TA/C(總骨材對水泥比)等三個因子，並以迴歸分析建構出一個二次方程式的強度模型，及簡單的三次方程式工作度模型。

James [22]使用粗骨材因子、水泥砂漿因子及骨材粒徑分佈爲基礎，對混凝土配比最佳化進行研究。

Larrard 等人[23]以半理論方式建構高性能混凝土的工作度模型、強度模型、勁度模型、最大理論堆積密度模型，並加以整合，發展出一套名爲 BETONLAB 的高性能混凝土配比設計最佳化軟體。

Kasperkiewicz [24]以試算表軟體發展混凝土最佳配比設計系統。此系統以強度及工作度爲輸入變數，以最低成本爲目標函數，將規範表格中的水灰比與強度關係，及用水量與各成份表面積的關係迴歸成方程式，加上絕對體積限制的方程式，構成傳統混凝土的最佳配比設計系統。

Khayat 等人[25]使用因子設計的方法在給定五項變數時，成功的建立水中混凝土的工作度及抗壓強度的模型。這五項變數分別是膠結料用量、水膠比、砂對總骨材比、以及兩種不同效果的添加劑用量。研究結果顯示，在給定這五項變數一定的區間範圍時，變數之間具有極具影響配比模型的交互作用。在研究中，以等高線圖探討各變數對工作度、抗壓強度的影響。在成本分析中，也成功的展現了在不同的配比需求下，經濟的配比設計。這個研究成功的建立一個有用的數學模型，提供使用者在設計水中混凝土配比設計時一個有用的設計工具。

Ghezal 等人[26]以反應曲面法最佳化具有含 limestone filler 等四種成份，滿足包括坍流度、1 天及 28 天強度等八個效能準則的自填充混凝土配比設計。結果顯示，反應曲面法所產生的設計模式是一個產生考量成本效益下最佳化配比設計的有效方法。

Sonbei 等人[27]以二水準因子設計法建構包含五個獨立變數的自填充混凝土材料行為模式。這五個獨立變數包括 limestone power 比例、砂比例、強塑劑用量、viscosity agent 用量、水膠比。考慮的材料行為包括坍度、1 天及 28 天強度等。研究結果指出，所產生的模型確實能夠提供設計低抗壓強度自填充混凝土配比有用資訊。

Sonbei [28]爲了設計低成本中等強度自填充混凝土材，以因子設計法建構包含四個獨立變數的自填充混凝土材料行為模式。這四個獨立變數包括水泥用量、PFA 飛灰用量、水膠比、強塑劑用量。考慮的材料行為包括坍流度、7 天、28 天及 90 天抗壓強度等。研究結果指出，所產生的模型確實能夠提供設計中抗壓強度自填充混凝土配比有用資訊。

(二) 國內相關研究

顏聰、張朝順[29]指出由不同材料與比例所製造的混凝土成本必然互異，於合乎強度及其它工作性質需求條件規範下，如何調整其配比以製得最低成本的混凝土，是配比設計及製造供應商一致追求的目標。本文即基於拌合材料成本，試圖提供一簡易且爲可以量化的配比方法，以充實目前概略、模糊地衡量混凝土經濟性之方式。

葉怡成[30]提出一個在指定的工作度與強度下，使用類神經網路與非線性規劃之高性能混凝土

土配比設計最佳化的方法。它包括三個步驟：(1)利用實驗數據與類神經網路建構精確的工作度與強度模型，(2)將此模型整合在一個可以評估給定配比下混凝土特定性質的軟體，(3)將此軟體與一個可以搜尋最佳配比設計的非線性規劃軟體整合，並以一個實驗計劃驗證此一方法的可用性。結果顯示，本研究是一個可行的高性能混凝土配比設計最佳化方法。

柯泰至[31]為建立一精確的工作度預測模型，以單體形心設計做實驗設計工具，以迴歸分析及類神經網路為模型建構工具，最後以實驗驗證，檢驗模型之可信度。結果顯示，(1)類神經網路為較理想之建構工具，(2)在工作度的影響因子中，以強塑劑之曲率作用，及水與強塑劑間之交互作用之影響最大，(3)在模型之可預測性上，以坍度及坍流度有一定程度的預測性，坍流時間沒有可預測性。

陳怡成[32]以適合建構非線性模型的類神經網路取代傳統的迴歸分析，做為模型建構工具。再者，混凝土配比設計時由於使用的材料眾多，各材料價格亦會隨物價波動而變化，以往配比設計進行時通常只考慮強度與工作度，忽略經濟性，因此本研究考慮各項使用材料成本，設計出成本最低之高性能混凝土之配比。結果顯示，本研究所設計之配比大致上均能滿足強度與工作度之需求，且成本低於傳統混凝土，證明本文所提之方法是高性能混凝土配比設計之一個具潛力的新方法。

張清雲[33]以舊有建築物拆除後之廢棄混凝土塊作為再生骨材之料源，並利用實驗計劃法來探討再生混凝土的最適化配比設計，於再生混凝土材料中設定因子為水灰比、細骨材率、天然砂取代量、紅磚含量、潔淨程度等五種，並假設彼此間有交互作用，各採二個水準，按 L16 直交表配置試驗。以進行抗壓試體製作並測定其坍度，且於 7 天、14 天及 28 天齡期時分別量測其超音波值、電阻值及抗壓強度。利用變異數分析檢定其是否有交互作用存在及顯著程度。經由回應圖及貢獻率之分析來推定其最適化的材料組合。經確認試驗顯示其坍度與抗壓強度皆可達一般混凝土之要求。

陳家偉[34]研究建構工作度之經驗模型的方法。一般建構經驗模式之主要工具為迴歸分析。然由於高性能混凝土配比材料用量與工作度之關係為複雜曲線關係，迴歸分析可能不足以建構準確之模型，因此，研究亦使用類神經網路做為工具，結果顯示：(1)建構高性能混凝土工作度模型係一可行之研究，且模型具相當之準確性；(2)以類神經網路建構高性能混凝土工作度模型遠優於以迴歸分析建構模型；(3)篩選有問題的實驗點，以獲得可靠之實驗數據，對建構精確之模型有相當大的助益。

許慶安[35]以七天強度及水泥用量、拌合水用量、細骨材用量、粗骨材六分料用量、粗骨材三分料用量、附加劑用量、W/C 及 F.M.計有九項變數做為輸入變數；進行二十八天齡期抗壓強度之推估預測。結果顯示，採用類神經網路推估模式之相關係數與準確度均優於傳統的統計回歸分析方法，其推估值與真實值之相關係數達 0.983。

詹君治[36]使用非監督式模糊類神經網路(UFN)模擬工程師的邏輯思考方式，發展混凝土配比設計數學模型。研究中先以模糊數學產生水灰比，再以強度與水灰比等參數作為 UFN 之輸入變數，經比對、模糊推理等計算步驟產生水泥用量與水泥與系骨材重量比。研究結果發現，UFN 可有效預測混凝土配比設計。

葉怡成[37]指出飛灰與爐灰混凝土是一種高度複雜的材料，以致於模式化其行為變得相當地困難。因此提出一個使用類神經網路來模式化飛灰與爐灰混凝土強度的方法。強度被視為齡期與所有成分，包括水泥、飛灰、爐灰、水、強塑劑、粗骨材、細骨材的函數。並探討在具有不同的飛灰與爐灰替代百分下，飛灰與爐灰混凝土的強度行為，結果顯示，飛灰與爐灰用量與強度的關係程度有滿意的結果。

田耀遠[38]以田口方法進行再生混凝土與本土化高性能混凝土的配比設計與交互作用的探討，發現田口方法確能節省實驗時間與成本，並能充分掌握控制因子及交互作用對品質特性的影

響。研究結果顯示，再生混凝土的控制因子中，僅有紅磚含量對品質特性的影響很小，控制因子間確實存在有交互作用，並且交互作用的貢獻度相當大，有些甚至超過 50%；本土化高性能混凝土的控制因子中，以飛灰用量影響最大，細骨材率次之，控制因子間亦存在交互作用，會影響控制因子的組合水準。

三、基於 D-Optimal 之配比實驗設計

3-1 導論

高性能混凝土配比實驗設計的每個候選點必須滿足三種配比設計的限制：

- 1.各成份上下限限制
- 2.各成份間比例限制
- 3.絕對體積限制

HPC 的成份上下限限制如下：

$$W_C^{\min} \leq W_C \leq W_C^{\max} \quad (3-1)$$

$$W_F^{\min} \leq W_F \leq W_F^{\max} \quad (3-2)$$

$$W_S^{\min} \leq W_S \leq W_S^{\max} \quad (3-3)$$

$$W_W^{\min} \leq W_W \leq W_W^{\max} \quad (3-4)$$

$$W_{SP}^{\min} \leq W_{SP} \leq W_{SP}^{\max} \quad (3-5)$$

$$W_{CA}^{\min} \leq W_{CA} \leq W_{CA}^{\max} \quad (3-6)$$

$$W_{FA}^{\min} \leq W_{FA} \leq W_{FA}^{\max} \quad (3-7)$$

其中

W_C^{\min} 、 W_F^{\min} 、 W_S^{\min} 、 W_W^{\min} 、 W_{SP}^{\min} 、 W_{CA}^{\min} 、 W_{FA}^{\min} 為水泥、飛灰、爐石粉、水、強塑劑、粗骨材、細骨材使用量之下限；

W_C^{\max} 、 W_F^{\max} 、 W_S^{\max} 、 W_W^{\max} 、 W_{SP}^{\max} 、 W_{CA}^{\max} 、 W_{FA}^{\max} 為水泥、飛灰、爐石粉、水、強塑劑、粗骨材、細骨材使用量之上限；

各種成份使用量之上下限反應了混凝土配比設計的規範及經驗。詳細的條件限制範圍見表 3-1。

表 3-1 單位重量成本、用量限制、成份比重表

成份	單位重量成本	下限 (kg/m ³)	上限 (kg/m ³)	比重	1/比重
水泥	2.25	140	350	3.15	0.3175
飛灰	0.6	0	200	2.22	0.4505
爐石粉	1.2	0	240	2.85	0.3509
水	0.01	150	250	1.00	1.000
強塑劑	25.1	3	15	1.20	0.8333
粗骨材	0.236	780	1050	2.54	0.3937
細骨材	0.28	640	900	2.55	0.3922

HPC 的成份比例限制如下：

$$R_1^{\min} \leq R_1 \leq R_1^{\max} \quad (3-8)$$

$$R_2^{\min} \leq R_2 \leq R_2^{\max} \quad (3-9)$$

$$R_3^{\min} \leq R_3 \leq R_3^{\max} \quad (3-10)$$

$$R_4^{\min} \leq R_4 \leq R_4^{\max} \quad (3-11)$$

$$R_5^{\min} \leq R_5 \leq R_5^{\max} \quad (3-12)$$

$$R_6^{\min} \leq R_6 \leq R_6^{\max} \quad (3-13)$$

$$R_7^{\min} \leq R_7 \leq R_7^{\max} \quad (3-14)$$

$$R_8^{\min} \leq R_8 \leq R_8^{\max} \quad (3-15)$$

$$R_9^{\min} \leq R_9 \leq R_9^{\max} \quad (3-16)$$

其中

$$R_1 = (W_W + W_{SP}) / W_C \quad (3-17)$$

$$R_2 = (W_W + W_{SP}) / (W_C + W_F + W_S) \quad (3-18)$$

$$R_3 = (W_W + W_{SP}) / (W_C + W_F + W_S + W_{CA} + W_{FA}) \quad (3-19)$$

$$R_4 = W_{SP} / (W_C + W_F + W_S) \quad (3-20)$$

$$R_5 = W_F / (W_C + W_F + W_S) \quad (3-21)$$

$$R_6 = W_S / (W_C + W_F + W_S) \quad (3-22)$$

$$R_7 = (W_F + W_S) / (W_C + W_F + W_S) \quad (3-23)$$

$$R_8 = (W_{CA} + W_{FA}) / (W_C + W_F + W_S) \quad (3-25)$$

$$R_9 = W_{FA} / (W_{CA} + W_{FA}) \quad (3-26)$$

其中

R_1 為水灰比；

R_2 為水膠比；

R_3 為水固比；

R_4 為強塑劑與膠結料之比例；

R_5 為飛灰佔膠結料之比例；

R_6 為爐石粉佔膠結料之比例；

R_7 為灰飛與爐石粉之總量佔膠結料之比例；

R_8 為粗骨材之總量對膠結料之比例；

R_9 為細骨材佔粗骨材總量之比例。

詳細的條件限制範圍見表 3-2。

配比設計問題的特點為材料組成的總體積需符合一常數。在混凝土配比設計中，由於混凝土是按體積計價，通常以立方公尺為單位，因此配比設計時需符合體積總和為一立方公尺的限制：

$$\frac{W_C}{G_C} + \frac{W_F}{G_F} + \frac{W_S}{G_S} + \frac{W_W}{G_W} + \frac{W_{SP}}{G_{SP}} + \frac{W_{CA}}{G_{CA}} + \frac{W_{FA}}{G_{FA}} = 1000 \quad (3-27)$$

其中 G_C 、 G_F 、 G_S 、 G_W 、 G_{SP} 、 G_{CA} 、 G_{FA} 為水泥、飛灰、爐石粉、水、強塑劑、粗骨材、細骨材之比重。

上述公式等於 1000 是因為本配比之設計是要求 1 立方公尺混凝土所需之重量，重量(W)除以比重(G)所得之數值，為該成份所佔之體積，以公升為單位，其總和須為 1 立方公尺，即 1000 公升。

表 3-2 各種成份間用量的比例限制

比例	下限	上限
R_1 (水灰比)	0.60	1.60
R_2 (水膠比)	0.30	0.70
R_3 (水固比)	0.08	0.12
R_4 (強塑劑與膠結料之比例)	0.013	0.04
R_5 (飛灰佔膠結料之比例)	0.00	0.55
R_6 (爐石粉佔膠結料之比例)	0.00	0.60
R_7 (飛灰與爐石粉之總量對膠結料之比例)	0.25	0.70
R_8 (粗細骨材之總量對膠結料之比例)	2.70	6.40
R_9 (細骨材佔粗細骨材總量之比例)	0.40	0.52

3-2 方法

研究的流程如下述幾個步驟：

一、收集文獻實驗數據

收集具有實驗數據的相關文獻[31,32,34]。由於文獻的數據單位、混凝土養護天數不盡相同，因此需將數據加以整理。在強度方面，由於養護天數包含 3 天到 365 天共 1030 筆，選取 28 天的數據共 425 筆，而坍度部分總共有 103 筆。

二、建立基準預測模型

由於選取的實驗點從 20 點到 100 點都有。當選取 100 個實驗點時，為了避免實驗所產生的誤差，每一個實驗點要作五個試體，總計要作 500 個試體，需要很長的時間與高昂的成本。為了不進行實驗也能夠模擬出與實驗相近的反應值，因此在建立模擬實驗點的基準預測模型，使用文獻的數據來建立。在建構模型方面，由於類神經網路在模型建構、模擬預測值的部分有良好的成果，因此建構模型的工具採用類神經網路。

詳細的建立過程如下：

- (1) 首先將步驟一得到的實驗數據進行隨機排序。
- (2) 在強度部分，將數據的前 300 筆做訓練範例，後 125 筆做測試範例；在坍度部份，將數據的前 80 筆做訓練範例，後 25 筆做測試範例，使用 PCNeuron 3.1 類神經網路軟體[3]建立基準預測模型。
- (3) 將網路參數設定最佳化，得到測試範例誤差均方根為 843 psi 的強度模型與 5.19 cm 的坍度模型。

三、產生候選點

所有的候選點必須滿足本章導論所提到的成份上下限、比例限制以及絕對體積限制。候選點的產生可利用試算表，數據的產生過程如下：

- (1) 創造出滿足水泥、飛灰、爐石粉、水、強塑劑、粗骨材等六成份的重量上下限約一萬筆。
- (2) 接著將重量單位轉換成體積單位，利用體積總合為 1000 的限制來決定細骨材的體積用量，在將細骨材用量超過體積成份上下限的筆數給刪除。
- (3) 接下來利用逐步刪去法從 R_1 開始將不符合比例限制的項目給刪除直到 R_9 為止，最後總共會產生 1934 筆。
- (4) 再將體積單位轉回重量單位，所產生的結果如表 3-3 所示。

表 3-3 符合限制的 1934 筆候選點

	C (kg)	F (Kg)	S (kg)	W (kg)	SP (kg)	CA (kg)	FA (kg)	強度 (psi)	坍塌 (cm)
1	165.8	94.7	160.8	196.4	13.1	912.3	718.4		
2	289.0	65.5	135.5	208.9	11.0	812.2	748.0		
3	322.4	31.7	143.9	184.4	10.1	833.6	795.2		
4	271.1	32.6	136.9	171.6	14.2	929.3	769.9		
5	311.8	45.1	120.3	205.7	14.7	792.3	786.7		
6	259.8	145.3	93.5	210.0	14.1	863.9	656.4		
7	175.2	170.5	158.3	165.4	13.3	965.3	651.6		
8	145.3	70.9	186.1	194.5	12.8	877.8	780.2		
9	176.4	8.9	227.5	171.3	14.0	971.8	751.2		
10	260.6	104.2	119.0	222.1	11.8	854.4	663.7		
11	271.9	191.2	57.8	174.3	9.1	923.9	667.2		
12	279.7	73.9	58.0	219.5	13.8	784.5	810.2		
13	165.8	94.7	160.8	196.4	13.1	912.3	718.4		
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		
1934	253.3	77.6	199.3	175.0	14.0	865.0	733.1		

四、產生實驗點

當實驗數目減少的時候，對於實驗的預測模型會造成一定程度的影響。反過來說，在設計實驗點的時候便要考慮到底要多少個實驗點，才能讓預測模型達到足夠的準確度。然而，為了讓模型誤差縮小，往往卻使實驗點數增加，因此本研究目的之一，盡可能的減少實驗點數目卻不會影響模型準確。

本章採用二階的 D-Optimal 最佳準則法選取實驗點，使用的軟體為 Design-Expert Version 6.0.3，候選點來自步驟三的 1934 筆數據，選取的實驗點數包含 20 點、30 點、40 點、50 點、100 點，其中 20 點的 D-Optimal 設計低於七成份因子的最低點數 28 點，故取消跟粗、細骨材有交互作用的項目。以 20 點為例篩選的結果如表 3-4 所示。

表 3-4 利用 D-Optimal 選取出的 20 筆實驗點

	C (kg)	F (kg)	S (kg)	W (kg)	SP (kg)	CA (kg)	FA (kg)	強度 (psi)	坍塌 (cm)
1	313.5	11.8	235.1	174.9	13.6	866.0	727.9		
2	166.0	10.3	230.4	165.3	11.2	852.4	896.5		
3	166.4	140.5	210.1	164.4	14.9	926.6	684.9		
4	161.3	169.3	166.9	164.7	7.2	824.2	813.1		
5	240.3	2.8	81.6	204.5	4.3	852.7	892.7		
6	319.0	186.6	23.1	221.8	14.9	815.1	641.2		
7	158.1	129.3	15.5	171.6	4.8	1035.5	772.3		
8	317.3	14.5	105.7	182.0	15.0	973.9	708.1		
9	266.4	4.1	179.9	168.6	6.1	1013.3	708.6		
10	148.4	21.9	170.4	228.3	6.8	966.6	685.2		
11	157.9	69.0	238.9	221.9	14.5	829.0	700.3		
12	164.3	145.3	64.1	220.8	14.9	862.3	732.5		
13	145.0	196.8	124.4	222.7	7.3	791.6	717.1		
14	309.2	101.1	4.6	231.4	5.5	932.4	641.4		
15	346.2	4.3	149.1	227.2	9.9	847.6	680.3		
16	279.7	196.1	13.3	159.2	12.7	845.5	804.5		
17	244.8	148.1	151.2	202.2	7.2	848.0	664.3		
18	144.7	96.3	49.2	173.2	9.7	919.4	892.8		
19	331.0	90.8	47.2	200.4	14.0	781.6	810.3		
20	260.9	199.3	26.7	182.9	14.3	936.9	648.5		

五、模擬實驗值

將第四步驟所篩選出來的實驗點代入第二步驟的基準預測模型來模擬強度以及坍塌。以 20 點為例模擬的結果如表 3-5 所示。

六、建立實驗預測模型

將第五步驟所得到的模擬實驗值當作類神經網路的訓練範例，用來建立基準預測模型的文獻數據當作類神經網路的測試範例，建構實驗預測模型。

表 3-5 利用基準預測模型模擬 20 筆實驗點的強度以及坍塌結果

	C (kg)	F (kg)	S (kg)	W (kg)	SP (kg)	CA (kg)	FA (kg)	強度 (psi)	坍塌 (cm)
1	313.5	11.8	235.1	174.9	13.6	866.0	727.9	6726	0
2	166.0	10.3	230.4	165.3	11.2	852.4	896.5	4301	0
3	166.4	140.5	210.1	164.4	14.9	926.6	684.9	5876	0
4	161.3	169.3	166.9	164.7	7.2	824.2	813.1	6708	0
5	240.3	2.8	81.6	204.5	4.3	852.7	892.7	3115	20.01
6	319.0	186.6	23.1	221.8	14.9	815.1	641.2	5575	25.95
7	158.1	129.3	15.5	171.6	4.8	1035.5	772.3	3646	17.06
8	317.3	14.5	105.7	182.0	15.0	973.9	708.1	5823	16.72
9	266.4	4.1	179.9	168.6	6.1	1013.3	708.6	6124	0
10	148.4	21.9	170.4	228.3	6.8	966.6	685.2	2566	24.94
11	157.9	69.0	238.9	221.9	14.5	829.0	700.3	2229	8.072
12	164.3	145.3	64.1	220.8	14.9	862.3	732.5	3398	26.73
13	145.0	196.8	124.4	222.7	7.3	791.6	717.1	4212	24.84
14	309.2	101.1	4.6	231.4	5.5	932.4	641.4	4920	20.74
15	346.2	4.3	149.1	227.2	9.9	847.6	680.3	4442	23.01
16	279.7	196.1	13.3	159.2	12.7	845.5	804.5	8372	16.43
17	244.8	148.1	151.2	202.2	7.2	848.0	664.3	5682	10.2
18	144.7	96.3	49.2	173.2	9.7	919.4	892.8	3380	20.06
19	331.0	90.8	47.2	200.4	14.0	781.6	810.3	6514	23.49
20	260.9	199.3	26.7	182.9	14.3	936.9	648.5	6248	22.62

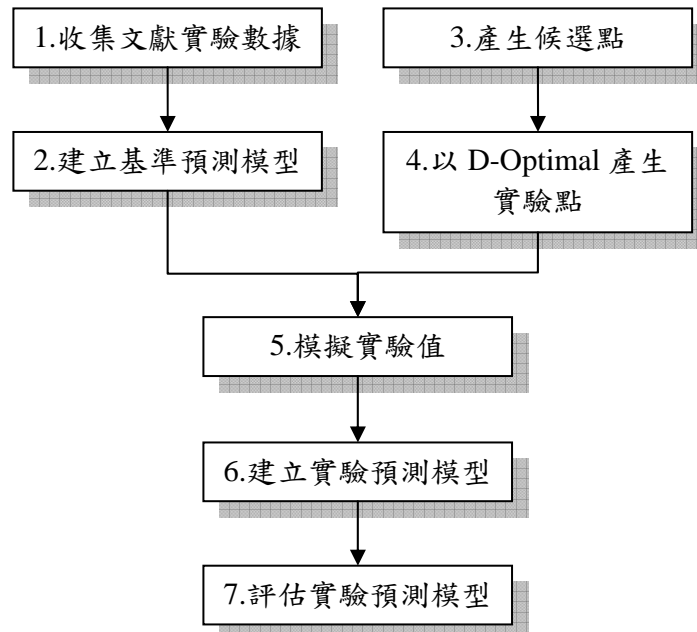


圖 3-1 D-Optimal 的研究流程

七、評估實驗預測模型

將各個五種不同筆數的實驗預測模型來進行評估，針對其收斂圖、散佈圖以及誤差均方根來進行比較。

3-3 結果

從圖 3-2 可以得知基準預測模型的收斂圖與散佈圖，以收斂圖來看，強度最佳收斂大約在 1500 次，坍塌則是 990 左右；以散佈圖來看，強度模型約以 45 度角對稱呈現，坍塌部分在低坍塌度有預測偏高的情形，在高坍塌度則有略偏低預測的情形。

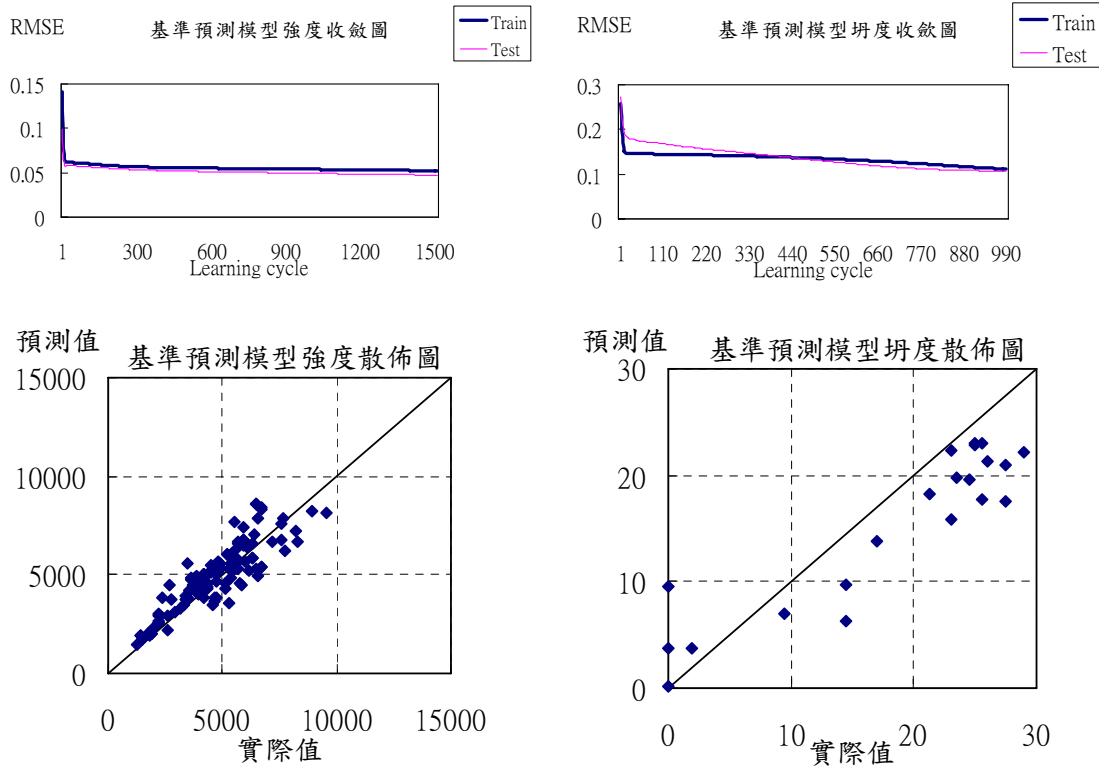


圖 3-2 為強度、坍塌度的基準預測模型收斂圖與散佈圖

由圖 3-3 可以得知，不論是強度模型還是坍塌模型，其訓練誤差均方根都遠小於測試部分。此外，強度的測試誤差均方根大多在低學習循環便沒有明顯的下降趨勢；坍塌度的測試誤差均方根大約在 6000 次循環便沒有明顯下降趨勢。而實驗點數目對於收斂圖的似乎有些微影響，當實驗點數目越多的模型，其測試誤差均方根越早呈現收斂趨勢。

由圖 3-4 可以得知，強度在 0~5000 psi 之間，當強度越小其誤判為高強度的情形越多；強度在 5000~10000 psi 之間的預測值較看不出其偏態；強度在 1000~15000 psi 之間，近乎所有的預測值皆偏低。坍塌度在 0~10cm 之間，近乎所有的預測值皆偏高；坍塌度在 10~20cm 之間，預測的結果略為偏高；坍塌度在 20~30cm 之間，其預測值則是有偏低的情況。當實驗點數目越多，強度模型散佈點越集中 45° 線。比起強度模型，坍塌度的散佈圖較為分散，而且實驗點數目對模型的影響似乎不明顯。

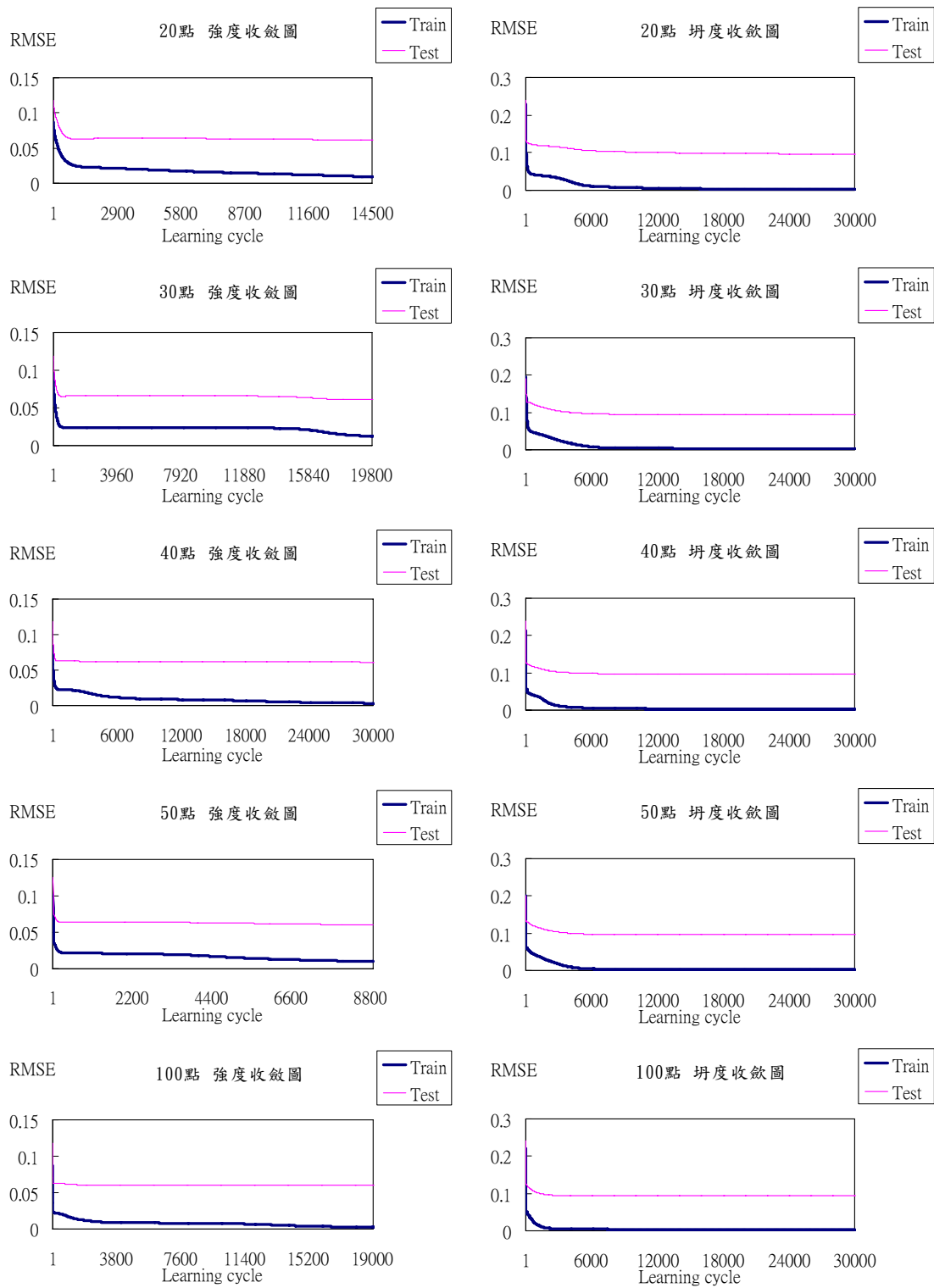


圖 3-3 為不同實驗筆數下的強度、坍度模型收斂圖

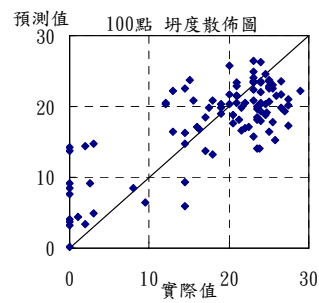
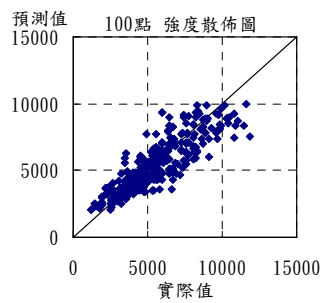
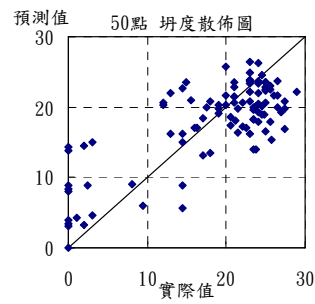
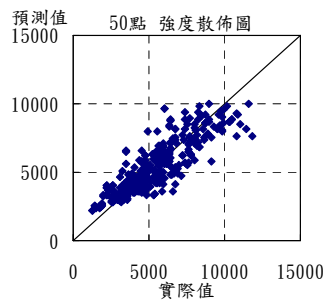
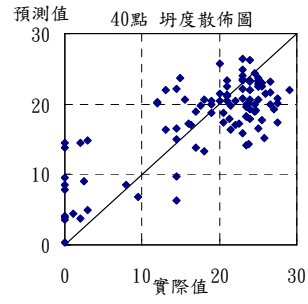
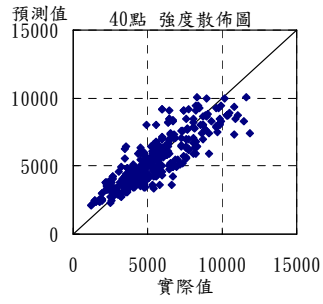
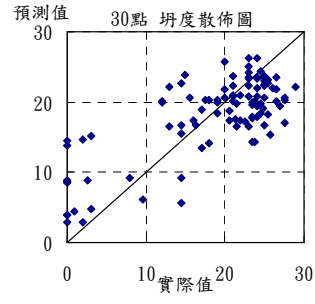
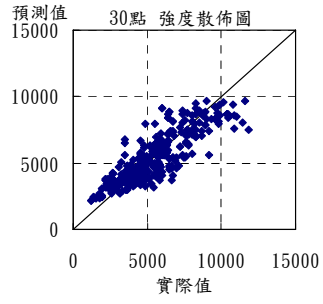
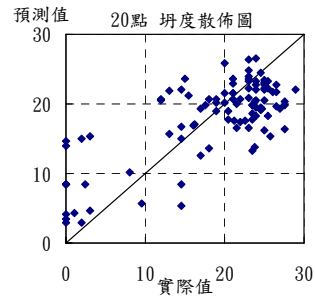
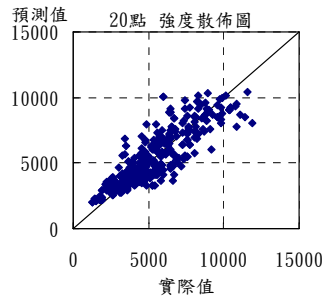


圖 3-4 為各個候選點的強度、坍塌度散佈圖

由表 3-6 可以得知，當實驗點數目越多的情況下，實驗預測模型的誤差均方根越接近基準預測模型。

表 3-6 為各模型的誤差均方根

實驗預測模型						基準 預測 模型
實驗點 數目	20	30	40	50	100	
強度 (psi)	1097	1077	1082	1074	1060	843
坍塌 (cm)	5.48	5.38	5.37	5.39	5.36	5.19

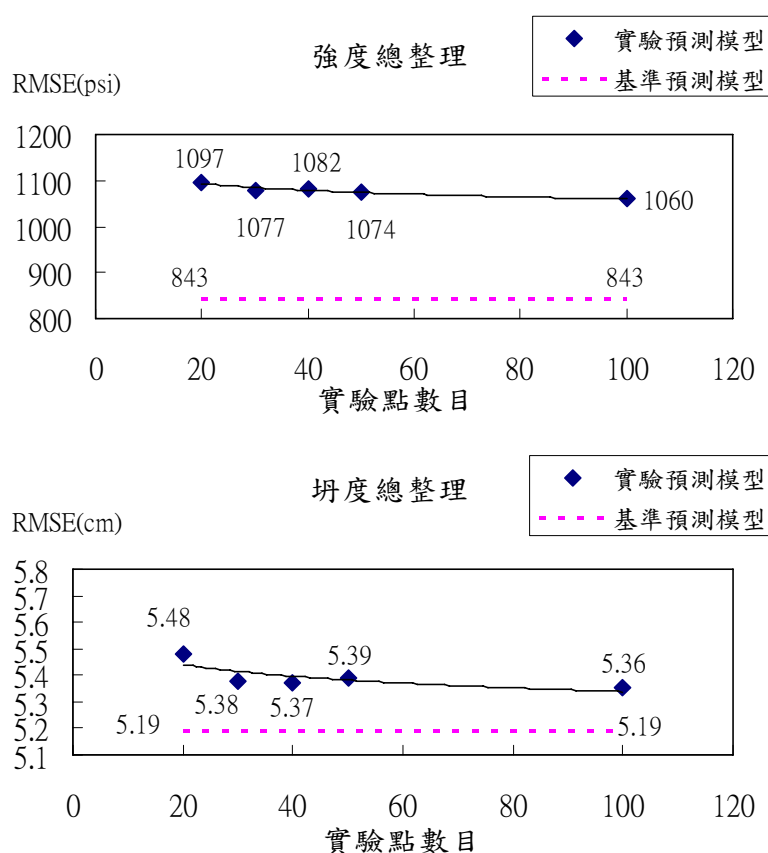


圖 3-5 為實驗預測模型與基準預測模型的強度、坍塌度整理圖

3-4 討論與結論

1. 實驗點數目對於模型的影響為何?

以上節的結果來看，實驗點數目的多寡對模型的影響似乎並沒有預期中來的重大，由圖 3-5 來看，強度的 20 點模型與 100 點模型相差約為 3.4%；坍塌度的 20 點模型與 100 點模型相差約為 2.3%。

因為類神經網路有很強的建模能力，因此基準預測模型的誤差均方根可視為難以消除的純誤差，故將所有的實驗預測模型的誤差均方根扣除基準預測模型的誤差均方根產生表 3-7。

表 3-7 為扣除基準預測模型的實驗預測模型

實驗點數目	20	30	40	50	100
強度(psi)	254	234	239	231	217
坍塌度(cm)	0.29	0.19	0.18	0.20	0.17

由表 3-7 可以得知，強度 20 點模型與 100 點模型相差大約為 14.6%；坍塌度 20 點模型與 100 點模型相差大約為 43.4%。可以得知實驗點的數目確實對於模型的影響有很大的關係。

為了瞭解實驗設計是否有效率，因此將 1934 筆候選實驗點均用來建立預測模型，去預測用來建立基準模型的數據(425 筆強度及 103 筆坍塌度數據)，以評估使用實驗設計所能達到的最小誤差水準的大小。結果如圖 3-6 與表 3-8 所示。

表 3-8 為扣除候選預測模型的實驗預測模型

實驗點數目	20	30	40	50	100
強度(psi)	81	61	66	58	44
坍塌度(cm)	0.22	0.12	0.11	0.13	0.10

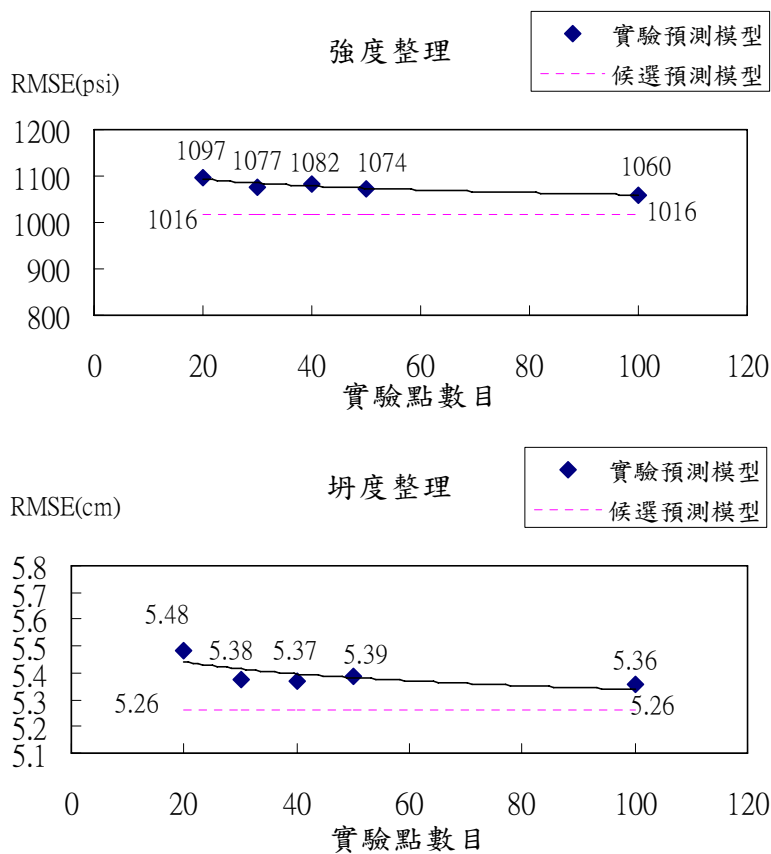


圖 3-6 為實驗預測模型與候選預測模型的強度、坍塌度整理圖

由表 3-8 可知

$$\text{實驗增加比率} = \frac{100 - 20}{1934 - 20} = \frac{80}{1914} = 4.2\%$$

$$\text{強度誤差減少比率} = \frac{1097 - 1060}{1097 - 1016} = 45.7\%$$

$$\text{坍塌度誤差減少比率} = \frac{5.48 - 5.36}{5.48 - 5.26} = 56.5\%$$

可見實驗設計是有效率的。

2. 以收斂圖來看，基準模型與實驗模型的差異為何？

以圖 3-2 與圖 3-3 來探討收斂圖，不論是強度模型還是坍塌度模型，實驗預測模型的訓練誤差均方根與測試誤差均方根差異極大；基準預測模型則沒有這樣情況。此外，實驗預測模型的測試誤差均方根在低學習循環便有收斂的趨勢，尤其是強度的部份。圖 3-3 實驗預測模型是最佳學習循環的收斂圖，比起圖 3-2 基準預測模型的最佳學習循環要高得多。

3. 以散佈圖來看，基準模型與實驗模型的差異為何？

以圖 3-2 與圖 3-4 來探討散佈圖，強度模型散佈圖隨著實驗點數目的增加更為集中在 45° 斜線；坍塌度則是有低坍塌度預測值偏高、高坍塌度預測值偏低的情形發生，實驗點的數目對於散佈圖似乎沒有顯著的影響。不論是強度還是坍塌度模型，其基準預測模型皆優於實驗預測模型。

四、基於自組織映射圖之配比實驗設計

4-1 方法

研究的流程如下述幾個步驟：

一、收集文獻實驗數據

本章沿用第三章的文獻實驗數據，其詳細內容請參閱本文 3-2 方法的研究流程步驟一。

二、建立基準預測模型

本章沿用第三章的基準預測模型，詳細內容請參閱本文 3-2 方法的研究流程步驟二。

三、產生候選點

本章沿用第三章的候選點，詳細內容請參閱本文 3-2 方法的研究流程步驟三。

四、產生實驗點

實驗點詳細的產生過程如下：

- (1) 本章採用自組織映射圖產生聚類，選用的軟體為葉怡成教授開發的 PCNeuron 1.0[3]。由於 PCNeuron 1.0 該軟體設計的輸出層處理單元以二維的型態排列，形狀為正方形；因此在設定實驗點數目無法與第三章一致，最後挑選 16(4x4)、25(5x5)、36(6x6)、49(7x7)、100(10x10)的實驗點。
- (2) 計算各聚類的形心。
- (3) 選取距離聚類形心最近的候選點為實驗點。

結果如表 4-1 所示(以 16 個實驗點之設計為例)。

表 4-1 自組織映射圖產生的 16 點實驗點(以重量為單位)

	C (kg)	F (kg)	S (kg)	W (kg)	SP (kg)	CA (kg)	FA (kg)	強度 (psi)	坍塌度 (cm)
1	238.8	40.0	162.8	177.2	12.1	963.8	719.6		
2	202.5	116.4	43.8	176.6	9.7	982.6	755.3		
3	191.4	146.7	62.1	211.1	8.1	905.6	706.0		
4	295.2	132.0	53.4	197.3	12.3	862.4	716.3		
5	279.6	72.9	66.6	210.7	8.3	917.0	704.4		
6	191.1	47.5	126.3	187.0	7.0	977.0	755.1		
7	199.4	150.7	137.5	174.8	10.9	927.6	692.1		
8	204.2	146.7	122.3	206.9	12.8	855.7	692.5		
9	196.3	53.6	187.4	209.5	9.7	914.8	688.3		
10	190.5	57.1	169.1	211.1	11.9	839.1	772.3		
11	194.2	115.6	188.8	179.5	10.0	835.6	772.9		
12	199.9	143.8	64.5	181.3	12.6	855.3	817.2		
13	298.6	37.8	156.2	208.8	11.2	851.3	714.0		
14	237.2	52.9	117.8	208.1	7.7	827.1	814.0		
15	230.3	46.9	139.0	175.0	11.1	873.2	838.6		
16	227.7	133.7	47.7	186.4	7.6	853.5	820.7		

五、模擬實驗值

將第四步驟所篩選出來的實驗點代入第二步驟的基準預測模型來模擬強度以及坍塌度。以 16 點為例模擬的結果如表 4-2 所示。

六、建立實驗預測模型

將第五步驟所得到的模擬實驗值當作類神經網路的訓練範例，用來建立基準預測模型的文獻數據當作類神經網路的測試範例，建構實驗預測模型。

七、評估實驗預測模型

將各個五種不同筆數的實驗預測模型來進行評估，針對其收斂圖、散佈圖以及誤差均方根來進行比較。

表 4-2 利用基準預測模型模擬 16 筆實驗點的強度以及坍塌度結果

	C (kg)	F (kg)	S (kg)	W (kg)	SP (kg)	CA (kg)	FA (kg)	強度 (psi)	坍塌度 (cm)
1	238.8	40.0	162.8	177.2	12.1	963.8	719.6	5274	3.1
2	202.5	116.4	43.8	176.6	9.7	982.6	755.3	4549	19.9
3	191.4	146.7	62.1	211.1	8.1	905.6	706.0	4177	23.8
4	295.2	132.0	53.4	197.3	12.3	862.4	716.3	5982	23.0
5	279.6	72.9	66.6	210.7	8.3	917.0	704.4	4425	22.7
6	191.1	47.5	126.3	187.0	7.0	977.0	755.1	3646	17.1
7	199.4	150.7	137.5	174.8	10.9	927.6	692.1	5982	3.7
8	204.2	146.7	122.3	206.9	12.8	855.7	692.5	4301	22.6
9	196.3	53.6	187.4	209.5	9.7	914.8	688.3	3238	14.9
10	190.5	57.1	169.1	211.1	11.9	839.1	772.3	3097	20.2
11	194.2	115.6	188.8	179.5	10.0	835.6	772.9	6018	0.0
12	199.9	143.8	64.5	181.3	12.6	855.3	817.2	5239	21.5
13	298.6	37.8	156.2	208.8	11.2	851.3	714.0	4991	16.8
14	237.2	52.9	117.8	208.1	7.7	827.1	814.0	3964	22.2
15	230.3	46.9	139.0	175.0	11.1	873.2	838.6	5540	7.3
16	227.7	133.7	47.7	186.4	7.6	853.5	820.7	5150	20.3

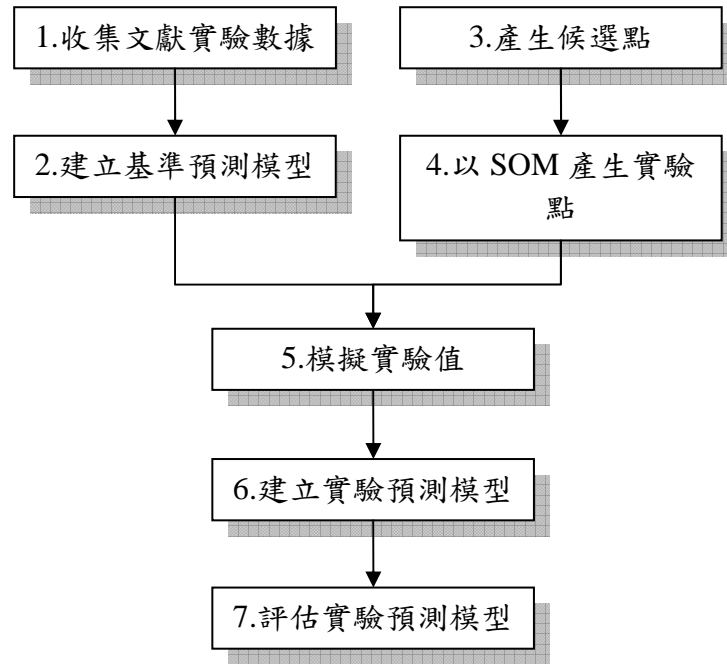


圖 4-1 SOM 的研究流程

4-2 結果

由圖 4-2 可以得知，不論是強度模型還是坍塌度模型，其訓練誤差均方根都遠小於測試部分。此外強度部分的收斂趨勢，除了 16 點模型約在 6000 次循環才開始收斂，其它的實驗點模型在 1500 次便有收斂的趨勢；坍塌度部分除了 16 點模型的測試曲線在學習循環剛開始的時候有明顯的下降，其曲線近乎以水平呈現。而實驗點數目對於收斂圖的似乎有些微影響，當實驗點數目越多的模型，其測試誤差均方根越早呈現收斂趨勢。不論是強度模型還是坍塌度模型其最佳的收斂次數均為 30000。

由圖 4-3 可以得知，強度在 0~5000 psi 之間，當強度越小其誤判為高強度的情形越多；強度在 5000~10000 psi 之間的預測值較看不出其偏態；強度在 10000~15000 psi 之間，近乎所有的預測值皆偏低。坍塌度在 0~10cm 之間，近乎所有的預測值皆偏高；坍塌度在 10~20cm 之間，預測的結果略為偏高；坍塌度在 20~30cm 之間，其預測值則是有偏低的情況。當實驗點數目越多，強度模型散佈點越集中 45° 線。比起強度模型，坍塌度的散佈圖較為分散，而且實驗點數目對模型的影響似乎不明顯。

由表 4-3 可以得知，當實驗點數目越多的情況下，實驗預測模型的誤差均方根越接近基準預測模型。

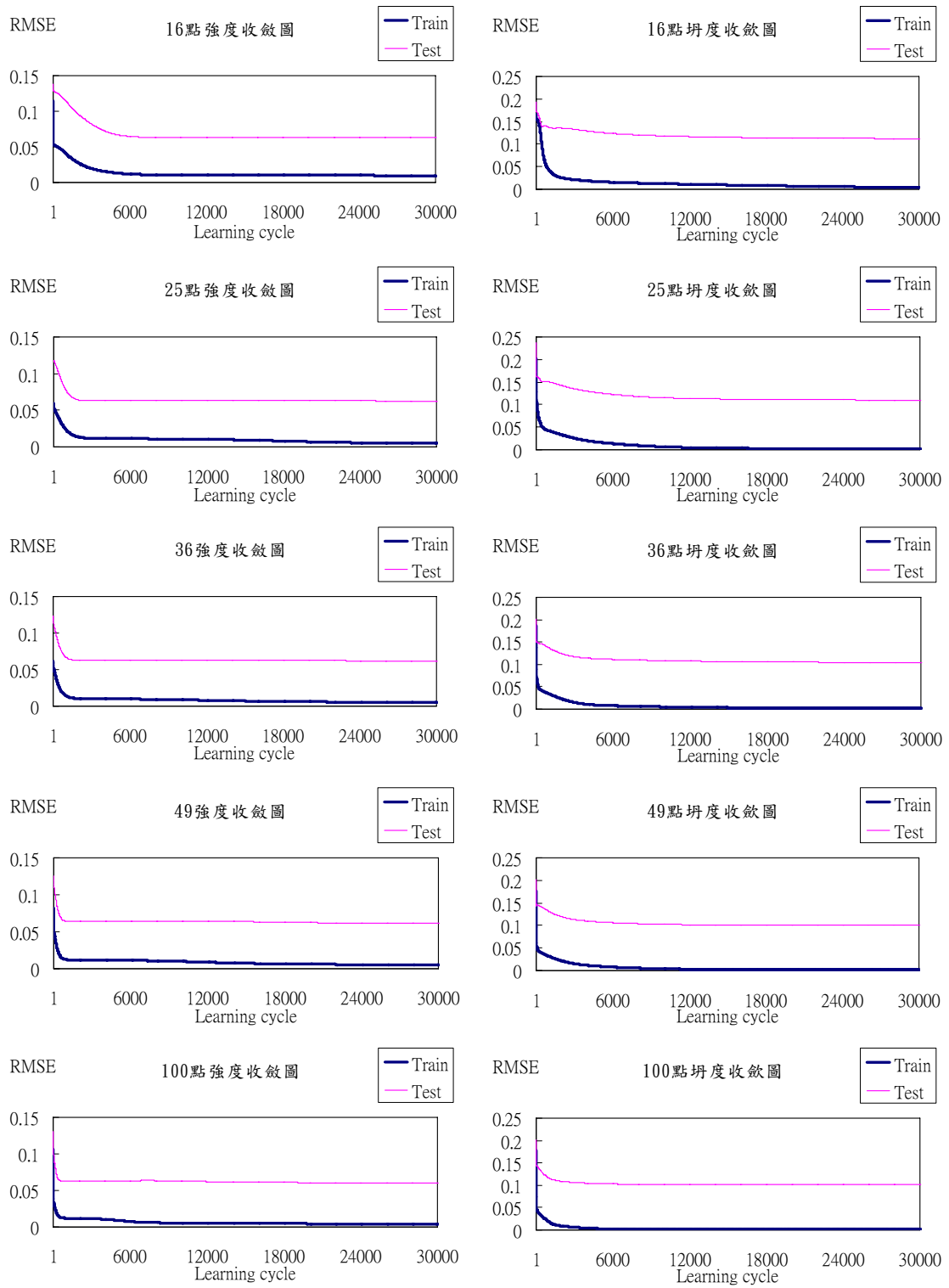


圖 4-2 為不同實驗筆數下的強度、坍塌度模型收斂圖

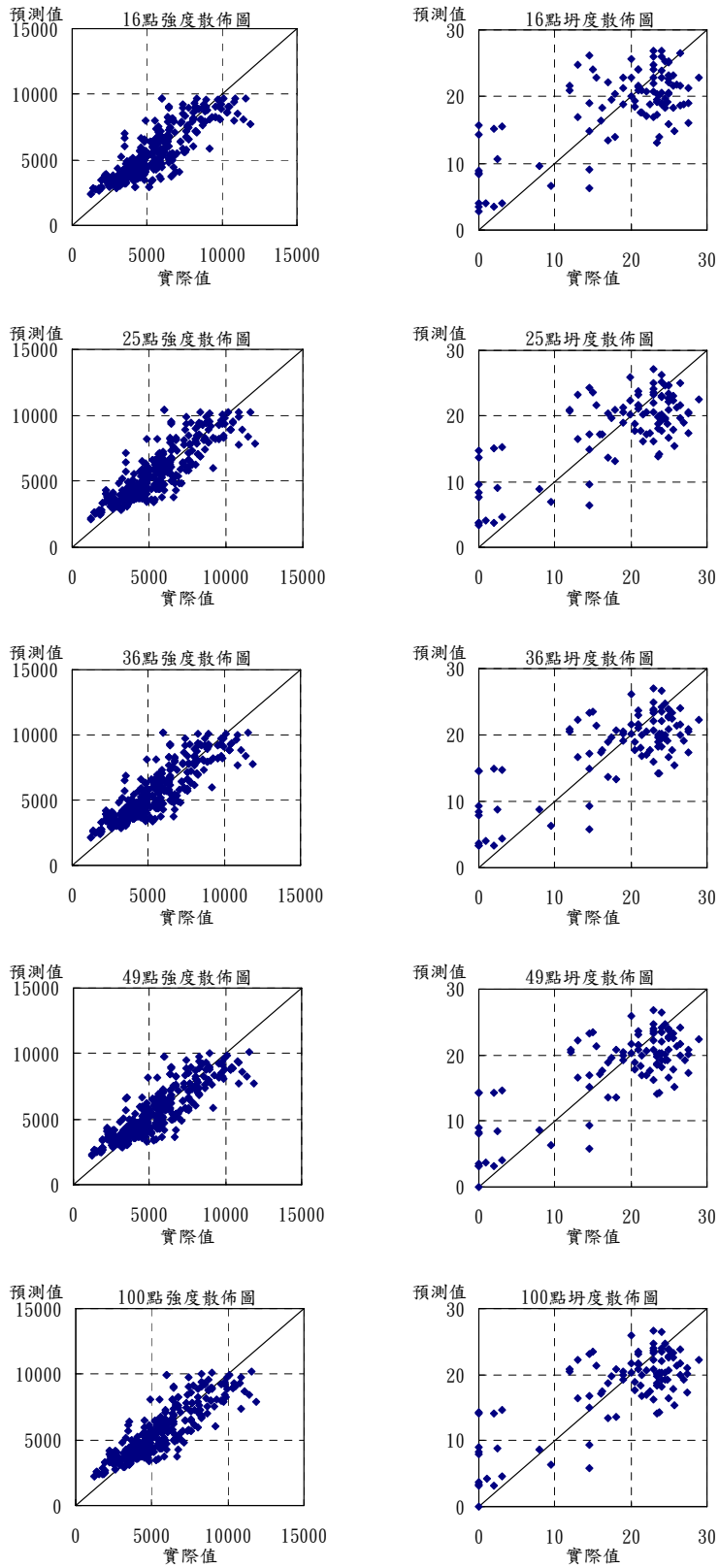


圖 4-3 為各個候選點的強度、坍度散佈圖

表 4-3 為各模型的誤差均方根

實驗預測模型						基準 預測 模型
實驗點 數目	16	25	36	49	100	
強度 (psi)	1107	1105	1090	1085	1074	843
坍塌 (cm)	5.77	5.48	5.40	5.35	5.35	5.19

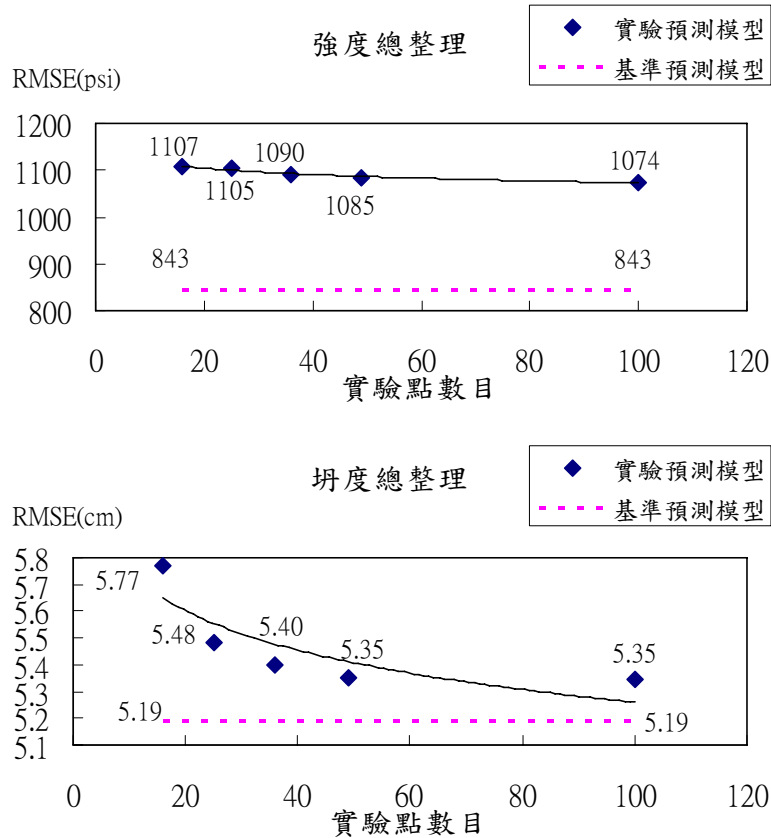


圖 4-4 為實驗預測模型與基準預測模型的強度、坍塌整理圖

4-3 討論與結論

1. 實驗點數目對於模型的影響為何?

以上節的結果來看，實驗點數目的多寡對模型的影響似乎並沒有預期中來的重大，由圖 4-4 來看，強度的 16 點模型與 100 點模型相差約為 3%；坍塌的 16 點模型與 100 點模型相差約為 7.3%。將所有的實驗預測模型的誤差均方根扣除基準預測模型的誤差均方根可以產生表 4-4。由表 4-4 可以得知，強度 16 點模型與 100 點模型誤差大約為 12.5%；坍塌 16 點模型與 100 點模型誤差大約為 73.1%。可以得知實驗點的數目確實對於模型的影響有很大的關係。

表 4-4 為扣除基準預測模型的實驗預測模型

實驗點數目	16	25	36	49	100
強度(psi)	264	262	247	242	231
坍塌(cm)	0.58	0.29	0.21	0.16	0.16

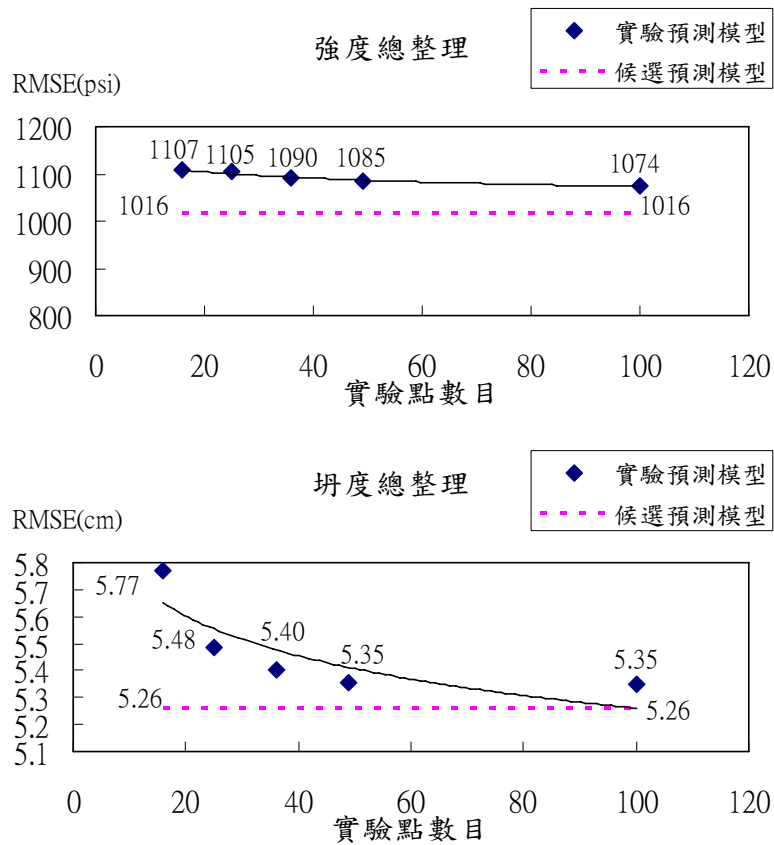


圖 4-5 為實驗預測模型與候選預測模型的強度、坍度整理圖

為了瞭解實驗設計是否有效率，因此將 1934 筆候選實驗點均用來建立預測模型，去預測用來建立基準模型的數據(425 筆強度及 103 筆坍度數據)，以評估使用實驗設計所能達到的最小誤差水準的大小。結果如圖 4-5 與表 4-5 所示。

表 4-5 為扣除候選預測模型的實驗預測模型

實驗點數目	16	25	36	49	100
強度(psi)	91	89	74	69	58
坍度(cm)	0.51	0.22	0.14	0.09	0.09

由表 4-5 可知

$$\text{實驗增加比率} = \frac{100 - 20}{1934 - 20} = \frac{80}{1914} = 4.2\%$$

$$\text{強度誤差減少比率} = \frac{1107 - 1074}{1107 - 1016} = 36.3\%$$

$$\text{坍度誤差減少比率} = \frac{5.77 - 5.35}{5.77 - 5.26} = 82.7\%$$

可見實驗設計是有效率的。

2. 以收斂圖來看，基準模型與實驗模型的差異為何？

以圖 3-2 與圖 4-2 來探討收斂圖，不論是強度模型還是坍塌度模型，實驗預測模型的訓練誤差均方根與測試誤差均方根差異極大；基準預測模型則沒有這樣情況。此外，實驗預測模型的測試誤差均方根在低學習循環便有收斂的趨勢，尤其是強度的部份。圖 4-2 實驗預測模型是最佳學習循環的收斂圖，比起圖 3-2 基準預測模型的最佳學習循環要高得多。

3. 以散佈圖來看，基準模型與實驗模型的差異為何？

以圖 3-2 與圖 4-3 來探討散佈圖，強度模型散佈圖隨著實驗點數目的增加更為集中在 45°斜線；坍塌度則是有低坍塌度預測值偏高、高坍塌度預測值偏低的情形發生，實驗點的數目對於散佈圖似乎沒有顯著的影響。不論是強度還是坍塌度模型，其基準預測模型皆優於實驗預測模型。

五、基於分層聚類分析之配比實驗設計

5-1 方法

研究的流程如下述幾個步驟：

一、收集文獻實驗數據

本章沿用第三章的文獻實驗數據，其詳細內容請參閱本文 3-2 方法的研究流程步驟一。

二、建立基準預測模型

本章沿用第三章的基準預測模型，詳細內容請參閱 3-2 方法的研究流程步驟二。

三、產生候選點

本章沿用第三章的候選點，詳細內容請參閱 3-2 方法的研究流程步驟三。

四、產生實驗點

實驗點詳細的產生過程如下：

- (1) 本章採用分層聚類分析產生聚類，選用的軟體為 XLminer[41]。
- (2) 計算各聚類的形心。
- (3) 選取距離聚類形心最近的候選點為實驗點。

結果如表 5-1 所示(以 20 個實驗點之設計為例)。

五、模擬實驗值

將第四步驟所篩選出來的實驗點代入第二步驟的基準預測模型來模擬強度以及坍塌度。以 20 點為例模擬的結果如表 5-2 所示。

表 5-1 利用 HCA 選取出的 20 筆實驗點

	C (kg)	F (kg)	S (kg)	W (kg)	SP (kg)	CA (kg)	FA (kg)	強度 (psi)	坍塌 (cm)
1	146.0	135.4	111.2	197.5	14.4	855.9	783.2		
2	203.6	93.8	43.0	181.2	4.8	912.6	850.6		
3	188.6	34.8	114.9	181.4	6.7	1025.9	747.7		
4	175.7	138.6	85.9	176.2	9.4	978.4	720.0		
5	198.5	53.8	150.0	174.0	12.5	976.4	742.8		
6	247.2	147.3	26.6	175.0	14.8	856.4	819.5		
7	197.6	53.1	167.4	177.8	10.5	858.1	842.0		
8	188.1	136.2	51.1	205.0	5.9	950.8	705.6		
9	180.2	89.1	165.8	221.1	6.2	820.4	753.0		
10	189.0	33.4	182.2	216.7	14.9	874.4	733.5		
11	192.4	145.9	176.8	172.9	10.0	863.5	739.4		
12	253.3	132.4	73.2	210.4	8.0	840.3	730.2		
13	171.2	69.4	160.2	217.1	8.1	931.3	682.5		
14	212.6	46.3	136.4	194.3	6.4	872.2	817.9		
15	187.3	165.0	127.3	191.9	12.0	874.5	702.1		
16	229.7	139.8	32.3	185.1	8.2	945.0	736.4		
17	236.9	38.8	141.0	187.4	9.6	957.5	727.9		
18	271.0	116.8	89.2	196.8	11.9	886.2	700.0		
19	258.1	22.6	179.9	216.9	6.6	849.8	733.8		
20	284.9	75.2	54.7	207.8	9.3	954.7	675.8		

六、建立實驗預測模型

將第五步驟所得到的模擬實驗值當作類神經網路的訓練範例，用來建立基準預測模型的文獻數據當作類神經網路的測試範例，建構實驗預測模型。

七、評估實驗預測模型

將各個五種不同筆數的實驗預測模型來進行評估，針對其收斂圖、散佈圖以及誤差均方根來進行比較。

表 5-2 利用基準預測模型模擬 20 筆實驗點的強度以及坍塌度結果

	C (kg)	F (kg)	S (kg)	W (kg)	SP (kg)	CA (kg)	FA (kg)	強度 (psi)	坍塌度 (cm)
1	146.0	135.4	111.2	197.5	14.4	855.9	783.2	3398	23.8
2	203.6	93.8	43.0	181.2	4.8	912.6	850.6	4106	18.1
3	188.6	34.8	114.9	181.4	6.7	1025.9	747.7	3486	16.8
4	175.7	138.6	85.9	176.2	9.4	978.4	720.0	4672	17.9
5	198.5	53.8	150.0	174.0	12.5	976.4	742.8	4602	6.7
6	247.2	147.3	26.6	175.0	14.8	856.4	819.5	6425	21.7
7	197.6	53.1	167.4	177.8	10.5	858.1	842.0	5027	3.2
8	188.1	136.2	51.1	205.0	5.9	950.8	705.6	4106	22.0
9	180.2	89.1	165.8	221.1	6.2	820.4	753.0	3451	21.8
10	189.0	33.4	182.2	216.7	14.9	874.4	733.5	2336	21.7
11	192.4	145.9	176.8	172.9	10.0	863.5	739.4	6584	0.0
12	253.3	132.4	73.2	210.4	8.0	840.3	730.2	4849	23.4
13	171.2	69.4	160.2	217.1	8.1	931.3	682.5	3132	23.0
14	212.6	46.3	136.4	194.3	6.4	872.2	817.9	4088	16.9
15	187.3	165.0	127.3	191.9	12.0	874.5	702.1	4920	15.6
16	229.7	139.8	32.3	185.1	8.2	945.0	736.4	4956	20.3
17	236.9	38.8	141.0	187.4	9.6	957.5	727.9	4549	13.5
18	271.0	116.8	89.2	196.8	11.9	886.2	700.0	5487	21.7
19	258.1	22.6	179.9	216.9	6.6	849.8	733.8	3947	17.0
20	284.9	75.2	54.7	207.8	9.3	954.7	675.8	4495	22.5

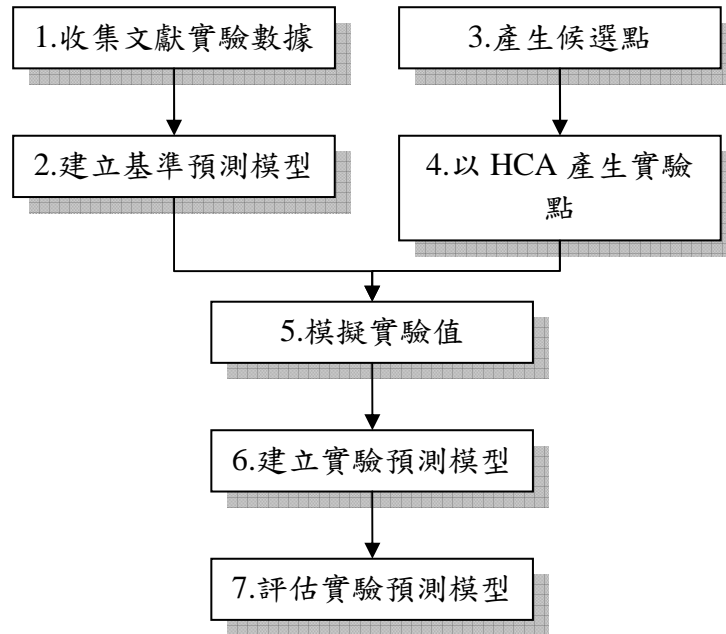


圖 5-1 HCA 的研究流程

5-4 結果

由圖 5-2 可以得知，不論是強度模型還是坍塌度模型，其訓練誤差均方根都遠小於測試部分。此外強度部分的收斂趨勢，除了 20 點模型約在 2660 次循環才開始收斂，其它的實驗點模型在 1000 次便有收斂的趨勢；而實驗點數目對於強度收斂圖的似乎有些微影響，當實驗點數目越多的模型，其測試誤差均方根越早呈現收斂趨勢。坍塌度部分除了 30 點模型的測試曲線在學習循環剛開始的時候有明顯的下降，其曲線近乎以水平呈現；40 點模型的測試曲線在開始的時候有平緩的現象，一直到 6000 次循環才開始有收斂趨勢。實驗數目對於坍塌度收斂結果來看似乎沒有明顯的趨勢。

由圖 5-3 可以得知，強度在 0~5000 psi 之間，當強度越小其誤判為高強度的情形越多；強度在 5000~10000 psi 之間的預測值較看不出其偏態；強度在 10000~15000 psi 之間，近乎所有的預測值皆偏低。坍塌度在 0~10cm 之間，近乎所有的預測值皆偏高；坍塌度在 10~20cm 之間，預測的結果略為偏高；坍塌度在 20~30cm 之間，其預測值則是有偏低的情況。當實驗點數目越多，強度模型散佈點越集中 45° 線。比起強度模型，坍塌度的散佈圖較為分散，而且實驗點數目對模型的影響似乎不明顯。

由表 5-3 可以得知，當實驗點數目越多的情況下，實驗預測模型的誤差均方根越接近基準預測模型。

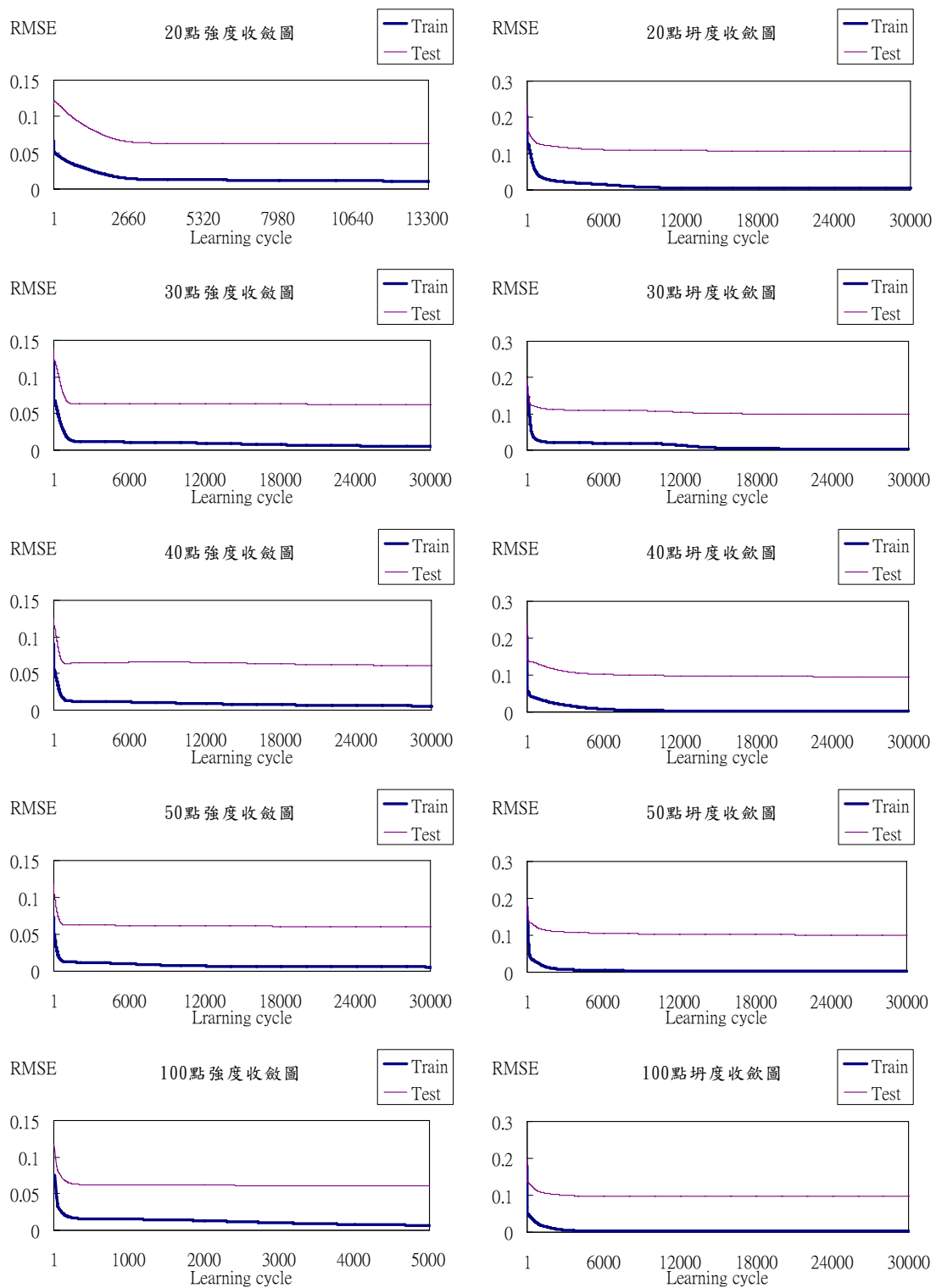


圖 5-2 為不同實驗筆數下的強度、坍塌度模型收斂圖

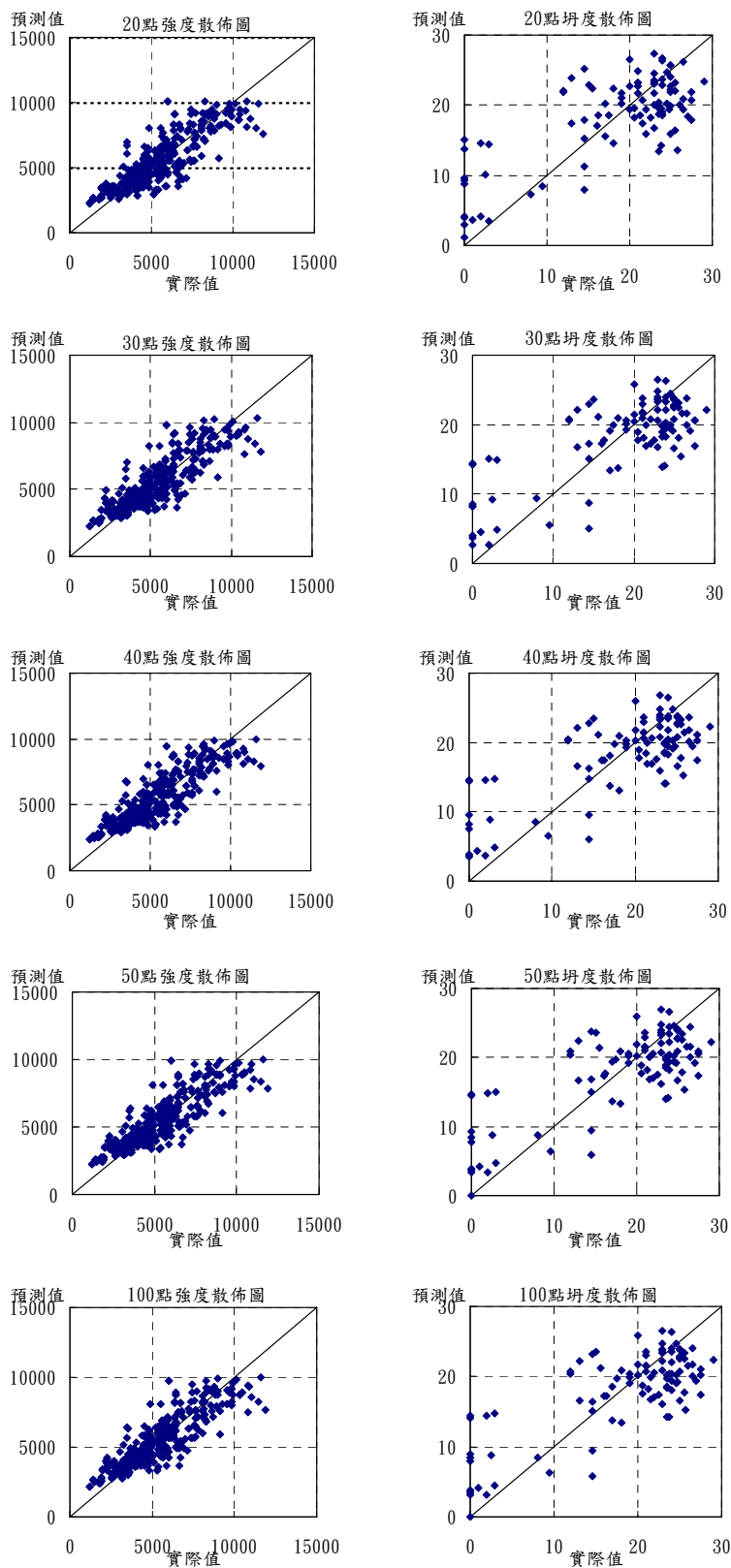


圖 5-3 為各個候選點的強度、坍度散佈圖

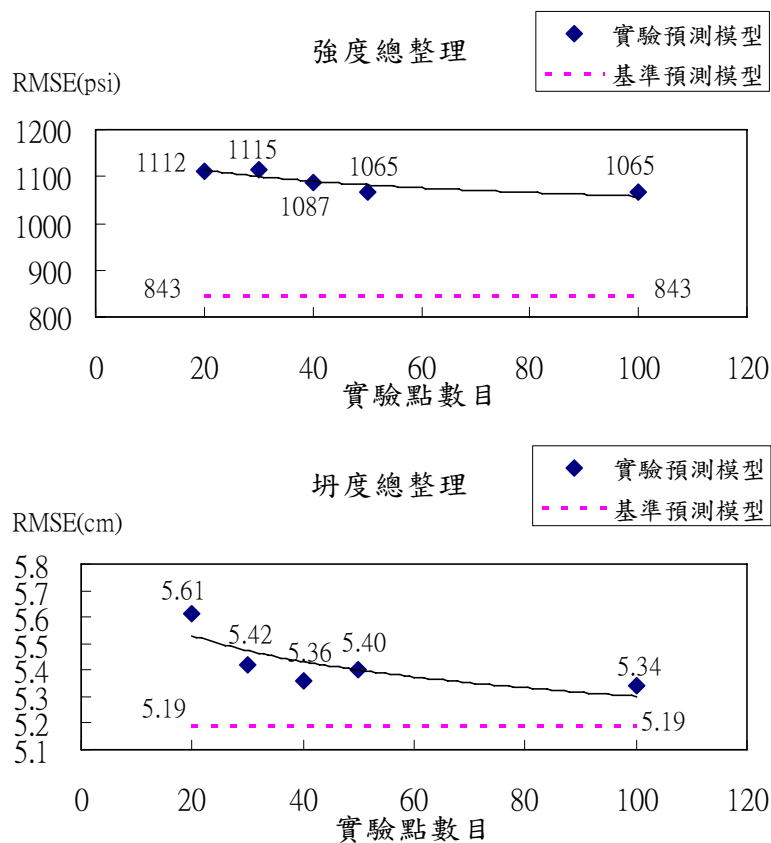


圖 5-4 為實驗預測模型與基準預測模型的強度、坍度整理圖

表 5-3 為各模型的誤差均方根

實驗預測模型						基準 預測 模型
實驗點 數目	20	30	40	50	100	
強度 (psi)	1112	1115	1087	1065	1065	843
坍度 (cm)	5.61	5.42	5.36	5.40	5.34	5.19

5-4 討論與結論

1. 實驗點數目對於模型的影響為何?

以上節的結果來看，實驗點數目的多寡對模型的影響似乎並沒有預期中來的重大，由圖 5-4 來看，強度的 20 點模型與 100 點模型相差約為 3%；坍度的 20 點模型與 100 點模型相差約為 7.3%。將所有的實驗預測模型的誤差均方根扣除基準預測模型的誤差均方根產生表 5-4。由表 5-4 可以得知，強度 20 點模型與 100 點模型相差大約為 17.5%；坍度 20 點模型與 100 點模型相差大約為 63.8%。可以得知實驗點的數目確實對於模型的影響有很大的關係。

表 5-4 為扣除基準預測模型的實驗預測模型

實驗點數目	20	30	40	50	100
強度(psi)	269	272	244	222	222
坍塌度(cm)	0.42	0.23	0.17	0.21	0.15

為了瞭解實驗設計是否有效率，因此將 1934 筆候選實驗點均用來建立預測模型，去預測用來建立基準模型的數據(425 筆強度及 103 筆坍塌度數據)，以評估使用實驗設計所能達到的最小誤差水準的大小。結果如圖 5-5 與表 5-5 所示。

由表 5-5 可知

$$\text{實驗增加比率} = \frac{100 - 20}{1934 - 20} = \frac{80}{1914} = 4.2\%$$

$$\text{強度誤差減少比率} = \frac{1112 - 1065}{1112 - 1016} = 49.0\%$$

$$\text{坍塌度誤差減少比率} = \frac{5.61 - 5.34}{5.61 - 5.26} = 75.9\%$$

可見實驗設計是有效率的。

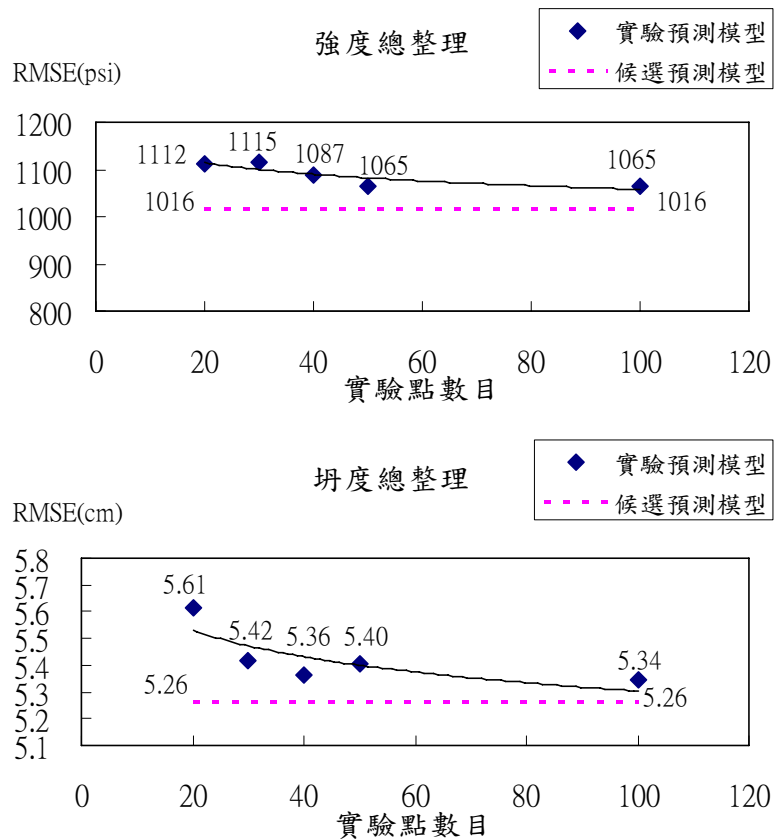


圖 5-5 為實驗預測模型與候選預測模型的強度、坍塌度整理圖

表 5-5 為扣除候選預測模型的實驗預測模型

實驗點數目	20	30	40	50	100
強度(psi)	96	99	71	49	49
坍塌度(cm)	0.35	0.16	0.10	0.15	0.09

2. 以收斂圖來看，基準模型與實驗模型的差異為何？

以圖 3-2 與圖 5-2 來探討收斂圖，不論是強度模型還是坍塌度模型，實驗預測模型的訓練誤差均方根與測試誤差均方根差異極大；基準預測模型則沒有這樣情況。此外，實驗預測模型的測試誤差均方根在低學習循環便有收斂的趨勢，尤其是強度的部份。圖 5-2 實驗預測模型是最佳學習循環的收斂圖，比起圖 3-2 基準預測模型的最佳學習循環要高得多。

3. 以散佈圖來看，基準模型與實驗模型的差異為何？

以圖 3-2 與圖 5-3 來探討散佈圖，強度模型散佈圖隨著實驗點數目的增加更為集中在 45°斜線；坍塌度則是有低坍塌度預測值偏高、高坍塌度預測值偏低的情形發生，實驗點的數目對於散佈圖似乎沒有顯著的影響。不論是強度還是坍塌度模型，其基準預測模型皆優於實驗預測模型。

六、配比實驗設計之比較

6-1 隨機法(RA)預測模型

一、收集文獻實驗數據

本章沿用第三章的文獻實驗數據，其詳細內容請參閱本文 3-2 方法的研究流程步驟一。

二、建立基準預測模型

本章沿用第三章的基準預測模型，詳細內容請參閱本文 3-2 方法的研究流程步驟二。

三、產生候選點

本章沿用第三章的候選點，詳細內容請參閱本文 3-2 方法的研究流程步驟三。

四、產生實驗點

本章的實驗點主要是從 1934 筆候選點中隨機抽取 20、30、40、50 以及 100 點。因為本法具隨機性，因此重覆進行六次。

五、模擬實驗值

將第四步驟所篩選出來的實驗點代入第二步驟的基準預測模型來模擬強度以及坍塌。

六、建立實驗預測模型

將第五步驟所得到的模擬實驗值當作類神經網路的訓練範例，用來建立基準預測模型的文獻數據當作類神經網路的測試範例，建構實驗預測模型。

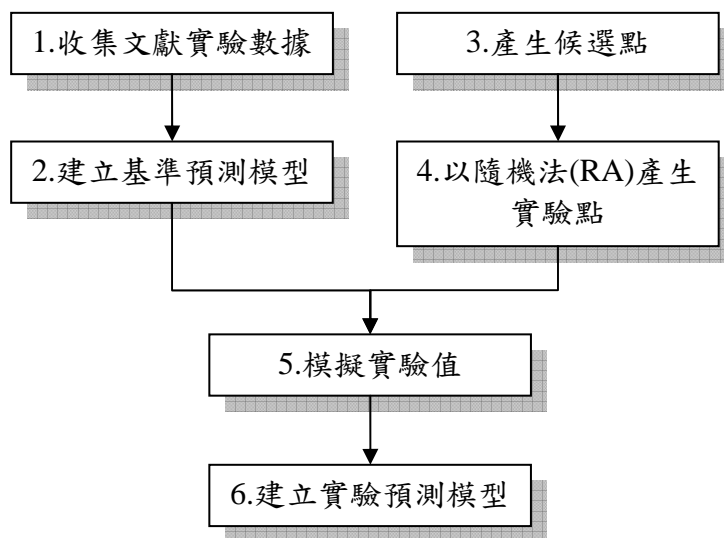


圖 6-1 隨機法(RA)的研究流程

由圖 6-2 與表 6-1 可以得知，當模型實驗點數目越少，相同實驗點數目下的模型所產生的誤差均方根間距越大。反之，當實驗點數目越多，模型所產生的模型誤差間距越小。以強度模型為例，20 點模型誤差均方根最大值為 1210 psi 而最小值為 1065 psi，其間距為 $1210 - 1065 = 145$ psi；30 點模型誤差間距為 $1151 - 1068 = 83$ psi；40 點模型誤差間距為 $1119 - 1074 = 45$ psi；50 點模型誤差間距為 $1098 - 1067 = 31$ psi；100 點模型誤差間距為 $1068 - 1059 = 9$

psi。

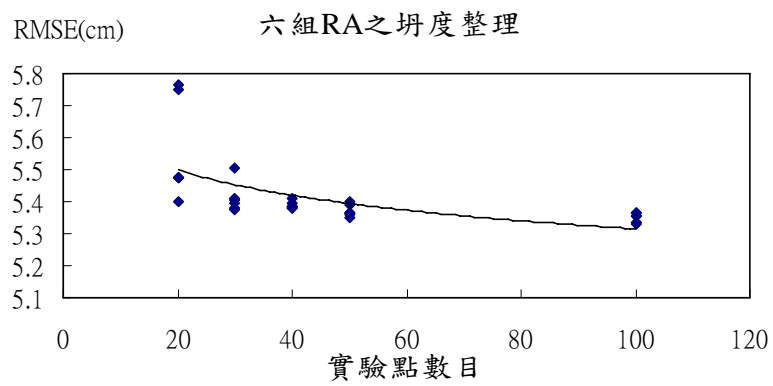
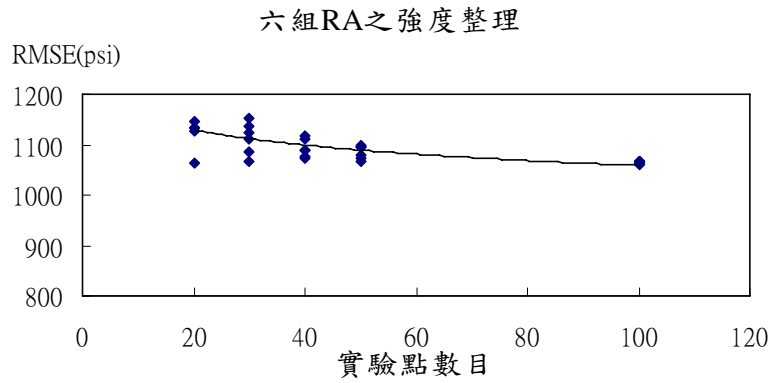


圖 6-2 為六組 RA 模型的誤差均方根

表 6-1 六組 RA 模型的誤差均方根

實驗預測模型					
實驗點數目	20	30	40	50	100
強度(psi)	1126	1123	1088	1096	1068
	1146	1151	1110	1098	1062
	1210	1135	1119	1094	1067
	1065	1068	1075	1067	1059
	1133	1112	1089	1072	1066
	1133	1085	1074	1079	1062
坍度(cm)	5.47	5.40	5.41	5.35	5.36
	5.75	5.50	5.38	5.36	5.34
	5.48	5.38	5.38	5.37	5.35
	5.40	5.38	5.40	5.40	5.35
	5.77	5.41	5.38	5.36	5.33
	5.47	5.41	5.39	5.39	5.37

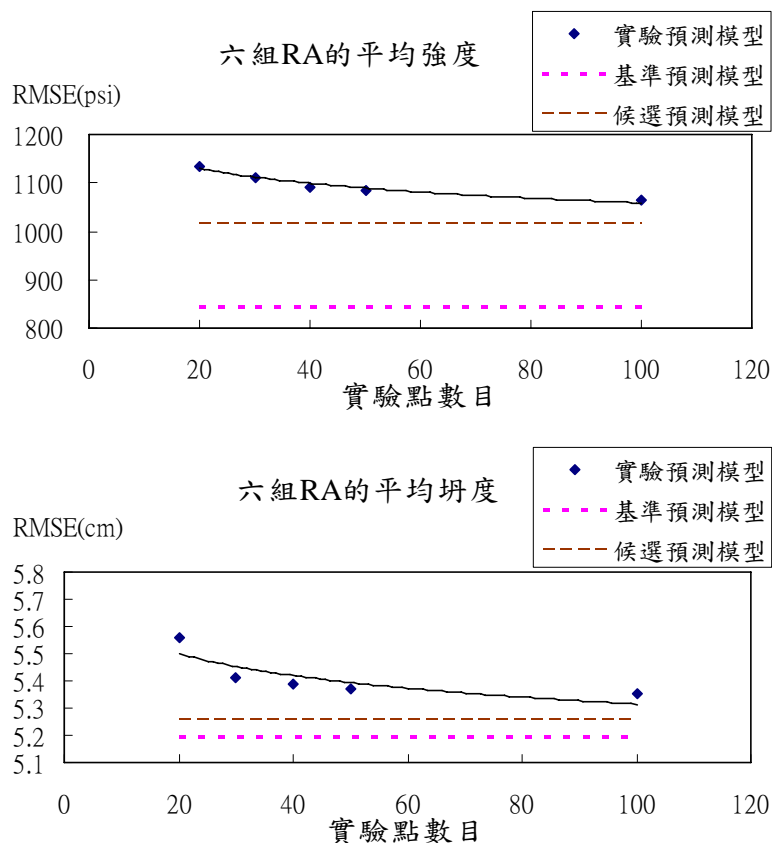


圖 6-3 為六組 RA 模型的平均誤差均方根

表 6-2 六組 RA 模型的平均誤差均方根

實驗點 數目	實驗預測模型					基準 預測 模型	候選 預測 模型
	20	30	40	50	100		
強度 (psi)	1136	1112	1093	1084	1064	843	1016
坍度 (cm)	5.56	5.41	5.39	5.37	5.35	5.19	5.26

為了與有經設計過的 D-Optimal、SOM 以及 HCA 模型進行比較，將同實驗點數目下的六組隨機法模型求其模型平均誤差水準。產生的結果如圖 6-3 與表 6-2 所示。

由表 6-2 與圖 6-3 可以得知經過平均的 RA 模型誤差水準隨著實驗點數目的增加會降低。

6-2 模型比較

由於各個設計方法所產生的最佳化模型，其網路參數設定皆不盡然相同，故為了能夠進行公平的比較，將所有模型的網路參數設定固定一致，在學習循環的設定上固定為 5000，隱藏節點數固定為單層 7 節點。選擇上述參數的理由是在上述參數下，神經網路尚不致於發生過度學習 (overlearning)，且有較低的誤差。

將所有設計模型與隨機法(RA)模型整理可得圖 6-4。由圖可知，在實驗點數為 20 時，D-Optimal 模型所產生的誤差水準會比較差，其原因可歸咎於七成份實驗設計的最低建議點數為 28 點。當

實驗點數目大於 30 點，不論是強度還是坍塌度，D-Optimal 都是一個比較穩健的設計模型的方法，甚至可以發現，D-Optimal 設計所產生之模型誤差水準均比隨機法(RA)模型所產生之最低誤差均方根要來得小。

當實驗點數目達到 40 點，不論是強度還是坍塌度，SOM 模型與 HCA 模型，兩模型的誤差水準差異已不大。

隨機法(RA)模型的誤差水準極為不穩定，尤其是強度部份，即便實驗點數目達到 100 點，其誤差水準的差異亦很大。反觀坍塌度部分，當實驗點數目達到 100 點，模型間的誤差水準差異已很小。

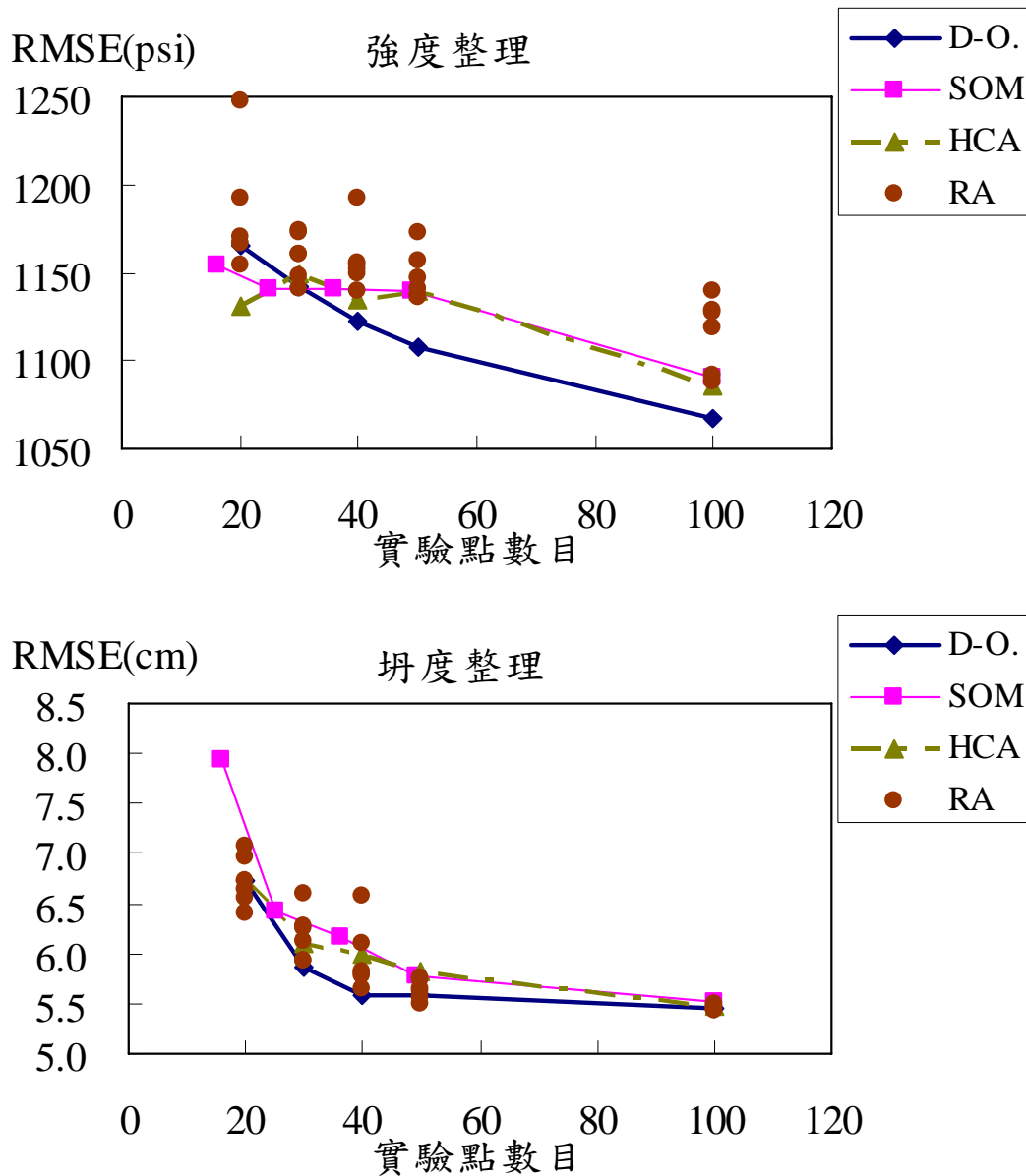


圖 6-4 所有設計方法與隨機法模型之整理圖(以文獻實驗數據為評估)

如果不用文獻實驗的數據作為評估的依據，而改用 1934 筆「模擬」的候選點數據，嘗試使用不同的評估方式來看看，結果又會是如何？評估的過程如下所示：

1. 以設計方法篩選出的實驗點作為訓練範例。
2. 將候選點中與訓練範例重複的實驗點刪除，以扣除後的候選點作為測試範例。
3. 將固定網路參數設定(網路參數設定與 6-2 模型比較相同)。
4. 比較分析模型。

由圖 6-5 可以得知，在實驗點數為 20 時，同樣可以發現 D-Optimal 模型所產生的誤差水準會比較差，其原因可歸咎於七成份實驗設計的最低建議點數為 28 點。當實驗點數目大於 30 點，不論是強度還是坍塌度，D-Optimal 都是一個比較穩健的設計模型的方法。SOM 模型與 HCA 模型，其模型誤差水準相較於 D-Optimal 模型要來得差，甚至在坍塌度部分，與隨機法模型相比都要來得差。同樣可以發現隨機法(RA)模型的誤差水準極為不穩定。與圖 6-4 相比，實驗點數目對於模型的影響較為明顯。

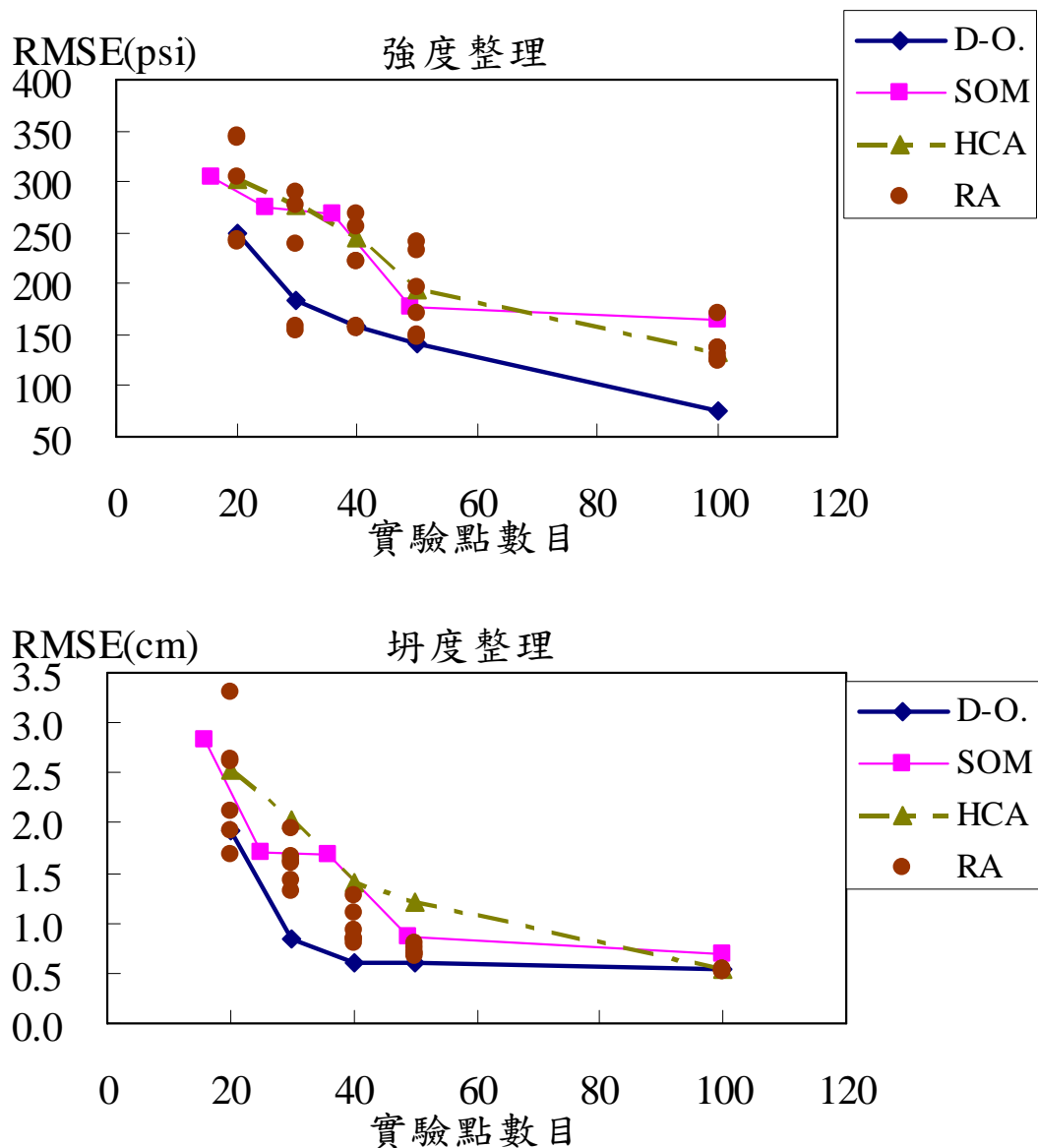


圖 6-5 所有設計方法與隨機法模型之整理圖(以 1934 筆候選點數據為評估)

七、結論與建議

本研究有以下結論：

1. 在強度實驗方面，實驗數目從 50 增加到 100 仍有很大的強度誤差的降低，顯示為建立精確的強度模型，100 個以上的配比實驗是有必要的。此外，即使實驗數目達到 100，隨機法仍比 D-Optimal 遜色很多，顯示即便實驗數目多達 100，仍有必要使用 D-Optimal 來進行實驗設計。
2. 在坍度實驗方面，實驗數目從 50 增加到 100 已無明顯的坍度誤差的降低，顯示為建立精確的坍度模型，50 個以上的配比實驗就足夠了。此外，當實驗數目達到 100 時，隨機法已達到 D-Optimal 的誤差水準，顯示當實驗數目達到 100 時，可用簡單的隨機法來代替複雜的 D-Optimal。
3. 在 D-Optimal 方面，其建立的預測模型之誤差幾乎都比相同實驗數目下，六次隨機法之誤差最小者低，可見 D-Optimal 是很有效率的實驗設計法。

本研究對於想應用實驗設計於混凝土強度、坍度模型建構者的建議如下：

- 一、 當實驗點數目小於 100 時，或實驗的目的在於建構強度模型時，使用 D-Optimal 設計方法。
- 二、 當實驗點數目大於 100 時，且實驗的目的在於建構坍度模型時，使用隨機設計方法。

參考文獻

- [1] 黃兆龍，混凝土性質與行為，詹氏書局，台北市(1999)。
- [2] 葉怡成，類神經網路-模式應用與實作，儒林圖書公司，台北(2000)。
- [3] 葉怡成，應用類神經網路，儒林圖書公司，台北(2001)。
- [4] Kasperkiewicz, J., Racz, J. and Dubrawski, A.(1995).” HPC strength prediction using artificial neural network,” *J. of Computing in Civil Engineering*, ASCE, Vol. 9, No. 4, pp.279-284(1995).
- [5] Abbasi, A. F., Ahmad, M. and Wasim, M.” Optimization of concrete mix proportioning using reduced factorial experimental technique,” *ACI Materials Journal*, Vol. 84, No. 8, pp.55-63 (1987).
- [6] 蘇南，「21 世紀 TAICON 台灣混凝土之配比設計」，高性能混凝土配比設計實作研討會論文集，台北市，第 46 頁(1998)。
- [7] Francois de Larrard, “Optimization of high-performance concrete,” 高性能混凝土研討會，台北市，第 31~44 頁(1993)。
- [8] de Larrard, F., Sedran, T. ” Optimization of ultra high performance concrete by the use of a packing model,” *Cement and concrete Research*, Vol24, No. 6, pp.997-1009(1994).
- [9] 葉怡成，實驗計劃法—製程與產品最佳化，五南圖書，台北市(2001)。
- [10] Shilstone, J. M. Jr. “Concrete mixture optimization,” *Concrete International*, June 1994, pp.31-37 (1994).
- [11] Stegemann, J. A. and Buenfeld, N. R., “Mining of existing data for Cement-solidified wastes using neural networks,” *Journal of Environmental Engineering*, ASCE, Vol.130, No.5, pp.508-515 (2004).
- [12] Kim, J. I., Kim, D. K., Feng, M. Q., and Yazdani, F., “Application of Neural Networks for Estimation of Concrete Strength,” *Journal of Materials in Civil Engineering*, ASCE, Vol.16, No.3, pp.257-264 (2004).
- [13] Ghaboussi, J. Garrett, J. H. and Wu, X. “Knowledge-based Modeling of Material Behaviour with Neural Networks,” *J. Engineering Mechanics*, ASCE, Vol.117, No.1, pp.129-134 (1991).
- [14] Kasperkiewicz, J., Racz, J. and Dubrawski, A., “HPC Strength Prediction Using Artificial Neural Network,” *J. of Computing in Civil Engineering*, ASCE, Vol.9, No.4, pp.279-284 (1995).
- [15] Peng, J., Li, Z., and Ma, B., “Neural Network Analysis of Chloride Diffusion in Concrete,” *Journal of Materials in Civil Engineering*, ASCE, Vol.14, No. 4, pp.327-333 (2002).
- [16] Nehdi, M., Djebbar, Y., and Khan, A., “Neural Network Model for Preformed-Foam Cellular Concrete,” *ACI Materials Journal*, Vol.98, No.5, pp.402-409 (2001).
- [17] Nehdi, M., El-Chabib, H., and El-Naggar, M. H., “Predicting Performance of Self-Compacting Concrete Mixtures Using Artificial Neural Networks,” *ACI Materials Journal*, Vol.98, No.5, pp.394-401 (2001).
- [18] Haj-Ali, R. M., Kurtis, K. E., and Akshay, R., “Neural Network Modeling of Concrete Expansion During Long-Term Sulfate Exposure,” *ACI Materials Journal*, Vol.98, No.1, pp.36-43 (2001).
- [19] Basma, A. A., Barakat, S., and Al-Oraimi, S., “Prediction of Cement Degree of Hydration Using Artificial Neural Networks,” *ACI Materials Journal*, Vol.96, No.2, pp.167-172 (1996).
- [20] Ghaboussi, J., Garrett, J. H. and Wu, X., “Knowledge-Based Modeling of Material Behavior with Neural Networks,” *Journal of Engineering Mechanics*, ASCE, Vol.117, No.1, pp.132-153 (1991).
- [21] Oh, J.-W., Lee, I.-W., Kim, J.-T., and Lee, G.-W., “Application of Neural Networks for Proportioning of Concrete Mixes,” *ACI Materials Journal*, Vol.96, No.1, pp.61-67 (1999).
- [22] James, M., “Concrete Mixture Optimization,” *Concrete International*, June 1990, pp.33-39 (1990).

- [23] Larrard, F., Sedran, T., "Optimization of Ultra High Performance Concrete by the Use of a Packing Model," *Cement and Concrete Research*, Vol.24, No.6, pp.997-1009 (1994).
- [24] Kasperkiewicz, J., "Optimization of Concrete Mix Using a Spreadsheet Package," *ACI Materials Journal*, Vol.91, No.6, pp.551-559 (1994).
- [25] Khayat, K. H., Yahia, A. and Sonebi, M., "Applications of Statistical Models for Proportioning Underwater Concrete," *ACI Materials Journal*, Vol.96, No.6, pp.634-640 (1999).
- [26] Ghezal, A. and Khayat, K. H., "Optimizing Self-Consolidating Concrete with Limestone Filler by using Statistical Factorial Design Methods," *ACI Materials Journal*, Vol.99, No.3, pp.264-272 (2002).
- [27] Sonebi, M., Svermova, L., and Bartos, P. J. M., "Factorial Design of Cement Slurries Containing Limestone Powder for Self-Consolidating Slurry-Infiltrated Fiber Concrete," *ACI Materials Journal*, Vol.101, No.2, pp.136-145 (2004).
- [28] Sonebi, M., "Applications of Statistical Models in Proportioning Medium-Strength Self-Consolidating Concrete," *ACI Materials Journal*, Vol.101, No.5, pp.339-346 (2004).
- [29] 顏聰、張朝順,「混凝土配比之經濟化模式」,中國土木工程學刊,第二卷,第三期,第 293-300 頁 (1990)。
- [30] Yeh, I-Cheng, "Design of high performance concrete mixture using neural networks," *ASCE, Journal of Computing in Civil Engineering*, Vol.13, No.1, pp.36-42(1999).
- [31] 柯泰至,「以類神經網路建構高性能混凝土工作度模型之研究」,碩士論文,中華大學土木工程學系,新竹(2001)。
- [32] 陳怡成,「以類神經網路作高性能混凝土配比設計之研究」,碩士論文,中華大學土木工程學系,新竹(2001)。
- [33] 張清雲,「實驗計劃法應用於再生混凝土最適化配比設計之研究」,碩士論文,國立台灣科技大學營建工程系,台北(2002)。
- [34] 陳家偉,「以迴歸分析與類神經網路建構高性能混凝土工作度模型之比較研究」,碩士論文,中華大學土木工程學系碩士班,新竹 (2002)。
- [35] 許慶安,「應用類神經網路推估混凝土之抗壓強度」,碩士論文,國立成功大學,台南市 (2002)。
- [36] 詹君治,「非監督式模糊類神經網路應用於混凝土配比設計」,行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告, NSC91-2218-E-231-004 (2003)。
- [37] Yeh, I-Cheng, "Prediction of strength of fly ash and slag concrete by the use of artificial neural networks," *Journal of the Chinese Institute of Civil and Hydraulic Engineering*, Vol.15, No.4, pp.659-663(2003).
- [38] 田耀遠,「田口法應用於混凝土配比設計及交互作用之研究」,博士論文,國立台灣科技大學營建工程系 (2004)。
- [39] Myers, R.H. and Montgomery, D.C., *Response Surface Methodology*, John Wiley & Sons, Ins. (1995).
- [40] Stat-Ease. Inc, *Design-Expert 6 User' s Guide* (2003).
- [41] <http://www.resample.com/xlminer/>
- [42] 張皓博,高性能混凝土配比實驗設計方法之比較研究,碩士論文,中華大學土木與工程資訊學系 (2006)。
- [43] 劉原旭,高性能混凝土最佳化配比設計方法之研究,碩士論文,中華大學土木與工程資訊學系 (2005)。
- [44] 葉怡成、張皓博,「高性能混凝土配比實驗設計方法之比較研究」,技術學刊 (已接受,出

版中)。(NSC 94-2211-E-216-023)

計畫成果自評

混凝土的強度與坍度是混凝土品質的重要因子，由於缺少數理模型，強度、坍度與配比的關係必須透過實驗收集數據，再以迴歸分析或類神經網路建立模型。一般土木材料的實驗設計缺少系統化的方法，因此本研究嘗試以實驗設計 (Design of Experiment) 來設計實驗。本研究除了採用傳統的 D-Optimal 設計方法外，提出二種新的實驗設計方法，(1)自組織映射圖(Self-Organizing Map)設計方法、(2)分層聚類分析 (Hierarchical Cluster Analysis) 設計方法。並以五種實驗數目各自以類神經網路建立強度、坍度預測模型，並與隨機法所建立的模型作比較，以分析三種設計方法的優劣。本研究結果顯示：(1)實驗數目的多寡對於預測模型有明顯的影響。(2)有進行實驗設計的模型相對於隨機法所產生的模型要來得好。(3)對於模型實驗點的配適，D-Optimal 設計方法比自組織映射圖設計方法與分層聚類分析設計方法要來得準確和穩健。

本研究是國科會二年期計畫的第二年，計畫期間指導二篇碩士論文：

1. 張皓博，高性能混凝土配比實驗設計方法之比較研究，碩士論文，中華大學土木與工程資訊學系 (2006)。
2. 劉原旭，高性能混凝土最佳化配比設計方法之研究，碩士論文，中華大學土木與工程資訊學系 (2005)。

並發表相關期刊論文十篇(2005~2007)：

國外期刊

1. Yeh, I-Cheng, "Modeling slump flow of concrete using second-order regressions and artificial neural networks," *Cement and Concrete Composites*, Vol.29, 474-480 (2007). (SCI, EI)
2. Yeh, I-Cheng, "Generalization of strength versus water-cementitious ratio relationship to age," *Cement and Concrete Research*, Vol.36, No.10, 1865-1873 (2006). (SCI, EI)
3. Yeh, I-Cheng, "Computer-aided design for optimum concrete mixture," *Cement and Concrete Composites*, Vol.29, No.3, 193-202 (2007). (SCI, EI)
4. Yeh, I-Cheng, "Analysis of strength of concrete using design of experiments and neural networks," *Journal of Materials in Civil Engineering, ASCE*, Vol.18, No.4, pp.597-604 (2006). (SCI, EI)
5. Yeh, I-Cheng, "Exploring concrete slump model using artificial neural networks,"

J. of Computing in Civil Engineering, ASCE, Vol.20, No.3, pp.217-221 (2006).
(EI, SCI)

國內期刊

6. 葉怡成、陳家偉，「以實驗計劃法與類神經網路建構混凝土的坍流度模型」，技術學刊，第二十卷，第二期，第 153-162 頁 (2005)。
7. 葉怡成、彭釗哲、連立川，「類神經網路與經驗公式在高性能混凝土抗壓強度預測之比較」，技術學刊，第二十卷，第三期，第 261-268 頁 (2005)。
8. 連立川、葉怡成、鄭明淵，「以遺傳演算法及運算樹作高性能混凝土強度建模」，技術學刊，第二十一卷，第一期，第 41-54 頁 (2006)。
9. 葉怡成、張皓博，「高性能混凝土配比實驗設計方法之比較研究」，技術學刊 (已接受，出版中)。
10. Yeh, I-Cheng, “Neural networks for evaluating workability of high-performance concrete,” 技術學刊 (已接受，出版中)。