

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

(I)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC94-2211-E-216-023-

執行期間：94年08月01日至95年07月31日

執行單位：中華大學土木與工程資訊學系

計畫主持人：葉怡成

計畫參與人員：張皓博

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 95 年 10 月 31 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(I)

計畫類別： 個別型計畫 整合型計畫

計畫編號：NSC-94-2211-E-216-023-

執行期間：94年8月1日至95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 95 年 10 月 10 日

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(I)

計劃編號：NSC-93-2211-E-216-001-

執行期限：93/08/01~94/07/31

主持人：葉怡成 中華大學土木工程學系 教授

一、中文摘要（關鍵字：高性能混凝土、配比、實驗設計、D-Optimal）

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。本研究採用傳統的 D-Optimal 設計方法，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。本研究結果顯示：(1)要建立準確的預測模型，強度模型需要 100 個以上的配比實驗；坍度模型只需 50 個以上的配比實驗。(2)D-Optimal 產生的模型相對於隨機法所產生的模型要來得好。

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

design method.

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

二、計畫緣由與目的

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)[2]。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。

在建立模型的方法上，由於類神經網路(Artificial Neural Network, ANN)[3,4]發展至今已擁有十多年的歷史，用在土木工程的預測方面也有良好的成效[5-10]，故本研究採用應用最普遍的倒傳遞神經網路建立預測模型。倒傳遞網路的演算法參考文獻[3,4]。

本文的研究目的在於探討如何利用 D-Optimal 法進行高性能混凝土的實驗設計，並探討實驗數目對於實驗誤差的影響，以提供混凝土配比設計人員參考。

三、研究方法與結果

(一) D-Optimal 方法

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 實驗設計即迴歸係數變異最小化的實驗設計[2]。其原理簡述如下：

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

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (1)$$

其中

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

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

故

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \quad (2)$$

殘差平方和：

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

將上式展開得

$$L = \mathbf{y}'\mathbf{y} - \boldsymbol{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \quad (4)$$

上式第三項 $\mathbf{y}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ 是一個 1×1 矩陣，即純量，

其轉置亦為純量，故

$$\mathbf{y}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = (\mathbf{y}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})' = \boldsymbol{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{y} \quad (5)$$

故第二項與第三項可合併，得

$$L = \mathbf{y}'\mathbf{y} - 2\boldsymbol{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{y} + \boldsymbol{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \quad (6)$$

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 $\boldsymbol{\beta}$ 得

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

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

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。

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

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 $\boldsymbol{\beta}$ 為模型之係數， \mathbf{b} 為估計之係數。估計之係數之協方差 $\text{Cov}(\mathbf{b})$ 為

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\mathbf{b}) &= E\{[\mathbf{b} - E(\mathbf{b})][\mathbf{b} - E(\mathbf{b})]'\} \\ &= \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \end{aligned} \quad (10)$$

其中

σ^2 為殘差之變異數，即

$$\text{Var}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sigma^2 \quad (11)$$

σ^2 代表模型誤差。

估計係數變異 $\text{Var } \mathbf{b}$ 即 $\text{Cov } \mathbf{b}$ 的對角元素，由(10)式可知模型變異 $\text{Var } \mathbf{b}$ 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。

(二) 以 D-Optimal 作為高性能混凝土實驗設計

本研究的流程如下(參考圖 1)：

1. 收集文獻實驗數據

收集具有實驗數據的相關文獻[6]。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。

2. 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；在坍塌度部份，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[4]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 的坍塌度模型。

從圖 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，坍塌度則是 990 左右；以散佈圖來看，強度模型約以 45 度角對稱呈現，坍塌度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。

3. 三、產生候選點

所有的候選點必須滿足文獻[6]中所提到的成份上下限、比例間限制以及體積總和限制。候選點的產生可利用試算表，數據的產生過程如下：

- (1) 隨機產生滿足水泥、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數據。
- (2) 接著將重量單位轉換成體積單位，利用體積總合為 1 m^3 的限制來決定細骨材的體積用量，再將細骨材用量超過體積成份上下限的數據刪除。
- (3) 接下來將不符合比例限制的數據給刪除，最後總共會產生 1934 筆。
- (4) 再將體積單位轉回重量單位。

4. 產生實驗點

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，故取消二階多項式迴歸中所有和粗、細骨材有關的交互作用。

5. 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。

6. 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，將步驟三所產生出來的候選點扣除與訓練範例重複的實驗點當作測試範例，建構實驗預測模型。

7. 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。

四、結論及討論

(一) 結果與討論

隨機預測模型的產生主要是將前節流程步驟四，改以隨機法(RA)來選取實驗點。D-Optimal 與隨機法(重複六次)產生的結果如圖 3 所示。

由圖 3 可以得知，在實驗點數為 20 時，D-Optimal 模型所產生的誤差水準會比較差的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。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。

(二) 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 是有效率之實驗設計法。

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：

1. 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。
2. 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。

五、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，實驗計劃法－製程與產品最佳化，

五南圖書，台北市。

3. 葉怡成，類神經網路-模式應用與實作，儒林圖書公司，台北(2000)。
4. 葉怡成，應用類神經網路，儒林圖書公司，台北(2001)。
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).
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. Yeh, I-Cheng, "Analysis of strength of concrete using design of experiments and neural networks," Journal of Materials in Civil Engineering, ASCE (Accepted) (2006).
8. 柯泰志，「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碩士班，新竹(2001)。
9. 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)。
10. 葉怡成、陳怡成、柯泰至、彭釗哲、柑俊晟與陳家偉，「以類神經網路作高性能混凝土最佳配比設計之研究」，技術學刊，第十七卷，第四期，第 583-591 頁(2002)。

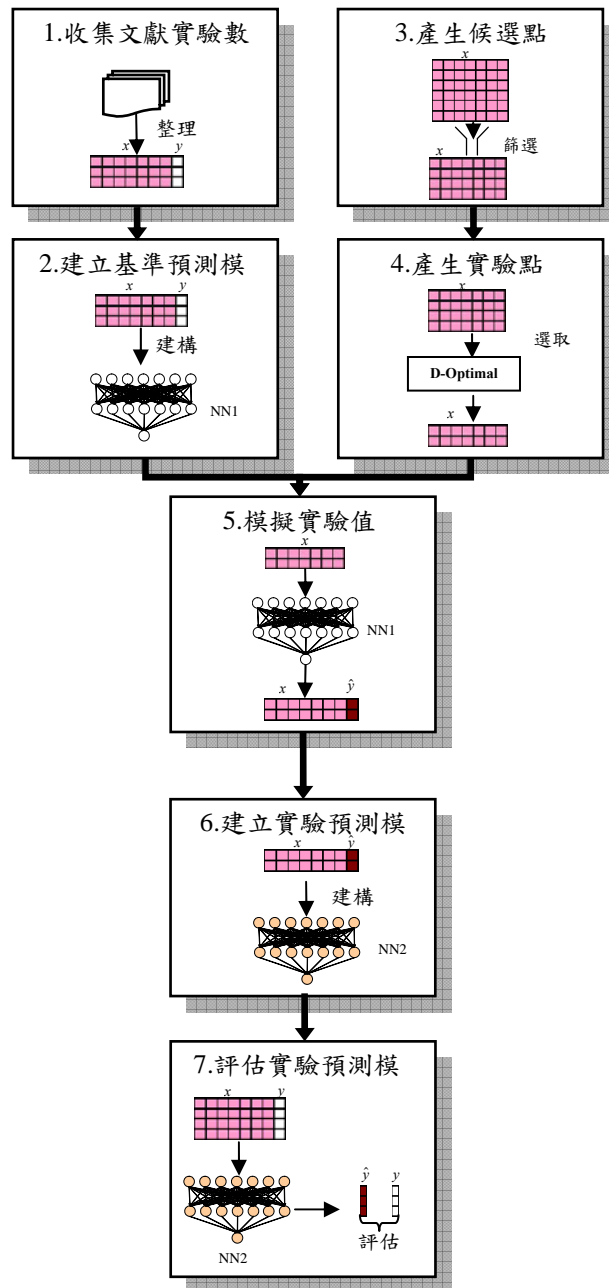
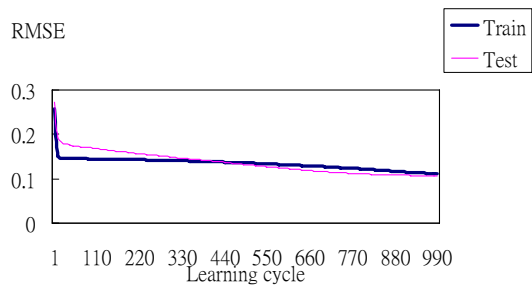
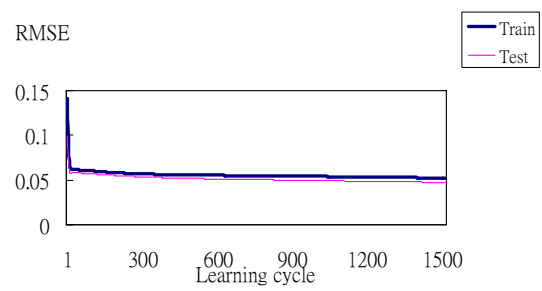


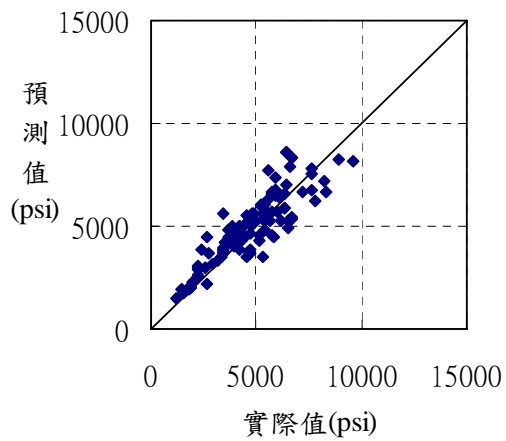
圖 1 研究流程



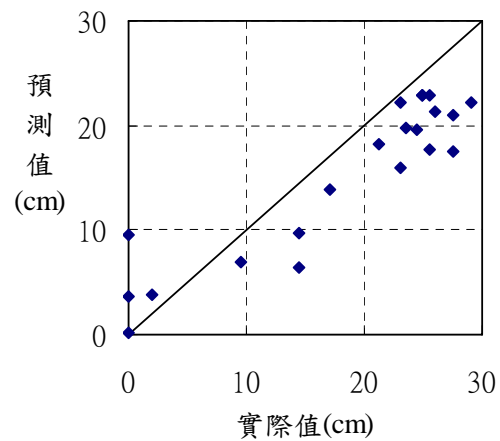
(a) 基準預測模型強度收斂圖



(b) 基準預測模型坍塌度收斂圖

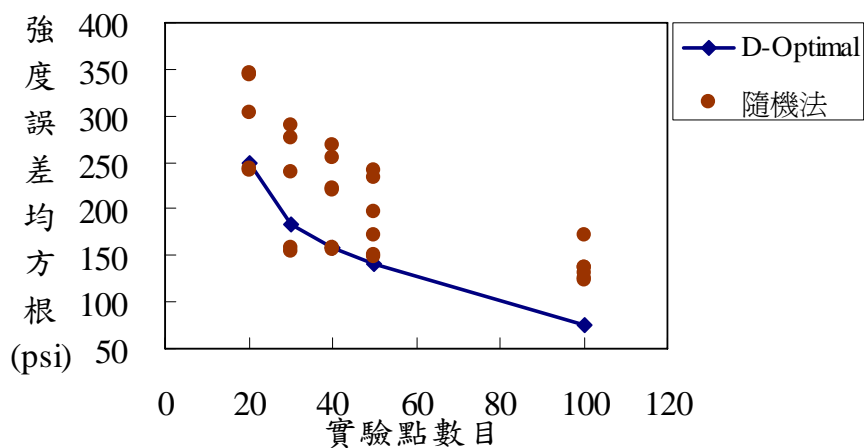


(c) 基準預測模型強度散佈圖

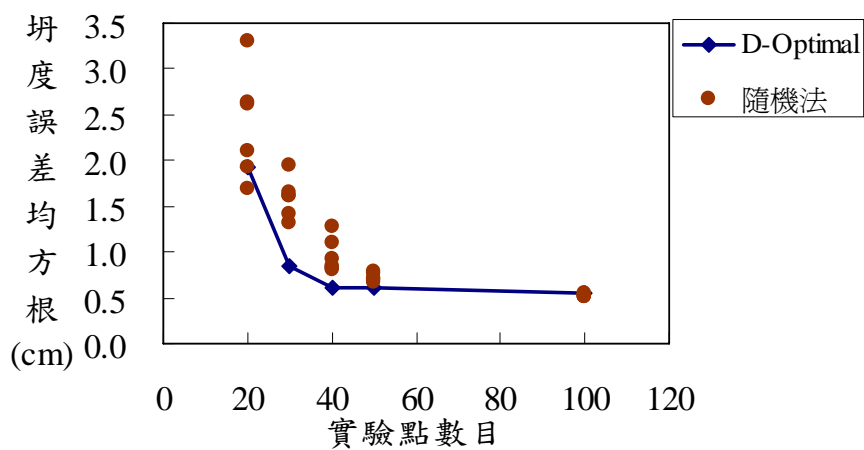


(d) 基準預測模型坍塌度散佈圖

圖 2 基準預測模型之收斂圖與散佈圖



(a)強度誤差與實驗數目之關係



(b)坍塌度誤差與實驗數目之關係

圖 3 D-Optimal 與隨機法(RA)的整理圖