

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ

# МЕТОД КРУТОГО ВОСХОЖДЕНИЯ

*Оптимизация процесса представляет собой целенаправленный поиск значений влияющих факторов, при которых достигается экстремум критерия оптимальности.*

Важно отметить, что как влияющие факторы, так и функции отклика могут изменяться только в определенных пределах. Так, концентрации реагентов не могут быть отрицательными, температура и давление в аппарате не могут превышать безопасных пределов, себестоимость продукции должна быть не выше плановой и т. п. Следовательно, оптимизацию процессов, как правило, осуществляют в условиях *ограничений* на влияющие факторы и функции отклика.

Известные ученые Д. Бокс и К. Уилсон предложили использовать для оптимизации результаты полного или дробного факторного эксперимента [1]. Сущность такой оптимизации состоит в следующем.

# МЕТОД КРУТОГО ВОСХОЖДЕНИЯ

Пусть, например, критерием оптимальности служит функция отклика  $y$ , представленная в виде

$$y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + \dots + b_{12}X_1X_2 + \dots$$

По уравнению регрессии определяют градиент изменения параметра. *Градиентом* называется вектор, направленный в сторону наиболее интенсивного, «крутого» возрастания значения функции.

$$\overline{\text{grad}}y = \sum_{i=1}^k \frac{\partial y}{\partial x_i} \vec{l}_i$$

где  $\vec{l}_i$  – единичный вектор в направлении координаты  $X_i$  факторного пространства.

Поскольку функция отклика аппроксимирована полиномом первой степени вида , нетрудно видеть, что частные производные  $y$  по факторам будут равны соответствующим коэффициентам:

# МЕТОД КРУТОГО ВОСХОЖДЕНИЯ

$$\frac{\partial y}{\partial x_i} = b_i \quad \overline{\text{grad}} y = (\overline{b_1, b_2, \dots, b_k})$$

Ставят ряд опытов в точках, лежащих на градиенте. Для этого выбирается базовый фактор, который оказывает наибольшее воздействие на параметр, т.е. для которого произведение  $b_i \Delta x_i$  является наибольшим; здесь  $\Delta x_i$  – интервал варьирования  $i$ -го фактора.

Затем для базового фактора выбирают шаг движения, с которым будет осуществляться оптимизация. Обычно он берется несколько меньшим шага варьирования. Пусть для примера фактор  $x_1$  будет определяющим, тогда вычисляют отношение

$$\gamma = \frac{\Delta x_1^*}{b_1 \Delta x_1}$$

# МЕТОД КРУТОГО ВОСХОЖДЕНИЯ

Для всех остальных факторов шаги движения к оптимальным значениям рассчитывают по формуле

$$\Delta x_i^* = \gamma b_1 \Delta x_1$$

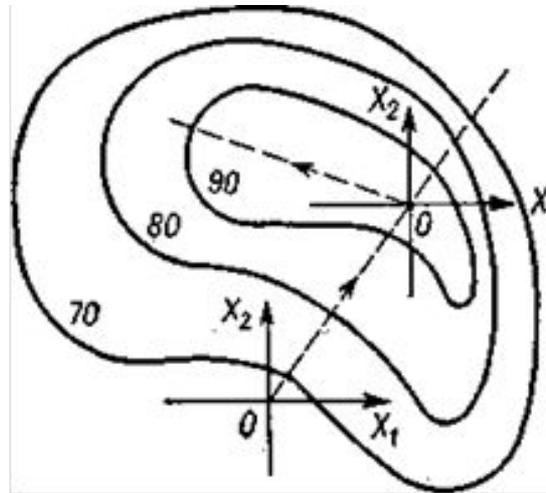
Движение к оптимуму начинают *из центра* плана, который использовался для получения математического описания функции отклика.

Значения факторов на каждом новом шаге находят путем прибавления  $\Delta x_i^*$  к соответствующим предыдущим значениям. Так осуществляется оптимизация по методу *крутого восхождения*.

Если же ищется минимум функции  $y$ , то новые значения факторов находят из предыдущих путем вычитания  $\Delta x_i^*$ . Такой способ оптимизации называют методом *наискорейшего спуска*.

# МЕТОД КРУТОГО ВОСХОЖДЕНИЯ

По данным опытов устанавливают положение *частного экстремума* в данном направлении



Движение к оптимуму прекращают также когда значения одного или нескольких факторов или функций отклика вышли на границы допустимых значений.

# МЕТОД КРУТОГО ВОСХОЖДЕНИЯ

В точке частного экстремума ставят новый факторный эксперимент. Находят уравнение регрессии. Проверяют его адекватность. Ищут направление нового градиента и осуществляют «крутое восхождение» по нему в соответствии с изложенным ранее.

Поиск прекращается, когда линейная модель оказывается неадекватной. Это означает, что достигнута область *оптимума*. В ней ставят *эксперимент второго порядка*, по которому уточняют положение оптимума, или просто принимают наилучший из полученных результатов.

Если же в области оптимума не удастся получить адекватного уравнения регрессии, то проводят анализ выбранных переменных и добавляют новые влияющие факторы либо увеличивают точность эксперимента.



# ПРИМЕР

Пусть в результате полного факторного эксперимента получено адекватное уравнение регрессии

$$y_1 = 35,6 + 1,95x_1 - 1,35x_2.$$

Здесь  $y_1$  – выход продукта реакции,  $x_1$  – температура,  $x_2$  – концентрация реагента. Введем также в рассмотрение функцию отклика  $y_2$ , характеризующую скорость химической реакции ( $\text{кмоль} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{ч}^{-1}$ ).

Требуется выполнение условия  $y_2 \geq 2,5$ .

*Решение.* Допустим, что ограничения на влияющие факторы имеют вид

$$30^\circ \leq x_1 \leq 120^\circ,$$

$$10\% \leq x_2 \leq 70\%.$$

Оптимизируем выход продукта реакции методом крутого восхождения.

В качестве базового фактора возьмем температуру и примем шаг движения на крутом восхождении  $4^\circ$ , тогда

$$\gamma = \frac{\Delta x_1^*}{b_1 \Delta x_1} = \frac{4}{1,95 \cdot 5} = 0,41$$

## ПРИМЕР

Здесь  $\Delta x_1$  взят по условиям предыдущего примера.

Шаг по концентрации на крутом восхождении можно рассчитать по уравнению

$$\Delta x_2^* = \gamma b_2 \Delta x_2 = 0,41(-1,35)1 = -0,55$$

Для удобства ведения эксперимента шаги движения, рассчитанные по данной формуле, можно несколько округлять.

В данном случае удобно принять -0,5 %.

Результаты опытов, выполненных по методу крутого восхождения, приведены в таблице

# ПРИМЕР

Характеристика опыта	$x_1$	$x_2$	$Y_1^э$	$Y_2^э$
Центр плана	50	25	35,1	2,9
Интервал варьирования	5	1	–	–
Шаг движения	4	–0,5	–	–
	Крутое восхождение			
Номер опыта				
1	54	24,5	36,9	3,2
2	58	24,0	37,2	3,7
3	62	23,5	38,5	2,8
4	66	23,0	40,7	2,3
5	70	22,5	38,1	1,9
6	74	22,0	37,2	1,6

*Примечание.*  $Y_1^э$  – экспериментальные значения выхода продукта реакции, %;  $Y_2^э$  – экспериментально найденные скорости реакции, кмоль/(м<sup>3</sup>ч).

# ПРИМЕР

Как видно из таблицы, в опыте №4 достигнут максимальный выход продукта реакции, однако скорость процесса в этом случае меньше допустимого значения.

По-видимому, оптимальным режимом процесса следует считать условия опыта №3.

Ограничения на  $x_1$  и  $x_2$  в ходе оптимизации не нарушены.

# ИСПОЛЬЗУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Саутин С.Н. Планирование эксперимента в химии и химической технологии / С.Н. Саутин. Л. : Химия, 1975.