Математическое моделирование

Задачи оптимизации

СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

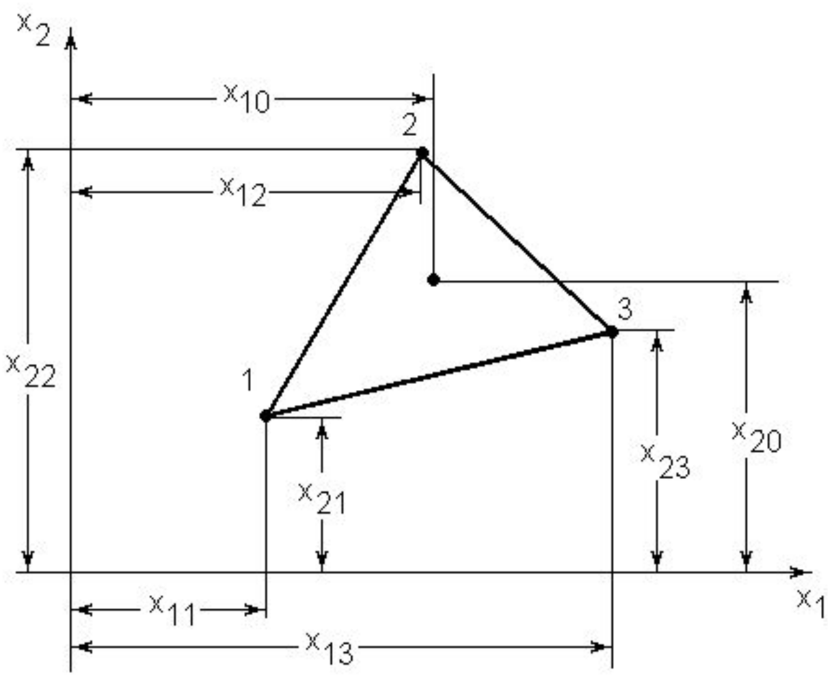
Метод симплексного планирования позволяет без предварительного изучения влияния факторов найти область оптимума. В этом методе не требуется вычисления градиента функции отклика, поэтому он относится к безградиентным методам поиска оптимума. Для этого используется специальный план эксперимента в виде симплекса.

Симплекс — это простейший выпуклый многогранник, образованный n+1 вершинами в n-мерном пространстве, которые соединены между собой прямыми линиями. При этом координаты вершин симплекса являются значениями факторов в отдельных опытах. Так, например, в двухфакторном пространстве (на плоскости) n=2 симплекс — любой треугольник, в трехфакторном (трехмерном) пространстве — тетраэдр и т. д.

Симплекс называется правильным или регулярным, если все расстояния между образующими его вершинами равны (равносторонний треугольник, правильный тетраэдр и др.).

СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

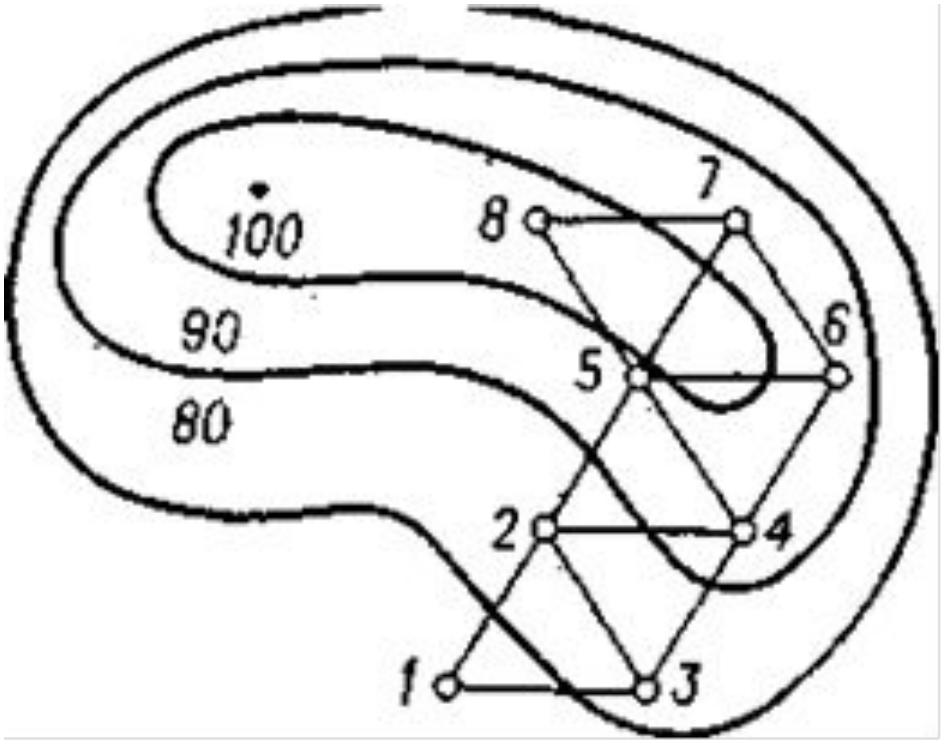
На рис. представлено геометрическое изображение симплекс-метода для двумерного случая n=2.



СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

Сущность симплексного метода оптимизации иллюстрирует следующий рисунок.

Начальная серия опытов соответствует вершинам исходного симплекса (точки 1, 2 и 3*)*. Условия этих первых опытов берутся из области значений факторов, соответствующих наиболее благоприятным из известных режимов оптимизируемого процесса.



СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

Сравнивая между собой результаты опытов в точках 1, 2 и 3, находят среди них самый «плохой» с точки зрения выбранного критерия оптимальности. Пусть, например, самым «неудачным» оказался опыт в точке 1.

Этот опыт исключают из рассмотрения, а вместо него в состав симплекса вводят опыт в точке 4, которая симметрична точке 1 относительно противоположной стороны треугольника, соединяющей точки 2 и 3.

Далее сравнивают между собой результаты опытов в вершинах нового симплекса, отбрасывают самый «неудачный» из них и переносят соответствующую вершину симплекса в точку 5. Затем рассмотренная процедура повторяется в течение всего процесса оптимизации.

Если достигнут экстремум критерия оптимальности, то дальнейшее движение симплекса прекращается. Это значит, что новый шаг возвращает исследователя в предыдущую точку факторного пространства.

СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

Матрица опытов исходного симплекса в *кодированных* переменных приведена в таблице

Номер опыта	X_1	X_2	…	X_{n-1}	X_n	Функция отклика
1	k_1	k_2	…	$k_{(n-1)}$	k_n	y_1
2	$-R_1$	k_2	…	$k_{(n-1)}$	k_n	y_2
3	0	$-R_2$	…	$k_{(n-1)}$	k_n	y_3
…	…	…	…	…	…	…
n–1	0	0	…	$k_{(n-1)}$	k_n	$y_{(n-1)}$
n	0	0	…	$-R_{(n-1)}$	k_n	y_n
n+1	0	0	…	0	$-R_n$	$y_{(n+1)}$

СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

Символом *O* обозначены координаты центра плана, т. е. основной уровень. Величины, входящие в эту таблицу, рассчитываются по следующим формулам:

$$k_i = \sqrt{\frac{1}{2i(i+1)}}$$

$$R_i = ik_i,$$

где *i* – номер фактора в матрице планирования

Опыты, представленные в табл. соответствуют вершинам симплекса, сторона которого равна единице, а центр совпадает с началом координат (в кодированных переменных).

СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

Результаты расчетов для четырех факторов, приведены в табл.

Номер опыта	X_1	X_2	X_3	X_4
1	0,5	0,289	0,204	0,158
2	–0,5	0,289	0,204	0,158
3	0	–0,578	0,204	0,158
4	0	0	–0,612	0,158
5	0	0	0	–0,632

Аналогично можно рассчитать условия исходной серии опытов для большего количества факторов.

Очевидно, наибольшее количество опытов приходится ставить *в начале* эксперимента. Затем на каждом шаге оптимизации выполняется *только один* опыт.

СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

Результаты расчетов для четырех факторов, приведены в табл.

Аналогично можно рассчитать условия исходной серии опытов для большего количества факторов.

Очевидно, наибольшее количество опытов приходится ставить *в начале* эксперимента. Затем на каждом шаге оптимизации выполняется *только один* опыт.

Приступая к оптимизации, необходимо рассчитать матрицу исходной серии опытов в *физических* переменных, преобразуя формулу

$$x_i = x_{i0} + \Delta x_i X_i,$$

где x_{i0} – основной (нулевой уровень);

X_i – кодированная переменная;

Δx_i – интервал варьирования.

СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

В дальнейшем все операции производятся только с физическими переменными. Условия каждого нового опыта рассчитываются по формуле

$$x_i = \frac{2}{n}\left(\sum_{j=1}^{n+1} x_{ji} - x_i^x\right) - x_i^x$$

где *n* – число факторов в матрице планирования;

j – номер опыта;

i – номер фактора;

x_i^* – значение *i*-го фактора в самом «неудачном» опыте предыдущего симплекса.

Следует отметить, что на любом шаге оптимизации, осуществляемой симплексным методом, можно включить в программу исследований *новый фактор,* который до тех пор не принимался во внимание, но оставался на постоянном уровне.

СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

При этом значения всех ранее рассматриваемых факторов перерассчитываются по формуле

$$x_i = \frac{1}{n+1}\sum_{j=1}^{n+1} x_{ji}$$

где $i = 1, 2, ..., n$, т. е. является средним арифметическим значением соответствующих координат предыдущего симплекса.

Значение вновь вводимого фактора определяется по формуле

$$x_{(n+1)} = x_{0(n+1)} + \Delta x_{(n+1)}\left(R_{(n+1)} + k_{(n+1)}\right)$$

где $x_{0(n+1)}$ – основной уровень этого фактора;

$\Delta x_{(n+1)}$ – выбранный шаг варьирования для данного фактора

добавление нового фактора в состав *полного факторного* эксперимента сопровождается увеличением количества опытов *вдвое.* В этом смысле симплексный метод имеет очевидное *преимущество*

ПРИМЕР

Пусть требуется с помощью симплексного метода оптимизировать выход целевого продукта y (%), который получается при взаимодействии двух реагентов с концентрациями x_1 и x_2 (кмоль/м^3) при температуре x_3 (°C).

Решение. Выберем основные уровни и шаги варьирования факторов и сведем их в таблицу

Фактор	Основной уровень	Шаг варьирования
x_1 (кмоль/м^3)	1,0	0,1
x_2 (кмоль/м^3)	1,5	0,2
x_3 (°C)	60,0	5,0

ПРИМЕР

Рассчитаем условия проведения первых четырех опытов:

$x_{11} = 1+0,1 \cdot 0,5 = 1,05;$ $x_{12} = 1,50+0,2 \cdot 0,289 = 1,56;$ $x_{13} = 60+5 \cdot 0,204 = 61;$	$x_{21} = 1+0,1(-0,5) = 0,95;$ $x_{22} = 1,50+ ,2 \cdot 0,289 = 1,56;$ $x_{23} = 60+5 \cdot 0,204 = 61,$
$x_{31} = 1+0,1 \cdot 0 = 1;$ $x_{32} = 1,50+0,2(-0,578) = 1,38;$ $x_{33} = 60+5 \cdot 0,204 = 61;$	$x_{41} = 1+0,1 \cdot 0 = 1;$ $x_{42} = 1,50+0,2 \cdot 0 = 1,5;$ $x_{43} = 60+5 (-0,612) = 57.$

ПРИМЕР

Полученные результаты сведем в табл. Здесь первый индекс обозначает номер опыта, а второй – номер фактора.

Сравнивая между собой результаты первых четырех опытов, видим, что самый низкий выход целевого продукта получился в третьем опыте. Этот опыт следует исключить из дальнейшего рассмотрения

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	Функция отклика
1	1,05	1,56	61	72,3
2	0,905	1,56	61	70,1
3	1,00	1,38	61	65,4
4	1,00	1,50	57	68,2
5	1,00	1,70	58	73,9
6	1,00	1,72	63	76,5

ПРИМЕР

Заменим его опытом № 5

$$x_{51} = 2/3(1{,}05+0{,}905+1+1-1)-1 = 1;$$

$$x_{52} = 2/3(1{,}56+1{,}56+1{,}38+1{,}5-1{,}38)-1{,}38 = 1{,}7;$$

$$x_{53} = 2/3(61+61+61-57-67)-67 = 58.$$

В новом симплексе, образованном опытами №1, 2, 4 и 5, самым «неудачным» является опыт №4. Его заменим опытом №6, условия которого найдем, пользуясь той же формулой.

Далее процедура оптимизации может быть продолжена аналогично.

ПРИМЕР

Рассмотрим теперь вопрос о том, как включить в программу исследований еще один фактор, например скорость вращения мешалки. Пусть до этих пор она была постоянной и равной 500 об/мин. Теперь будем считать эту величину фактором x_4 и примем для нее шаг варьирования Δx_4=100 об/мин.

Предыдущий симплекс для трех факторов (табл. 9.5) состоит из опытов № 1, 2, 5 и 6. Для того чтобы из него получить новый симплекс для четырех факторов, введем опыт №7

Условия проведения опыта №7 найдем по формулам:

$$x_{71} = 1/4(1{,}05+0{,}95+2\cdot 1{,}00) = 1{,}00,$$

$$x_{72} = 1/4(2\cdot 1{,}56+1{,}70+1{,}72) = 1{,}64,$$

$$x_{73} = 1/4(2\cdot 61+58+63) = 61,$$

$$x_{74} = 500+100(0{,}632+0{,}158) = 579 \approx 580.$$

Далее оптимизацию можно продолжить с учетом всех четырех факторов, пользуясь рассмотренной выше процедурой.

ПРИМЕР

Симплексный план эксперимента для четырех факторов

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	Функция отклика
1	1,05	1,56	61	500	72,3
2	0,95	1,56	61	500	70,1
5	1,00	1,70	58	500	73,9
6	1,00	1,72	63	500	76,5
7	1,00	1,64	61	580	78,1

СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

Таким образом, при симплекс-планировании:

1) удается резко снизить число экспериментов по сравнению с методом полного факторного эксперимента, где, кроме того, добавление каждого нового фактора требует удвоения всего числа экспериментов, а при симплекс-планировании – только одного нового опыта (если выбрано правильное направление) и еще одного (если выбрано неправильное направление);

2) получаемые результаты не зависят от формы поверхности отклика, так как из всех данных нас интересуют худшие результаты, и при отрицательных результатах экспериментатор возвращается назад и повторяет «кантование» симплекса;

3) не требуется проведения расчетов. Метод может быть также применен при изучении процессов, в которых функцию выхода нельзя измерить количественно, а можно только оценить полуколичественно или даже чисто качественно. При этом правила движения к оптимуму не теряют своей строгости.

СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД ПЛАНИРОВАНИЯ

Вместе с тем, используя метод симплекс-планирования:

1. Мы никогда не сможем оценить роль отдельных факторов;

2. При исследовании сложных процессов не получим никакой информации о взаимодействии факторов.

К тому же экспрессность метода симплекс-планирования проявляется в полной мере лишь в тех случаях, когда затраты времени на проведение самого эксперимента незначительны и основное время экспериментатора уходит на расчеты (в случае постановки полного факторного эксперимента). В тех же случаях, когда эксперимент по своей природе является длительным (недели и месяцы), применение метода симплекс-планирования нерационально, так как последовательность получения точек может растянуться на неопределенно долгий срок, ибо построение следующего симплекса невозможно, прежде чем не будет реализован предыдущий. В этом случае целесообразно использование метода полного факторного эксперимента, позволяющего одновременно поставить хотя и большее число вариантов, но зато получить более полное представление о влиянии факторов и условиях движения к оптимуму.

ИСПОЛЬЗУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

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