Дисциплина

Моделирование химическо-технологических процессов

Тема №6

Другие методы построения моделей 2-го порядка

Воробьев Евгений Сергеевич

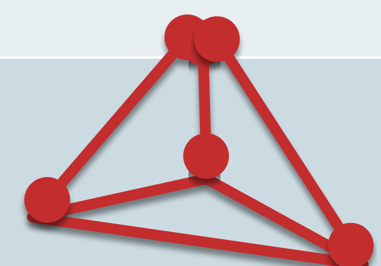
Введение в метод

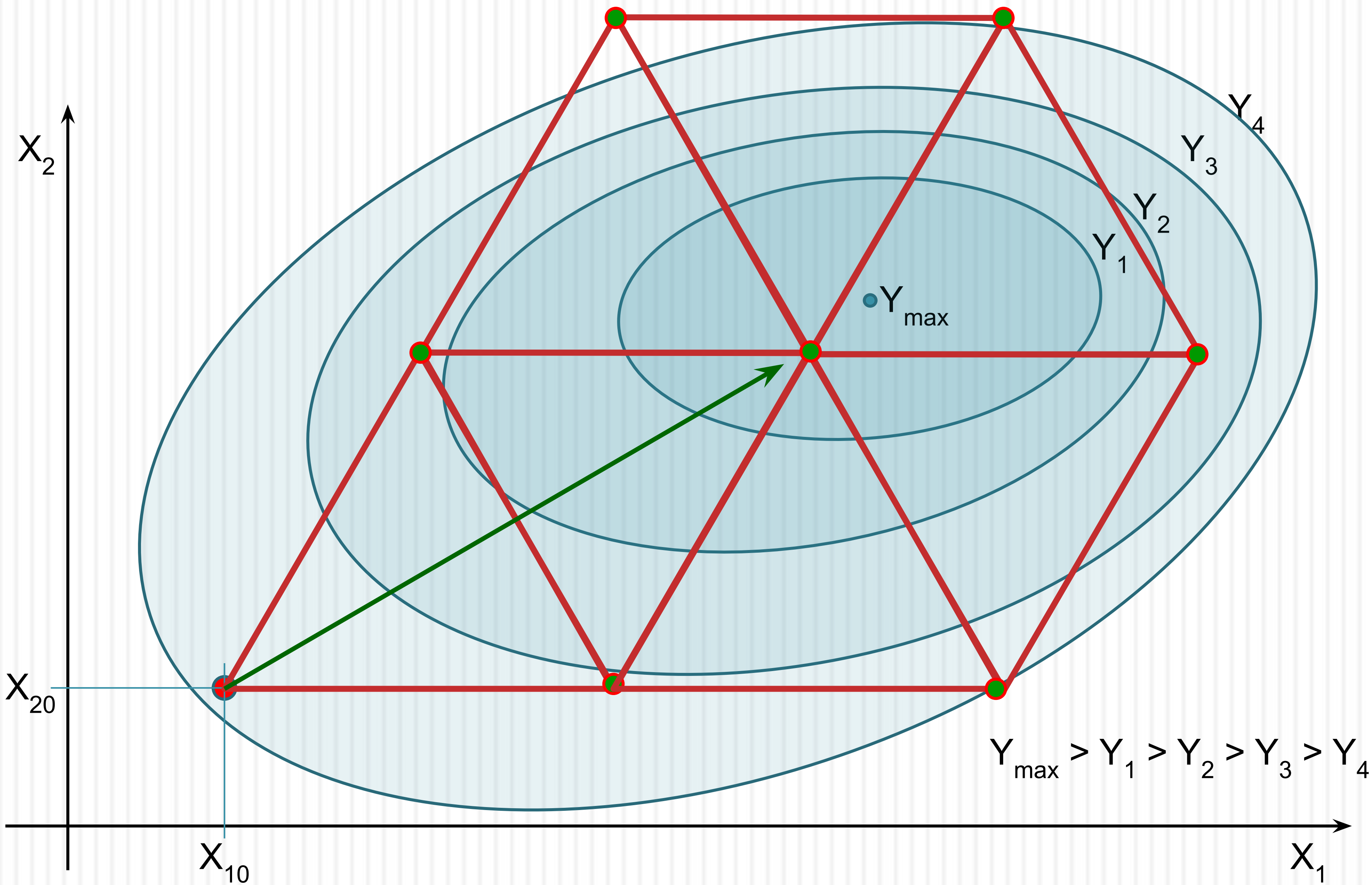
Симплекс-метод, известный также под названием метода последовательного улучшения плана, впервые разработал Г. Данциг в 1947 г.

Этот метод позволяет переходить от одного допустимого базисного решения к другому, причем так, что значения целевой функции непрерывно возрастают. В результате оптимальное решение находят за конечное число шагов.

Симплексные методы оптимизации

Симплекс – это фигура, имеющая на 1 вершину больше, чем размерность факторного пространства:

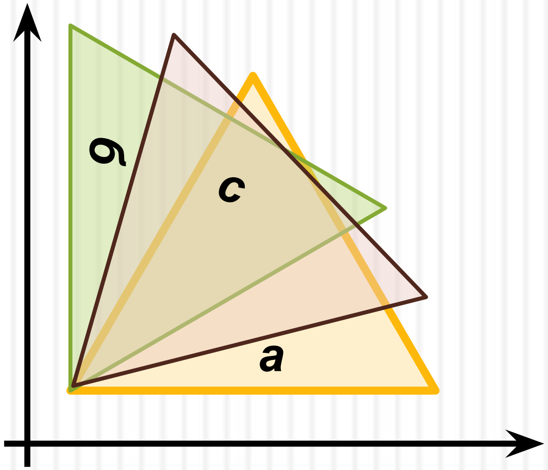
Факторное пространство n	Число вершин симплекса	Фигура
1	**2**	Отрезок линии 
2	**3**	Треугольник 
3	**4**	Пирамида 


X_2
X_{20}
X_{10}
X_1
Y_4
Y_3
Y_2
Y_1
Y_{max}
$Y_{max} > Y_1 > Y_2 > Y_3 > Y_4$

Симплексные методы оптимизации, алгоритм

1. Оцениваются априорные сведения о процессе и выбираются интервалы варьирования по каждому из значимых факторов, необходимые для определения ребра симплекса. Область проведения поиска должна включать в себя не менее 8 симплексов. Например, имеем два параметра: температура в интервале от 100 до 200 градусов и давление от 1 атмосферы до 5 атмосфер. Для данного факторного пространства одной кодированной единице по температуре будет соответствовать около 10 градусов, а по давлению – около 0,4 атмосферы;

2. Задается значение ребра симплекса в единицах варьирования соответствующих переменных (проводится их кодирование). Ребро симплекса обычно принимается равным **единице**. Факторное пространство изменяется в кодированных значениях от 0 до минимум 8 единиц. По каждому параметру кодированной единице пространства



3. Проводится первоначальная ориентация симплекса в факторном пространстве: вдоль одной из осей факторного пространства (***а***, ***б***), или в промежутке между ними (***с***). Два первых варианта упрощают расчеты координат точек, но ведут поиск вдоль одного из параметров;

4. Рассчитываются координаты точек симплекса сначала в кодированных значениях, потом переводятся в натуральные и реализуется исследования на объекте. Например, для указанной ранее температуры имеем ось в кодированных значениях от 0 до 10, что соответствует натуральным значениям от 100 до 200 и через пропорцию находим температуру в натуральных единицах;

5. Симплекс перемещается по факторному пространству за счет замены вершины симплекса с наихудшем значением по сравнению с остальными вершинами на вершину, являющуюся зеркальным отображением отброшенной вершины.

Симплексные методы оптимизации, расчеты

Построение первого симплекса выполняется по геометрическим формулам для построения равносторонней фигуры, например, для 2-х параметрической модели строим равносторонний треугольник с углами, равными 60 градусов. Первая точка задается произвольно, вторая точка лежит вдоль одной из координат факторного пространства на расстоянии 1 и третья точка вычисляется через тригонометрические функции Sin(60) и Cos(60), что дает (0,866; 0,5);

Нахождение зеркальной точки выполняется тоже геометрически через определение центра тяжести оставшейся фигурки (для n=2 – это отрезок линии), который вычисляется как среднее значение координат её точек. Для построения новой точки к координатам центра тяжести добавляются расстояния от него до худшей точки с учетом

Как только симплекс завершит оборот вокруг экстремума, можно переходить к расчету коэффициентов уравнения регрессии в виде полинома второго порядка со взаимосвязями, мы имеем семь экспериментальных точек и уравнение с шестью неизвестными. Используя метод наименьших квадратов подбираем наилучшие коэффициенты для описания полученных данных.

Данные подход кажется более простым, но имеет основной недостаток – трудно выбрать правильный размер симплекса, небольшой размер приведет к медленному поиску области экстремума и малых размеров области для хорошего описания экстремума из-за точности используемой методики Большой размер симплекса может сразу же увести поиск за пределы факторного пространства.

Факторный эксперимент при изучении смесевых систем

Задача факторного эксперимента при изучении смесевых систем не отличается от задачи факторного эксперимента второго порядка (ЦКП). Однако здесь надо учитывать условие:

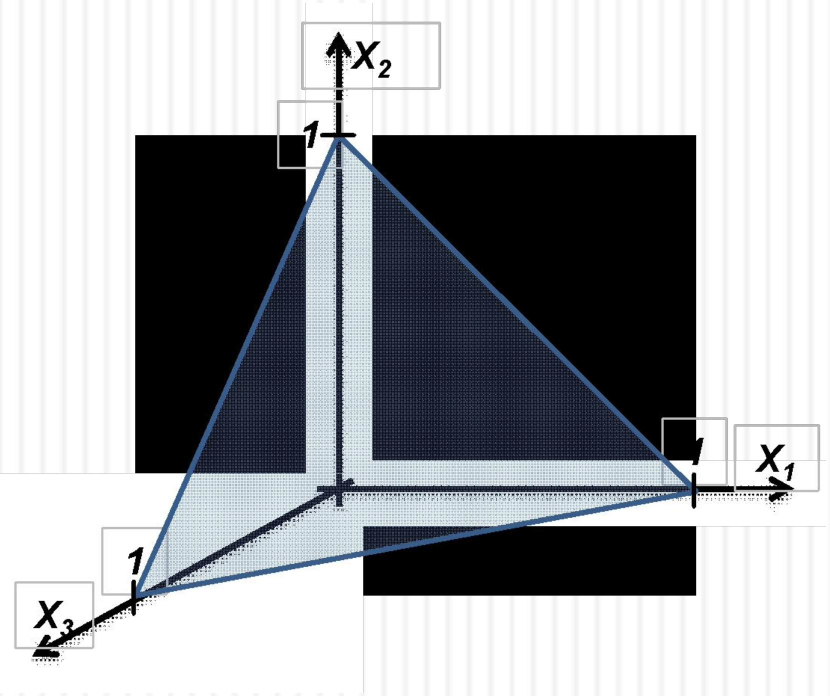
$$\sum_{i=1}^{n} x_i = 1, \quad 0 \le x_i \le 1$$

Применять методы ПФЭ нельзя из-за условия вырожденности матрицы, поэтому используется полином, в котором отсутствует свободный член. Он легко получается при следующий условиях из обычного полинома:

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1 \Rightarrow x_3 = 1 - x_1 - x_2$$

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^{n} \beta_i x_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \ne j}}^{n} \beta_{ij} x_i x_j + \ldots$$

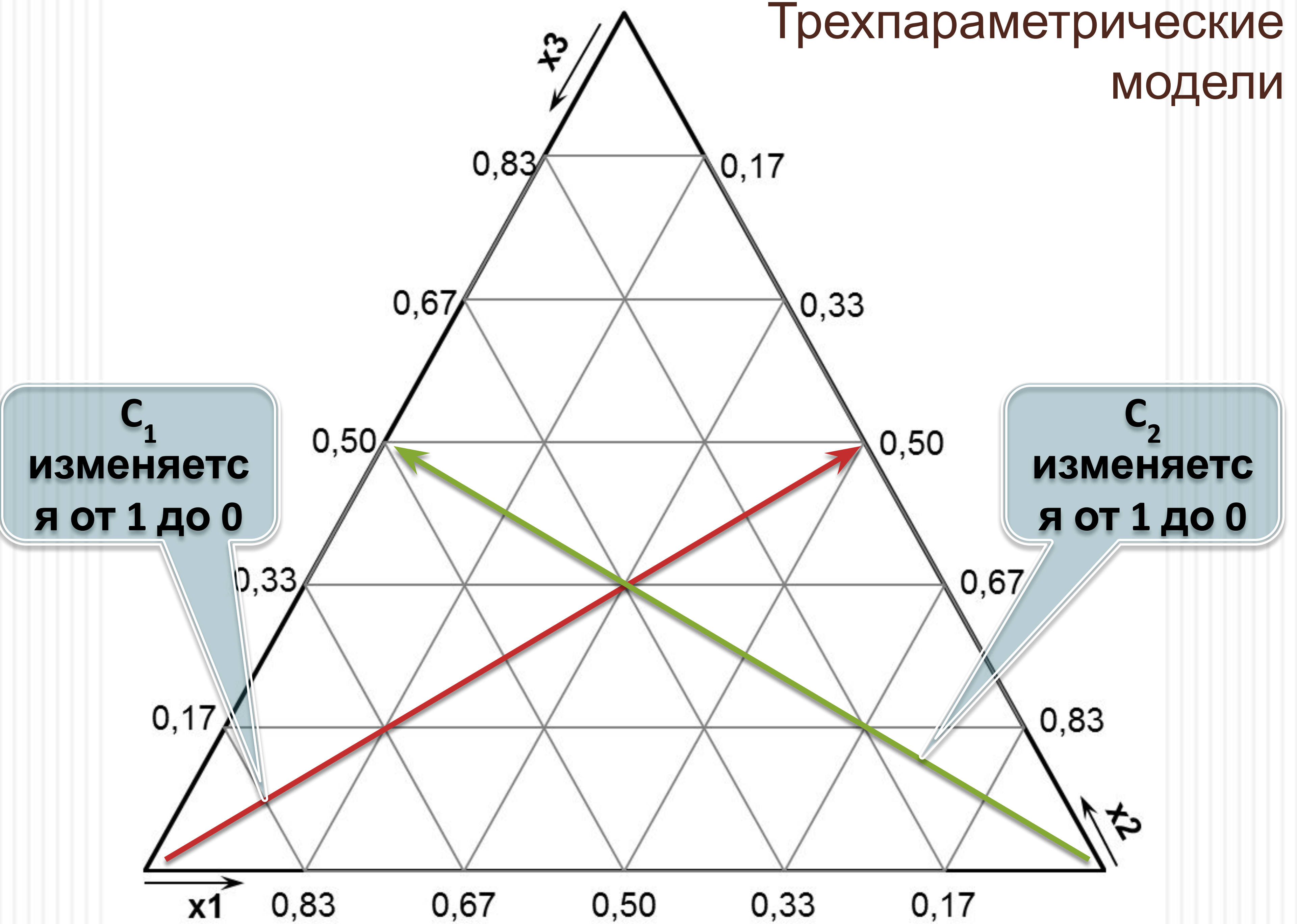
Симплекс-решетчатые планы Шеффе



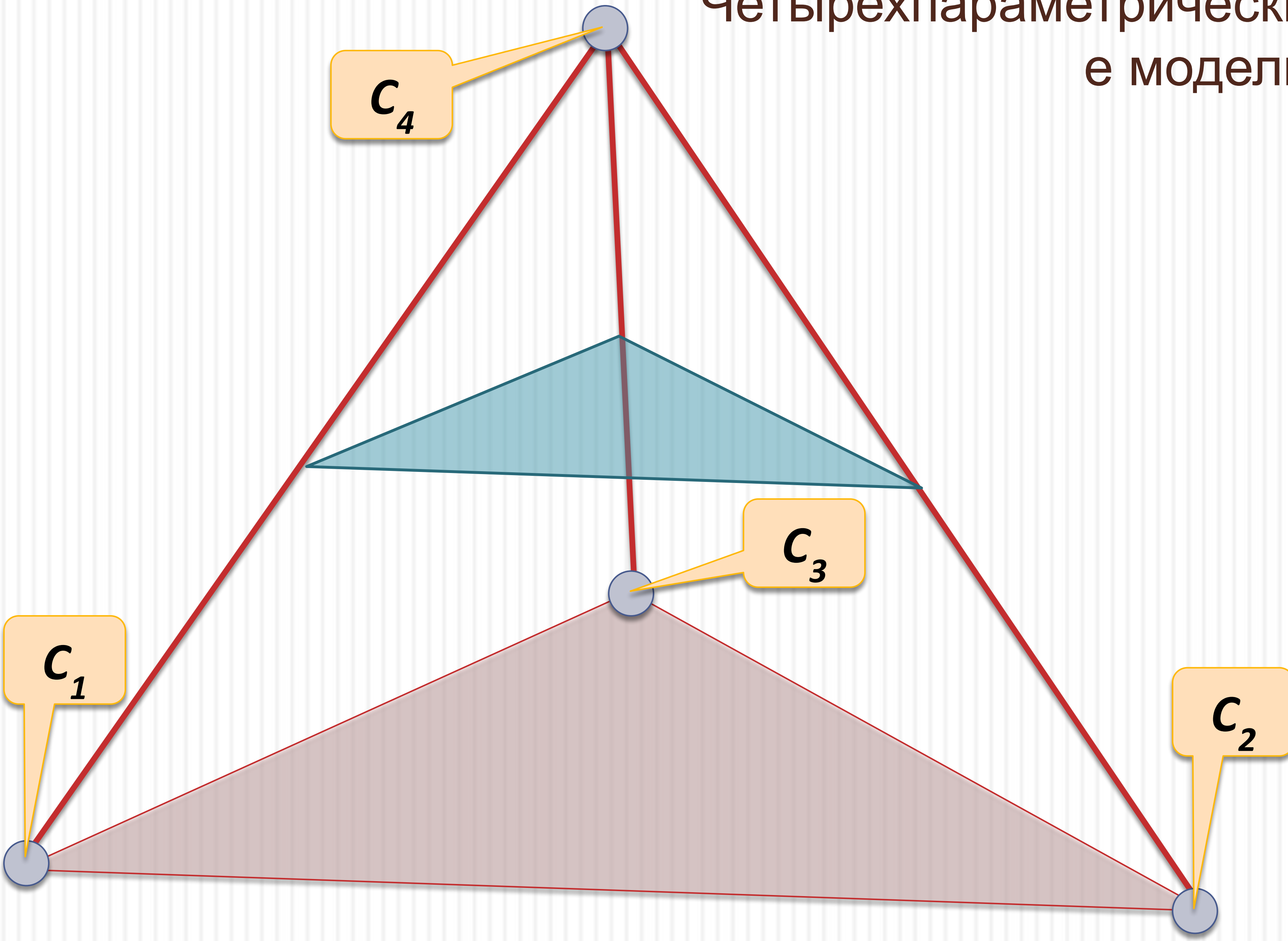
Геометрическое место точек, для условия $x_1+x_2+x_3=1$ является правильным n-1 симплексом. Тогда факторное пространство можно представить в n-1 мерном пространстве в виде, например треугольника для $n=3$.

Планирование на симплексах осуществляется равномерным разбросом экспериментальных точек. Получаются $\{n, m\}$ -решетки, где n — число компонентов смеси; m — порядок полинома.

Трехпараметрические модели



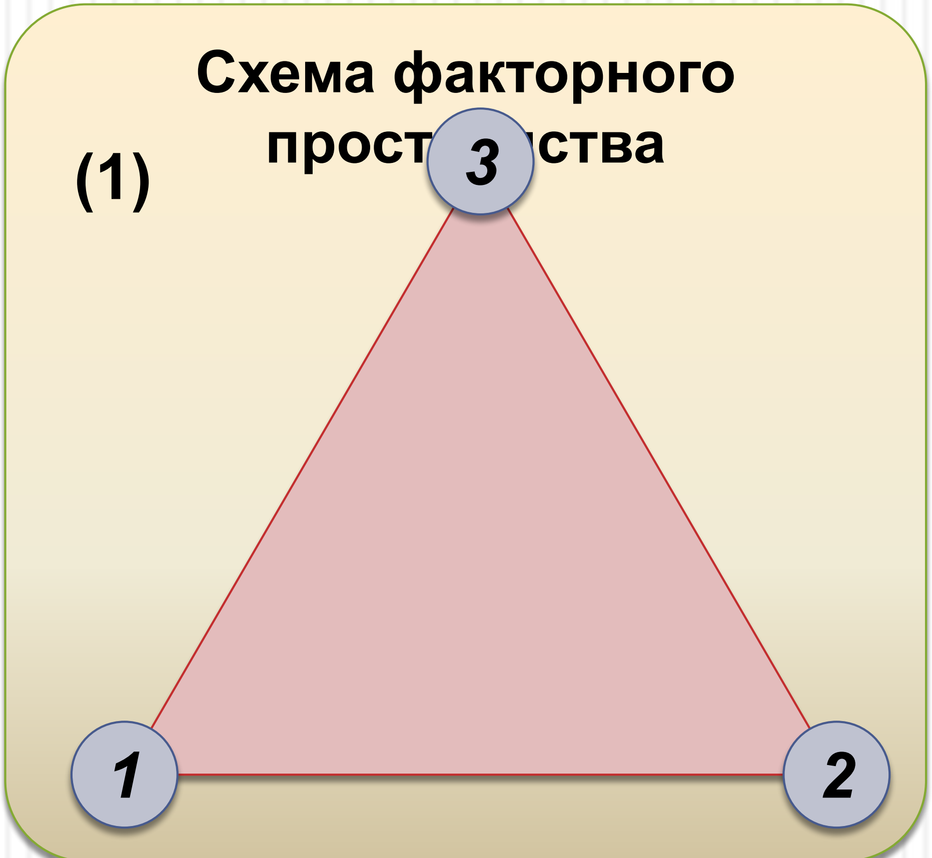
Четырехпараметрически
е модели



Трехпараметрические модели

Модель первого порядка

$$Y = \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3$$

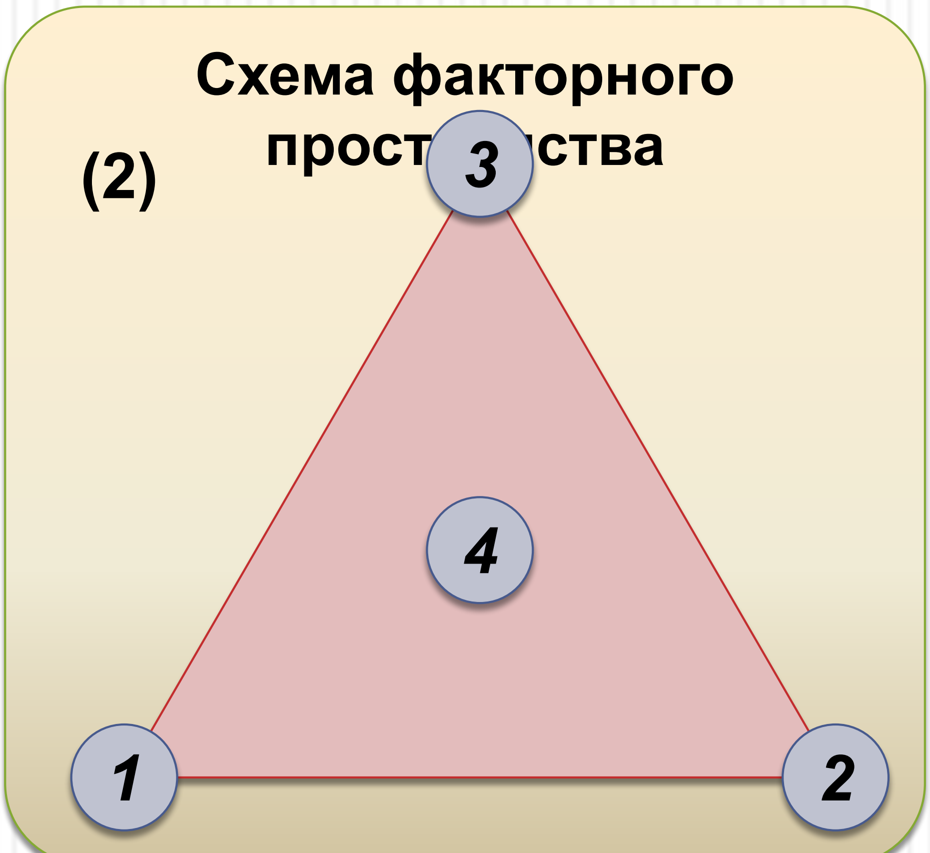


План экспериментов				
№	X_1	X_2	X_3	Y
1	1	0	0	Y_1
2	0	1	0	Y_2
3	0	0	1	Y_3

Трехпараметрические модели

Модель первого порядка с центральной точкой

$$Y = \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_2 X_3 + \beta_{123} X_1 X_2 X_3$$



План экспериментов

№	X_1	X_2	X_3	Y
1	1	0	0	Y_1
2	0	1	0	Y_2
3	0	0	1	Y_3
4	0,33	0,33	0,34	Y_4

Трехпараметрические модели

Модель первого порядка с тремя точками внутри решетки

$$Y = \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{1123} X_1^2 X_2 X_3 + \beta_{1223} X_1 X_2^2 X_3 + \beta_{1233} X_1 X_2 X_3^2$$

Схема факторного пространства

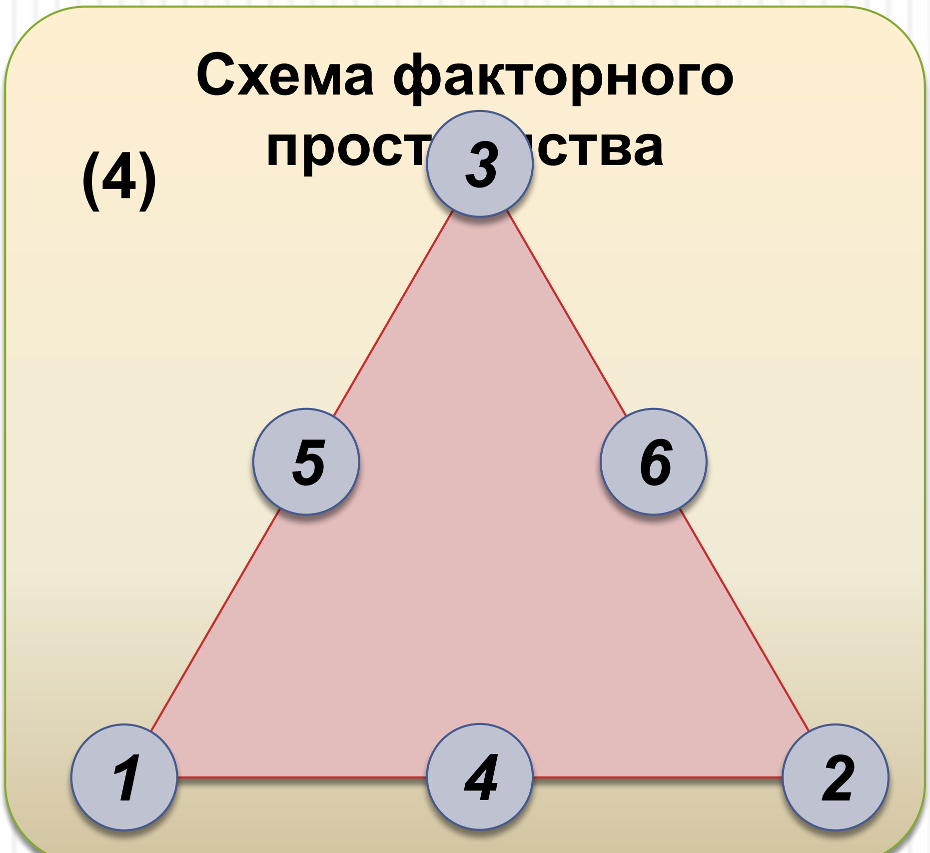
План экспериментов

№	X_1	X_2	X_3	Y
1	1	0	0	Y_1
2	0	1	0	Y_2
3	0	0	1	Y_3
4	0,5	0,25	0,25	Y_4
5	0,25	0,5	0,25	Y_5
6	0,25	0,25	0,5	Y_6

Трехпараметрические модели

Модель второго порядка

$$Y = \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3$$



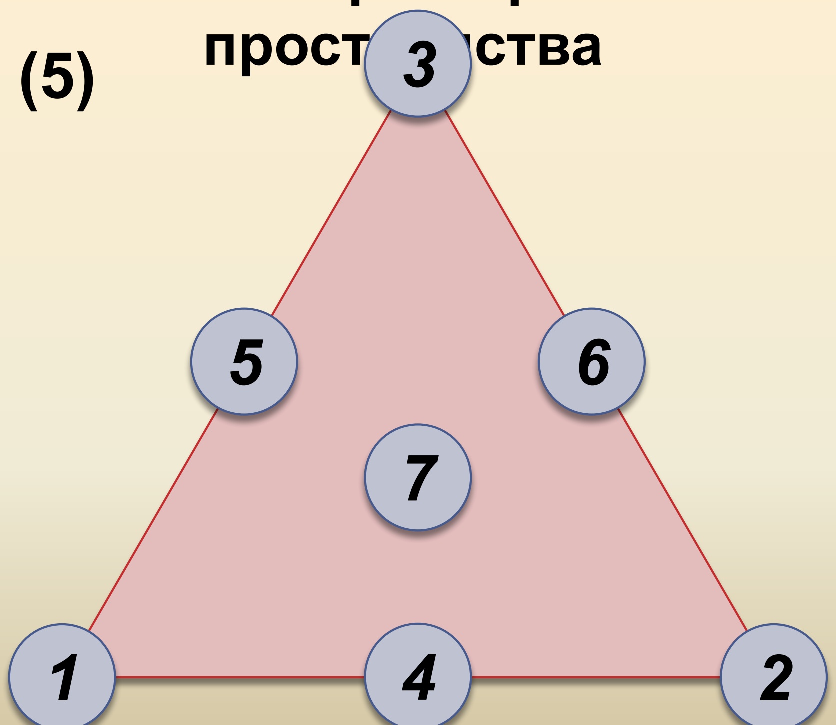
План экспериментов				
№	X_1	X_2	X_3	Y
1	1	0	0	Y_1
2	0	1	0	Y_2
3	0	0	1	Y_3
4	0,5	0,5	0	Y_4
5	0,5	0	0,5	Y_5
6	0	0,5	0,5	Y_6

Модель второго порядка с центральной точкой

$$Y = \beta_1X_1 + \beta_2X_2 + \beta_3X_3 + \beta_{12}X_1X_2 + \beta_{13}X_1X_3 + \beta_{23}X_2X_3 + \beta_{123}X_1X_2X_3$$

Схема факторного пространства

(5)



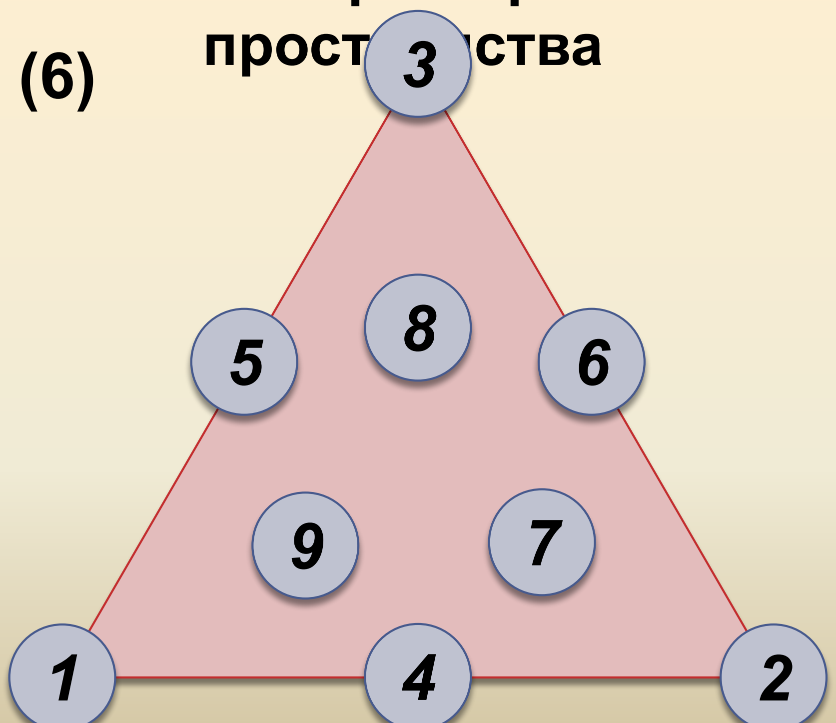
План экспериментов				
№	X_1	X_2	X_3	Y
1	1	0	0	Y_1
2	0	1	0	Y_2
3	0	0	1	Y_3
4	0,5	0,5	0	Y_4
5	0,5	0	0,5	Y_5
6	0	0,5	0,5	Y_6
7	0,33	0,33	0,34	Y_7

Модель второго порядка с тремя точками внутри решетки

$$Y = \beta_1X_1 + \beta_2X_2 + \beta_3X_3 + \beta_{12}X_1X_2 + \beta_{13}X_1X_3 + \beta_{23}X_2X_3 +$$
$$\beta_{1123}X_1^2X_2X_3 + \beta_{1223}X_1X_2^2X_3 + \beta_{1233}X_1X_2X_3^2$$

Схема факторного пространства

(6)



План экспериментов

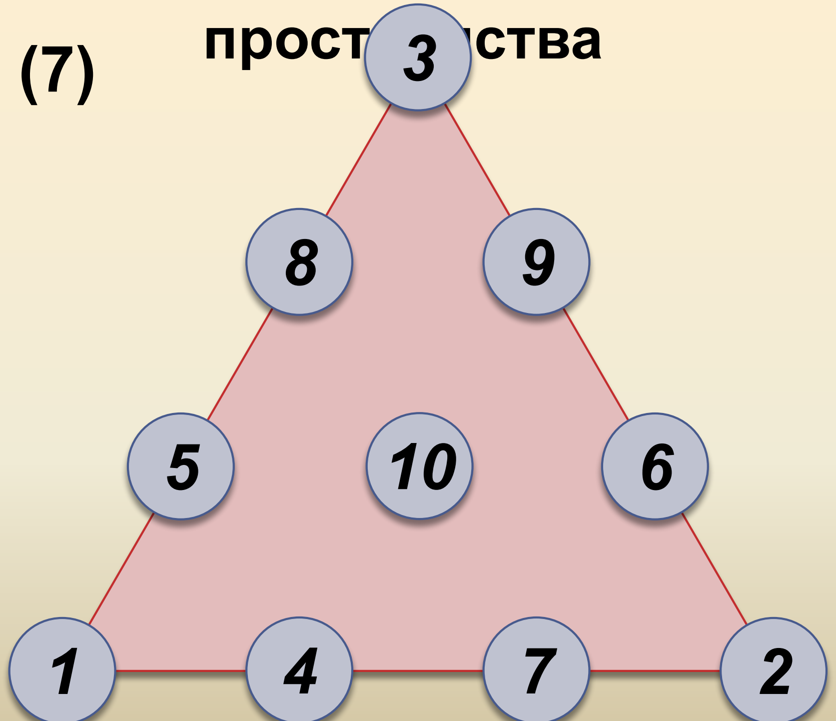
№	X_1	X_2	X_3	Y
1	1	0	0	Y_1
2	0	1	0	Y_2
3	0	0	1	Y_3
4	0,5	0,5	0	Y_4
5	0,5	0	0,5	Y_5
6	0	0,5	0,5	Y_6
7	0,5	0,25	0,25	Y_7
8	0,25	0,5	0,25	Y_8
9	0,25	0,25	0,5	Y_9

Модель третьего порядка

$$Y = \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{123} X_1 X_2 X_3 + \gamma_{12} X_1 X_2 (X_1 - X_2) + \gamma_{13} X_1 X_3 (X_1 - X_3) + \gamma_{23} X_2 X_3 (X_2 - X_3)$$

Схема факторного пространства

(7)



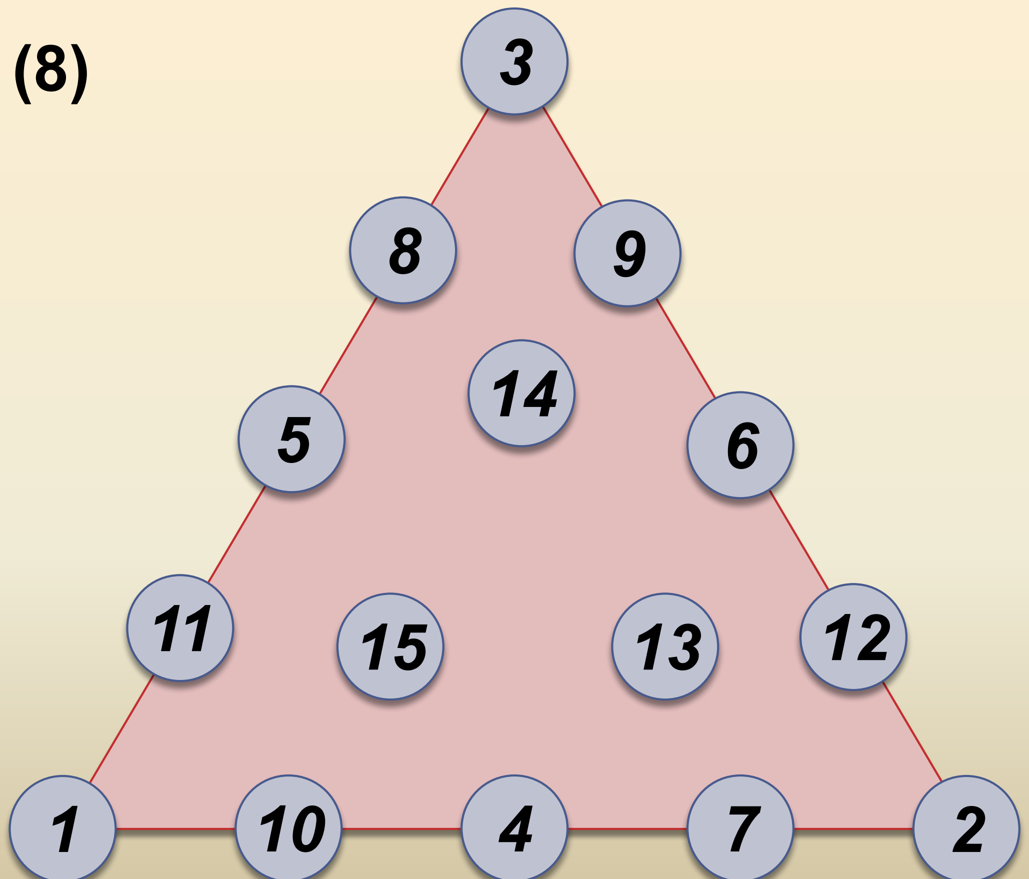
План экспериментов				
№	X_1	X_2	X_3	Y
1	1	0	0	Y_1
2	0	1	0	Y_2
3	0	0	1	Y_3
4	0,33	0,67	0	Y_4
5	0,33	0	0,67	Y_5
6	0	0,33	0,67	Y_6
7	0,66	0,34	0	Y_7
8	0,66	0	0,34	Y_8
9	0	0,66	0,34	Y_9
10	0,33	0,33	0,34	

Модель четвертого порядка

$$Y = \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3 +$$
$$+ \gamma_{12} X_1 X_2 (X_1 - X_2) + \gamma_{13} X_1 X_3 (X_1 - X_3) + \gamma_{23} X_2 X_3 (X_2 - X_3) +$$
$$\delta_{12} X_1 X_2 (X_1 - X_2)^2 + \delta_{13} X_1 X_3 (X_1 - X_3)^2 + \delta_{23} X_2 X_3 (X_2 - X_3)^2 +$$
$$\beta_{1123} X_1^2 X_2 X_3 + \beta_{1223} X_1 X_2^2 X_3 + \beta_{1233} X_1 X_2 X_3^2$$

Схема факторного пространства

(8)



План экспериментов				
№	X_1	X_2	X_3	Y
1	1	0	0	Y_1
2	0	1	0	Y_2
3	0	0	1	Y_3
4	0,5	0,5	0	Y_4
5	0,5	0	0,5	Y_5
6	0	0,5	0,5	Y_6
7	0,25	0,75	0	Y_7
8	0,25	0	0,75	Y_8

Продолжение плана				
№	X_1	X_2	X_3	Y
9	0	0,25	0,75	Y_9
10	0,75	0,25	0	Y_{10}
11	0,75	0	0,25	Y_{11}
12	0	0,75	0,25	Y_{12}
13	0,5	0,25	0,25	Y_{13}
14	0,25	0,5	0,25	Y_{14}
15	0,25	0,25	0,5	Y_{15}

Композиционность моделей

В зависимости от стоящих задач построение моделей может идти по разным путям от простых к сложным.

При отсутствии экстремумов функции в факторном пространстве усложнение моделей идет по цепочке:

- Модель 1

Точка для проверка

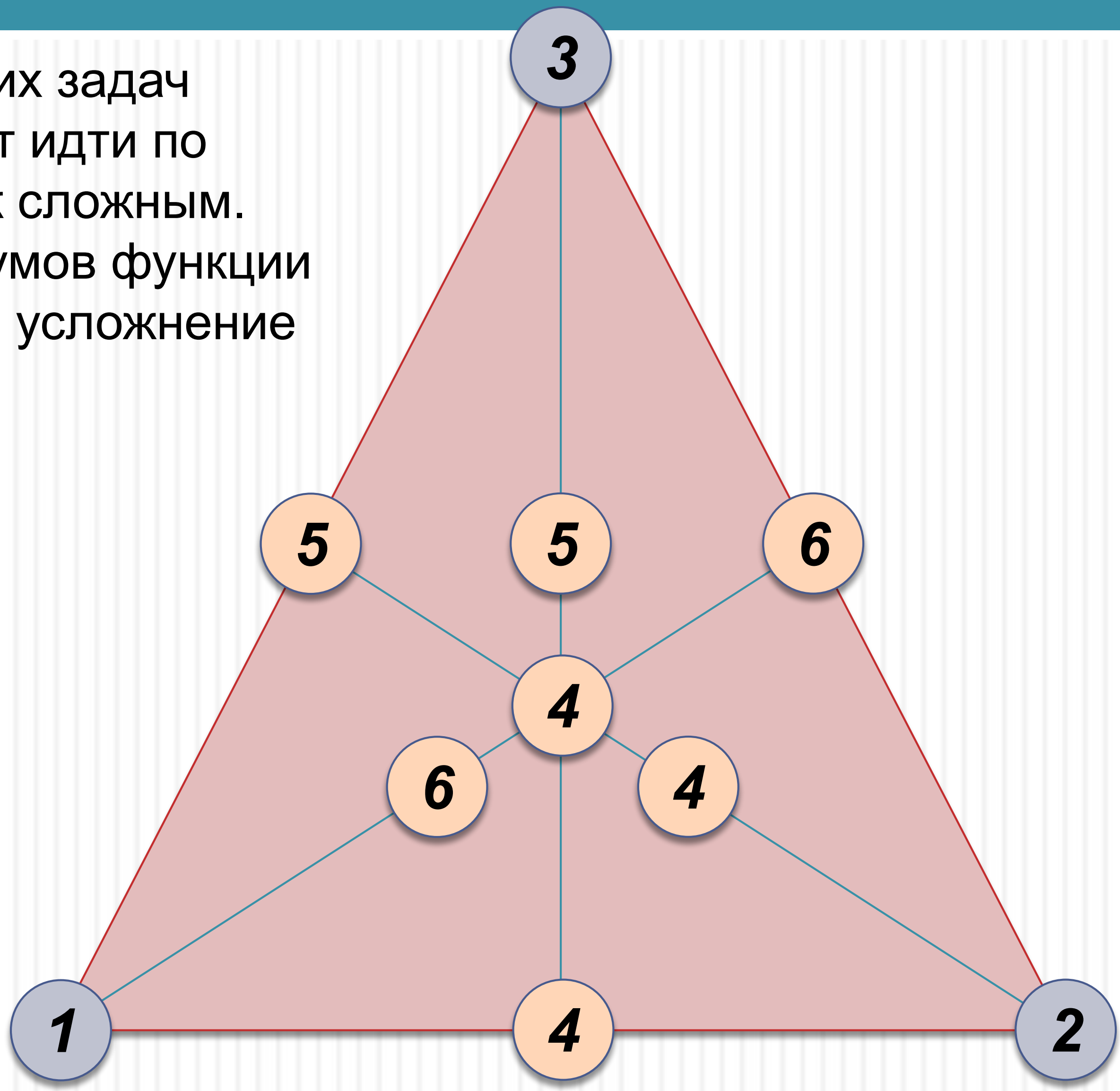
- Модель 2

Точки для проверки

- Модель 3

Точки для проверки

- Модель 4



Композиционность моделей

Если в факторном пространстве может присутствовать экстремум функции то подбор модели можно проводить по следующей цепочке:

- Модель 2

Точки для проверка

- Модель 4

Точки для проверки

- Модель 5

Точки для проверки

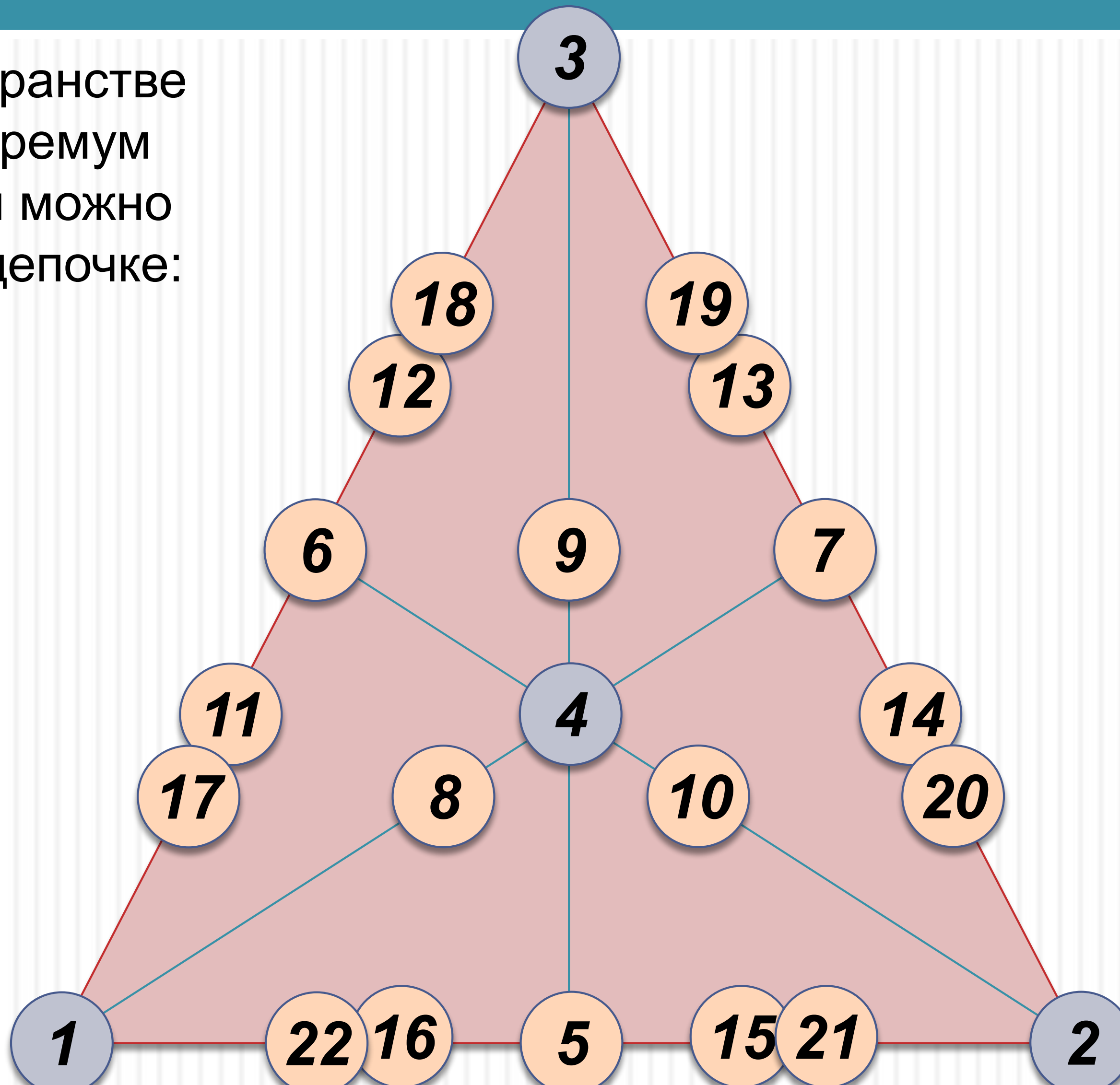
- Модель 6

Точки для проверки

- Модель 7

Точки для проверки

- Модель 8

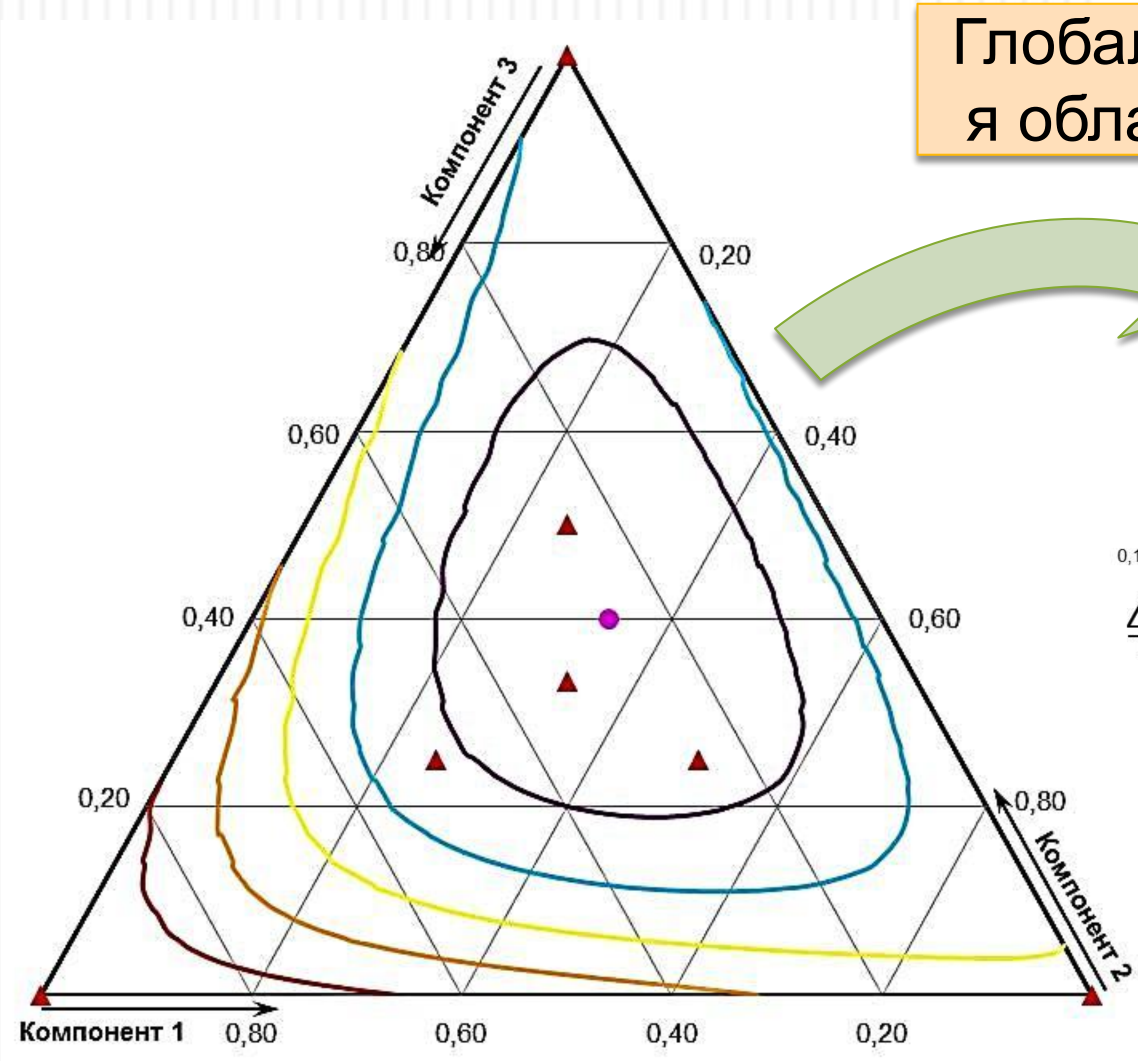


Исследование локальных областей

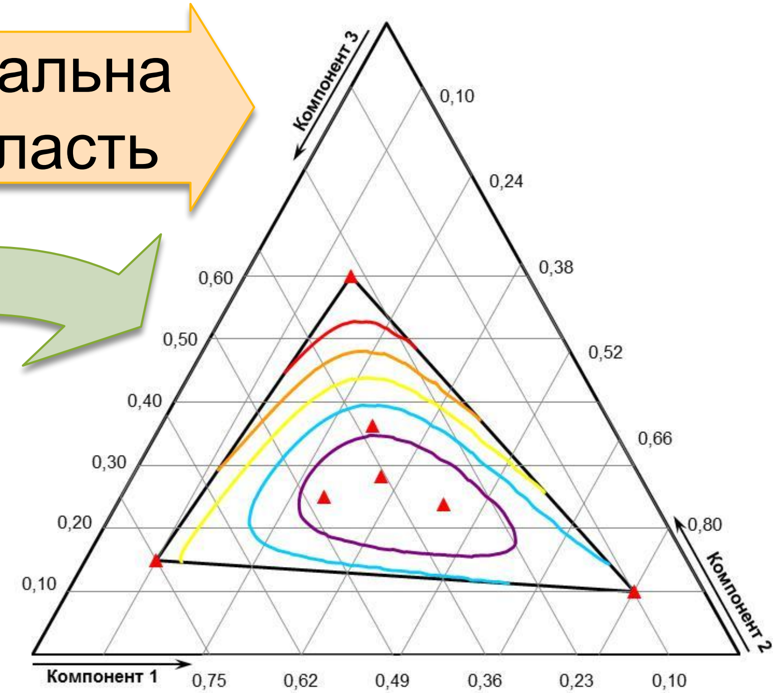
Вершины треугольника						
№	Натуральные вершины			Кодированные вершины		
	X1	X2	X3	Z1	Z2	Z3
1	0,25	0,75	0,1	1	0	0
2	0,15	0,1	0,8	0	1	0
3	0,6	0,15	0,1	0	0	1

	Минимум	Максимум	Шаг
Компонент 1	0,1	0,75	0,130
Компонент 2	0,1	0,8	0,140
Компонент 3	0,1	0,6	0,100

Исследование локальных областей



Глобальная область



Локальная область

Расчеты коэффициентов

Обычно все эти схемы являются насыщенными, имеют равное число опытов и неизвестных коэффициентов в уравнении, поэтому их расчеты доведены до простых формул. С другой стороны надо помнить, что для проверки данных проводятся дополнительные опыты, которые берутся из последующих моделей или произвольно внутри факторного пространства. В первом случае мы можем сразу же повысить сложность модели, если она окажется не адекватной. Коэффициенты при чистых веществах равны значениям *Y*

$$\beta_i = Y_i \quad \beta_1 = Y_1, \beta_2 = Y_2, \beta_2 = Y_3$$

а, например для второй модели остальные коэффициенты

$$\beta_{ij} = 4Y_{ij} - 2Y_i - 2Y_j \Leftarrow Y_{ij} = \frac{1}{2}\beta_i + \frac{1}{2}\beta_j + \frac{1}{4}\beta_{ij} \Leftarrow \beta_i = Y_i$$

Расчет средствами MS Excel

С другой стороны можно пользоваться стандартными решениями (метод наименьших квадратов и «Поиск решения»), которые были рассмотрены ранее. В этом случае надо заботиться о количестве проведенных опытов и числе неизвестных коэффициентов ($N > L$) и выбирать уравнение, которое обеспечит свое существование только внутри факторного пространства. Последнее достигается введением дополнительного условия $X_1 + X_2 + X_3 = 1$ или произвести замену последнего фактора через предыдущие $X_3 = 1 - (X_1 + X_2)$

Для решения данных задач и построения графиков имеется программа в среде MS Excel, которая позволяет выбрать модель, опередить таблицу экспериментальных данных, провести эксперимент и выполнить расчет с построением графика

Выбираем тип треугольника

Данные для построения треугольника

Тип треугольника : Глобальный

Координаты вершин треугольника

В реальных коо

	Наименование	Вершина 1	Вершина
X1	Пропан	1	0
X2	Бутан	0	1
X3	Примеси	0	0

=		Минимум	Максимум
=	Пропан	0	
=	Бутан	0	
=	Примеси	0	

Проводим эксперименты по : 3-ой модели

Проверку выполняем по : 4-ой модели

Расчет коэффициентов выполняем : по точкам плана

Число экспериментов (план/проверка): 6 3

Число параллельных испытаний : 1

Таблица экспериментальных и расчетных данных

№№	X1	X2	X3	Y эксп	Y расч
1	1	0	0	5	5
2	0	1	0	7	7
3	0	0	1	3	3
4	0,5	0,25	0,25	6	6
5	0,25	0,5	0,25	8	8
6	0,25	0,25	0,5	5	5
7	0,5	0,5	0	8	6
8	0,5	0	0,5	6	4
9	0	0,5	0,5	8	5

Дисперсия воспроизводимости : 0,5

Критерий минимизации : 1,642E-16

Критерий Пирсона : 1

1	X2	X3	Условие	Значение
0	0	1	1	3,0000001
0,2			1	8,3078419
				0

Выбираем номер модели, проверочные точки, параллельные испытания, заполняем результаты

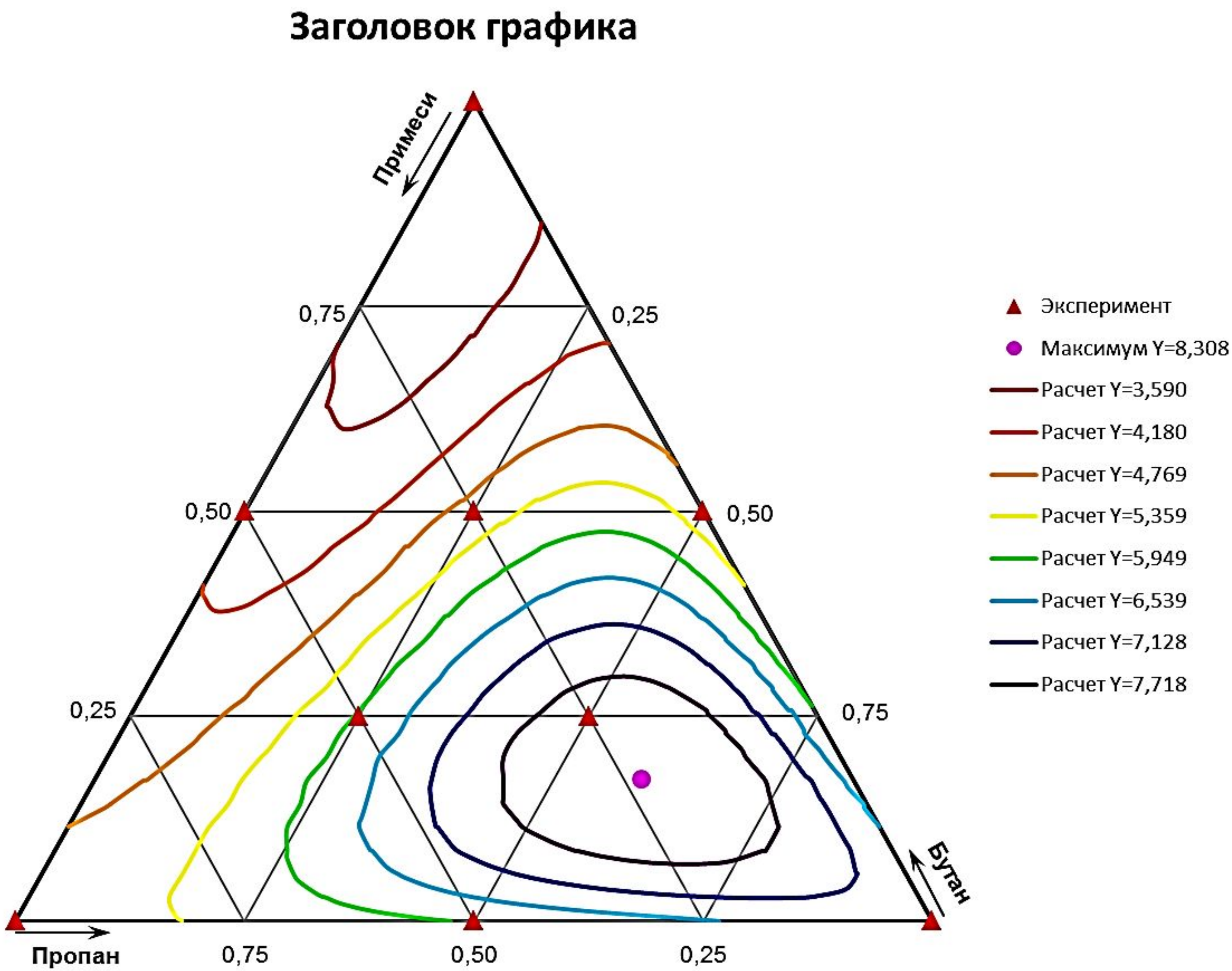
Заголовок графика

Число линий сетки (от 1 до 5) :	4
Показать значения меток по осям :	Да
Повернуть название оси по ней :	Да
Число изолиний на треугольнике (от 0 до 10) :	5
Детализация изолиний (от 5 до 50) :	35
Цветовая гамма изолиний :	Спектр
Показать график в локальной области :	Да
Показать на графике эксперимент :	Да
Показать на графике минимум :	Нет
Показать на графике максимум :	Да
Строим график :	Да

Настраиваем график

β1	5
β2	7
β3	3
β1123	1,33E-06
β1223	192
β1233	-64

Получаем ответ



Заголовок графика
Примеси
Бутан
Пропан
0,75
0,50
0,25
0,25
0,50
0,75
0,75
0,50
0,25
Эксперимент
Максимум Y=8,308
Расчет Y=3,590
Расчет Y=4,180
Расчет Y=4,769
Расчет Y=5,359
Расчет Y=5,949
Расчет Y=6,539
Расчет Y=7,128
Расчет Y=7,718