МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ.

СТАТИСТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ.

Наиболее сложен для оптимизации случай, когда неизвестен вид целевой функции. В этом случае оптимум находят экспериментально. Существует 2 области изменения выходного параметра **y:**

- Область, удаленная от оптимума, в которой происходит значительное изменение **y.**
- Почти стационарная область, в которой практически не происходит изменения **y.**

После того как область, удаленная от оптимума, описана адекватным ***линейным*** уравнением, используем его для оптимизации.

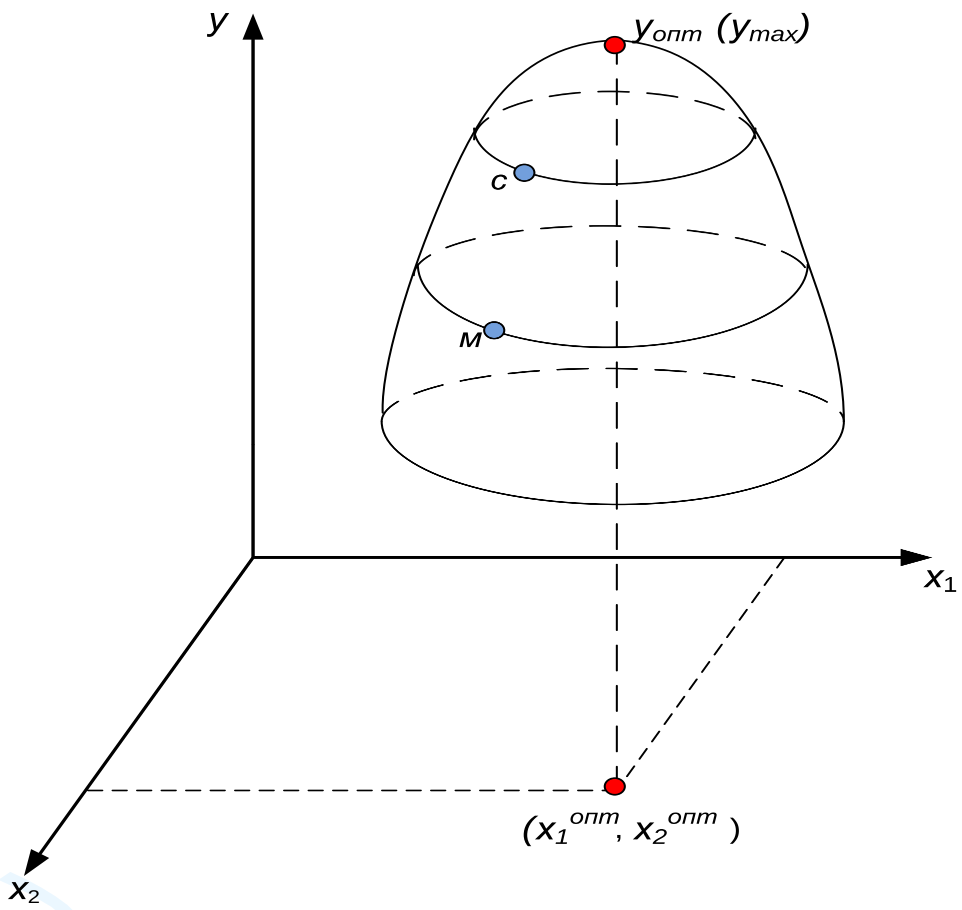
Рассмотрим метод Бокса-Уилсона

МЕТОД БОКСА-УИЛСОНА.
(крутое восхождение по поверхности отклика)

Используя факторное планирование, в 1951 году Бокс и Уилсон предложили метод поиска оптимальных условий для сложных процессов.

Постановка задачи оптимизации:

Определить координаты оптимальной (экстремальной) точки ($x_1^{опт.}, x_2^{опт.}, \ldots x_n^{опт.}$) поверхности отклика $y=f(x_1 \ldots x_n)$.



y
y опт (y max)
c
м
x1
(x1 опт, x2 опт)
x2

Метод градиента предусматривает движение к оптимуму по наикратчайшему пути, т.е. это движение к экстремуму по градиенту.

Градиент – это вектор, который направлен в сторону наибыстрейшего изменения функции.

$$gradF = \left(\frac{\partial F}{\partial x_1}; \frac{\partial F}{\partial x_2} \ldots \frac{\partial F}{\partial x_n} \right);$$

В окрестности точки *M* (область, удаленная от оптимума) ставится эксперимент по схеме ПФ или ДФ планирования для <u>локального</u> описания поверхности отклика в окрестности т. *M*, линейным уравнением регрессии:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x + b_2 x_2$$

Если линейное уравнение адекватно, от центра плана начинают движение к оптимуму по поверхности отклика в направлении градиента:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_1} = b_1;$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} = \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_2} = b_2.$$

Движение к экстремуму продолжают до тех пор, пока наблюдается увеличение (если поиск максимума) параметра оптимизации *y*.

.

Как только *y* перестает расти, переносят центр планирования в точку, до которой дошли по градиенту, т.С, выполняют эксперимент (ПФЭ или ДФЭ) и вновь строят плоскость (линейное уравнение). Если линейное уравнение вновь адекватно, продолжают движение по градиенту.

Эта процедура продолжается до тех пор, пока не попадем в почти стационарную область, т.е. область, близкую к экстремуму. В этой области уравнение 1-го порядка не адекватно эксперименту. Поэтому ставится большой эксперимент для описания этой области ***полиномом 2-ого порядка***, а затем, полученная поверхность исследуется для локализации экстремума.

Шаг по каждой оси дает частная производная по переменным x_1 и x_2.

т.к.

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_1} = b_1;$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} = \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_2} = b_2;$$

то, для того, чтобы двигаться по плоскости в направлении градиента, необходимо делать шаги пропорционально коэффициентам.

При постановке опытов величина шага должна быть приблизительно равна произведению коэффициентов $\mathbf{b_i}$ на интервал варьирования $\mathbf{\Delta x_i}$.

$$\text{grad } f = b_1\Delta x_1 + b_2\Delta x_2$$

$\mathbf{\Delta x_i}$ – интервал варьирования по каждой переменной.

$\mathbf{b_i\Delta x_i}$ – шаг по соответствующей оси.

Расчет «шагов» при движении по градиенту:

1.Вычисляют произведение **$b_i\Delta x_i$ и фактор, для которого это произведение максимально, принимают за базовый.**

$$(b_i\Delta x_i)_{max}=a$$

2.Для базового фактора выбирают шаг варьирования крутого восхождения h_a, оставляя старый интервал варьирования Δx_i, либо вводя новый – более мелкий.

3.Производят расчет шага для каждого фактора по уравнению:

$$h_i=\frac{b_i\Delta x_i}{a}\cdot h_a;$$

где коэффициенты берутся со своими знаками. Таким образом**, знак шага** по каждому фактору совпадает со знаком соответствующего коэффициента. Рассчитанные шаги по каждому фактору округляются.

Движение начинают от основного уровня. При первом шаге, т.е. опыте, факторы получают значения равные основному уровню плюс, рассчитанные шаги варьирования

При каждом последующем шаге значения факторов изменяют на величину шага варьирования. Движение продолжают до тех пор, пока наблюдается увеличение (или уменьшение) функции отклика (улучшение). $\mathbf{x_i = x_0 + h_i}$

***Пример**: Методом крутого восхождения получить максимальный выход продукта D по реакции*

$$A \underset{K_2}{\overset{K_1}{\rightleftarrows}} D$$

В качестве независимых параметров выбираются концентрация **[A] - x_1** и температура – **x_2.**

Условия эксперимента:

Фактор	Уровни		*Интервал варьирования* Δx_i	*Основные уровни* x_i^0
	Верхний(+1)	Нижний (-1)		
x_1([A])	*40*	*20*	*10*	*30*
x_2(T^0)	*80*	*40*	*20*	*60*

Был проведен эксперимент по схеме ПФЭ (2 параллельных опыта).

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2;$$

N	X0	x_1	x_2	Y
1	+	+	+	38.4
2	+	+	-	42.6
3	+	-	+	43.29
4	+	-	-	32.15

1. По критерию Кохрена проверялась дисперсия на однородность.

2. Определялась дисперсия воспроизводимости.

3. Определялись коэффициенты уравнения регрессии и проверялись на значимость по критерию Стьюдента.

Уравнение запишется:

$$\hat{y} = 39.1 + 5.56x_1 - 1.175x_2$$

4. Проверка на адекватность по критерию Фишера и показала, что уравнение ***адекватно***, а, следовательно, ***может быть использовано для оптимизации***

Фактор	Основные уровни x_j^0	Интервал варьирования Δx_i	Коэффициент b_i	$b_i \Delta x_i$	Шаг $K\ b_i \Delta x_i$
x_1	30	10	5.56	55.6	5.56
x_2	60	20	-1.175	-23.5	-2.35

Движение начинаем от основного уровня (30,60) и на первом шаге факторы принимают значения: $x_i^0+h_i$.

N	x_1	x_2	y
1	35.56	57.65	40.4
2	41.12	55.30	43.56
3	46.68	52.95	48.73
4	52.24	50.60	52.72
5	57.80	48.25	58.00
6	63.36	45.90	50.62
7	68.92	43.55	47.34

Дальнейшего роста ***у*** не происходит

Переносим центр плана в лучшую (5) точку и реализуем ПФЭ для двух факторов (т.5 – локальный экстремум).

Условия опытов:

Фактор	Основные уровни	Интервал варьирования Δx_i	Уровни	
			+1	-1
x_1	57.8	10	67.8	47.8
x_2	48.25	20	68.25	28.25

ПФЭ 2^2

N	x_0	x_1	x_2	Y
1	+1	+1	+1	56.4
2	+1	-1	+1	56.6
3	+1	+1	-1	62.7
4	+1	-1	-1	70.5

Вновь проводим регрессионный анализ.

В результате получаем- линейное уравнение регрессии ***неадекватное*** эксперименту.

Следовательно, достигли **области близкой к экстремуму** (почти стационарная область).

Если бы ***уравнение вновь было адекватным, то от основного уровня вновь бы продолжали двигаться по градиенту*** (но шаги в этом случае рекомендуют делать меньшими, т.к. при приближении к оптимуму кривизна поверхности возрастает и можно перешагнуть экстремум).