ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ХТФ
КАФЕДРА ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ ЭЛАСТОМЕРОВ

А.Н. Гайдадин, С.А. Ефремова, С.А. Сафронов

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ В РЕШЕНИИ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Методические указания

Волгоград
2018

УДК 66 (075):519.8 (075)

Рецензент

доцент кафедры «Прикладной математики» *И.А.Тарасова*

Издается по решению редакционно-издательского совета
Волгоградского государственного технического университета

Методы оптимизации экспериментальных данных в решении практических задач химической технологии / сост. А.Н.Гайдадин, С.А.Ефремова, С.А.Сафронов; ВолгГТУ. – Волгоград, 2018. – 16 с.

В методических указаниях описаны методы оптимизации технологических процессов. Для студентов по направлению 18.03.01 Химическая технология, профилям подготовки: «Химическая технология органических веществ», «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов», «Технология и переработка полимеров», для студентов, обучающимся в магистратуре по направлению 18.04.01 «Химическая технология», по программам подготовки: «Технология переработки эластомеров», «Технология переработки пластмасс и композиционных материалов».

ВВЕДЕНИЕ

Результирующим этапом большинства технологических исследований является оптимизация полученных данных. Многочисленные методы оптимизации позволяют провести выбор лучшего объекта из группы предложенных либо определение области изменения факторов, обеспечивающей искомые значения функции отклика. В этом случае задачей исследователя является обоснованный выбор как метода оптимизации, так и снижение уровня субъективизма при реализации оценки.

1 ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

Целью лабораторной работы является ознакомление студентов с методами однокритериальной и многокритериальной оптимизации технологических процессов в химической промышленности. Студенты должны изучить применение симплекс-метода для решения задач оптимизации, графический метод совмещения контурных кривых поверхности отклика, способы нахождения экстремума.

В ходе лабораторной работы студент должен овладеть навыками использования графических методов оптимизации технологических процессов.

2 ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Оптимизация – целенаправленная деятельность, заключающаяся в получении наилучших результатов при соответствующих условиях [1].

В производственной практике под оптимизацией часто понимают:

1. определение области изменения целевой функции, удовлетворяющей выбранной системе критериев;

2. обоснованный выбор лучшего объекта из группы рассматриваемых либо распределение объектов в ряд по степени снижения (роста) целевой функции.

При решении задач оптимизации технологических процессов из-за большого числа и их сложной взаимосвязи между собой могут возникнуть трудности. При постановке задачи оптимизации необходимо:

1.Наличие объекта оптимизации и цели оптимизации. Под объектом оптимизации, как правило, понимают технологическую систему, группу систем, рассматриваемую при решении конкретной оптимизационной задачи.

2.Наличие ресурсов оптимизации, а именно возможность выбора значений некоторых параметров оптимизируемого объекта. Объект должен обладать определенными степенями свободы - управляющими воздействиями.

3.Должна существовать возможность количественной оценки оптимизируемой величины, которую называют критерием оптимальности. В качестве критерия оптимизации удобно использовать конкретные технологические, эксплуатационные и т.п. свойства объектов оптимизации.

4.Учитываются ограничения, накладываемые на входные параметры.

На основании выбранного критерия оптимизации составляется целевая функция, представляющая собой зависимость критерия оптимальности от параметров, влияющих на ее значение. Для решения задач, требующих поиска оптимального решения, удовлетворяющего нескольким, не сводимым друг к другу критериям, используются методы многокритериальной оптимизации. Известен ряд способов решения многокритериальных задач:

1. Оптимизация одного наиболее важного критерия, остальные критерии в данном случае являются дополнительными ограничениями.

2. Упорядочение заданного множества критериев и последовательная оптимизация по каждому из них.

3. Сведение многих критериев к одному с помощью введения экспертных весовых коэффициентов для каждого из критериев. в данном случае более важный критерий получает более высокий вес. Степень важности параметра оптимизации принято называть его рангом (весом).

2.1 Метод последовательного симплекс-планирования для решения задач оптимизации

Название метода произошло от названия геометрической фигуры «регулярный симплекс», т.е. правильный выпуклый многогранник. При исследовании свойств объекта k-факторов, то факторное пространство задается в виде регулярного симплекса с (k+1) вершиной, так для двух факторов факторное пространство задается в виде правильного треугольника, для трех факторов – в виде тетраэдра [2].

На практике эксперименты с использованием регулярных симплексов применяются для решения задач оптимизации при движении к почти стационарной области.

Для построения регулярного симплекса необходимо преобразовать уровни фактора:

$$x_j = \frac{z_j - z_j^0}{\Delta z_j}, \qquad (1)$$

где z_j^0 – j –я координата центра плана;

Δz_j- интервал варьирования по j-фактору.

Оптимизация методом симплекс-планирования проводится следующим образом: начальная серия опытов планируется таким образом, чтобы экспериментальные точки образовывали регулярный симплекс в факторном пространстве. На практике рекомендуется ориентировать исходный симплекс в факторном пространстве следующим образом: центр симплекса совпадает с началом координат, одна из вершин лежит на координатной оси, а остальные располагаются симметрично относительно координатных осей. Для двухфакторного пространства координаты симплекса задаются следующей матрицей:

$$X=\begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ -x_1 & x_2 \\ 0 & -2x_2 \end{pmatrix} \qquad (2)$$

Если принять длину стороны симплекса равной 1, то координаты симплекса рассчитываются по формуле:

$$x_j = \sqrt{\frac{1}{2j(j+1)}} \qquad (3)$$

Тогда матрица (1) примет вид

$$X= \begin{pmatrix} 0{,}5 & 0{,}289 \\ -0{,}5 & 0{,}289 \\ 0 & -0{,}578 \end{pmatrix}$$

После завершения эксперимента по начальному симплекс-плану сравнивают полученные значения отклика объекта и определяют наихудший результат. После этого строится новый симплекс, в котором наихудшая точка заменяется новой, расположенной симметрично относительно грани симплекса, находящейся напротив наихудшей точки. Координаты отраженной точки:

$$x_j^{(k+2)}=2x_j^{(c)}-x_j^{(l)}, \quad j=1,2,\dots,k \qquad (4)$$

где $-x_j^{(l)}$ – j-я координата наихудшей точки; $x_j^{(k+2)}$- j-я координата новой точки, получаемой в результате отражения; $2x_j^{(c)}$ - j –я координата центра противоположной грани, определяемая по формуле:

$$x_j^{(c)} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k+1} x_j^{(i)} \qquad i \neq l \qquad (5)$$

где $-x_j^{(i)}$ – j-я координата i-ой вершины симплекса $(i=1,2,\dots,k+1)$.

После реализации опыта в дополнительной точке опять проводится выявление наихудшей точки и т.д. Если новый опыт не приводит к получению лучшего значения отклика Y, то эксперименты заканчивают и за рациональное значение факторов принимают координаты опыта, в котором получено наилучшее значение Y. Критерием достижения экстремальной области можно считать факт прекращения поступательного движения и переход к вращению вокруг определённой вершины. Для двух факторов рекомендуют продолжить движение до тех пор, пока число симплексов с одной и той же вершиной не превысит 4.

Иногда может сложиться ситуация, когда наихудшее значение отклика будет наблюдаться сразу в нескольких вершинах. Тогда, решение принимается случайным образом, например, на основе таблицы равномерно распределенных случайных чисел.

К недостаткам метода симплекс-планирования можно отнести следующее:

1. Данный метод позволяет найти только один экстремум функции отклика объекта оптимизации, для поиска других экстремумов необходимо повторять реализацию исходного симплекс-плана в другой области факторного пространства.

2.Эффективность поиска экстремумов функции отклика объекта зависит от величины выбранного интервала варьирования факторов.

Пример 1. Изучается зависимость сопротивление разрыву (Y) резины от содержания серы (z_1) и технического углерода П-803 (z_2). Необходимо найти такой состав резины, при котором напряжения при удлинении на 300% (Мпа) минимальны [3]. Центру плана соответствуют следующие значения входящих факторов:

z_1^0=1,8 масс.ч. z_2^0= 55 масс.ч.

Шаг варьирования:

Δz_1=0,7 масс.ч Δz_2=10 вес.ч.

Шаг 1. Построим первый симплекс. Для этого определим координаты вершин (таблица 1) по формулам (2) и (3). В полученных точках проведем эксперимент. Полученные данные сведем в таблицу 1. Как видно максимальное значение отклика (наихудшее) возникает в первой вершине симплекса с координатами (0,5, 0,289) (рис.1, а).

Таблица 1- План построения первого симплекса

Номер вершины	Координаты вершин симплекса		Данные эксперимента, Y, МПа
	x_1	x_2	
1	0,5	0,289	8,755
2	-0,5	0,289	6,237
3	0	-0,578	5,525

Произведем отражение наихудшей точки относительно противоположной грани и рассчитаем координаты центра противоположной грани и очередной вершины по формулам (4) и (5):

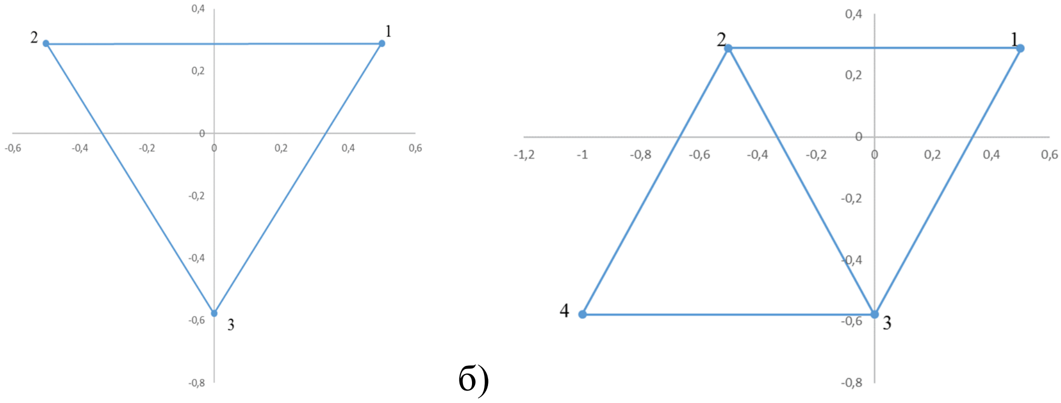
$$x_1^{(c)} = \frac{1}{2}\cdot(-0.5+0) = -1/4 \qquad x_1^{(4)} = 2\cdot\left(-\frac{1}{4}\right) - 0.5 = -1$$

$$x_2^{(c)} = \frac{1}{2}\cdot\left(0.289+(-0.578)\right) = -0.1445 \qquad x_2^{(4)} = 2\cdot(-0.1445) - 0.289 = -0.578$$

Шаг 2. После этого строим второй симплекс и проводим эксперимент в полученных точках (рис.1, б).

Таблица 2- План построения второго симплекса

Номер вершины	Координаты вершин симплекса		Данные эксперимента, Y, кН/м
	x_1	x_2	
2	-0,5	0,289	6,237
3	0	-0,578	5,525
4	-1	-0,578	4,193



а) б)

Рисунок 1 – Построение симплекс-плана

Как видно из экспериментальных данных во втором симплексе наихудшей является вторая точка. В ней функция отклика принимает наибольшее значение, следовательно, следующую вершину строим симметрично ей относительно противоположной грани.

Таблица 3 – Реализация симплекс-метода

Номер вершины	Координаты вершин симплекса		Данные эксперимента Y, кН/м
	x_1	x_2	
1	0,5	0,289	8,755
2	-0,5	0,289	6,237
3	0	-0,578	5,525
4	-1	-0,578	4,193
5	-0,5	-1,445	4,843
6	-1,5	-1,445	4,696
7	-2	-0,578	5,127

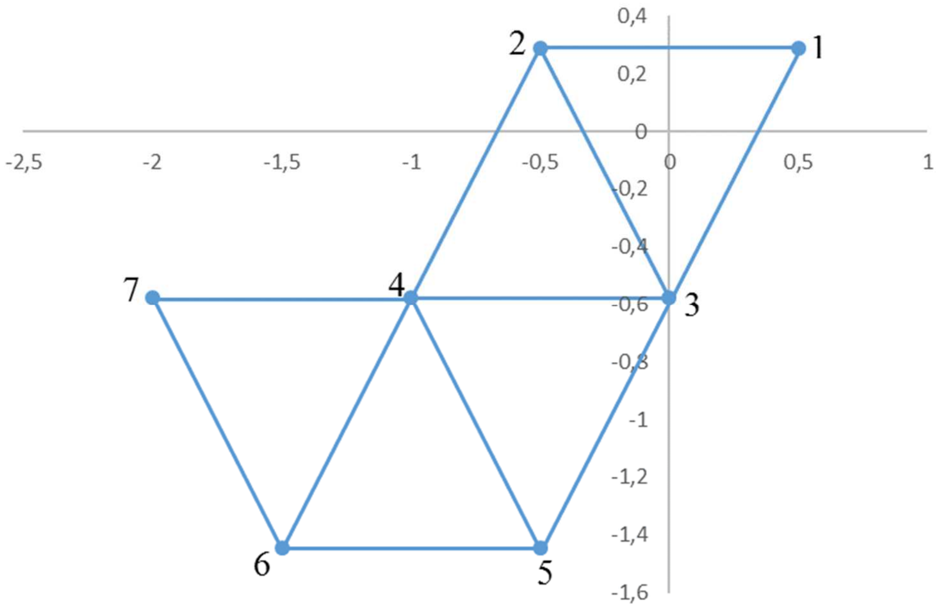


Рисунок 2 – Метод последовательного симплекс-метода.

В таблице 3 и на рисунке 2 показаны координаты последующих вершин при использовании симплекс-метода.

Как видно из таблицы 3 в последнем симплексе с вершинами в точках (4,6,7) наихудшее значение - в точке 7. Противоположная точка точке 7 – точка 5. Следовательно, мы достигли области оптимума. Оптимальное значение напряжения при удлинении 300% равно 4,193 МПа, состав резины, при котором получено это значение:

x_1=-1 z_1= 1,1 вес.ч.

x_2=-0,589 z_2= 49,22 вес.ч.

2.2 Нахождение экстремальных значений функции

Алгоритм поиска наибольшего или наименьшего значения функции в ограниченной замкнутой области сводится к решению трех задач:

- Определение стационарных точек внутри области.
- Определение стационарных точек на границе области.
- Выбор наибольшего и наименьшего значений функции в этих точках.

Рассмотрим поставленную задачу на примере функции двух переменных. Требуется найти наибольшее (или наименьшее) значение функции $f(x_1,x_2)$, определенную замкнутой области планируемого эксперимента.

1) Решаем систему уравнений из частных производных первого порядка для нахождения критических точек, в которых может быть экстремум:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1} = 0 \\ \dfrac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2} = 0 \end{cases}$$

Вычисляем значение функции в этих точках.

2) Исследуем поведение функции на границе области исследования, находим точки возможного наименьшего (наибольшего) значений. Вычисляем значения функции в этих точках.

3) Выбираем наибольшее и наименьшее значений функции из полученных точек.

Пример 2. Необходимо найти минимальное значение напряжения при удлинении 300%, МПа (Y) от состава композиции для изготовления протекторной смеси. Варьируемые составляющие смеси – сера (z_1) и технический углерод П-803 (z_2). Границы исследуемой области: содержание серы (z_1) изменяется в пределах от 1,1 до 2,5 масс.ч., содержание технического углерода П-803 (z_2) варьируется от 45 масс.ч. до 65 масс.ч.

В ходе проведения планируемого эксперимента была получена математическая модель:

$$Y(z_1,z_2) = 40 - 7z_1 - 1{,}2z_2 + 2{,}4z_1^2 + 0{,}01z_2^2 + 0{,}06z_1z_2.$$

Решим систему уравнений из частных производных, приравненных нулю:

$$\begin{cases} \frac{\partial Y(z_1,z_2)}{\partial z_1} = 0 \\ \frac{\partial Y(z_1,z_2)}{\partial z_2} = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} \frac{\partial Y(z_1,z_2)}{\partial z_1} = -7 + 4{,}8z_1 + 0{,}06z_2 = 0 \\ \frac{\partial Y(z_1,z_2)}{\partial z_2} = -1{,}2 + 0{,}02z_2 + 0{,}06z_1 = 0 \end{cases}$$

Решая данную систему уравнений, находим координаты точек, при котором наша функция может принимать экстремальное значений: z_1=0,74 z_2=57,78. Надо отметить, что данная точка лежит вне границ исследуемой области.

Исследуем поведение функции на границе области. Область ограничена следующими значениями:

1,1<=z_1<=2,5

45<=z_1<=65

При z_1=1,1 функция приобретает следующий вид

$Y(1{,}1, z_2) = 33{,}3251 - 1{,}215z_2 + 0{,}01z_2^2$.

Найдем первую производную данной функции и приравняем ее к нулю, получаем первую критическую точку на границе:

$\frac{\partial Y(z_1,z_2)}{\partial z_2} = -1.215 + 0.02z_2 = 0$ z_1=1.1 z_2=60,45

Аналогичным образом находим критические точки на других границах.

Все найденные координаты критических точек сведем в таблицу 4, исключим точки, выходящие за пределы исследуемой области и вычислим значения функции в этих точках.

Таблица 4 – Координаты критических точек и значения функции в этих точках.

Наименование точки	z_1	z_2	$Y(z_1,z_2)$
Первая граница z_1=1,1	1.1	52.5	3.231
Вторая граница z_1=2,5	2,5	56,55	10.102
Третья граница z_2=45	0,896	45	Эта точка выходит за границы области
Четвертая граница z_2=65	0,646	65	Эта точка выходит за границы области
Точки в вершинах границы	1.1	45	4.424
	1.1	65	3.744
	2.5	45	10.5
	2.5	65	11.5
Точка экстремума	0,74	57,78	Эта точка выходит за границы области

Как видно из таблицы 4 наименьшее значение функция принимает в точке с координатами (1,1, 52,5).

Следовательно, минимальное значение напряжения при удлинении 300%, МПа (Y), равное 3,231 Мпа, будет у композиции с содержанием серы 1,1 масс.часть и технического углерода 52,5 масс.ч.

2.3 Метод анализа контурных кривых

Рассмотрим графические методы многокритериальной оптимизации. Для определения оптимальных условий, удовлетворяющих комплексу требований, использую метод совмещения контурных кривых для исследуемых показателей [4].

Рассмотрим алгоритм метода совмещения контурных кривых с помощью примера.

Пример 3. Изучается зависимость свойств резины от содержания серы (x_1) и технического углерода П-803 (x_2) (таблица 4). Необходимо найти такой состав резины, при котором напряжение при удлинении 300% не ниже 5 Мпа и не выше 8 МПа, предел прочности при разрыве не выше 15 МПа, сопротивление раздиру не ниже 6 Н/м и не выше 8 Н/м [3].

Таблица 5– Уровни переменных условном и натуральном масштабах

Компоненты	Фактор	Средний уровень, вес.ч.	Шаг варьирования, вес.ч.	Значения уровней переменных (вес.ч.), соответствующие усл.ед.		
				-1	0	1
Сера	x_1	1,8	0,7	1,1	1,8	2,5
Технический углерод П-803	x_2	55	10	45	55	65

Таблица 6 - Матрица планирования и результаты испытаний

Номер опыта	Планирование. усл.ед		Результаты испытаний, физич. ед.		
	x_1	x_2	Y_1	Y_2	Y_3
1	-1	-1	5,0	16,5	7,0
2	+1	-1	8,8	15,0	4,8
3	-1	+1	8,6	14,5	8,0
4	+1	+1	14,0	17,0	6,0
5	0	0	7,4	15,5	7,0
6	+1	0	10,0	16,0	6,0
7	-1	0	4,2	14,0	8,0
8	0	+1	9,8	16,5	8,8
9	0	-1	4,7	14,0	5,4

Результаты проведения экспериментов в соответствии с ортогональным планом сведены в таблицу 6 (Y_1 – напряжение при удлинении 300%, МПа, Y_2 – предел прочности при разрыве, МПа, Y_3- сопротивление раздиру, Н/м).

В соответствии с полученными экспериментальными данными рассчитаны коэффициенты уравнений и были получены следующие целевые функции:

$$Y_1(x_1,x_2)=6{,}436+2{,}5x_1+2{,}32x_2+1{,}13x_1^2+1{,}283x_2^2+0{,}4x_1x_2;$$

$$Y_2(x_1,x_2)=15{,}05+0{,}5x_1+0{,}417x_2+0{,}167x_1^2+0{,}417x_2^2+x_1x_2;$$

$$Y_3(x_1,x_2)=7{,}3-1{,}03x_1+0{,}93x_2-0{,}433x_1^2-0{,}33x_2^2+0{,}05x_1x_2;$$

Проверка с помощью критерия Фишера показала, что приведенные уравнения адекватно описывают все изучаемые зависимости. Для графического анализа полученных целевых функций с целью оптимизации необходимо построить контурные графики.

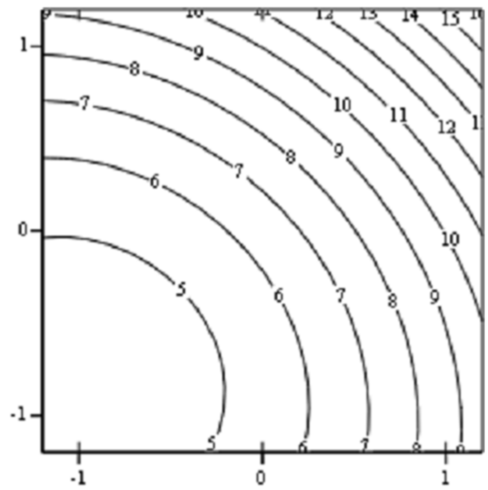
Для построения контурных кривых изменения свойств в зависимости от содержания двух компонентов по осям откладывают дозировки компонентов в условных единицах. Контурные кривые позволяют определить, при каких дозировках компонентов резины характеризуются наиболее высоким показателями, как, изменяя дозировки двух компонентов, сохранить уровень показателей постоянным и в какой области показатель изменяется в допустимых пределах.

На рисунке 3 приведены контурные кривые (линии равного уровня) изменения напряжение при удлинении 300% (рис,3, а), предел прочности при разрыве (рис, 3, б), сопротивление раздиру (рис,3, в), построенные с помощью MathCad .

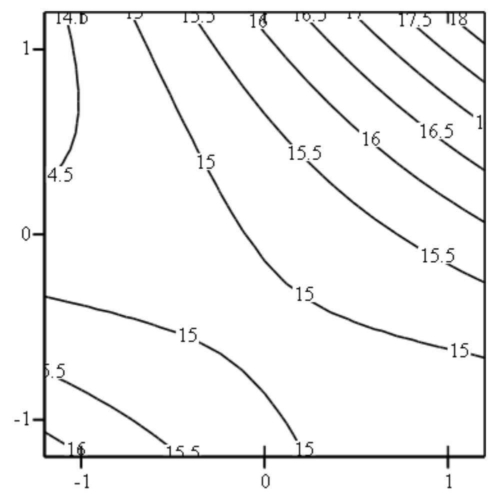
При построении контурных кривых без использования специальных программ (например, MathCad) необходимо помнить, что с увеличением числа промежуточных дозировок точность построения кривых увеличивается, однако при выборе шага следует учитывать, чтобы ожидаемое изменение величины свойства превышало ошибку эксперимента.

Для определения состава смеси, удовлетворяющей комплексу требований к свойствам резины совместим контурные кривые Y_1 - напряжение при удлинении 300%, МПа, Y_2 – предел прочности при разрыве, МПа, Y_3- сопротивление раздиру, Н/м). (рис. 4).

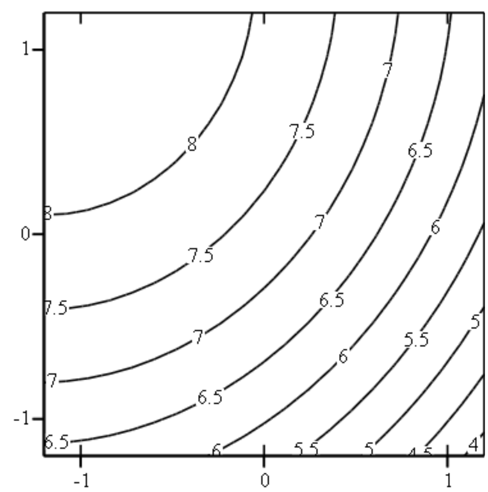
В заштрихованной области находятся смеси, характеризующиеся напряжением при разрыве не ниже 100 МПа, сопротивлением разрыву не ниже 200 МПа, сопротивлением раздиру не ниже 60 кН/м одновременно. После того, как выбрана область оптимальных значений необходимо перейти от кодированных значений входных параметров к натуральным.



а) Y1



б) Y2



в) Y3

Y_1 - напряжение при удлинении 300%, МПа, Y_2 – предел прочности при разрыве, МПа, Y_3- сопротивление раздиру, Н/м).

Рисунок 3 -Контурные кривые (линии равного уровня)

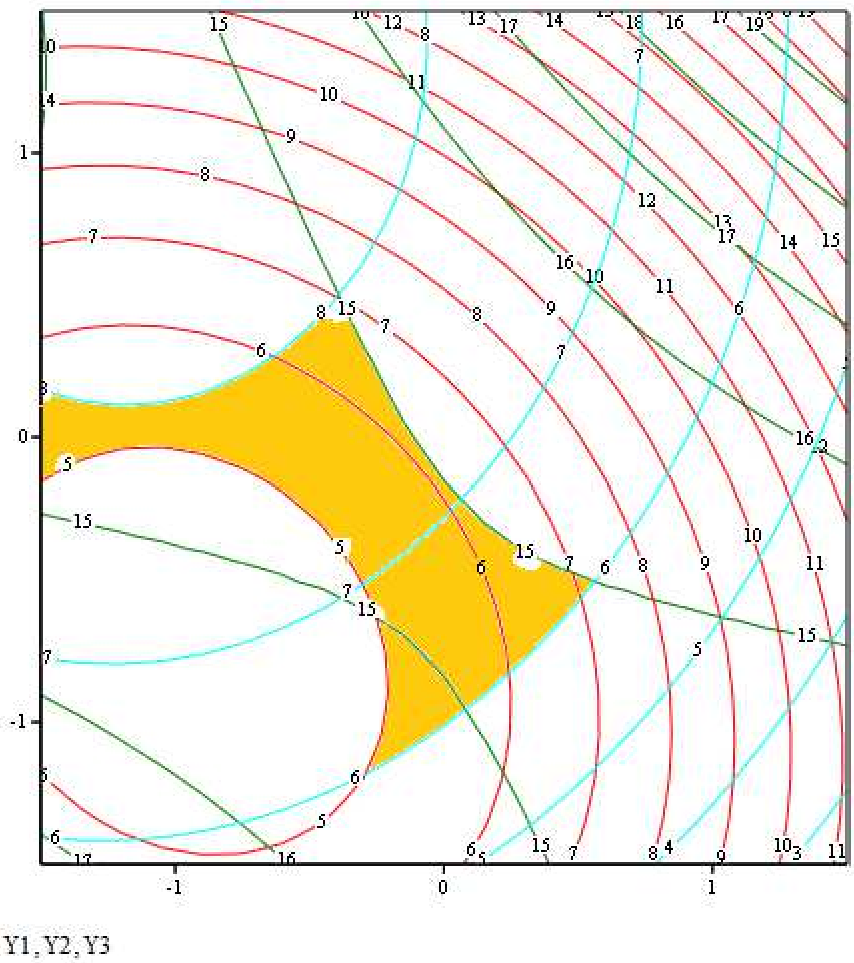


Рисунок 4 - Совмещенные контурные кривые зависимости показателей свойств от содержания серы и технического углерода П-803.

3 ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1.Подготовить экспериментальные данные и получить допуск на проведение лабораторной работы у преподавателя.

2.Произвести расчет коэффициентов целевых функций для исследуемых свойств.

3. Проверить полученные математические модели на адекватность.

4. Построить линии равного уровня для полученных целевых функций. Провести их анализ.

5. Найти оптимально значение функции отклика с помощью симплекс-метода.

6.С помощью совмещения контурных кривых найти область изменения независимых факторов, удовлетворяющую комплексу требований к свойствам изучаемого объекта. Результаты записать в протокол лабораторной работы.

4 КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1.Дайте определение оптимизации, что является объектом оптимизации, критерием оптимизации, рангом?

2.Что надо учитывать при постановке задачи оптимизации?

3.Приведите алгоритм симплекс-метода для решения задач оптимизации.

4.Какие достоинства и недостатки метода последовательного симплекс-планирования вы можете назвать?

5. Назовите способы решения задач многокритериальной оптимизации,

6. В чем состоит суть метода анализа контурных кривых?

7. Приведите алгоритм поиска наибольшего или наименьшего значения функции в ограниченной замкнутой области.

5.СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1.Саулин Д.В. Математическое моделирование химико-технологических систем.

2. Блохин А.В. Теория эксперимента [Электронный ресурс]: Курс лекций в двух частях: Часть 2, — Электрон, текст, дан, (1,0 Мб), — М.: Научно-методический центр "Электронная книга БГУ", 2003.

3. Планирование эксперимента и применение вычислительной техники в процессе синтеза резины, под ред. В.Ф. Евстратова, А.Г. Шварца, – М.: «Химия», 1970, – 254 с.

4.Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента химической технологии: Учеб. пособие для хим. – технол. Спец. вузов, – 2-е изд. перераб. и доп. – М.: Высш. шк., 1985,-327 с.

Алексей Николаевич **Гайдадин**
Светлана Анатольевна **Ефремова**
Сергей Александрович **Сафронов**

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ В РЕШЕНИИ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Методические указания к лабораторной работе

Редактор

Темплан изданий 2018 г., поз. № 572.

Подписано в печать Заказ № 600.

Волгоградский государственный технический университет.
400005, г. Волгоград, пр. им. В. И. Ленина, 28., корп. 1

Отпечатано в типографии ИУНЛ ВолгГТУ
400005, г. Волгоград, пр. им. В. И. Ленина, 28., корп. 7