

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

А.Н. Гайдадин, С.А. Ефремова, А.В. Нистратов

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ В ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ
ПРАКТИКЕ

Методические указания



Волгоград
2008

Рецензент

доцент кафедры «Общая и неорганическая химия»
С.М. Москвичев

Издается по решению редакционно-издательского совета
Волгоградского государственного технического университета

Методы оптимизации в технологической практике/ сост.
А.Н.Гайдадин, С.А.Ефремова, А.В.Нистратов; ВолгГТУ. – Волгоград, 2008. –
16 с.

В методических указаниях описаны методы многокритериальной оптимизации технологических процессов. Для студентов по направлениям 240100 «Химическая технология и биотехнология», 260100 «Технология продуктов питания», специальности 240502 «Технология переработки пластических масс и эластомеров», а также для студентов, обучающихся по магистерским программам 240115 «Технология переработки эластомеров» и 240110 «Химическая технология высокомолекулярных соединений».

© Волгоградский государственный
технический университет, 2008

Введение

Результатирующим 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 и пищевой промышленности. Студенты должны изучить симплекс-метод, графический метод совмещения контурных кривых поверхности отклика.

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).

Метод последовательного симплекс-планирования

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 к стационарной области.

Для построения регулярного симплекса необходимо преобразовать уровни фактора:

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

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:

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

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

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

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:

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

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:

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

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 .

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. Эффективностт поиска экстремумов функции отклика объекта зависит

от величины выбранного интервала варьирования факторов.

Пример 1. Изучается зависимость напряжения при удлинении 300% (Y) резины от содержания серы (z_1) и сантокура (z_2). Необходимо найти такой состав резины, при котором напряжения при удлинении на 300% максимальны [3]. Центру плана соответствуют следующие значения входящих факторов:

$$z_1=1,9 \text{ вес.ч.} \quad z_2= 0,5 \text{ вес.ч.}$$

Шаг варьирования:

$$\Delta z_1=0,6 \text{ вес.ч} \quad \Delta z_2=0,5 \text{ вес.ч.}$$

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 минимальное значение отклика возникает в третьей вершине симплекса с координатами (0,-0,578) (рис.1, а).

Таблица 1- План построения первого симплекса

| Номер вершины | Координаты вершин симплекса | | Данные эксперимента Y, кгс/см |
|---------------|-----------------------------|--------|-------------------------------|
| | x_1 | x_2 | |
| 1 | 0,5 | 0,289 | 90,76 |
| 2 | -0,5 | 0,289 | 65,76 |
| 3 | 0 | -0,578 | 39,17 |

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

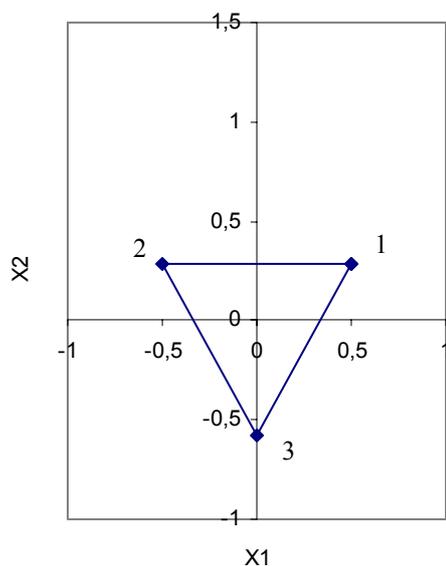
$$x_1^{(c)} = \frac{1}{2}(0.5 + (-0.5)) = 0 \quad x_1^{(4)} = 2 \cdot 0 - 0 = 0$$

$$x_2^{(c)} = \frac{1}{2}(0.289 + 0.289) = 0.289 \quad x_2^{(4)} = 2 \cdot 0.289 - (-0.578) = 1,156$$

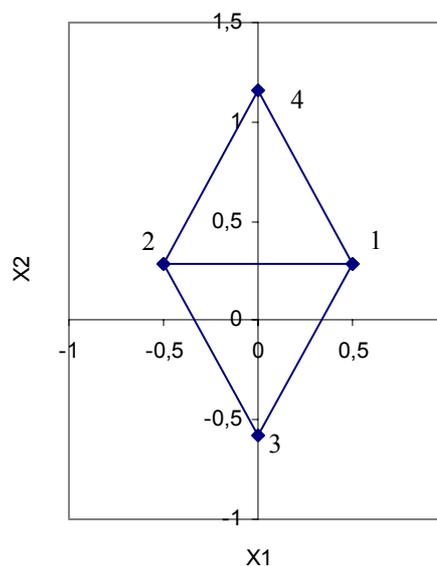
Шаг 2. После этого строим второй симплекс и проводим эксперимент в полученных точках (рис.2,б).

Таблица 2- План построения второго симплекса

| Номер вершины | Координаты вершин симплекса | | Данные эксперимента Y, кгс/см |
|---------------|-----------------------------|----------------|----------------------------------|
| | x ₁ | x ₂ | |
| 1 | 0,5 | 0,289 | 90,76 |
| 2 | -0,5 | 0,289 | 65,76 |
| 4 | 0 | 1,156 | 93,9 |



а)



б)

Рисунок 1 – Построение симплекс-плана

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

В таблице 3 показаны координаты последующих вершин при использовании симплекс-метода.

Как видно из таблицы 3 в последнем симплексе с вершинами в точках (9,11,12) наихудшее значение - в точке Противоположная точка точке 12 – точка 10. Следовательно, мы достигли области оптимума. Оптимальное значение напряжения при удлинении 300% равно 141,61 кгс/см², состав резины, при котором получено это значение:

$$\begin{aligned}
 x_1 &= 3,5 & z_1 &= 4 \text{ вес.ч.} \\
 x_2 &= 2,89 & z_2 &= 1,945 \text{ вес.ч.}
 \end{aligned}$$

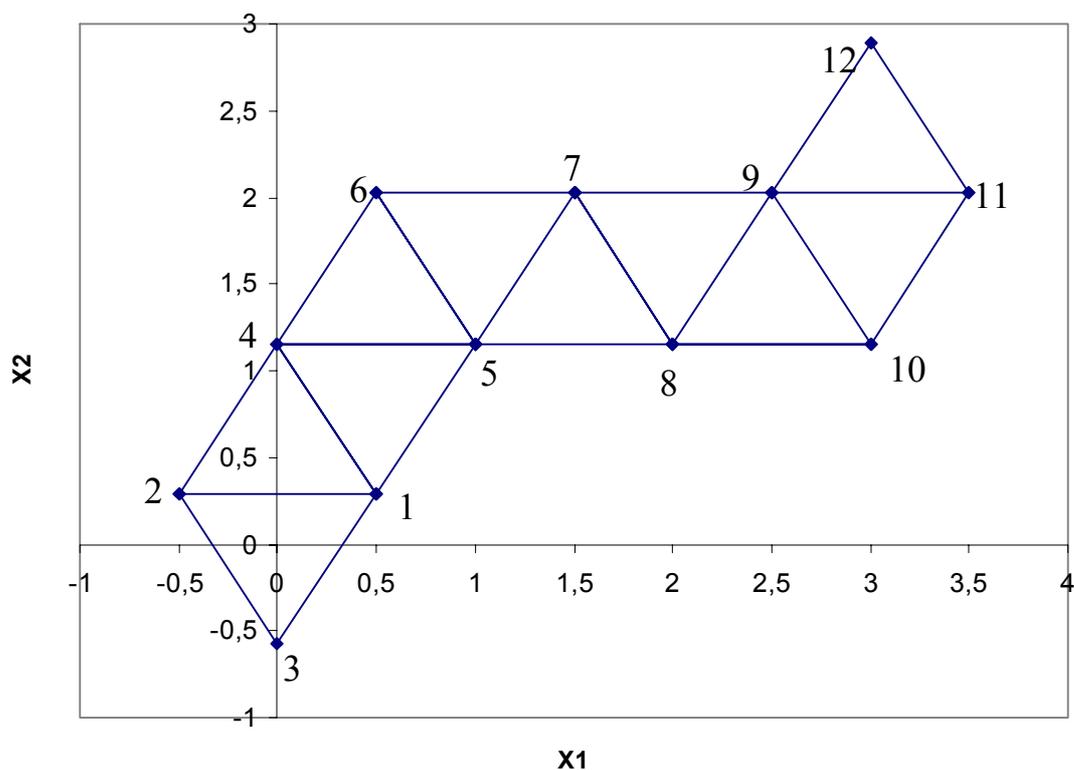


Рисунок 2 – Метод последовательного симплекс-метода.

Таблица 3 – Реализация симплекс-метода

| Номер вершины | Координаты вершин симплекса | | Данные экс- перимента Y, кгс/см |
|------------------|-----------------------------|----------------|---------------------------------------|
| | x ₁ | x ₂ | |
| 1 | 0,5 | 0,289 | 90,76 |
| 2 | -0,5 | 0,289 | 65,76 |
| 3 | 0 | -0,578 | 39,17 |
| 4 | 0 | 1,156 | 93,9 |
| 5 | 1 | 1,156 | 118,9 |
| 6 | 0,5 | 2,023 | 98,63 |
| 7 | 1,5 | 2,023 | 123,76 |
| 8 | 2 | 1,156 | 133,22 |
| 9 | 2,5 | 2,023 | 138,1 |
| 10 | 3 | 1,156 | 136,7 |
| 11 | 3,5 | 2,023 | 141,61 |
| 12 | 3 | 2,89 | 119,55 |

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 2. Изучается зависимость свойств резины от содержания серы (x_1) и сантокура (x_2) (таблица 1). Необходимо найти такой состав резины, при котором напряжение при удлинении 300% не ниже 200 кгс/см², сопротивление разрыву не ниже 200 кгс/см², сопротивление раздиру не ниже 60 кгс/см [3].

Таблица 1 – 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 | 1,9 | 0,6 | 1,3 | 1,9 | 2,5 |
| Сантокур | x_2 | 0,7 | 0,5 | 0,2 | 0,7 | 1,2 |

Таблица 2 - 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 | 16 | 122 | 60 |
| 2 | +1 | -1 | 53 | 202 | 70 |
| 3 | -1 | +1 | 58 | 215 | 67 |
| 4 | +1 | +1 | 120 | 200 | 50 |
| 5 | 0 | 0 | 85 | 220 | 62 |
| 6 | +1 | 0 | 103 | 215 | 56 |
| 7 | -1 | 0 | 48 | 215 | 70 |
| 8 | 0 | +1 | 92 | 210 | 6 |
| 9 | 0 | -1 | 35 | 190 | 73 |

Результаты проведения экспериментов в соответствии с ортогональ-

ным планом сведены в таблицу 2 (Y_1 – напряжение при удлинении 300%, кгс/см², Y_2 – сопротивление разрыву, кгс/см², Y_3 – сопротивление раздиру, кгс/см).

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

$$Y_1(x_1, x_2) = 82,9 + 25,7x_1 + 27,7x_2 - 5,4x_1^2 - 17,4x_2^2 + 6,3x_1x_2;$$

$$Y_2(x_1, x_2) = 228,6 + 10,8x_1 + 18,5x_2 - 14,7x_1^2 - 29,9x_2^2 - 23,9x_1x_2;$$

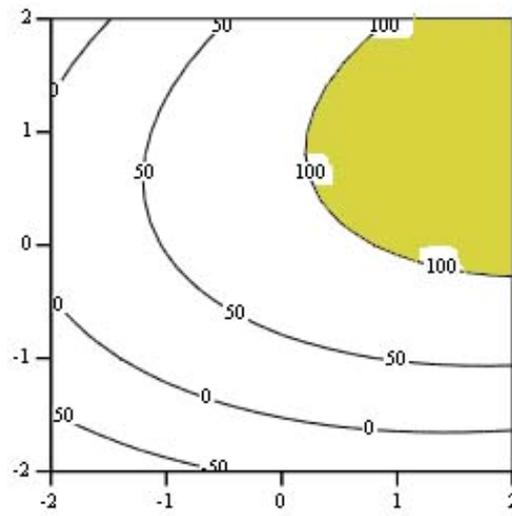
$$Y_3(x_1, x_2) = 65,8 - 3,5x_1 - 4,3x_2 - 3,8x_1^2 - 0,3x_2^2 - 6,8x_1x_2;$$

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.

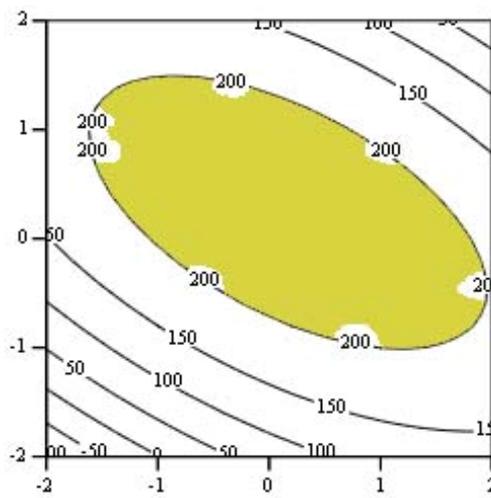
Для построения контурных кривых изменения свойств в зависимости от содержания двух компонентов по осям откладывают дозировки компонентов в условных единицах. Контурные кривые позволяют определить, при каких дозировках компонентов резины характеризуются наиболее высокими показателями, как, изменяя дозировки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

На рисунке 1 приведены контурные кривые (линии равного уровня) изменения напряжения при разрыве (рис.3, а), сопротивления разрыву (рис. 3, б), сопротивлению раздиру (рис.3, в), построенные с помощью MathCad .

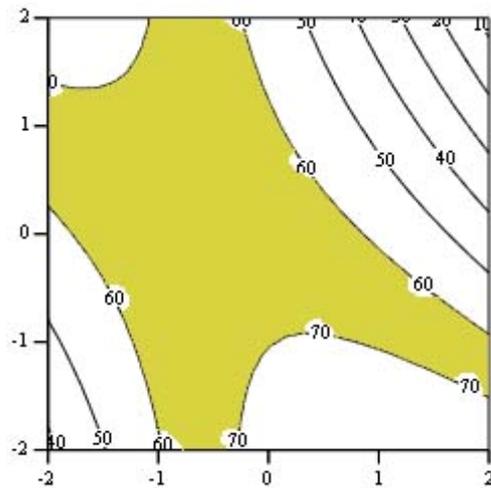
При построении контурных кривых без использования специальных программ (например, MathCad) необходимо помнить, что с увеличением числа промежуточных дозровок точность построения кривых увеличивается, однако при выборе шага следует учитывать, чтобы ожидаемое изменение величины свойства превышало ошибку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



а) Y1



б) Y2



в) Y3

Рисунок 3 -Контурные кривые (линии равного уровня) изменения напряжения при разрыве (а), сопротивления разрыву (б), сопротивлению раздиру (в).

Области, выделенные цветом, показывают смеси, характеризующиеся соответственно напряжением при разрыве не ниже 100 кгс/см^2 , сопротивлением разрыву не ниже 200 кгс/см^2 , сопротивлением раздиру не ниже 60 кгс/см .

Для определения состава смеси, удовлетворяющей одновременно требованиям к напряжению при разрыве и сопротивлением разрыву, совместим контурные кривые напряжения при разрыве Y_1 и сопротивления разрыву Y_2 (рис.4, Y_1 – оранжевая линия, Y_2 - коричневая линия).

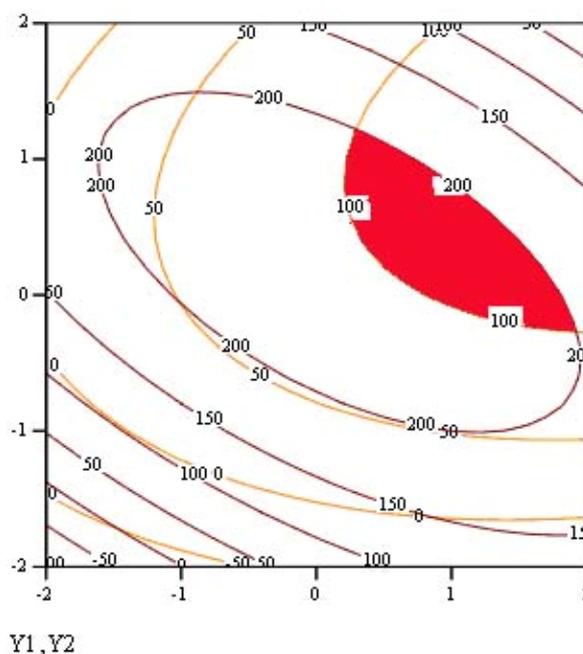


Рисунок 4 – Совмещенные контурные кривые зависимостей показателей свойств от содержания серы и сантокура.

В области, выделенной красным цветом находятся смеси, для которых напряжение при разрыве не ниже 100 кгс/см^2 и сопротивление разрыву не ниже 200 кгс/см^2 .

Для определения состава смеси, удовлетворяющей комплексу требований к свойствам резины. Совместим контурные кривые напряжения при разрыве Y_1 , сопротивления разрыву Y_2 , сопротивления раздиру Y_3 (рис.5, Y_1 – оранжевая линия, Y_2 - коричневая линия, Y_3 – черная линия).

В заштрихованной области находятся смеси, характеризующиеся на-

пряжением при разрыве не ниже 100 кгс/см^2 , сопротивлением разрыву не ниже 200 кгс/см^2 , сопротивлением раздиру не ниже 60 кгс/см одновременно. После того, как выбрана область оптимальных значений необходимо перейти от кодированных значений входных параметров к натуральным.

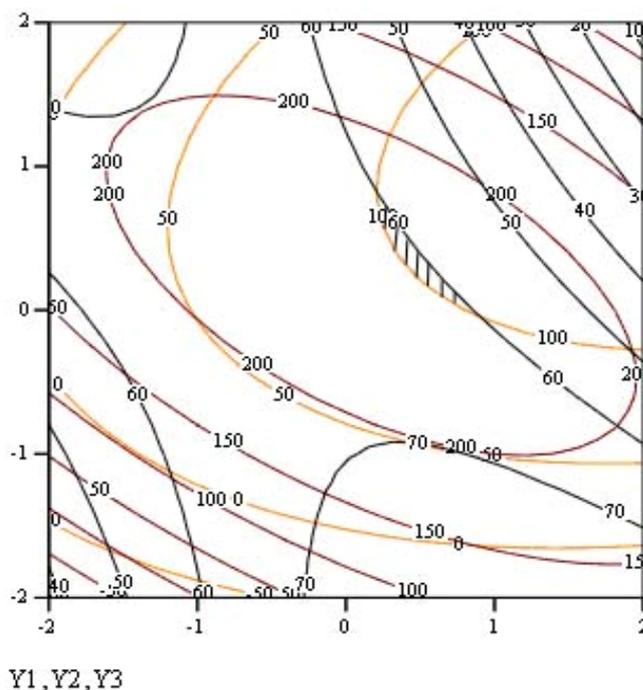


Рисунок 5 - Совмещенные контурные кривые зависимости показателей свойств от содержания сера и сантокура.

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.
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?

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). — Мн.: 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**
Анриан Викторович **Нистратов**

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ В ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ ПРАКТИКЕ
Методические указания к лабораторной работе

Редактор

Темплан выпуска электронных изданий 2008 г., поз. № .

На магнитоносителе. Уч.-изд. л. 1,0.

Подписано на «Выпуск в свет» 16.04.2008 г. Заказ № .

Волгоградский государственный технический университет.
400131, г. Волгоград, пр. им. В. И. Ленина, 28.

РИО РПК «Политехник»
Волгоградского государственного технического университета.
400131, г. Волгоград, ул. Советская, 35.