

Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий

Во многих случаях инженерной практике перед исследователем ставится задача не только выявления связи между рядами наблюдений, но и нахождение таких численных значений факторов при которых отклик (выходной параметр) достигает своего экстремального значения.

Эксперимент, решающий эту задачу, называется **экстремальным**.

В этом случае задача сводится к оптимизационной и формулируется следующим образом: требуется определить такие координаты экстремальной точки $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*)$

поверхности отклика $y = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$

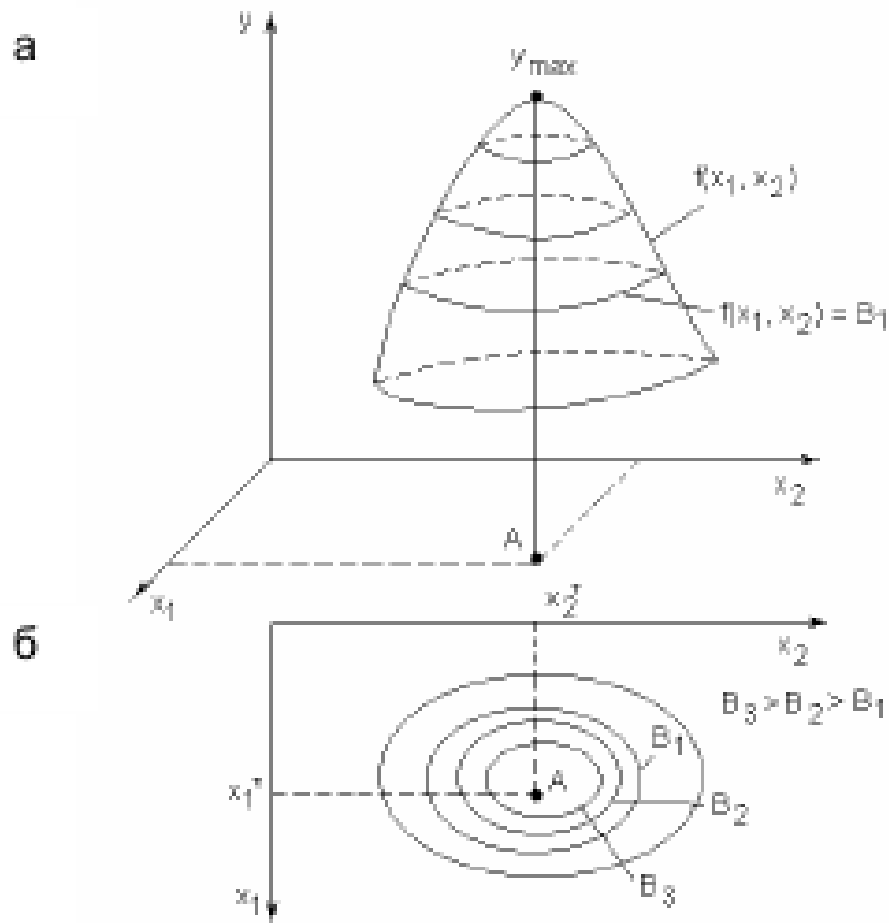
в которой она максимальна (минимальна).

Разработано множество методов пошаговой оптимизации, мы же рассмотрим некоторые, которые эффективно используются в промышленном и лабораторном эксперименте.

Графическая интерпретация задачи оптимизации объекта $y(x_1, x_2)$ при двух факторах x_1, x_2 представлена на рис. а, б.

Здесь точка А соответствует оптимальным значениям факторов x_1^* и x_2^* , обеспечивающим максимум функции отклика y_{\max} .

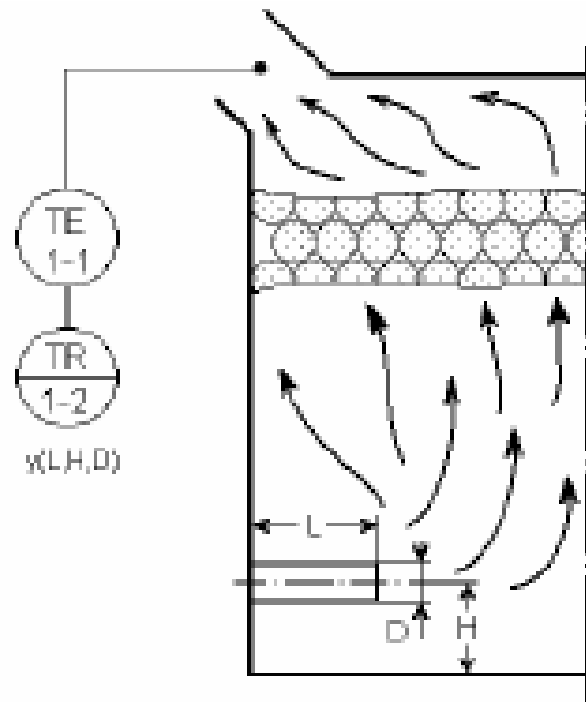
Замкнутые линии на рис. б характеризуют линии постоянного уровня и описываются уравнением $y=f(x_1, x_2)=B=\text{const}$.



Необходимость в экстремальных экспериментах довольно часто возникает в инженерной практике.

Так, на модели шахтной печи с противоточно движущимся плотным продуваемым слоем, схема которой представлена на рис. требуется определить расположение фурмы по высоте печи H , ее диаметр D и высов L , обеспечивающие максимальную степень использования теплового потенциала газового потока.

В данном случае факторами являются H , D , L , а в качестве функции отклика $y(H, D, L,)$ в первом приближении можно использовать температуру отходящих из печи газов.



Заметим, что вид функции отклика в этом случае исследователю заранее неизвестен, т.е. отсутствует математическая модель, адекватно описывающая данный процесс.

Требуется с наименьшими затратами (при минимальном числе опытов) определить оптимальные значения H^* , L^* , D^* , при которых температура отходящих газов минимальна.

Известный из практики метод "проб" и "ошибок", в котором факторы изменяются на основании опыта, интуиции или наугад, при обычно имеющем место значительном числе факторов при исследовании процессов зачастую оказывается малоэффективным вследствие весьма сложной зависимости функции отклика от факторов

Требуют значительно меньшего числа опытов и быстрее приводят к цели те поисковые методы оптимизации, где шаговое варьирование факторами производится целенаправленно по определенному плану.

Поисковые методы оптимизации относятся к классу итерационных процедур, при этом весь процесс разбивается на шаги, на каждом шаге делается ряд опытов и определяется, каким образом нужно изменить факторы, влияющие на процесс, чтобы получить улучшение результата.

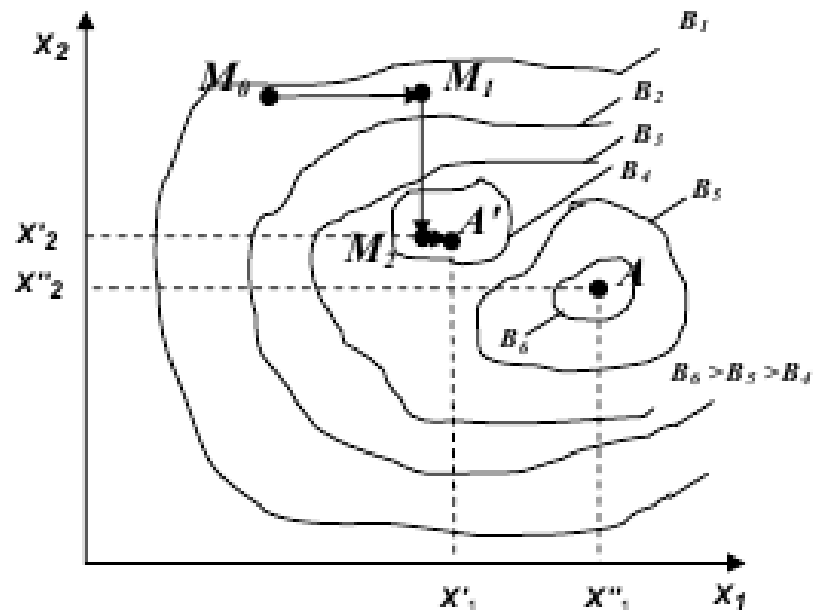
При этом на каждом очередном шаге получаемая информация используется для выбора последующего шага.

Разработано множество методов пошаговой оптимизации, которые подробно рассматриваются в разделе вычислительной математики – “Численные методы оптимизации”.

Мы же рассмотрим только некоторые из них, эффективность использования которых в промышленном и лабораторном эксперименте

Метод покоординатной оптимизации

Процесс поиска оптимума методом покоординатной оптимизации для двухмерного случая представлен на рис..



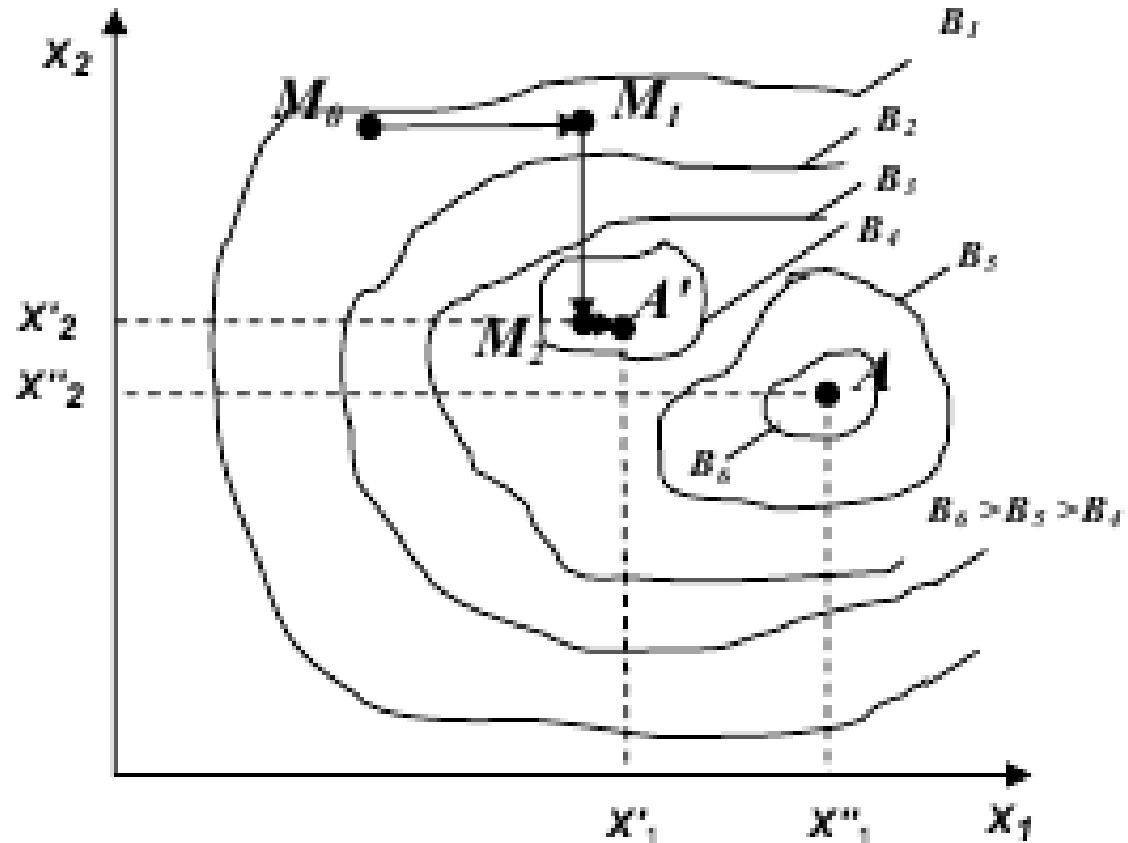
Поиск оптимума методом
покоординатной оптимизации

По этому методу выбирается произвольная точка m_0 и определяются ее координаты.

Поиск оптимума **осуществляется поочередным варьированием каждого из факторов.**

При этом сначала изменяют один фактор (x_1) при фиксированных остальных до тех пор, пока не прекращается прирост функции отклика (точка M_1). В дальнейшем изменяется другой фактор (x_2) при фиксированных остальных, и далее процедура повторяется.

Данный метод весьма прост, однако при большом числе факторов требуется значительное число опытов, чтобы достичь координат оптимума. Однако, в некоторых случаях (см. Рис.)



этот метод может привести к ложному результату.

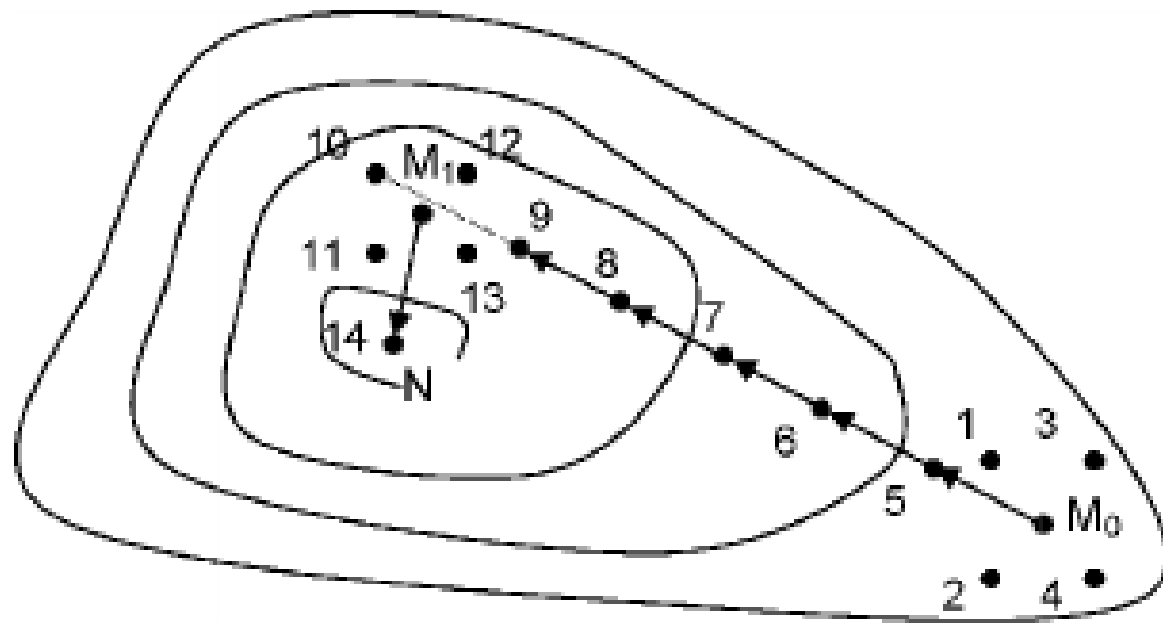
Поэтому далее рассмотрим более совершенные методы.

Метод крутого восхождения

Известно, что кратчайший путь - это движение по градиенту, т.е. перпендикулярно касательным к линиям уровня, на которых функция отклика принимает постоянные значения

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = B$$

В связи с этим при оптимизации рабочее движение целесообразно совмещать в направлении наиболее быстрого возрастания функции отклика, т.е. в направлении градиента функции. Существует несколько модификаций градиентного метода, одним из них является **метод крутого восхождения**. Сущность его отражена на рис.



Процедура оптимизации методом крутого восхождения.

В этом случае шаговое движение осуществляется в направлении наискорейшего возрастания функции отклика, т.е. ***grad*** $y(x_1, x_2)$.

Однако направление корректируется не после следующего шага, а при достижении в некоторой точке на данном направлении частного экстремума функции отклика.

Пусть в окрестности точки M_0 , как центра плана, поставлен ПФЭ 2^2 .

Координаты отдельных опытов соответствуют точкам 1-4. По результатам ПФЭ можно рассчитать коэффициенты линейного уравнения регрессии:

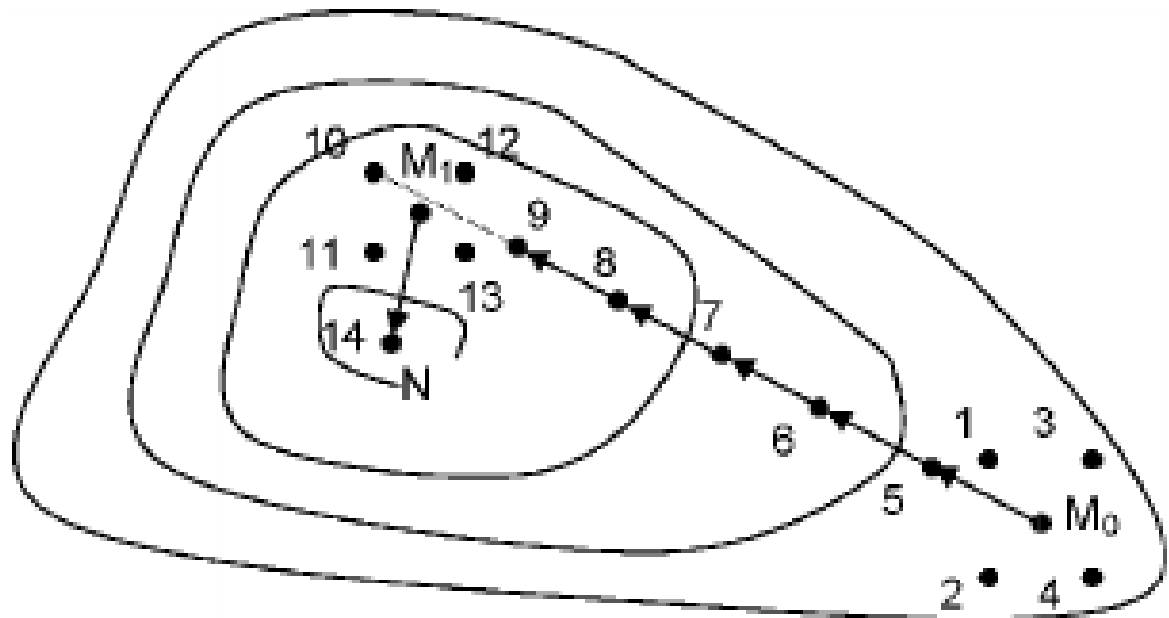
$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2.$$

После чего можно **найти градиент**

$$\text{grad } y = \frac{\partial y}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial y}{\partial x} \vec{j}$$

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = b_1, \frac{\partial y}{\partial x_2} = b_2$$

Для движения по градиенту необходимо изменять факторы пропорционально их коэффициентам регрессии в сторону, соответствующую знакам коэффициентов. В процессе поиска двигаются в этом направлении, пока не будет найден локальный максимум (т.е. M_1). после чего находят направление градиента, осуществляя |



Практически алгоритм сводится к следующей последовательности операций:

1. Планирование и постановка ПФЭ (или ДФЭ) в окрестности точки начального состояния (M_0). Расчет коэффициентов линейной регрессии; определении направления градиента.
2. Расчет произведений $b_i A x_i$, где $A x_i$ - интервал варьирования факторов при ПФЭ (ДФЭ).
3. Выбор базового фактора $x_i = x_{i0}$, у которого $b_i A x_i = a = \max$
4. Выбор шага крутого восхождения для базового фактора h_a **производится на базе априорной информации и опыта исследователя. Следует учесть, что слишком малый шаг потребует значительного числа опытов, а большой - создает опасность проскакивания области оптимума.**

5. Расчет шагов изменения других факторов по формуле: $h_i = (b_i A x_i) h_a / a$.

Это соотношение между величинами шагов изменения отдельных факторов обеспечивает движение по градиенту в факторном пространстве.

6. Составление плана движения по градиенту: в соответствии с определенными значениями шагов изменения факторов $x_{ik} = x_{i0} + kh_i$, $k = 1, 2, \dots$

Находят координаты опытов 5, 6, 7. Часть этих опытов проводят «мысленно». «Мысленный» опыт заключается в получении предсказанных (расчетных) значений функции отклика по линейному уравнению регрессии, что позволяет сократить объем реальных опытов. Обычно реальные опыты ставят через 3-4 «мысленных» для того, чтобы подтвердить действительное возрастание отклика. Из опытных данных находят положение локального экстремума.

7. В окрестности локального экстремума ставят новую серию опытов (ПФЭ илиДФЭ) для определения новых значений коэффициентов уравнения регрессии и нового направления градиента. В дальнейшем процедура повторяется до достижения нового локального экстремума и т.д., вплоть до определения окрестности координат максимума функции отклика, которая носит название **почти стационарной области**.

Признаком достижения этой области является статистическая незначимость коэффициентов b_j .

В этой области становятся значимыми эффекты взаимодействия и квадратичные эффекты.

Здесь требуется переходить отДФЭ к ПФЭ и к планам второго порядка. Для задач, где требуется определить координаты не максимума, а минимума функции отклика, знаки b_j *следует поменять на обратные. Движение будет происходить в направлении, обратном вектору градиента.*

Симплекс-планирование

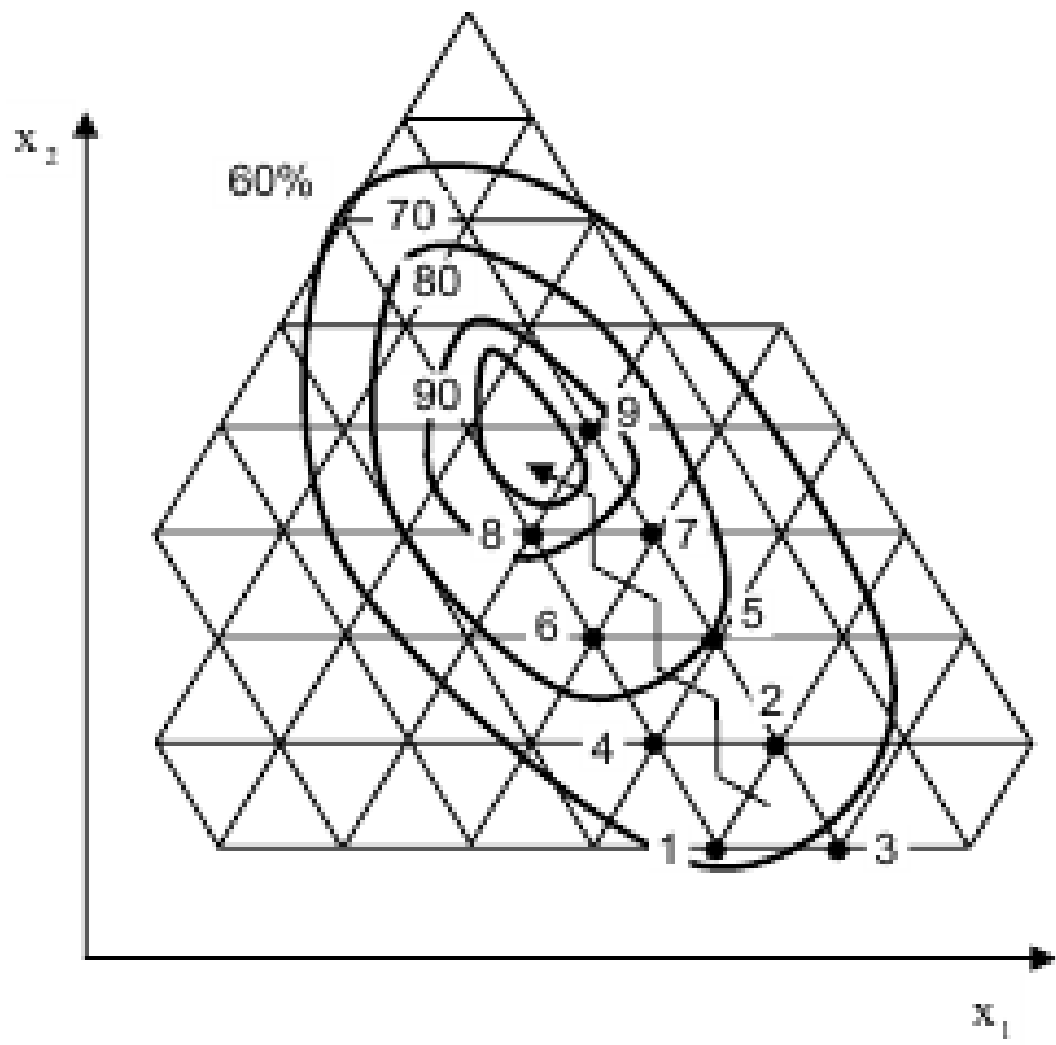
Позволяет без предварительного изучения влияния факторов найти область оптимума. Т.к. здесь не требуется определение градиента, то этот метод относится **безградиентным метода поиска** оптимума. Для этого используется специальный план эксперимента в виде **симплекса**.

Симплекс – простейший выпуклый многогранник, образованный $k+1$ вершинами в k -мерном пространстве, которые соединены между собой прямыми линиями.

При этом координаты вершин симплекса являются значениями факторов в отдельных опытах $k=2$, симплекс- треугольник, $k=3$ – тетраэдр и т.д.

Симплекс называется правильным, если все расстояния между его вершинами (ребра) равны.

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

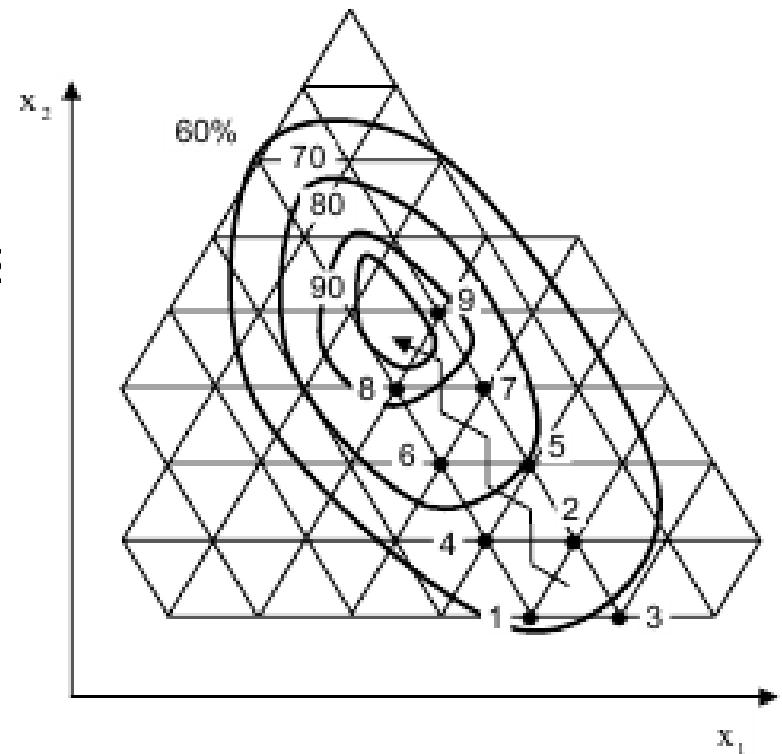


По итогам проведения опытов 1, 2 и 3 худшим оказался опыт 3. Следующий опыт ставится в точке 4, которая образует с точками 1 и 2 новый правильный симплекс.

Далее сопоставляются результаты опытов 1, 2 и 4.

Наихудший результат получен в точке 1, поэтому она в новом симплексе заменяется зеркальным отображением (точкой 5) и т.д., пока не будет достигнута почти стационарная область.

Следует заметить, что хотя этот путь и зигзагообразен, общее число опытов, необходимых для достижения области оптимума, может быть небольшим за счет того, что проводить $k+1$ опыт приходится лишь в начале, а в дальнейшем каждый шаг сопровождается проведением только одного дополнительного опыта, условия которого выбираются на основе предшествующих результатов.



Алгоритм симплекс планирования:

Строится исходный симплекс, проводятся опыты в его вершинах и анализируются результаты.

1. Выбирается вершина, в которой получено **наименьшее** значение функции отклика.

Для движения к оптимуму ставится опыт в новой точке, являющейся зеркальным отображением точки с наихудшим (минимальным) результатом.

Процесс повторяется до тех пор, пока не будет найдена почти стационарная область.

2. Не смотря на то, что путь может быть и не прямолинеен, общее число опытов может быть не большим.

При симплекс-планировании выбор размеров симплекса и его начальное положение произволен.

Для окончания процесса используются следующие критерии:

1 – разность значений функции отклика в вершинах симплекса становится меньше ранее заданной. Это означает вход в почти стационарную область вблизи оптимума, либо достижения области оптимума в виде «плато»;

2 - отражение любой из вершин симплекса после однократного «качания» приводит к возврату в исходное положение. При этом есть основания считать, что симплекс накрыл область оптимума.

3 – циклическое движение симплекса вокруг одной из его вершин на протяжении более, чем нескольких шагов. Т.е. циркулирует вокруг области оптимума.

В случаях 2 и 3 рекомендуется уменьшать размеры симплекса, т.е. расстояние между вершинами, до уточнения координаты оптимума.

Данный метод прост, но работает не достаточно быстро.
Наиболее быстрым является метод, основанный на его модификации
- **метод деформируемого многогранника.**

Ускорение достигается за счет того, что отражение осуществляется не на постоянную величину.

На рис. показана точка 4 очередного опыта при нормальном отражении наихудшей вершины 1, точки $5'$, $5''$, $5'''$ последующих опытов для случаев, соответственно, растяжения, сжатия и отрицательного сжатия многогранника.

К методу деформируемого симплекса

