

ОПТИМИЗАЦИЯ СИМПЛЕКС-МЕТОДОМ С НЕРЕГУЛЯРНЫМИ СИМПЛЕКСАМИ ПРИ ПОМОЩИ ПРОИЗВОДНОЙ ПО НАПРАВЛЕНИЮ

А. Л. САРКИСЯН, Г. А. КАЗАРЯН, А. В. АГАСАРЯН,
Э. С. АСРЯН и С. А. КАЗАРЯН

Научно-производственное объединение «Полимерклей»
им. Э. Л. Тер-Газаряна, Кировакан

Поступило 11 III 1983

Предложена модификация симплекс-метода планирования эксперимента, позволяющая использовать значения целевой функции в каждой вершине симплекса, а новую серию опытов ставить в направлении, близком к градиентному в случае отыскания максимума, и в противоположном—в случае минимума. Показана эффективность предлагаемого метода на примере оптимизации состава модельного клея.

Табл. 1, библи. ссылки 3.

Известно, что планирование эксперимента обычно проводится в два этапа [1]: а. отыскание «почти стационарной» области изменения факторов; б. математическое описание процесса в этой области.

Очень часто на первом этапе оптимизации используются различные модификации симплекс-метода.

Допустим, что в рассматриваемой области имеется только одна экстремальная точка, причем для целевой функции

$$|\text{grad } f(\bar{x})| \neq 0 \quad \forall \bar{x} \in Q, \quad \bar{x} \neq \bar{x}_0 \quad \text{и} \quad |\text{grad } f(\bar{x}_0)| = 0$$

где \bar{x}_0 — точка экстремума.

Тогда задача отыскания оптимума сводится к задаче отыскания стационарной точки.

Пусть имеем следующий начальный симплекс:

$$\begin{array}{l} 1. \quad x_1^1 \dots x_n^1 \\ 2. \quad x_1^2 \dots x_n^2 \\ \dots \dots \dots \\ n. \quad x_1^n \dots x_n^n \\ n+1. \quad x_1^{n+1} \dots x_n^{n+1} \end{array}$$

с соответствующими значениями целевой функции $y_1, y_2, \dots, y_n, y_{n+1}$.

Как известно [2], производную по направлению \vec{k} можно вычислить по двум следующим формулам:

$$\frac{\partial f(\bar{x}_0)}{\partial \vec{k}} = \lim_{\substack{\vec{x} \rightarrow \vec{x}_0 \\ \vec{x} - \vec{x}_0 \parallel \vec{k}}} \frac{f(\vec{x}) - f(\vec{x}_0)}{\rho(\vec{x}, \vec{x}_0)}$$

$$f[\bar{x}_1 + \lambda_1 \text{grad } f(\bar{x}_1)] = \max_{\bar{x}_i \in Q} f[x_1 + \lambda \text{grad } f(\bar{x}_1) = \bar{x}_0]$$

в случае отыскания максимума и

$$f[\bar{x}_1 + \lambda_1 \text{grad } f(\bar{x}_1)] = \min_{\bar{x}_i \in Q} f[x_1 + \lambda \text{grad } f(\bar{x}_1) = \bar{x}_0]$$

в случае минимума. Если вид функции неизвестен, надо вычислить

$\lambda_{\max} = \min(\lambda > 0, \bar{x}_1 + \lambda \text{grad } f(\bar{x}_1) \in \text{граница } Q)$, а если есть возможность поставить n опытов, нужно проводить их в точках, для которых $\lambda_1 = \frac{\lambda_{\max}}{n}$; $\lambda_2 = \frac{2\lambda_{\max}}{n}$; ..., $\lambda_n = \lambda_{\max}$.

4. Заменяя «худшую» точку наилучшей из новой серии опытов, к полученному симплексу применяем вышеуказанный алгоритм.

5. Если зафиксировать $\varepsilon > 0, \varepsilon > \beta$, где β — ошибка эксперимента (абсолютная), то процесс оптимизации можно остановить, когда $|\text{grad } f(x)| < \varepsilon$.

Описанный алгоритм, как алгоритм квазиньютоновского типа, сходится линейно. Если предположить, что исследуемое уравнение регрессии дважды дифференцируемо, то алгоритм сходится сверхлинейно, а если потребовать существования четвертых производных, то алгоритм будет сходиться уже квадратично, в то время как сходимость при методе наискорейшего спуска не лучше линейной [3].

Приведенный метод оптимизации исключает случаи заикливания, т. е. постоянно можно менять не одну, а несколько вершин симплекса: это позволяет использовать значения целевой функции во всех вершинах симплекс-метода [1]. При описанном методе оптимизации движение в факторном пространстве предписывается после каждой серии опытов (за исключением начального симплекса), а не фиксируется после начальной серии экспериментов, как в методе крутого восхождения Бокса-Уилсона [1]. Поэтому, во-первых, этим методом можно пользоваться в условиях нелинейности, а во-вторых, неправильная ориентация одного из симплексов, вызванная ошибкой опыта, не нарушает общего движения к оптимуму, а лишь увеличивает число опытов, т. е. описанный метод обладает большей адаптивностью.

Начальный план можно выбрать по типу однофакторного эксперимента, т. е. он может иметь вид:

1. $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n$
2. $\Delta x_1 + x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n$
- ...
- n . $x_1, x_2, \dots, \Delta x_{n-1} + x_{n-1}, x_n$
- $n + 1$. $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, \Delta x_n + x_n$

В описанном алгоритме используется лишь линейное приближение целевой функции, поэтому значение градиента в любой точке одно и

то же. Тогда вместо системы (1) сразу можно получить значение градиента:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x_i}, \quad i = 1, \dots, n$$

Можно, конечно, на каждом шагу брать диагональную матрицу описанного вида, но это увеличит число опытов.

Описанный алгоритм применялся при оптимизации модельного клея, имеющего следующий состав: основа—смола ЭД-20 (X_1), отвердитель—Л-20 (X_2), наполнитель—MgO (X_3). Параметром оптимизации служила прочность на сдвиг склеенных образцов из стали-3. Время отверждения 4,5 ч, температура отверждения 70°. Априори были выбраны следующие пределы варьирования факторов:

$$80 \leq X_1 \leq 120^*$$

$$30 \leq X_2 \leq 50$$

$$40 \leq X_3 \leq 60$$

В качестве начального был выбран следующий регулярный симплекс в факторном пространстве [1]:

№	Z_1	Z_2	Z_3
1.	0,5	0,289	0,204
2.	20,5	0,289	0,204
3.	0	-0,578	0,204
4.	0	0	-0,612

Переход от факторного пространства в „пространство весовых частей“ осуществляется по формуле $X_j = \Delta X_j \cdot Z_j + X_j^0$. Поэтому начальный план в „пространстве весовых частей“ имеет вид:

№	X_1	X_2	X_3	Y_{cp}
1.	110	42,89	82,04	15,68
2.	90	42,80	82,04	16,02
3.	100	34,22	82,04	16,3
4.	100	40	43,88	6,22

Система уравнений (1) в этом случае имеет вид:

$$\begin{aligned} 0,5 \frac{\partial f}{\partial f_1} + 0,289 \frac{\partial f}{\partial f_2} + 0,816 \frac{\partial f}{\partial f_3} &= 9,46^{**} \\ -0,5 \frac{\partial f}{\partial f_1} + 0,289 \frac{\partial f}{\partial f_2} + 0,816 \frac{\partial f}{\partial f_3} &= 9,8 \\ -0,578 \frac{\partial f}{\partial f_1} + 0,816 \frac{\partial f}{\partial f_3} &= 10,08 \end{aligned} \quad (2)$$

* Пределы указаны в весовых частях.

** Расчеты велись для факторного пространства.

Решив систему уравнений (2) и переходя из факторного пространства в „пространство весовых частей“, получим, что $\text{grad} f(x)$ направлен параллельно вектору $(-0,186585, -0,029608, 3)$. Для проведения новой серии опытов выбирались λ следующим образом. Найдено $\lambda_{\text{max}} = 5,4$, т. е. минимальное из всех $\lambda > 0$, приводящих на границу рассматриваемой области. Далее брались $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 2, \lambda_3 = 3, \lambda_4 = 4, \lambda_5 = 5$. Так как чрезмерное увеличение наполнителя MgO (X_2) приводит к уменьшению прочности, опыты для $\lambda_4 = 4, \lambda_5 = 5$ проводились мысленно. Таким образом, следующая серия опытов ставилась в точках:

№	λ	X_1	X_2	X_3	$Y_{\text{ср}}$
5.	1	99,8	39,9	46,8	30,36
6.	2	99,6	39,9	40,8	17,06
7.	3	99,4	39,9	52,8	13,06

Заменив „худшую“ точку № 4 на лучшую“ из новой серии опытов № 5, снова применяем тот же алгоритм, После четырех шагов был получен следующий состав: $X_1 = 80, X_2 = 30, X_3 = 40$ с адгезионной прочностью 25,5 МПа. При условии, что $|\text{grad} f(x_{\text{опт}})| < \epsilon = 0,2$, а $\beta = 0,1 < 0,2$, где β — ошибка при взвешивании, полученный состав с таким образом определенной точностью можно считать оптимальным.

ԱՆԿԱՆՈՆ ՍԻՄՊԼԵՔՍԵՆՐՈՎ ՍԻՄՊԼԵՔՍ-ՄԵԹՈՂԻՈՎ ՕՊՏԻՄԻԶԱՑԻՄ ԸՍՏ ՈՒՂՂՈՒԹՅԱՆ ԱԾԱՆՑՅԱԼԻ ՕԿՆՈՒԹՅԱՄԲ

Ա. Լ. ՍԱՐԿՍՅԱՆ, Զ. Ա. ՂԱԶԱՐՅԱՆ, Ա. Կ. ԱԶԱՍՐՅԱՆ, Է. Ս. ԱՍՐՅԱՆ և Ս. Ա. ՂԱԶԱՐՅԱՆ

Առաջարկված է էքսպերիմենտի պլանավորման սիմպլեքս-մեթոդի ձևափոխում, որը հնարավորություն է տալիս օգտագործել նպատակային ֆունկցիայի արժեքները սիմպլեքսի ցանկացած գագաթում, փորձերի նոր համալիրը դնել մաքսիմումի որոնման դեպքում գրադիենտին մոտ ուղղությամբ և մինիմումի որոնման դեպքում՝ հակառակ ուղղությամբ: Յուրյց է տրված առաջարկված մեթոդի էֆեկտիվությունը մոդելային սոսնձի բաղադրակազմի օպտիմիզացման օրինակի վրա:

SYMPLEX-METHOD OPTIMIZATION WITH IRREGULAR SYMPLEXES WITH THE HELP OF DIRECTIONAL DERIVATIVES

A. L. SARKISSIAN, G. A. KAZARIAN, A. B. AGASSARIAN,
E. S. ASRIAN and S. A. KAZARIAN

A simplex-method modification of experiment planning has been proposed offering the possibility of using the intended function values at any summit of the simplex to put the new series of experiments in a direction close to the gradient in the case of a search for a maximum and in the opposite direction in the case of a search for a minimum. The effectiveness of the proposed method has been shown on the example of optimization of the pattern adhesive composition.

1. С. Л. Ахназарова, В. В. Кафаров, Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии, Изд. «Высшая школа», М., стр. 225.
2. В. А. Садовничий, С. Х. Сендов, Математический анализ, Изд. «Наука», М., 1980, стр. 573.
3. Э. Полак, Численные методы оптимизации (единый подход), Изд. «Мир», М., 1974, стр. 27, 294.

Армянский химический журнал, т. 37, № 4, стр. 219—223 (1984 г.)

НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

УДК 541.123,6+541.78+546.32+546.33

ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМЫ $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{—Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}\text{—H}_2\text{O}$ ПРИ 0 И 25°C

Э. Б. ОГАНЕСЯН, В. Д. ГАЛСТЯН, С. С. АПЯН и К. Г. ГРИГОРЯН

Институт общей и неорганической химии АН Армянской ССР, Ереван

Поступило 23 VII 1983

Изотермическим методом при 0 и 25° изучено фазовое равновесие в системе $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{—Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}\text{—H}_2\text{O}$ с установлением состава твердых фаз по Скрейнемакерсу. Система характеризуется отсутствием химического взаимодействия с образованием новых соединений.

Установлены области существования кристаллизующихся твердых фаз: $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$, твердые растворы $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O} + \text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$.

Идентификация полученных твердых фаз проведена с помощью химического, кристаллооптического, рентгенофазового, термографического анализов.

Рис. 3, табл. 3, библиограф. ссылки 11.

Согласно работам [1—6], в синтетических моющих композициях комплексно употребляются полифосфат, карбонат и силикат натрия. Нами при 0 и 25° изучена система $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{—Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}\text{—H}_2\text{O}$, которая является частью четверной системы $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{—Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}\text{—Na}_2\text{SiO}_3\text{—H}_2\text{O}$.

При исследовании системы $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{—Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}\text{—Na}_2\text{SiO}_3\text{—H}_2\text{O}$ необходимо изучать три изотермы боковых тройных систем, две из которых — $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{—Na}_2\text{SiO}_3\text{—H}_2\text{O}$ и $\text{Na}_2\text{SiO}_3\text{—Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}\text{—H}_2\text{O}$ — при 25° уже известны [7, 8].

Изучение проводилось методом изотермической растворимости с установлением состава твердых фаз по Скрейнемакерсу. В работе использовали $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$, $\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ марки «х. ч.».

Время установления равновесия 4 недели. Состав жидкой и твердой фаз определяли аналитически: P_2O_5 — дитратным, Na^+ — пламенно-фотометрическим, CO_2 — кальциметрическими методами. Результаты исследований сведены в табл. 1, 2, по данным которых построены диаграммы 0 и 25° (рис. 1, 2).

Изотерма растворимости системы $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{—Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}\text{—H}_2\text{O}$ при 25° характеризуется наличием трех ветвей кристаллизации из равновесных растворов. Первая ветвь соответствует кристаллизации $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$,