بهینه سازی با استفاده از روش های گرادیان و سیمپلکس

ویکتور سردا [1]، خوان لوئیس سردا [2] و ابوبکر م. ادریس[3]

[1]گروه شیمی، دانشگاه جزایر بالئاریک، 07122 پالما د مایورکا، اسپانیا

[2] گروه ریاضیات کاربردی و تجزیه و تحلیل، دانشگاه بارسلون، اسپانیا

[3]گروه شیمی، کالج علوم، دانشگاه ملک خالد، ابها 61321، عربستان سعودی

چکیده - به‌طور سنتی بهینه‌سازی روش‌های تحلیلی با استفاده از روش تک متغیره متفاوت انجام شده است، هر پارامتر یک به یک باقی مانده ثابت را نگه می دارد. این بدان معنی است که در بسیاری از موارد حداقل فقط محلی است و بهینه واقعی را دریافت نمی کند. در میان گزینه های مختلف برای بهینه سازی چند متغیره، این است که با این روش مقاله روش گرادیان را برجسته می کند، که شامل توانایی انجام مشتقات جزئی است،مدل ریاضی و همچنین روش سیمپلکس که به آن شرط نیاز ندارد.مزایا و معایب آن دو روش بهینه سازی چند متغیره مورد بحث قرار می گیرد، نشان می دهد که چه زمانی می توان آنها را اعمال کرد و اشکال مختلفی که معرفی شده اند. موارد مختلف،در مورد کاربرد این روش ها در شیمی تجزیه توضیح داده شده است

1- مقدمه

بهینه سازی معمولاً یک مرحله اجباری در هنگام کار در علوم تجربی و مهندسی است، از توابع ریاضی و فرآیندهای صنعتی گرفته تا روش های تحلیلی جدید. قادر به در نظر گرفتن اثر متقابل بین شرایط نیست. از این رو، حداکثر بازده روش های تحلیلی ممکن است به دست نیاید. زیرا تک متغیره مبتنی بر بهینه سازی شرایط یک به یک با تغییر سطوح یک شرط است در حالی که سطوح سایر شرایط ثابت نگه داشته می شوند. رویکرد موثرتر بهینه‌سازی چند متغیره است که همه شرایط را به طور همزمان با سطوح مختلف همه آنها بهینه می‌کند. بر این اساس، بهینه‌سازی چند متغیره می‌تواند بیشترین بازدهی روش‌های تحلیلی را در کوتاه‌ترین دوره زمانی کسب کند.

هنگام بهینه سازی یک قدر یا یک تابع ریاضی، به عنوان مثال. $f(X)= f(x,y,\ldots,z)=U$، که به یک یا چند متغیر یا عامل بستگی دارد، $(x,y,\ldots,z)=X$، تابع را تابع هدف و مقادیر متغیرهایی که مقدار بهینه (حداکثر یا حداقل) را برای تابع هدف می دهند باید تعیین شوند. بنابراین، زمانی که برای مثال بهینه‌سازی راندمان یک واکنش، حداکثر سیگنال یک ابزار و حداکثر اختلاف بین سیگنال و نویز ابزار، هدف بهینه‌سازی می‌شود، یک ماکزیمم هدف خواهد بود. به حداقل رساندن تداخل ها یا یک خطای تجربی است. در موارد دیگر، مقادیر هدفمند مانند پوشش مجدد (100٪) در درمان نمونه و تفکیک در تکنیک های جداسازی با حفظ زمان تحلیل کوتاه مطلوب است.

ما بر روی چگونگی بهینه سازی مینیم تمرکز می کنیم. با این حال، اگر ماکسیمم یک تابع $f(X)$ هدف باشد، ما فقط باید تابع مقابل، یعنی $U=- f(X)$ را کمینه کنیم.

اگرچه هدف اصلی یافتن ماکزیمم و مینیمم مطلق است، روش‌های ریاضی غالباً ماکزیمم و حداقل نسبی یا محلی را بسته به نقطه شروع ارائه می‌کنند (شکل 1). بنابراین، توصیه می‌شود اطمینان حاصل شود که حداکثر یا حداقل یافت‌شده، مطلق‌هایی هستند که محاسبه را از نقاط اولیه مختلف شروع می‌کنند.

استراتژی های مختلفی برای بدست آوردن مقادیر بهینه برای موارد مختلف بهینه سازی وجود دارد که ممکن است همزمان باشند (مثلاًعملیات گرادیان، سیمپلکس و تکاملی) [1-3] یا متوالی (به عنوان مثال باکس–بنکن، مرکب مرکزی، دوهلرت و علامت د فاکتوریال) [3]. روش محاسبه باید بر اساس هر سیستم

انتخاب شود [1،4]. در زیر برخی از روش‌های متوالی توضیح داده شده است که می‌توانند به طور مؤثر با اکثر موارد بهینه‌سازی رایج در علوم تجربی مواجه شوند. تابع هدف باید در آنهایی که مشتق دارند و آنهایی که دارای مشتق نیستند طبقه بندی شود. بنابراین، دو گزینه متفاوت وجود دارد:

1. روش گرادیان برای توابع با چندین متغیر و مشتقات جزئی قابل حصول، با استفاده از روش‌های نیوتن، دیویدون، فلچر و پاول توصیه می‌شود.

2. برای توابع با چندین متغیر و مشتق جزئی غیر **قابل دستیابی**، روش سیمپلکس بهترین گزینه است.

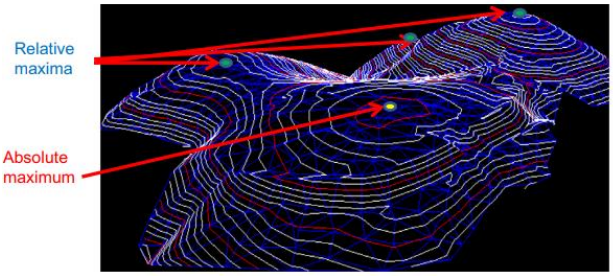

Fig. 1. Level curves with some local maxima and an absolute maximum.

شکل1 : منحنی های سطح با مقداری ماکزیمم محلی و حداکثر مطلق

تمام موارد ذکر شده، روش‌های عددی هستند که مبتنی بر پالایش مقادیر اولیه هستند. این مقادیر اولیه با توجه به دانش مشکل خاص تخمین زده می شوند، به عنوان مثال. هنگام تخمین pK یک گروه عاملی، یا با مقادیر به دست آمده با سایر روش های محاسبه تقریب، اعم از روش های گرافیکی یا تحلیلی.

در صورت امکان، توصیه می شود از الگوریتم هایی با استفاده از مشتقات برای دستیابی به قابلیت اطمینان بهتر و همگرایی سریع به بهینه (روش گرادیان) استفاده کنید، از جستجوی مستقیم با وجود سادگی آنها اجتناب کنید (روش ساده).

هدف از این بررسی، ارائه دانش کلی در مورد روش های گرادیان و سیمپلکس در امر بهینه سازی در علوم تجربی، پرهیز از استفاده بیش از حد از زبان ریاضی و ارائه توجیهی شهودی از روش های پیشنهادی است. متون تخصصی تر در این زمینه را می توان در ادبیات [5-7] یافت. مقدمه خوبی برای روش های عددی تجزیه و تحلیل را می توان در کتابشناسی یافت [8]. در زیر مجموعه ای از روش های مفید برای به کارگیری در زمینه علوم تجربی برای دستیابی به حد مطلوب شرح داده شده است

2- روش گرادیان

در روش «gradient»، «حداکثر شیب» یا «تندترین صعود»، مجموعه سطح یا منحنی تراز در صورت داشتن دو متغیر f(X)=U، مجموعه‌ای از نقاطی است که تابع مورد مطالعه همیشه در آنها بوده است. همان مقدار علاوه بر این، نه تنها U در این مجموعه تغییر نمی کند، بلکه به راحتی نشان داده می شود که تغییر U نسبت به پارامترها حداکثر در جهت در هر عمود بر مجموعه سطح است. این جهت توسط بردار گرادیان G(X) (معادل (1)) تعیین می شود که اجزای آن اولین مشتقات جزئی تابع "f" هستند. باید در نظر گرفت که اندازه بردار گرادیان نباید ثابت باشد، در غیر این صورت به حداکثر نمی رسد، از آن فراتر می رود (شکل a2). معیاری که باید رعایت شود کاهش اندازه بردار گرادیان است که شیب ها انجام می دهند.

شکل2 : روش گرادیان با (a) اندازه بردار ثابت و (b) اندازه بردار متغیر

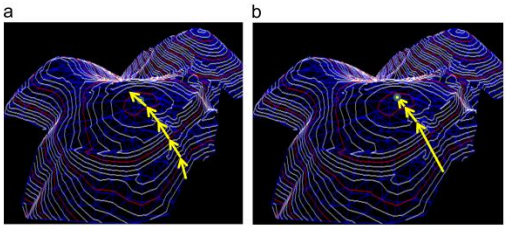

Fig. 2. The gradient method with (a) constant vector size and (b) variable vector size.

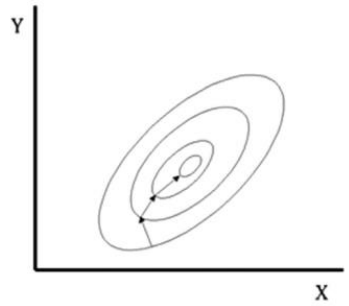

Fig. 3. The gradient method for two variables.

شکل3 : روش گرادیان برای دو متغیر مطلق

شکل b2

$$G(X) = (f_x(X), \ldots, f_z(X)),$$

در صورت وجود دو متغیر موثر بر تابع هدف، اگر جهت گرادیان را دنبال کنیم، یعنی مسیری عمود بر منحنی های تراز (شکل 3)، منحنی را با حداکثر شیب دنبال خواهیم کرد. بنابراین، با در نظر گرفتن معادله از نقطه (Xm) به نقطه بعدی (Xm+1) خواهیم رفت. (2) برای به حداکثر رساندن، و معادله. (3) برای به حداقل رساندن، گام "k" همیشه k>0 است. اگر نقاط Xm، Xmþ1 و غیره در شکل 4 ارائه شوند واضح تر خواهد بود.

$$X_{m+1} = X_m + k\ G(X_m) \qquad (2)$$

$$X_{m+1} = X_m - k\ G(X_m) \qquad (3)$$

2.1. نمونه هایی از کاربرد روش گرادیان

روش گرادیان به طور گسترده در برنامه‌هایی برای اصلاح پارامترهای ترمودینامیکی، مانند ثابت‌های تعادل، آنتالپی‌های واکنش و آنتروپی‌ها، که در آن مجموع مربعات باقی‌مانده به حداقل می‌رسد، استفاده شده است (جدول 1).

همه برنامه های فهرست شده در جدول 1 به مقادیر پارامترهای اولیه نیاز دارند. هر چه این مقادیر اولیه به بهینه نزدیکتر باشد، سرعت همگرایی به آن بیشتر خواهد شد و خطر واگرایی نیز کمتر خواهد بود.

با این حال، معیار شیمیایی باید همیشه در نظر گرفته شود، نتایج پوچ عاقلانه دیگری به دست خواهد آمد، به عنوان مثال. برای بدست آوردن سه ثابت پروتوناسیون برای یک اسید دی پروتیک زیرا مقدار باقیمانده کمتر است.

با چهار برنامه آخر نشان داده شده در جدول 1، دو فرآیند مختلف را می توان برای رسیدن به بهینه، یعنی یک فرآیند اعمال کرد.

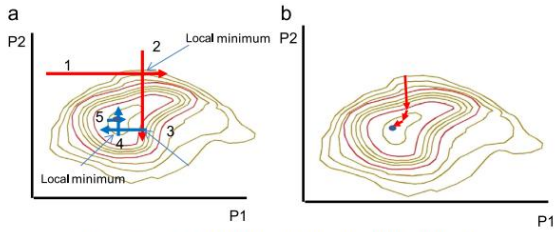

Fig. 4. (a) Search method (univariate). (b) Refinement method (multivariate).

شکل4 : (الف) روش جستجو (تک متغیره). (ب) روش پالایش (چند متغیره)

جدول 1 : نمونه هایی از برنامه هایی که از روش گرادیان استفاده می کنند

Table 1
Examples of programs using the gradient method.

Program	Function	Parameters to refine	Reference
MINIQUAD	$U = \sum_n (pH_{calculated} - pH_{exp})^2$	Equilibrium constants	[9]
MINIPOT	$U = \sum_n (E_{calculated} - E_{exp})^2$	Equilibrium constants	[10]
MINISPEF	$U = \sum_n (A_{calculated} - A_{exp})^2$	Equilibrium constants and molar absorbtivities	[11]
MINIPOL	$U = \sum_n (I_{calculated} - I_{exp})^2$	Equilibrium constants and intensities	[12]
MINITERM	$U = \sum_n (\Delta T_{calculated} - \Delta T_{exp})^2$	Equilibrium constants and enthalpies	[13]

بر اساس جستجوی تکراری به دنبال یک روش تک متغیره (شکل a4)، و دیگری بر اساس پالایش چند متغیره با بهره‌برداری از روش گرادیان (شکل b4).

با دو متغیر موثر بر تابع هدف، در روش جستجو ابتدا یک غربالگری گسترده برای یک متغیر برای یافتن حداقل محلی برای این متغیر اول انجام می‌شود، و متغیر دیگر را در یک مقدار ثابت نگه می‌دارد. سپس برای متغیر دوم غربالگری انجام می‌شود و متغیر اول در مقداری که در حداقل محلی اول یافت می‌شود ثابت می

ماند، و حداقل محلی دوم پیدا می‌شود. در شکل 4 الف، مشاهده می شود که یک حداقل مطلق تنها با دو غربالگری به دست نمی آید. غربالگری های تک متغیره باید دوباره تکرار شوند تا به حد مطلوبی که شامل رسیدگی به نقاط بسیار زیاد است نزدیکتر شود. روش جستجو می تواند به عنوان گام قبلی برای کاربرد روش گرادیان مفید باشد تا در نقطه ای نزدیک به بهینه شروع شود و از فرآیندهای واگرا اجتناب شود. با این حال، تعداد نقاط در روش گرادیان در مقایسه با روش جستجو بسیار کاهش می یابد.

به عنوان مثال، در مواد تکمیلی می توان جداول داده های ورودی و نتایج خروجی برنامهMINITERM را هنگام استفاده از روش جستجوی تک متغیره و سپس روش گرادیان چند متغیره برای اصلاح دو ثابت تعادل با استفاده از آزمایش های آنتالپیمتری یافت.

در کاربردهای دیگر، روش پرشیب‌ترین صعود برای بهینه‌سازی مؤثرترین شرایط تحلیلی پس از غربالگری با استفاده از روش‌های بهینه‌سازی همزمان چند متغیره به عنوان طرح فاکتوریل کامل و جزئی و Plackett-Burman [14-20] مورد استفاده قرار گرفت.

2.2. مشکلات روش گرادیان

روش گرادیان یا «شیب‌ترین نزول» و انواع آن بهترین گزینه برای ارزیابی یک بهینه و آرومتر یا مختصات آن در صورت امکان به دست آوردن مشتق تابع هدف و تخمین خوب مقادیر اولیه در نظر گرفته می‌شوند [21] . با این حال، به خوبی شناخته شده است که اثربخشی این روش‌ها در صورتی کاهش می‌یابد که مقادیر اولیه از حد مطلوب فاصله داشته باشند. همچنین، مشکلات به همراه تعداد متغیرها (N) برای بهینه سازی و در صورتی که تابع هدف به صورت تحلیلی قابل تفکیک نباشد، افزایش می یابد. قابل ذکر است که بهینه سازی توابع غیرمتمایز کننده در علوم تجربی مانند شیمی تجزیه بسیار رایج است. یک عبارت جبری برای همه متغیرها در علوم تجربی معمولاً در دسترس نیست.

هنگامی که استفاده از روش گرادیان دشوار یا غیرممکن است، جایگزین های بزرگ و شناخته شده ای وجود دارد که توسط روش های متوالی مستقیم ارائه می شود. اینها عموماً بر اساس اصلاحات روش سیمپلکس هستند. روش سیمپلکس اولین بار توسط اسپندلی، هکست و هیمسورث [22] پیشنهاد شد. متداول ترین اصلاحات مورد استفاده عبارتند از روش اصلاح شده سیمپلکس (MSM)، پیشنهاد شده توسط نلدر و مید [23]، و انواع مرتبط مانند سوپر اصلاح شده ساده (SMS) پیشنهاد شده توسط Routh، Swartz و Denton [24]، و روش تعدیل گاوسی پیشنهاد شده توسط ون در ویل [25].

در زیر با جزئیات بیشتر روش MSM و نمونه‌های آن، که بر اساس سودمندی آنها در کاربرد آزمایشی انتخاب شده‌اند، توضیح داده شده است.

3- روش سیمپلکس

روش سیمپلکس مبتنی بر یک شکل هندسی است که با تعدادی نقطه برابر N+1 به تعداد عوامل بهینه سازی (N) تعریف شده است.

ساده ترین سناریو شامل دو عامل است و سیمپلکس یک مثلث خواهد بود. به عنوان مثال، تصور کنید که هدف ما بهینه‌سازی نرخ جریان قابل احتراق (عامل 1، F1) و سرعت جریان اکسیدکننده (عامل 2، F2) برای تعیین عنصر X با استفاده از طیف‌سنجی جذب اتمی است.

شکل 5 منحنی‌های سطح را با پاسخ یکسان نشان می دهد، یعنی منحنی‌هایی که جذب‌هایی با مقدار یکسان در ترکیب نرخ‌های جریان متفاوت دارند. هدف به دست آوردن ترکیبی است که در آن جذب حداکثر است.

بهینه سازی از نقاط 1، 2 و 3 شروع می شود که یک را تشکیل می دهند

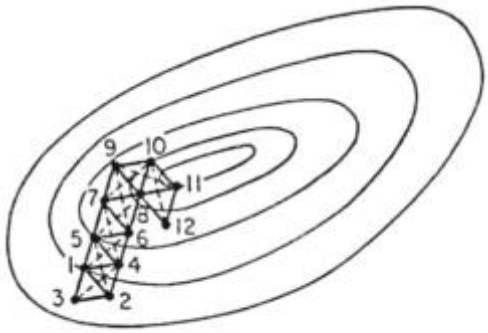

Fig. 5. Simplex advance.

شکل5 : سیمپلکس پیشرفته

مثلث متساوی الاضلاع و دادن نقطه 3 به عنوان بدترین پاسخ.بنابراین، احتمالاً پاسخ در جهت مخالف نقطه 3 افزایش خواهد یافت. بنابراین، مثلث منعکس شده 1-2-4 مورد مطالعه قرار می گیرد، که 4 نقطه بازتابی نقطه 3 است. آزمایش جدیدی برای بدست آوردن جذب نقطه 4 انجام شده است. اگر نقطه 2 بدترین پاسخ سیمپلکس جدید را بدهد، مثلث جدید با نقطه منعکس شده 2 به دست می آید. این روش به طور متوالی تکرار می شود و متوالی از سیمپلکس ها تولید می شود که به سرعت در سطح پاسخ حرکت می کنند. برای دستیابی به یک استراتژی پیشرفت کارآمدتر، یک سری قوانین به شرح زیر پیشنهاد شده است:

1. قانون 1: سیمپلکس جدید با دور انداختن نقطه ای که بدترین پاسخ را می دهد ایجاد می شود و با تصویر آینه ای خود در خطی که مطابق دو نقطه دیگر تعریف شده است جایگزین می شود. اگر نقطه جدید بدترین پاسخ زیر را بدهد، قانون 1 دیگر نمی تواند اعمال شود زیرا نقطه منعکس شده همان نقطه اصلی خواهد بود. اعمال قانون 1 منجر به ایجاد یک حلقه بی پایان بین دو سیمپلکس ایجاد شده می شود. بنابراین، قانون 2 باید رعایت شود.

2. قانون 2: بنابراین اگر نقطه جدید بدترین پاسخ را بدهد، بدترین نقطه دوم باید انتخاب شود و نقطه منعکس شده آن برای ایجاد سیمپلکس جدید به دست آید. تغییر در جهت پیشرفت به بهینه به دست می آید. این معمولا زمانی اتفاق می‌افتد که به حد مطلوب نزدیک می‌شویم.

3. قانون 3: بنابراین، اگر نقطه جدید نزدیک به بهینه باشد، تمام نقاط جدید از راس سطح پاسخ پیشی می گیرند و سیم‌پلکس‌های بعدی به دور بهینه می‌چرخند. این پدیده در شکل 6 نشان داده شده است که در آن چرخش از نقطه 9 شروع می شود.

انواع روش های ساده با هدف حل این مشکل و سرعت بخشیدن به جستجوی بهینه بوجود می آیند.

3.1. اصلاحات روش Simplex

3.1.1. روش سیمپلکس اصلاح شده

MSM [23] با داشتن N پارامتر (N>2) ارزیابی تابع هدف "U" را در رأس های N+1 آغاز می کند، به عنوان مثال. S(1)،S(N+1) ..... S(2)، از سیمپلکس اولیه. این رئوس را می توان از نقطه اولیه P(1)،...، P(N) و اندازه ضلع سیمپلکس "K" مانند معادله محاسبه کرد. (4)

$$S(1)\ \ P(1) + RP(2) + T\ldots P(N) + TS(2)\ \ P(1) + TP(2) + R\ldots P(N) + TS(N)\ \ P(1) + TP(2) + T\ldots P(N) + RS(N+1)\ \ P(1)\,P(2)\ldots P(N) \quad (4)$$

:

S(1)	:	P(1) + R P(2)+T ... . P(N)+T
S(2)	:	P(1) + T P(2) + R ..... P(N) + T
.....		
.....		
S(N)	:	P(1) + T P(2) + T ..... P(N) + R
S(N + 1)	:	P(1) P(2) ..... P(N)

where,

$$R = \frac{(N+1)^2 + N - 1}{\sqrt{2}N}K,\quad T = \frac{(N+1)^{1/2} - 1}{\sqrt{2}N}K \quad (5)$$

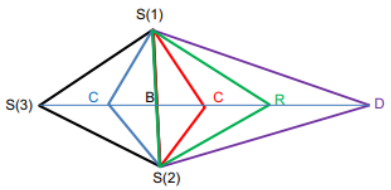

Fig. 6. Reflected, expanded, and contracted simplex.

شکل6 : سیمپلکس منعکس شده، منبسط و منقبض شده است

با فرض اینکه هدف یافتن یک حداقل باشد، برای مثال حداقل مجموع مجذور باقیمانده، تابع هدف "U" مانند معادله محاسبه خواهد شد. (6):

$$U(P_N) = \sum_i \left(M_{calc} - M_{exp}\right)^2 \qquad (6)$$

این تابع برای اصلاح پارامترهای آزمایشی با هدف دستیابی به حداکثر تنظیم بین مقادیر محاسبه‌شده یک تابع Mcalc(PN)i و داده‌های تجربی Mexp استفاده می‌شود که N پارامترهای مناسب P(1)،..... P(N) را انتخاب می‌کند.

در این مثال، بدترین راس آن است که بالاترین مقدار U را می دهد. با پیروی از استراتژی توصیف شده قبلی، این راس باید کنار گذاشته شود تا یک راس جدید طبق یک سری قوانین ساده انتخاب شود. این روش برای بهبود تدریجی مقدار U تکرار می شود تا زمانی که منطقه بهینه قرار گیرد.

رئوس سیمپلکس شماره گذاری می شوند، S(3) بدترین، S (2) دومین بدترین و S(1) بهترین نقطه. هنگام تعریف B به عنوان مرکز وجه مخالف S(3)، بدترین راس S(3) حذف می شود و راس جدید "R" با بازتاب مطابق معادله به دست می آید. (7).

$$R = B + (B - S(3)) \qquad (7)$$

استثنائات زیر باید در نظر گرفته شود:

a. اگر U(R)<U(S(1)) و U(R)>U(D)، که در آن D منبسط شده است، به عنوان مثال در فاصله دو برابر نقطه منعکس شده، سپس:

$$D = B + 2(B - S(3)) \qquad (8)$$

b. If $U(R) < U(S(3))$ and $U(R) > US((2))$ (9)

c. If $U(R) > U(S(3))$ (10)

در حالت (الف) سیمپلکس منعکس شده منبسط شده و راس جدید D است (شکل 6). از سوی دیگر، در موارد (b) و (c) یک انقباض خارجی و داخلی ایجاد می شود و راس جدید C=B+-0.5 (B- S(3)) است (شکل 7).

به اصطلاح مورد بحرانی زمانی است که بدترین پاسخ در نقطه C جدید به دست می‌آید. برای ادامه، توصیه می‌شود یکی از گزینه‌های توضیح داده شده در زیر را دنبال کنید:

انقباض عظیم (شکل 8)، پیشنهاد شده توسط نلدر و مید [23]. S با ضریب 0.5 به S(1) منقبض می شود. سپس، ارزیابی N راس جدید قبل از ادامه مورد نیاز است

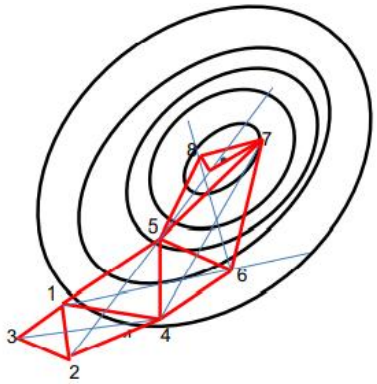

Fig. 7. Simplex progress with reflections, expansions and contractions.

شکل7 : پیشرفت سیمپلکس با بازتاب، انبساط و انقباض

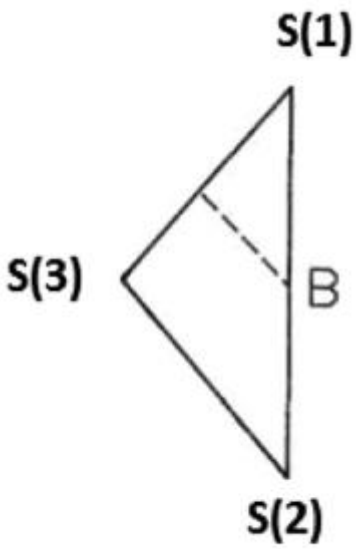

Fig. 8. Simplex massive contraction.

شکل8 : انقباض عظیم سیمپلکس.

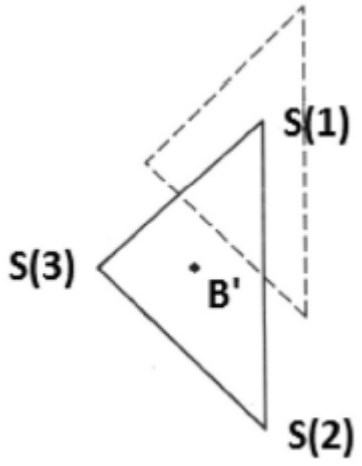

Fig. 9. Simplex translation.

شکل9 : ترجمه سیمپلکس

با اجرای الگوریتم در صورت بروز خطا امکان همگرایی زودرس وجود دارد.

2. ترجمه کل سیمپلکس (شکل 9)، پیشنهاد شده توسط ارنست [7]

3. سیمپلکس به عنوان (1) باریسنتر B از the جابجا می شود

سیمپلکس جدید Simplex در این مورد منقبض نمی شود، اما ارزیابی 1+N به رئوس جدید نیاز دارد.

4. نوع "بعدی بدترین" شامل جابجایی S(2) با S (3) هنگام اصلاح سیمپلکس، برای تغییر پیشرفت سیمپلکس با اجتناب از انقباض زودرس است.

3.1.2. روش سیمپلکس Supermodified

در روش SMS (شکل 10)، به جای دنباله ای از بازتاب ها، بازتاب ها و انقباضات برای به دست آوردن راس های جدید، برازش یک منحنی چند جمله ای مرتبه دوم برای مقادیر (U(S(3)، U(R), (U(B) از راس های S(3)، B و R استفاده می شود. منحنی بیشتر از S(3) و R برون یابی می شود، فاصله ای متناسب با فاصله بین S(3) و R. راس جدید

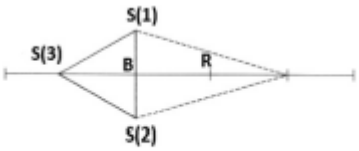

Fig. 10. Supermodified simplex method.

شکل 10 : ترجمه سیمپلکس

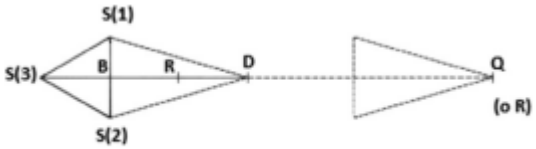

Fig. 11. Unidirectional progress.

شکل 11 : پیشرفت یک طرفه

نقطه ای با حداقل مقدار مربوط به تابع درجه دوم خواهد بود. مجاورت B برای جلوگیری از کاهش اندازه در طول فرآیند حذف می شوند.

3.2. سایر اصلاحات

به منظور پیشرفت سریعتر به سمت مطلوب و جلوگیری از انحطاط سیمپلکس به دلیل تغییر شکل های متوالی در هنگام اعمال MSM و SMS، یعنی زمانی که سیمپلکس به ناحیه بهینه نزدیک نیست، ما یک ترجمه سیمپلکس توسعه یافته در جهت S را پیشنهاد کرده ایم. S(3)-D (پیشرفت یک طرفه).

هنگامی که موارد (الف) MSM رخ می دهد، این پیشرفت یک طرفه پیشنهاد می شود اگر U(D)<U(S(1)) و U(Qn)<U(D)، جایی که

$$Q_n = B + 2^n(D - B) \quad (n = 1, 2)$$

آخرین نقطه Q=Qn مربوط به شرایط U(M)>U(Q) است که M=Qn+i است (شکل 11).

پیشرفت یک جهته فقط در صورتی توصیه می شود که n>2; در غیر این صورت تجربه نشان می دهد که

گسترش MSM (مورد (الف)) ارجح است. دو نوع از پیشرفت تک جهتی وجود دارد، یعنی:

1. پیشرفت یک طرفه ساده. سیمپلکس توسعه یافته جدید در (a) منتقل می شود. از این رو، راس های جدید Q=S(1)+V، S (2)+V، S(N+1)+V... هستند، که در آن

V=Q-S(N+1).

2. پیشرفت یک طرفه با درون یابی. بردار ترجمه V=A-D است، A نقطه ای است که پاسخ بهتری نسبت به Q و P می دهد، جایی که P نقطه ای است که با توجه به مقادیر U(D)، U(Q)، U(M) به دست می آید. یعنی P نقطه مربوط به مینیمم چند جمله ای مرتبه دوم است.

این روش‌ها همچنین می‌توانند در مورد بحرانی، که قبلاً توضیح داده شد، با پیشرفت یک‌طرفه S در جهت S(3)-S(1) اعمال شوند. استفاده از S(1) به جای B برای ساخت Q=Qn کافی است (شکل 12).

شکل 13 پیشرفت سیمپلکس را با بازتاب، ترجمه یک جهته و انقباض داخلی نشان می دهد.

3.3. روش سیمپلکس و کاربردهای انواع سیمپلکس

همانطور که قبلا گفته شد، سیمپلکس یک روش بهینه سازی است بر اساس استراتژی جستجوی منطقی حداقل یا حداکثر یک تابع یا آزمایش با یا بدون مدل ریاضی. در واقع تفاوت قابل توجه در مقایسه با روش های دیگر پالایش، مانند روش گرادیان، عدم نیاز به تمایز یک تابع ریاضی است.

همانند سایر روش‌های بهینه‌سازی، نیاز به دانستن مقادیر تقریبی عواملی برای پالایش دارد که به عنوان مقادیر اولیه استفاده می‌شوند.

همانطور که قبلا گفته شد، یکی از بزرگترین مشکلات پالایش است.

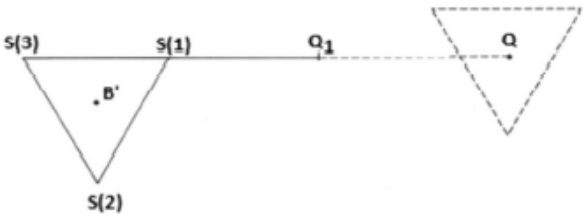

Fig. 12. Unidirectional progress of Sin direction S(3)–S(1).

شکل 12 : پیشرفت یک طرفه Sin جهت S(3)-S(1).

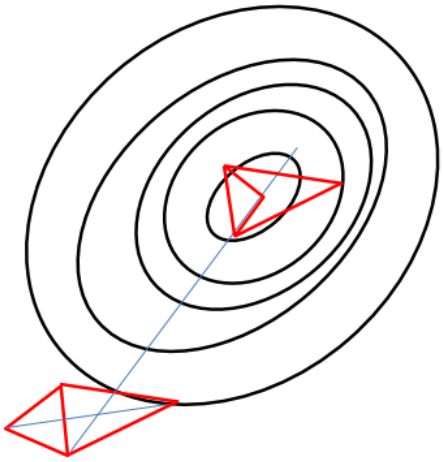

Fig. 13. Simplex progress with a reflexion, unidirectional translation and internal contraction.

شکل 13 : پیشرفت ساده با بازتاب، ترجمه یک طرفه و انقباض داخلی

روش همگرایی به حداقل محلی و نه مطلق است. بنابراین، توصیه می شود نقاط و مقادیر اولیه متفاوتی را برای اندازه جانبی سیمپلکس اولیه امتحان کنید. تجربه کافی ترین مقادیر اولیه را برای هر مشکل خاص نشان می دهد.

3.3.1. برنامه های کاربردی ساده

با توجه به نیازهای تحقیقاتی خود، ما برنامه های مختلفی را برای اعمال روش سیمپلکس در سه مورد مختلف ایجاد کرده ایم:

a. برنامه سیمپلکس: برای یافتن حداقل یک تابع ریاضی، به عنوان مثال. $U=X^2+Y^2$ که مقدار آن 0 است و در x=0 و y=0 قرار دارد.

b. برنامه SIMFIA: برای یافتن مینیمم یک تابع آزمایشی با دانستن مدل ریاضی آن (حداقل مربع حداقل مربع) [26،27].

c. برنامه ExpSimplex: برای یافتن حداقل در یک سیستم آزمایشی که مدل ریاضی آن را نمی داند. به عنوان مثال، بهینه سازی یک ابزار جذب اتمی که نرخ جریان قابل احتراق و اکسید کننده را تنظیم می کند. روش سیمپلکس برای بهینه‌سازی اتوماسیون روش وینکلر با استفاده از تجزیه و تحلیل تزریق متوالی (SIA) [28] و بهینه‌سازی راه‌اندازی اسپکتروفتومتر حرارتی با پرتو متقاطع لیزری دوگانه [29] استفاده شد. اخیراً روش Simplex نیز برای بهینه‌سازی چهار متغیر حجمی و دو متغیر شیمیایی برای کنترل کمی سازی اکسیژن محلول توسط SIA استفاده شد [28]. محاسبه راس و اعمال متعاقب آن از جمله آماده‌سازی درون خطی یک معرف در زمان واقعی با استفاده از نرم‌افزار AutoAnalysis انجام شد.

در واقع مثال های a و b را می توان با بازدهی بالاتر با استفاده از الگوریتم هایی از جمله مشتقات حل کرد که ترجیحاً باید از روش های متوالی استفاده شود.

3.3.2. برنامه های کاربردی انواع روش ساده سه برنامه ذکر شده قبلاً با ایجاد استراتژی های مختلف پیشرفت سیمپلکس در طول بهینه سازی ایجاد شده اند، از جمله ترجمه، پیشرفت تک بعدی، بسط و درونیابی بین سایرین. حداکثر هشت نوع را می توان انتخاب کرد که از بین آنها پوشش می دهد. اصل روش توسط نلدر و مید [23] برای اصلاحات خود. سرعت همگرایی به نوع مشکل و کیفیت مقادیر اولیه بستگی دارد.

تجربه راحت ترین نوع را تعیین می کند. شرح دقیق تر برنامه ها و لیستی از آنها سه برنامه را می توان در مطالب تکمیلی یافت.

4- مقیاس ها و معیارهای نهایی سازی

ملاحظات عملی مشترکی برای همه روش‌های بهینه‌سازی وجود دارد که علیرغم اینکه برای اطمینان از اثربخشی مهم هستند، معمولاً در نظر گرفته نمی شوند. از یک طرف، انتخاب صحیح مقیاس، یعنی مبدأ و واحد اندازه گیری برای همه متغیرهای درگیر، برای دستیابی به روشی معقول برای تغییرات همه عوامل و اطمینان از اندازه مناسب برای محدوده خطای انتخاب شده ضروری است. در چارچوبی دیگر، معیارهای نهایی سازی باید از تکرارهای غیرضروری و بیش از حد و همچنین نهایی شدن زودهنگام در گزینه غلط اجتناب شود.

4.1. انتخاب مقیاس برای متغیرها و تابع

تغییر مقیاس برای متغیرها شامل مطابقت بین متغیرهای اولیه $X=(x_1,\ldots,x_N)$ تابع هدف $f(X)$ و متغیرهای جدید $Y=(y_1,\ldots,y_N)$ است که با تغییر مبدا و واحدهای به دست آمده اند. اندازه گیری همانطور که در معادله نشان داده شده است. (11):

$$X_j = \alpha_j Y_j + \beta_j, \quad (j = 1, \ldots, N) \qquad (11)$$

در زیر برخی از قوانین اساسی برای انتخاب مقیاس مناسب ذکر شده است:

1. همه متغیرهای درگیر باید بزرگی مشابه داشته باشند سفارش یک واحد در منطقه مورد نظر

2. دانستن یک میدان متغیر متناسب و واقعی برای هر پارامتر، $a_j<x_j<b_j$ و انجام تغییر مقیاس با توجه به آن بسیار مفید است.

$$X_j = (b_j - a_j)y_j + a_j \qquad (12)$$

3. در صورت احتمال اشتباه بودن حدود aj و bj در مقیاس نباید تغییری ایجاد کرد.

4. برای مقیاس تابع، توصیه می شود مقادیر α و β را بین 1 و 1 یا بین 0 و 1 انتخاب کنید، زمانی که پارامترها در منطقه مورد نظر هستند.

5. مقیاس باید به گونه ای باشد که مقدار بهینه تابع 0 باشد. بنابراین، بهتر است $f(x,y)= x^2+y^2$ را در نظر بگیریم تا $f(x,y)= x^2+y^2+100000$.

در بهینه سازی با مشتقات، مقیاس به گونه ای است که تغییرات تابع نسبت به تغییرات پارامترها بسیار متفاوت است. این موضوع منجر به تفاوت های زیادی در مقادیر مشتقات جزئی در هنگام تغییر متغیر مشتق می شود.

بر این اساس، تغییرات مقیاس برای متغیرهایی که αj معادله را انجام می دهد مورد نیاز است. (12). علاوه بر این، باید در نظر گرفت که روش گرادیان به شدت به مقیاس انتخاب شده بستگی دارد.

$$\alpha_j = \frac{1+|f(X)|}{2f_j(X)} \qquad (13)$$

که در آن fj(X) مشتق جزئی "f" نسبت به Xj است.

4.2. معیارهای نهایی سازی

اگرچه یک بهینه سازی هنگام تعیین یک نقطه X که در آن G(X)=0 یا در صورت دانستن مقدار حداقل، f(X)=min حل می شود، با الگوریتم هایی با دقت محدود برای به دست آوردن همگرایی به بهینه (مانند موارد اعمال شده در تمرین)، تنها راه حل های تقریبی به دست خواهد آمد. یعنی شرایط قبلی باید با شرایط دیگری از نوع G(X)=0 یا f(X)=min جایگزین شود.

بر این اساس، با تعیین معیارهای نهایی سازی، می توان به اهداف زیر دست یافت:

1. بررسی پذیرش یک بهینه تخمینی دارای حاشیه خطا یا دقت کار.

2. در صورتی که یک بهینه تخمینی پذیرفته نشود، توصیه می شود معیاری برای توقف فرآیند اتخاذ شود، به خصوص اگر فرآیند کند باشد یا به تعداد ارزیابی های بالایی از تابع نیاز داشته باشد، زیرا روش می تواند به تکرارهای بی نهایت بدون انجام شود. همگرایی به حد مطلوب

معیارهای نهایی سازی جهانی را نمی توان برای همه روش ها یا موارد بهینه سازی ایجاد کرد. با این حال، انتخاب صحیح مقیاس باید هنجار باشد.

به طور کلی، معیارها توسط کاربر مشخص می شود که مقدار یک قدر مثبت ε را تعیین می کند، که مسئول ارقام قابل توجه تابع و/یا مقادیر پارامترها در بهینه است.

برای توصیف برخی معیارها، فرض کنید که اصلاحات متوالی پارامترها X1، X2 ... و مقادیر متناظر تابع عبارتند از y1، y2، .... در مورد بهینه‌سازی با استفاده از مشتقات، معیار نهایی‌سازی، انجام همزمان سه شرط زیر خواهد بود:

$$(1)\ |y_k - y_{k-1}| < \varepsilon(1+|y_k|)$$
$$(2)\ |x_k^j - x_{k-1}^j| < (\varepsilon(1+|x_k^j|))^{1/2} \qquad (j=1,\dots,N)$$
$$(3)\ |f_j(X_k)| \le \varepsilon^{1/2}(1+|y_k|)$$

where $X_k=(x_k^j)=(x^1,\dots,X_k^N)$.

شرط (2) را می توان نادیده گرفت اگر شرط (1) انجام شود و مقیاس های درست انتخاب شده باشد.

در روش سیمپلکس

اگر ;(f(S(3))-f(S(1))<ε (1+f(S(1))) باشد، می توان آن را پایان داد؛ یا در صورت دانستن حداقل مقدار OPT تابع f،

اگر f (S(1))–OPT<ε.

با توجه به احتمال خطای آزمایشی، توصیه می شود برای جلوگیری از نهایی شدن زودهنگام، یک شرط اضافی که در زیر توضیح داده شده اعمال شود.

$$|x_3^j - x_1^j| < (\varepsilon(1+|x_1^j|))^{1/2} \quad (j=1,\dots\dots,N),$$

where $X_3=S(3)$ and $X_1=S(1)$.

نلدر و مید [23] معیار نهایی سازی را برای انجام شرط زیر اتخاذ می کنند.

$$\frac{1}{N+1}\left(\sum_{i=1}^{N+1}[f(B)-f(S(i))]^2\right)^{1/2} < \varepsilon$$

که در آن S(1)،..... S(N+1) راس های N+1 آخرین سیمپلکس و B مرکز وجه مخالف S(3) هستند.

هنگام برخورد با توابع آزمایشی و در نظر گرفتن خطاهای احتمالی اندازه‌گیری، توصیه می‌شود از قانون "N+1" استفاده شود زیرا اگر این راس پس از تکرارهای متوالی N+1 بهترین پاسخ را بدهد، مقدار تابع در S(1) دوباره ارزیابی می‌شود.

5- توابع سنجش

پس از تدوین یک برنامه کامپیوتری بهینه سازی، باید آن را ارزیابی و با سایرین مقایسه کرد.

توصیه می شود عملکرد آن را به صورت مرحله ای بررسی کنید. ابتدا با مسائل ساده و سپس با مسائل پیچیده تر، افزایش تعداد متغیرها و دقت لازم برای نهایی کردن. سپس اگر اجزاء به درستی کار کنند، برنامه باید با توابع مختلف بررسی شود [30].

برخی از عملکردهای سنجش شده برای بررسی اثربخشی جایگزین های مختلف عبارتند از:

$$U = x_1^2 + \dots\dots + x_n^2 \text{ (from } N = 2 \text{ up to } 8) \quad (14)$$

$$U = [1.5 - x(1-y)]^2 + \left[2.25 - x(1-y)^2\right]^2 + \left[2.65 - x(1-y)^3\right]^2 \quad (15)$$

$$U = 100\left(y - x^2\right)^2 + (1-x)^2 \quad (16)$$

بهینه در (1،1،...، 1) قرار دارد و مقدار آن صفر خواهد بود. (1، 2، 1،...، 1، 2، 1) را می توان به عنوان نقاط اولیه در نظر گرفت [31]

$$U = (x - y + z)^2 + (-x + y + z)^2 + (x + y - z)^2 \quad (17)$$

Zangwill [32]

$$U = x^2 + 2Y^2 + 3Z^2 + 4W^2 + (x + y + z + w)^4 \quad (18)$$

$$U = (x + 10y)^2 + 5(z - t)^2 + (y - 2x)^4 + 10(z - t)^2 \quad (19)$$

با حداقل (0،0،0،0)، (3، 1، 0، 1) به عنوان نقطه اولیه پیشنهاد می شود.

همانطور که در تابع روزنبراک [31]، تابع پاول [33] را می توان به n4 متغیر گسترش داد و در گروه های 4 متغیری xpress بالا را تکرار کرد.

$$U = \sum_{i=1}^{n}\left(n - \sum_{j=1}^{n}(\cos x_j + i(1 - \cos x_j) - sen x_j)\right)^2 \quad (20)$$

تابع مثلثاتی، با n متغیر برای x=(x1,x2,...xn) (n/1، 1/n،...، 1/n) نقطه اولیه خواهد بود.

.

به منظور مطالعه روش‌های مختلف بهینه‌سازی، تعداد زیادی سنجش را با انتخاب تصادفی نقطه اولیه و اندازه K اولین سیمپلکس انجام داده‌ایم.

ما عمدتاً بر روی مقایسه روش نلدر و مید [23] و دو نوع پیشرفت یک جهته، همراه با گزینه های مختلف در موارد بحرانی، یعنی انقباض عظیم، ترجمه و پیشرفت یک جهته تمرکز کرده ایم. تعداد ارزیابی های مورد نیاز برای رسیدن به حد مطلوب تعیین شده است.

برای همه توابع، تقریب پیشرفت یک جهته کارآمدتر از بسط سیمپلکس منعکس شده در MSM است. این مزیت با افزایش N با رابطه فاصله نقطه اولیه و بهینه و همچنین با اندازه K سیمپلکس اول افزایش می یابد.

با این وجود، در موارد بحرانی، رویکرد انقباض عظیم اندکی سودمندتر از پیشرفت یک جهته و ترجمه زمانی است که از پیشرفت یک جهته به جای بسط استفاده شده باشد. این را می توان به این واقعیت نسبت داد که این پیشرفت از انقباض یا اعوجاج زودرس سیمپلکس جلوگیری می کند.

در پیشرفت یک جهته هیچ بهبودی در هنگام استفاده از درونیابی درجه دوم وجود ندارد. بنابراین، نتایج مشابه هستند و به طور کلی، پیشرفت ساده یک جهته ارجح است.

بنابراین توصیه می شود از MSM با انقباض عظیم در موارد بحرانی استفاده شود که با یک پیشرفت ساده یک جهته در موارد (a) هنگامی که U(D)>U(R)>U(S(1)) و U بهبود یافته است.

$U(Q_2)<U(Q_1)<U(D)$

این اصلاح روش سیمپلکس متوالی بسیار ساده و موثر است. همانطور که در MSM، هیچ دانش ریاضی

خاصی مورد نیاز نیست و محاسبات مربوطه کم اهمیت و آسان برای برنامه ریزی هستند.

5.1. استحکام روشها

در نهایت، بهینه سازی نباید با بدست آوردن پارامترهای optimum به پایان برسد. نتایج باید تکمیل شوند، یعنی ارزیابی رفتار هر پارامتر با در نظر گرفتن بهینه آن به عنوان نقطه مرکزی یک سنجش جدید. پس از آن، استحکام روش باید ارزیابی شود. این روش زمانی قوی‌تر خواهد بود که تحمل بیشتری نسبت به تغییرات پارامترهای مورد مطالعه در ناحیه بهینه یافت شده نشان دهد.

5.2. کاربردهای تحلیل جریان

در سال 2010، مروری بر کاربردهای الگوریتم SIMPLEX برای بهینه‌سازی سیستم‌های تحلیلی بر اساس تکنیک‌های جریان تقسیم‌بندی نشده توسط گروه ما منتشر شد [28،30،34]. توابع مختلف پاسخ مورد استفاده برای ارزیابی داده‌های تجربی بهینه‌سازی مورد مقایسه قرار گرفتند و مزایا و کاستی‌های تبلیغاتی آنها و مشکل استفاده از SIMPLEX با تمرکز ویژه بر کاربرد بلادرنگ به‌زودی مورد بحث قرار گرفت. کاربردهای تحلیلی و پارامترهای بهینه شده با روش SIMPLEX به صورت جدولی خلاصه شده است.

6. نتیجه گیری

1. در روش های بهینه سازی متوالی، روش گرادیان برای توابع با چندین متغیر و مشتقات جزئی قابل دستیابی توصیه می شود در حالی که روش سیمپلکس برای توابع با چندین متغیر و مشتقات جزئی غیرقابل حصول توصیه می شود.

2. توصیه می شود که تا حد امکان نزدیک به بهینه شروع کنید.

برای تحقق این هدف می توان از روش های محاسبه تقریبی استفاده کرد.

3. روش گرادیان بهترین گزینه در صورت امکان است.

4. بهینه سازی باید با شروع از نقاط اولیه مختلف تکرار شود تا اطمینان حاصل شود که بهینه یافت شده حداکثر مطلق یا حداقل است و نه محلی.

5. برنامه های مختلفی برای اصلاح پارامترهای ترمو دینامیکی بر اساس گرادیان m ایجاد شده است.

قدردانی

نویسندگان حمایت مالی وزارت اقتصاد و رقابت اسپانیا (MINECO) را از طریق پروژه CTQ2013-47461-R که توسط صندوق های FEDER تأمین مالی شده است، تأیید می کنند.

پیوست A. اطلاعات تکمیلی

داده‌های تکمیلی مرتبط با این مقاله را می‌توانید در نسخه آنلاین در http://dx.doi.org/10.1016/j.talanta.2015.05.061 پیدا کنید.

رفرنس

[1] P. Gans, Coord. Chem. Rev. 19 (1976) 99–124. [2] B. Dejaegher, Y.V. Heyden, Sequential optimization methods, Ref. Modul. Chem. Mol. Sci. Chem. Eng. Compr. Chemom. 1 (2009) 547–575. [3] L.V. Candioti, M.M. De Zan, M.S. Cámara, H.C. Goicoechea, Experimental design and multiple response optimization. Using the desirability function in analy tical methods development, Talanta 124 (2014) 123–138. [4] L.A. Sarabia, M.C. Ortiz, Response surface methodology, Ref. Modul. Chem. Mol. Sci. Chem. Eng. Compr. Chemom. 1 (2009) 345–390. [5] J.E. Dennis Jr., R.B. Schnabel, Numerical Methods for Unconstrained Optimi zation aAnd Nonlinear Equations, Prentice-Hall, 1983. [6] R. FIetcher, Practical Methods of Optimization, Vol I, Wiley, 1980. [7] D.M. Himmelblau, Applied Nonlinear Programing, McGraw, New York, 1972. [8] A.M. Cohén, Análisis Numérico, Reverte, Barcelona, 1977. [9] P. Gans, A. Sabatini, A. Vacca, Talanta 43 (1996) 1739–1753. [10] F. Gaizer, A. Puskás, Talanta 28 (1981) 565. [11] F. Gaizer, A. Puskás, Talanta 28 (1981) 925. [12] V. Cerdà, R. Jara, Thermochim. Acta 87 (1985) 13. [13] R. Forteza, V. Cerdá, Talanta 32 (1985) 1159. [14] H. Chen, J. Zhang, Y. Dang, G. Shu, J. Chem. Pharm. Res. 6 (2014) 612–616. [15] L. Escuder-Gilabert, Y. Martín-Biosca, S. Sagrado, M.J. Medina-Hernández, J. Chromatogr. A 1363 (2014) 331–337. [16] G. Di Nicola, M. Pacetti, F. Polonara, G. Santori, R. Stryjek, J. Chromatogr. A 1190 (2008) 120–126. [17] K. Selber, F. Nellen, B. Steffen, J. Thömmes, M.-R. Kula, J. Chromatogr. B 743 (2000) 21–30. [18] A. Herrero, M.C. Ortiz, M.J. Arcos, J. López-Palacios, Analyst 119 (1994) 1585–1592. [19] P. Petersson, N. Lundell, K.E. Markides, J. Chromatogr. A 623 (1992) 129–137. [20] D. Wienke, C. Lucasius, G. Kateman, Anal. Chim. Acta 265 (1992) 211–225. [21] J. Cerdá, V. Cerdá, Cuadernos de Ciencias y Técnicas Ambientales, in:

M. Blanco, V. Cerdà (Eds.), Serie Química Analítica, AEST, Barcelona, 1988. [22] W. Spendley, G.R. Hext, F.R. Himsworth, Technometrics 4 (1962) 441. [23] J.A. Nelder, R. Mead, Comput. J. 7 (1965) 308. [24] M.W. Routh, P.A. Swartz, M.B. Denton, Anal. Chem. 49 (1977) 1422–1428. [25] P.F.A. van der Wiel, Anal. Chim. Acta 122 (1980) 421–433. [26] M. Blanco, V. Cerdà, J. Coello, J. Gené, H. Iturriaga, S. Maspoch, Anal. Lett. 25 (1992) 543–560. [27] V. Cerdà, J.L. Cerdà, Optimization of analytical techniques using the gradient and simplex methods. 19th International Conference on Flow Injection Ana lysis and Related Techniques. Fukuoka, Japan,. [28] B. Horstkotte, A.T. Sánchez, C.M. Duarte, V. Cerdà, Anal. Chim. Acta 658 (2010) 147. [29] A. Cladera, C. Tomás, J.M. Estela, V. Cerdà, G. Ramis, Anal. Chim. Acta 282 (1993) 613–623. [30] M. Blanco, V. Cerdà (Eds.), Temas avanzados de Quimiometría, University of the Balearic Islands, Palma de Mallorca. Spain, 2007, ISBN: 987-84-8384-006- 1. [31] H.H. Rosenbrock, Comput. J. 3 (1960) 175. [32] W.I. Zangwill, Manag. Sci. 13 (1967) 334. [33] M.J.D. Powell, Non convex minimization calculations and the conjugate gra dient method, in: Lecture Notes in Mathematics, vol. 1066, Springer (1984), p. 122–141. [34] Burkhart Horstkotte, Carlos M. Duarte, Víctor Cerdà, TrAC Trends Anal. Chem. 29 (2010) 1224–1235