Н.И. Ботошан

МНОГОМЕРНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ ФУНКЦИИ РЕГРЕССИИ

Институт прикладной физики АН РМ,
ул. Академией, 5, MD-2028, г. Кишинев, Республика Молдова

Введение

Формально-эвристические методы решения широко распространены в оперативных задачах планирования и управления экономикой. По существу, это формулирование некоторого набора эвристик, обеспечивающих построение таких формальных алгоритмов, позволяющих получить оптимальное решение с необходимой точностью [1]. Оптимизация в технологиях переработки продуктов растениеводства основана на получении квадратичной функции отклика методом планирования эксперимента и существенно отличается от задач линейного программирования [2].

Интересный класс задач имеет отношение к определению экстремумов, расположенных на границе рассматриваемого промежутка или области пространства. В частности, в задачах оптимизации технологических процессов необходимо определить экстремум функции регрессии, подчиненной системе неравенств (ограничений). Для линейных функций разработана методика линейного программирования, сводящая поиск решения к численному анализу симплекс-методом. В случае квадратичной функции система ограничений предъявляет дополнительные требования, выполнить которые возможно путем канонического преобразования квадратичной формы и последующего, аналогичного симплекс-методу, поиска решения. Аналогом возможности аналитического представления области ограничений одной формулой является известный метод множителей Лагранжа, применяемый в задачах оптимизации. В этой статье развит формально-эвристический метод оптимизации функции регрессии, включающий преобразование квадратичной формы в каноническую, и линейный анализ преобразованных переменных в заданной их области ограничений, аналогичный симплекс-методу оптимизации.

Приведение квадратичной функции отклика к каноническому виду

Рассмотрим случай квадратичной функции регрессии двух переменных (факторов эксперимента) [3]:

$$Y(x_1, x_2) = a_{11}x_1^2 + 2a_{12}x_1x_2 + a_{22}x_2^2 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_0.$$

Детерминант однородной системы преобразований в канонический вид квадратичной формы приводит к следующему характеристическому уравнению:

$$D = \begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} \\ a_{12} & a_{22}-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

решение которого выглядит так: $\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\left\{\left(a_{11}+a_{22}\right) \pm \sqrt{\left(a_{11}-a_{22}\right)^2 + 4a_{12}^2}\right\}$.

В результате канонического преобразования квадратичная форма функции отклика приобретает вид

$$Y(x_1, x_2) = \lambda_1\left(x_1'\right)^2 + \lambda_2\left(x_2'\right)^2 + \mu_1x_1' + \mu_2x_2' + a_0,$$

где

© Ботошан Н.И., Электронная обработка материалов, 2006, № 1, С. 58–62.

$$x'_1 = b_{11}x_1 + b_{21}x_2\,, \qquad \mu_1 = \frac{a_1(b_{22} - b_{12})}{\Delta}, \qquad \text{где } \Delta = \begin{vmatrix} b_{11} & b_{21} \\ b_{12} & b_{22} \end{vmatrix}.$$
$$x'_2 = b_{12}x_1 + b_{22}x_2\,;\,. \qquad \mu_2 = \frac{a_2(b_{11} - b_{21})}{\Delta};$$

Коэффициенты b_{ij} в этих выражениях должны удовлетворять условию нормировки:

$$b_{11}^2 + b_{21}^2 = 1,$$
$$b_{12}^2 + b_{22}^2 = 1.$$

Для удовлетворения этих условий после их определения из однородной системы

$$b_{21} = \frac{\lambda_1 - a_{11}}{a_{12}} b_{11} = \frac{a_{12}}{\lambda_1 - a_{22}} b_{11}$$

$$b_{12} = \frac{\lambda_2 - a_{22}}{a_{12}} b_{22} = \frac{a_{12}}{\lambda_2 - a_{11}} b_{22}$$

их умножают на нормирующий множитель

$$N = \frac{1}{\sqrt{b_{11}^2 + b_{21}^2}} = \frac{1}{\sqrt{b_{22}^2 + b_{12}^2}}.$$

Например, для коэффициентов формы $a_{11} = 17, \quad a_{12} = 6, \quad a_{22} = 5$ имеем $\lambda_1 = 20, \quad \lambda_2 = 5$ и $\frac{b_{21}}{b_{11}} = \frac{1}{2}; \quad \frac{b_{12}}{b_{22}} = -\frac{1}{2}$, а нормирующий множитель $N = \frac{1}{\sqrt{5}}$.

Следовательно, новые переменные канонической формы равны

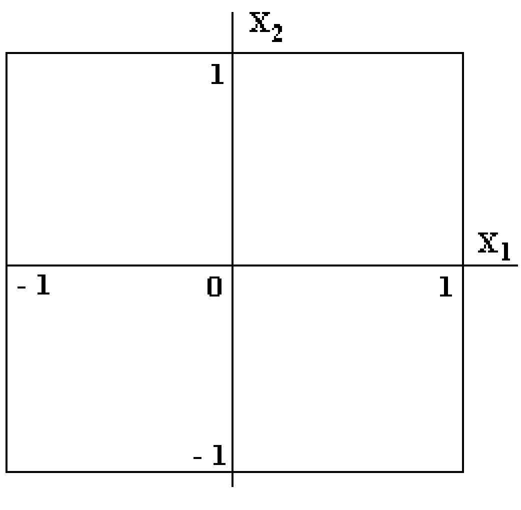
$$x'_1 = \frac{1}{\sqrt{5}}(2x_1 + x_2),$$

$$x'_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}(-x_1 + 2x_2)$$

а коэффициенты при линейных членах соотносятся как $\frac{\mu_1}{a_1} = \frac{3}{5}$ и $\frac{\mu_2}{a_2} = \frac{1}{5}$.

Оптимизация многомерной, квадратичной функции регрессии

Переменные функции регрессии, полученной методом планирования эксперимента, являются кодированными величинами факторов последнего. Согласно плану эксперимента значения кодированных факторов ограничены интервалом значений: $|x_i| \le 1, \quad i = 1,2.$ Критерию оптимизации обычно соответствует процедура определения максимума или минимума функции отклика. На рисунке представлена область допустимых решений системы неравенств, имеющая геометрическую форму квадрата со стороной, равной 2, центр которого находится в точке начала координат.



Экстремальные значения квадратичной формы $Y(x_1, x_2)$ в заданной области зависят от параметров λ_i и определяются пятью кардинальными точками квадрата области ограничений. В двух парах из четырех точек вершин квадраты величин x_i' имеют одинаковые значения, а именно – в вершинах, лежащих на соответствующих диагоналях квадрата. Во всех вершинах квадрата сумма квадратов величин x_i' максимальная. Следовательно, для оптимизации на максимум функции регрессии $Y(x_1, x_2)$, когда $\lambda_i > 0$, необходимо выбрать ту диагональ квадрата, для которой переменная x_i' при большем значении λ_i является наибольшей величиной. Естественно, таких точек в пространстве области оптимизации две, лежащих в противоположных вершинах на концах диагонали квадрата. Для исследованного примера $Y(1,1) = 20*\frac{9}{5} + 5*\frac{1}{5} + a_1 + a_2 + a_0 = 37 + a_1 + a_2 + a_0$ и $Y(-1,-1) = 37 - a_1 - a_2 + a_0$, что позволяет элементарно отбирать максимальное значение функции отклика при известных коэффициентах формы. Отбор из двух точек одной выполняется по знаку линейных коэффициентов функции регрессии.

Если хотя бы одно значение корней характеристического уравнения отрицательное, процедура оптимизации на определение максимума функции регрессии значительно упрощается – переменная величина x_i', при соответствующем отрицательном коэффициенте λ_i приравнивается нулю. Заметим, что в случае положительных корней для величины λ_i минимальному значению функции $Y(x_1, x_2)$ соответствует точка центра квадрата: $Y(0,0) = Y_{\min} = a_0$.

Развитую методику оптимизации двухфакторного эксперимента для функции отклика двух переменных можно применить для оптимизации многофакторного эксперимента. Например, для случая трехфакторного эксперимента основой для оптимизации является канонически преобразованная квадратичная форма:

$$Y(x_1, x_2, x_3) = \lambda_1 (x_1')^2 + \lambda_2 (x_2')^2 + \lambda_3 (x_3')^2 + a_0 .$$

Характеристическое уравнение при этом имеет вид

$$D = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

где a_{ij} коэффициенты формы:

$$Y(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} a_{ij} x_i x_j + a_0 .$$

Характеристическое уравнение можно представить в виде

$$\lambda^3 - \sigma\lambda^2 + \chi\lambda - \delta = 0 ,$$

где $\sigma = a_{11} + a_{22} + a_{33}$;

$$\chi = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{13} & a_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{23} & a_{33} \end{vmatrix};$$

$$\delta = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{vmatrix}.$$

Введенные переменные канонической формы определяются соотношениями:

$$x_1' = b_{11} x_1 + b_{21} x_2 + b_{31} x_3 ,$$

$$x_2' = b_{12} x_1 + b_{22} x_2 + b_{32} x_3 ,$$

$$x_3' = b_{13} x_1 + b_{23} x_2 + b_{33} x_3 .$$

Коэффициенты b_{ij} в этих выражениях удовлетворяют алгебраической, однородной системе уравнений вида

$$\begin{cases} (a_{11}-\lambda_i)b_{1i}+a_{12}b_{2i}+a_{13}b_{3i}=0, \\ a_{21}b_{1i}+(a_{22}-\lambda_i)b_{2i}+a_{23}b_{3i}=0, \\ a_{31}b_{1i}+a_{32}b_{2i}+(a_{33}-\lambda_i)b_{3i}=0, \end{cases}$$

где $i=1,2,3$.

Например, для случая $a_{11}=7$, $a_{12}=-2$, $a_{13}=0$, $a_{22}=6$, $a_{23}=-2$, $a_{33}=5$ имеем $\lambda_1=3$, $\lambda_2=6$ и $\lambda_3=9$. Формулы преобразования переменных в канонический вид квадратичной формы выглядят следующим образом:

$$x_1'=\frac{1}{3}(x_1+2x_2+2x_3);$$
$$x_2'=\frac{1}{3}(2x_1+x_2-2x_3);$$
$$x_3'=\frac{1}{3}(-2x_1+2x_2-x_3).$$

Результат оптимизации: $Y(-1,1,-1)=Y(1,-1,1)=Y_{\max}=9*\frac{25}{9}+6*\frac{1}{9}+3*\frac{1}{9}+a_0=26+a_0$, $Y(0,0,0)=Y_{\min}=a_0$. При наличии линейных членов результат оптимизации получаем отбором максимального или минимального значения функции отклика из трех конкретных значений: $Y(-1,1,-1)=26-a_1+a_2-a_3+a_0$, $Y(1,-1,1)=26+a_1-a_2+a_3+a_0$ и $Y(0,0,0)=a_0$.

Изложенная схема приведения квадратичной регрессии к каноническому виду применима также при любом числе переменных, однако решение характеристического уравнения становится все более трудным. Поэтому нахождение характеристических чисел и преобразование переменных – трудоемкая процедура. Кроме того, методика оптимизации представляет область допустимых значений переменных в N-мерном пространстве. Например, для трехфакторного эксперимента эта область является кубом в трехмерном пространстве со стороной равной 2, и центром в начале координат. В этом случае противоположные точки с равными значениями квадратов новых переменных x_i' являются точками вершин диагоналей куба. В четырехмерном пространстве форму области оптимизации графически представить невозможно. Несмотря на это противоположные точки на концах диагоналей можно легко получить из условия центральной симметрии путем изменения знаков всех переменных. Например, точка вершины $A(1,1,1,1)$ имеет противоположную вершину $A_S(-1,-1,-1,-1)$, а точка вершины $B(1,1,-1,-1)$ соответствует противоположная вершина диагонали четырехмерного куба $B_S(-1,-1,1,1)$ и т.д.

Комментарии и выводы

Методика оптимизации преобразованием квадратичной функции отклика в каноническую довольно просто реализуется программированием на компьютере. В этой методике содержатся элементы симплекс-метода оптимизации наряду с каноническим преобразованием функции отклика. Универсальность метода упирается в ограничения, связанные лишь с возможностями нахождения корней характеристического уравнения для квадратичной функции отклика.

Однако приведенный анализ указывает на следующие свойства области ограничения решений при поиске экстремальных значений квадратичной функции регрессии: экстремумы функции находятся в одной из точек вершин пересечений поверхностей, выражающих ограничения областью допустимых значений факторов функции регрессии, или в точке, определенной из уравнений необходимого условия экстремума; точки вершин области ограничений обладают центральной симметрией; количество предполагаемых точек экстремума равняется 2^k+1, где k – число факторов функции регрессии.

Следовательно, для оптимизации квадратичной функции отклика достаточно: решить систему линейных уравнений, выражающую необходимое условие экстремума, и определить значение функции в этой точке; пересчитать значения функции регрессии в 2^k точках вершин области ограничений; определить экстремальное значение функции подбором из 2^k+1 значений.

Таким образом, оптимизация квадратичной функции регрессии сводится к аналогичному симплекс-методу отбору оптимального решения по точкам вершин области ограничений, включая и точку необходимого условия экстремума.

Особую значимость оптимизация функции регрессии с целью уточнения режимов электрической или термической обработки приобретает в пищевой перерабатывающей промышленности. В технологиях переработки биологического сырья уточнение режимов обработки иногда приводит к новому качеству готового продукта, а даже незначительное увеличение его выхода представляет собой ощутимый экономический эффект.

В статье [2] методом планирования эксперимента изучается возможность интенсификации протирки и центрифугирования электроплазмолизованной томатной пульпы. Дело в том, что производство томат-пасты путем выпаривания является энергоемким технологическим процессом, в котором оптимизация режимов электроплазмолиза и тепловой обработки позволяет снизить потребление тепловой энергии. Для достижения эффекта после электрической обработки выполняют протирку или центрофугирование пульпы, выход которой зависит от режима электроплазмолиза. Отметим, что увеличение выхода предварительной протирки или центрифугирования всего на 1% отражается объемом производства томат-пасты в тысячи единиц готового продукта. Аналогичный процесс интенсификации экстракции сахара с увеличением выхода предварительным электроплазмолизом исследован в [4]. Разность концентраций содержания сахара в диффузионном соке от электроплазмолизованного сырья и необработанного током указывает на возможности улучшения динамики концентрирования.

Следовательно, предварительный экспериментальный анализ с применением оптимизации функции регрессии в процессах электрической и термической обработки биологического сырья является одним из возможных факторов обеспечения роста экономической эффективности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Алгоритмы и организация решения экономических задач. Сборник статей. Вып. 2. «Статистика». М., 1973.

2. *Берзой С.Е., Ботошан Н.И., Рудковская Г.В., Панькова А.С. Цырдя И.Д.* Интенсификация протирки и центрифугирования томатной пульпы электроплазмолизом // Электронная обработка материалов. 1990. № 2. С. 73–76.

3. *Ефимов Н.В.* Квадратичные формы и матрицы. Наука, М., 1967.

4. *Ботошан Н.И., Папченко А.Я., Берзой С.Е.* Интенсификация процесса экстракции сахара предварительной электрообработкой свекловичной стружки // Электронная обработка материалов. 1990. № 6. С. 66–72.

Поступила 15.08.05

Summary

The method of multidimensional optimization of a square-law function obtained by a method of experiment planning in problems of technologies of vegetable products processing is developed. The peculiarity of optimization problems for alimentary technologies consists of in limitation of space range of factors of planned experiment. The formal-heuristic method of optimization of regression function includes a transformation of a quadratic form into a canonical form, and linear analysis of converted variables in the given range of constraints similar to a simplex method. The possibilities of further simplification of the method, including computer-oriented implementation, are given.