Optimieren (III)

1. Parameteroptimierung mehrdimensionaler Systeme (Hill-Climbing-Methoden)

1.1 *Netz-Methode*
1.2 *Ein-Faktor-Methoden*
1.2.1 Variation der selben Prozessvariablen
1.2.2 Sukzessive Variation aller Variablen
1.3 *Box-Wilson-Methode*
1.3.1 Methode des steilsten Anstiegs
1.3.2 Gradienten-Methode Newton-Raphson-Methode
1.3.3
1.4 *Evolutionary Operation* (EVOP) – Evolutions-Methode –
1.4.1 Faktorieller Versuchsplan (Factorial Design)
1.4.2 Berechnung der Effekte von Einflussgrößen
1.4.2.1 Änderung des Mittelwertes (Change in mean effect)
1.4.2.2 Standardabweichungen
1.4.3 Beispiel einer Prozess-Optimierung
1.4.4 Möglichkeiten und Grenzen
1.5 *Sequential Simplex Method*
1.5.1 Startsimplex
1.5.2 Regeln und Verfahren der Methode
1.5.3 Berechnung eines Spiegelpunktes
1.5.4 Möglichkeiten und Grenzen

2. Funktionenoptimierung

2.1 Gradientenmethode
2.2 Maximumprinzip
2.3 Dynamische Programmierung nach *Bellman*

3. Literaturhinweise

zu 1.: Parameteroptimierung mehrdimensionaler Systeme

$$y = f(x_1, x_2, \ldots x_p)$$

p: Dimension der Zielfunktion

x_i: Prozeßvariable (Faktoren)

Beispiel:

$$A = f(t, c_i)$$

A: Ausbeute

t: Reaktionszeit

c_i: Konzentration eines Reaktionsproduktes i

(p=2)

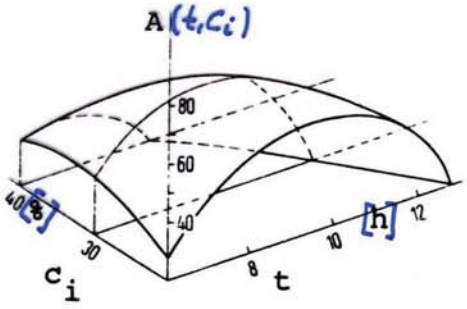


Abb.1a: Oberfläche einer Zielfunk. in Abhängigkeit von zwei Variablen

(p=2)

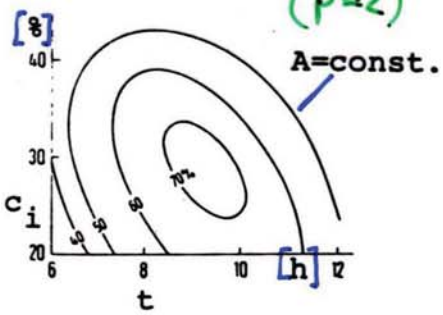


Abb.1b: Höhenlinien der Zielfunktion aus Abb. 1a

neben "Bergen" u. "Tälern" kann Zielfunktion auch "Sättel" ("Pässe") u. "Gräben" (Unstetigkeiten) enthalten.

$p > 2$: Zielfunktionen sind Hyperflächen im p-dimensionalen Variablenraum.

Hill-Climbing-Methoden (Berg-Besteigungsmethoden):

Optimierungsverfahren, die das Aufsteigen zum Maximum bzw. das Absteigen zum Minimum im mehrdimensionalen Raum auf eindimensionale Optimierungsschritte zurückführt:

(1) Startpunkt
(2) Suche entspr. einer Iterationszyklus
(3) Abbruch der Suche entspr. einer Abbruchkriterium

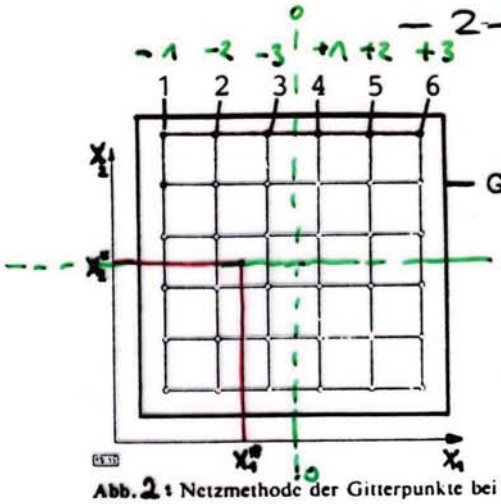
zu 1.1 Netzmethode

Der gesamte Variationsbereich der p Prozeßvariablen wird mit einem Netz von Versuchspunkten überdeckt. In jedem Versuchspunkt wird die Zielfunktion bestimmt. Hieraus wird ein Polynom aufgestellt, dessen Extremum berechnet wird. Die Zahl n der erforderlichen Versuche steigt mit der Zahl p der Prozeßvariablen exponentiell:

$n = a^p$, worin a: Anzahl der Niveaus (Stufen) der Prozeßvariablen

für a=4 und p=5 $\Rightarrow$ $n=4^5$ = 1024 Versuche. $\Rightarrow$ Netzmethode i.a. nur für p = 2 anwendbar.

Opt. III



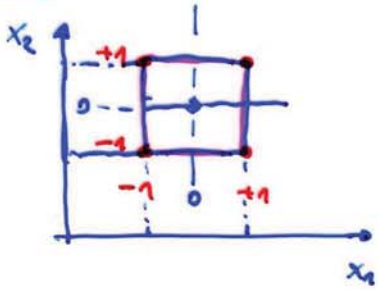
Grenze des Untersuchungsgebietes

x_1^*, x_2^* : Koordinaten des Optimums

Abb. 2: Netzmethode der Gitterpunkte bei zwei Variablen

a = 6; p = 2 ⇒

n = 6^2 = 36 Versuche



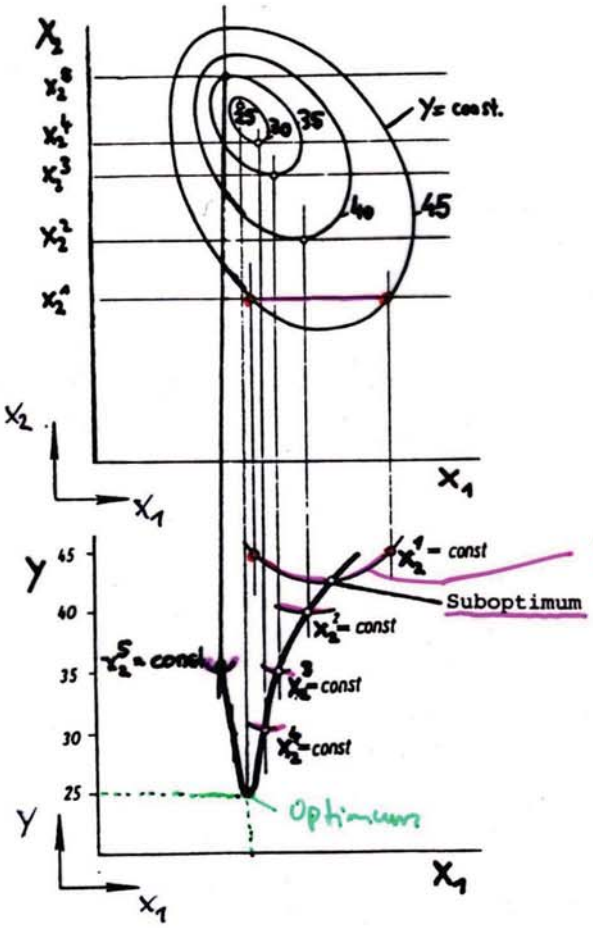
a=2; p=2

$n = 2^2 = 4$ Versuche

zu 1.2: Ein-Faktor-Methoden

Hier wird jeweils eine Prozeßvariable solange variiert, bis ein lokales Extremum (Suboptimum) erreicht ist.

zu 1.2.1: Variation derselben Prozessvariablen



$y = f(x_1, x_2)$: ~~bekannt~~ z.a. nicht; Regressionspolynom

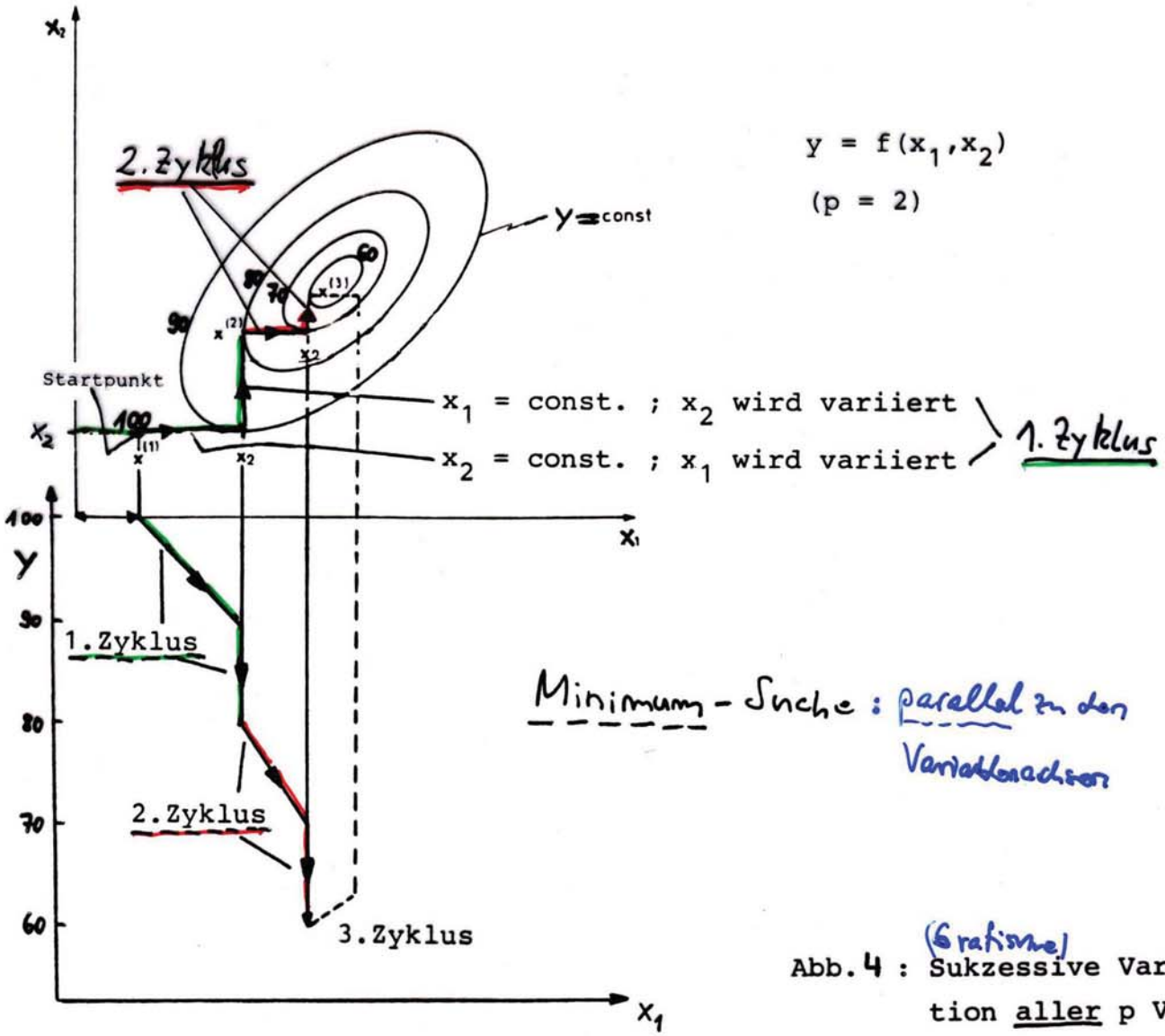
$y(x_1)_{x_2^1 = const.}$

Abb. 3 : Das Aufsuchen des Minimums durch Verminderung der Anzahl der Veränderlichen

Die gleiche Variable x_1 wird variiert: x_2 = const. ⇒ $y = f(x_1)_{x_2=const}$

Kurvenschar, jede Kurve mit Suboptimum

zu 1.2.2: Sukzessive Variation aller Variablen



$y = f(x_1, x_2)$

$(p = 2)$

Minimum-Suche: parallel zu den Variablenachsen

Abb. 4: (Grafische) Sukzessive Variation aller p Variablen

1. Zyklus: 1. vom Startpunkt $x^{(1)}$ wird $\lambda_1 \cdot \vec{e_1}$ (horizontal) solange variiert, bis y nicht weiter abnimmt: x_2 (1. Subminimum) → z.B. nach einer Methode in Abschn. 2.2 (Opt. II)

2. Variation von $\lambda_2 \cdot \vec{e_2}$ (vertikal) solange, bis y das 2. Subminimum erreicht: $x^{(2)}$ ist am Ende des 1. Zyklus der "beste" Wert.

1 Zyklus bedeutet: 1 Variation in horizontaler und 1 Variation in vertikaler Richtung

Rekursionsformel bei sukzessiven Variation der p Variablen ist:

$$\vec{x}^{(i+1)} = \vec{x}^{(i)} + \underbrace{\sum_{j=1}^{p} \lambda_j^* \vec{e}_j}_{\text{in jedem Zyklus } i \text{ werden alle p Variablen variiert}}$$

≙ Geradengl., d.h. lineare Extremum-Suche

i: Laufzahl der Zyklen

j: Laufzahl der Dimension der Zielfunktion → j=1: horizontale Richtung; j=2: vertikale Richtung

λ_j^*: Abstand in dem die Zielfunktion ein lokales Extremum erreicht

e_j: Einheitsvektor entlang den Koordinatenachsen

x: Prozeßvariable

p: Anzahl der Variablen

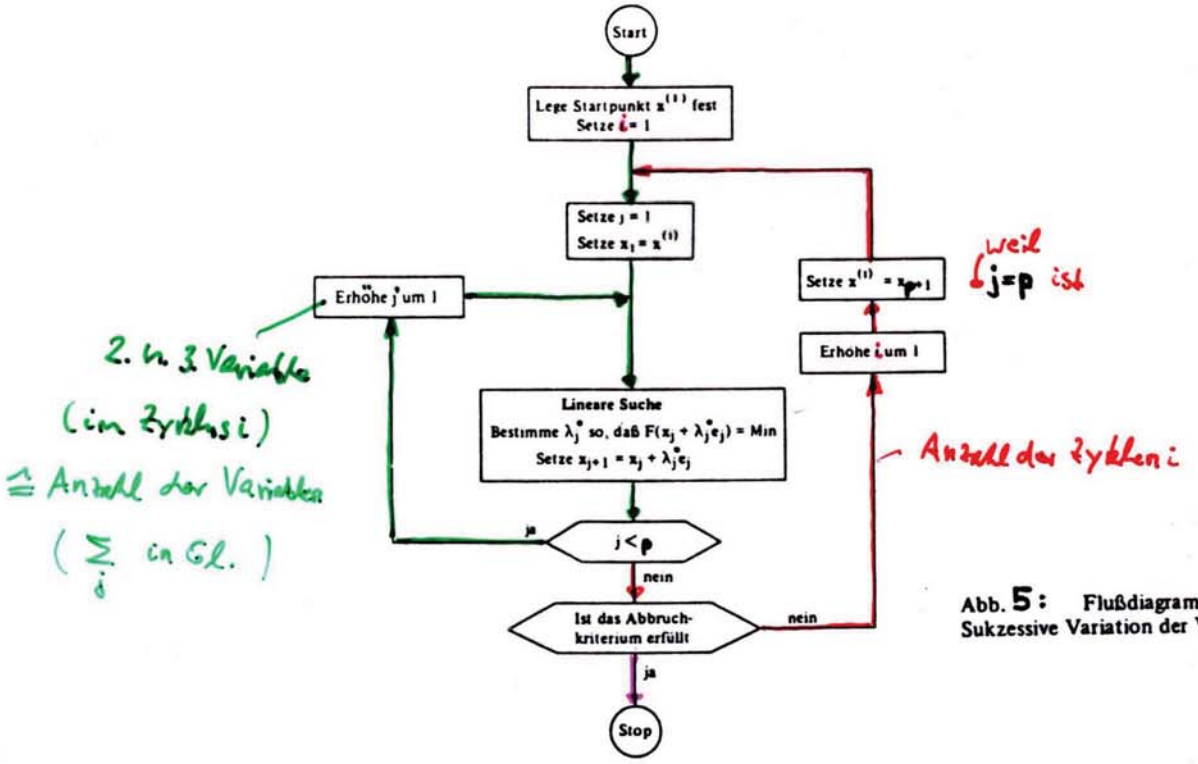


Abb. 5: Flußdiagramm für die (rechnerische) Sukzessive Variation der Variablen

zu 1.3: Box-Wilson-Methode:

Bei dieser Methode ist die Suchrichtung des Optimums i.a. nicht festgelegt parallel zu den Variablenachsen. Allerdings ist dann nicht nur die Kenntnis der Zielfunktion

$$y(x) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix}$$

erforderlich, sondern es müssen zusätzlich die partiellen 1. Ableitungen bekannt sein:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_1} \\ \frac{\partial y}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial y}{\partial x_p} \end{pmatrix}}_{\text{Vektor}} \equiv \overrightarrow{\text{grad } y}$$

zu 1.3.1: Methode des steilsten Anstiegs

relativ große Abweichung vom tatsächlichen Anstieg. Der neue Ausgangspkt $\vec{x}^{(i+1)}$ in dem ein lokales Extremum vorliegt, gehorcht der Beziehung:

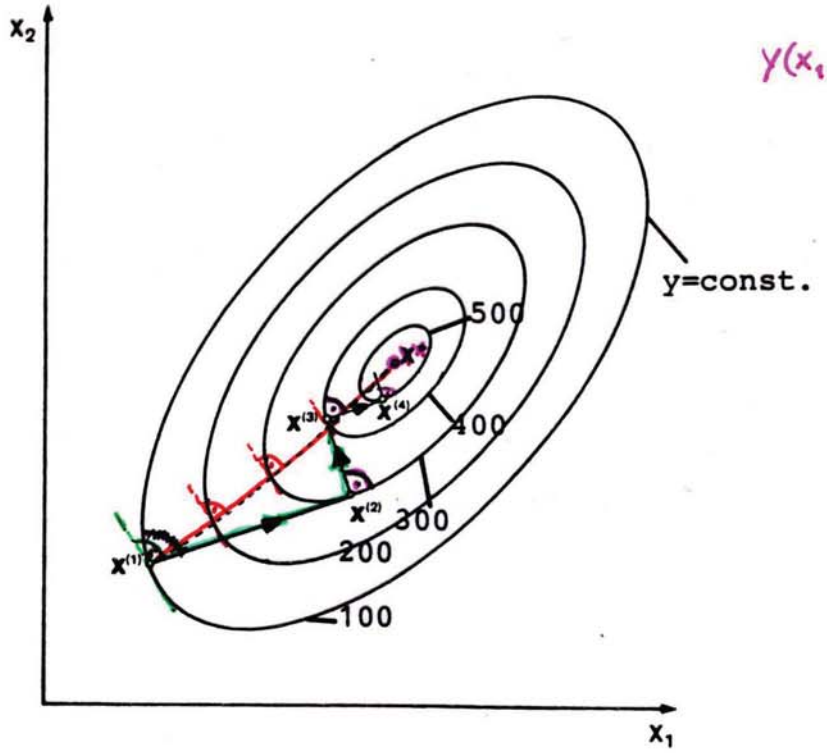
$$\vec{x}^{(i+1)} = \vec{x}^{(i)} \pm \lambda_i^* \, \overrightarrow{\text{grad } y(x^{(i)})}$$

(+): für Maximum-Suche

(–): für Minimum-Suche

λ_i^* solange variieren, bis 1. Submaximum (z.B. bei $x^{(2)}$) erreicht ist

↳ 300



$y(x_1, x_2 \ldots x_i)$: wird angenähert durch ein Regressionspolynom 1. Ordnung (Ebenengl.), dessen Koeff. durch faktorielle Versuchspläne ermittelt werden

x^* Maximum

– – – – – tatsächlich steilster Anstieg

(orthogonale Trajektorie)

Abb.6: Methode des steilsten Anstiegs, d.h. in einer Richtung senkrecht zu den Niveaulinien bis zu einem lokalen Extremum

zu 1.3.2: Gradienten-Methode

Kommt dem tatsächlich steilsten Anstieg näher als die vorige Methode. Man folgt dem berechneten Gradienten nicht bis zu einem lokalen Subextremum, sondern folgt der Richtung des Gradienten nur um die Schrittweite a. Der Vektor der Anstiegsrichtung wird normiert, so dass für die Rekursionsformel gilt:

Faktorielle Versuchspläne

↳ Bestimmung der Koeffizienten $b_0, b_1, b_2, b_3, \ldots$

Vorteile: am gebräuchlichsten, vielfach ausbaubar, zentral, normiert, orthogonal, häufig rotationssym., relativ einfach auszuführen, leicht übersichtbar, ohne großen Aufwand auswertbar.

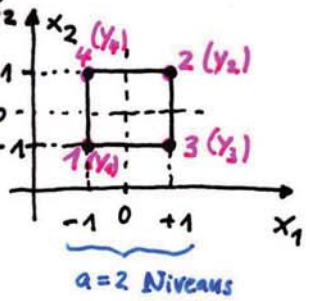
Die Niveaus a der Variablen p sind so zu wählen, dass der Variablenbereich gleichabständig in Form eines Gitters überstrichen wird.

- Lineare Regressionsmodelle (Regressionen 1. Grades) — -polynome — $y(x_1, x_2, x_3)$: linear — a^p

Meist $a=2$ für jede der p Variablen : 2^p-Faktor-Pläne (2^p-Factorial Design) mit $n = 2^p$ Versuchen

$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$ — Zielfunktion

$p=2$: $n = 2^2$ — $a=2$

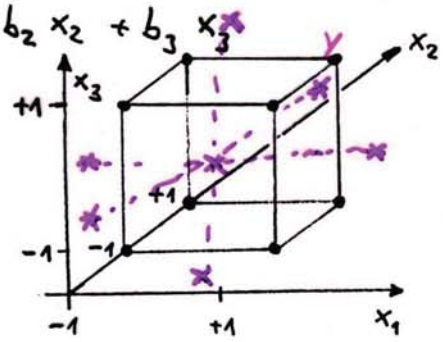


4 Eckpunkte eines Quadrats

2^2- Factorial Design

$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3$

$p=3$: $n = 2^3$



8 Eckpunkte eines Würfels

2^3 - Factorial Design

- Nichtlineare Regressionsmodelle (-polynome)

(Regressionen 2. Grades) : z.B. $y = b_0 + b_1 x_1^2 + b_2 x_2^2 + b_3 x_3$

Zweckmäßig ist hier ein zusammengesetzter Zentral-Versuchsplan (central composite design)

Erweiterung eines vollständigen 2^p-Designs um $(2p+1)$ zusätzliche Versuche

$p=3$: $n = 2^3 + (2 \cdot 3 + 1) = 15$; allgemein: $n = 2^p + (2p+1)$

- Maßzahlen für Effekte u. Wechselwirkungen : → Abschn. 1.4

$$\vec{x}^{(i+1)} = \vec{x}^{(i)} \pm a \frac{\overrightarrow{\text{grad } y\,(x^{(i)})}}{\left|\overrightarrow{\text{grad } y\,(x^{(i)})}\right|}$$

Einheitsvektor

$\frac{\vec{x}}{|\vec{x}|} = \vec{x}_0$

(+): für Maximum-Suche

(–): für Minimum-Suche

a: Schrittweite, die in der Nähe des Extremums häufig verkürzt wird, um Sprüngen um das Optimum zu vermeiden

1.3.3: Newton-Raphson-Methode

Suchrichtung nach einer nach erfolgsversprechenderen Richtung als bei Gradientenmethode: es ist die Krümmung (2. partielle Ableitungen) der Zielfunktion bekannt sein.

zu 1.4: Evolutionary Operation (EVOP) – Evolutionsmethode –

Hierbei handelt es sich um eine experimentelle Optimierungsmethode von Großanlagen, die während des Betriebs optimiert werden sollen.

zu 1.4.1:

Prinzip der EVOP-Methode:

um einen ausgewählten Betriebspunkt **0** (Zentrum, Nullpunkt) werden p=2 oder maximal p=3 Prozeßvariable (Faktoren) nach einem vorgegebenen Versuchsplan (faktorieller Versuchsplan oder Factorial Design) variiert:

n: Anzahl der Versuche

$$\boxed{n = 2^p + 1} \quad \text{mit} \quad 2 \leq p \leq 3$$

Vergleichsversuch

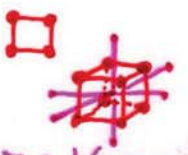
Basis 2: Anzahl der Niveaus der Faktors (z.B. hier 2)

Jede EVOP-Phase wird mehrfach (in mehreren Runden oder Zyklen) durchlaufen. → Solange die Prozessvariablen und Niveaus unverändert bleiben

→ der Einfluß von p Faktoren auf ein Versuchsergebnis kann bestimmt werden, wenn der Versuchsplan 2^p+1 ausgeführt wird, d.h. wenn $n = 2^p + 1$ Versuche durchgeführt werden.

p=2 : $n = 2^2 = 4$ (4 Eckpunkte eines Quadrats); 2^2-Factorial Design

p=3 : $n = 2^3 = 8$ (8 Eckpunkte eines Würfels); 2^3-Factorial Design



Composite Design: Erweiterung eines vollständigen 2^p-Designs um (2p+1) zusätzl. Versuche

→ p=3: 7 zusätzl. Vers.

y [%] : Zielfunktion ist z.B. Ausbeute A

p = 2 ⟹ ϑ, t $A = f(t, \vartheta)$

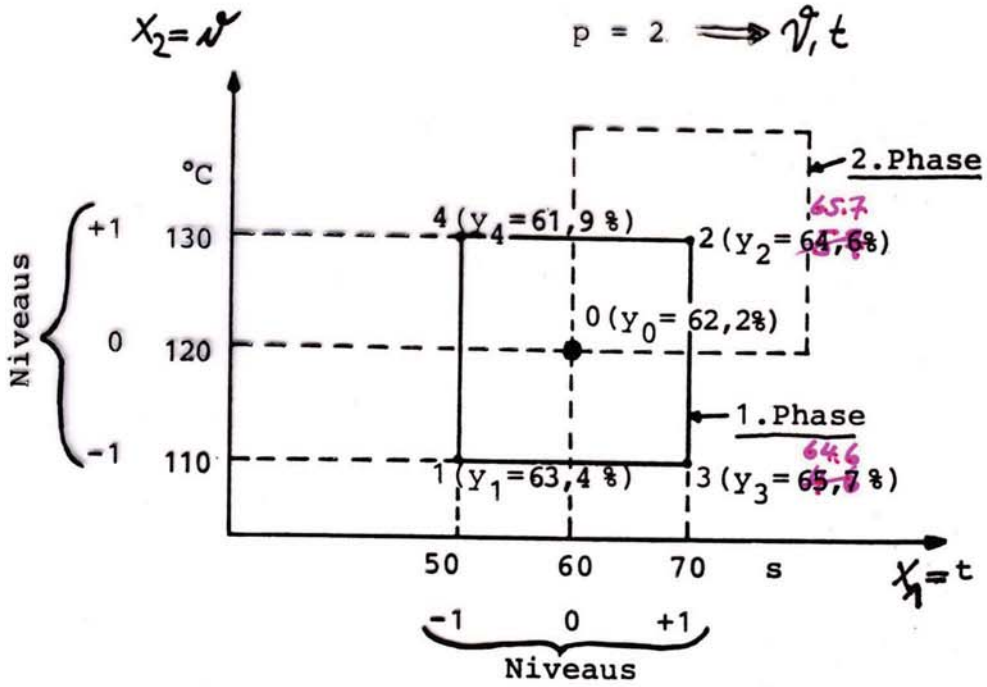


Abb.7 : Zur EVOP-Methode ; $n = 2^p + n = 2^2 + n = 5$ Versuche pro Runde
(2^2-Design)

zu 1.4.2:

Unter Effekten versteht man die Wirkung von Prozeßvariablen auf die Zielfunktion, d.h. Änderung der Zielgröße, wenn Prozess Variable (Faktoren) von einem mittleren auf ein höheres Niveau variiert werden.
Der Effekt der Prozeßvariablen x_1 (Abb.7) wird aus den arithmetischen Mittelwerten ($\bar{y}_i$-Werten) aller Versuchsergebnisse innerhalb einer Phase nach z_1-Runden berechnet nach:

$$x_1 = \frac{(+1)\bar{y}_2 + (+1)\bar{y}_3 + (-1)\bar{y}_4 + (-1)\bar{y}_1}{\sqrt{1^2 + 1^2 + (-1)^2 + (-1)^2}} = \frac{1}{2}\,(\underbrace{\bar{y}_2 + \bar{y}_3}_{\text{oberes Niveau von } x_1} - \underbrace{\bar{y}_4 - \bar{y}_1}_{\text{unteres Niveau von } x_1}) \qquad (10a)$$

Effekt von x_1 auf y

$$\text{mit} \quad \bar{y}_i = \frac{y_{i,1} + y_{i,2} + \ldots + y_{i,z_1}}{z_1} \qquad (10b)$$

: gemittelt über die Runden z_1

Entsprechend gilt für den Effekt der Variablen x_2:

$$x_2 = \frac{1}{2}\,(\bar{y}_4 + \bar{y}_2 - \bar{y}_3 - \bar{y}_1) \qquad (10c)$$

sowie für die Wechselwirkung zwischen den Effekten der Variablen x_1, x_2 :

$$x_1 x_2 = \frac{1}{2}\,(\bar{y}_2 + \bar{y}_1 - \bar{y}_3 - \bar{y}_4) \qquad (11)$$

→ Beeinflussung der Zielgröße durch das Zusammenwirken mehrerer Prozess Variablen

zu 1.4.2.1: Change in mean effect (Änderung M des Mittelwertes)

Innerhalb jeder Runde wird i.a. ein Vergleichsversuch ausgeführt, der wie in Abb. 8 gezeigt, angeordnet sein kann.

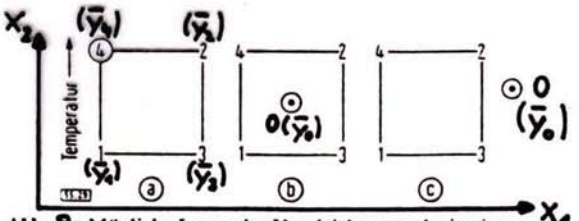


Abb. 8: Mögliche Lagen der Vergleichsversuche in einem 2^2-Design
Die Vergleichsversuche sind mit einem Kreis umrandet.

Die Änderung M des Mittelwertes der Zielfunktion berechnet sich aus der Differenz zwischen dem Phasenmittel (Mittelwert aller Versuche einer Phase) und dem Mittelwert aller Vergleichsversuche derselben Phase. Für die Anordnung a (Abb. 8) ist:

$$M = \underbrace{\frac{1}{4}\,(\bar{y}_1+\bar{y}_2+\bar{y}_3+\bar{y}_4)}_{\text{Phasenmittel}} - \underbrace{\bar{y}_4}_{\text{Vergleichs-Versuch}} = \frac{1}{4}\,(\bar{y}_1+\bar{y}_2+\bar{y}_3-3\bar{y}_4) \qquad (12a)$$

und für die Anordnungen b und c (Abb. 8) ist:

$$M = \underbrace{\frac{1}{5}\,(\bar{y}_1+\bar{y}_2+\bar{y}_3+\bar{y}_4+\bar{y}_0)}_{\text{Phasenmittel}} - \underbrace{\bar{y}_0}_{\text{Vergl.-Versuch}} = \frac{1}{5}\,(\bar{y}_1+\bar{y}_2+\bar{y}_3+\bar{y}_4-4\bar{y}_0) \qquad (12b)$$

$M > 0$: Minimum-Suche

$M < 0$: Maximum-Suche

Maß für die Entfernung vom Optimum der Zielfunktion; Maß für Krümmung der Zielfunktionsfläche

je größer $|M|$ umso näher liegt das Extremum. M ist auch ein Maß für die Kosten bzw. für den Gewinn, bedingt durch die EVOP-Versuche.

- M ist allg. ein Maß dafür, ob die Versuche der laufenden Ebene im Mittel bessere od. schlechtere Ergebnisse liefern als die im bisher bekannten Optimum.

zu 1.4.2.2: Standardabweichung der Effekte

- jeder Versuch muss mehrfach durchgeführt werden

Ein Effekt ist nur dann signifikant, wenn er größer ist als seine doppelte Standardabweichung (2σ), die einer Konfidenzzahl von 0,95 entspricht. Es gelten folgende Beziehungen:

Fehlerbreite

$$2\sigma_{\text{Effekt}} = \pm 2\, s/\sqrt{z_1} \quad \text{für ein } 2^2\text{-Design} \qquad (13a)$$

je größer z_1 umso kleiner σ_{Effekt}

$$2\sigma_{\text{Change in mean effect}} = \pm 1{,}79\, s/\sqrt{z_1} \quad \text{für ein } 2^2\text{-Design} \qquad (13b)$$

Es bedeuten:

z_1 ... Anzahl der Runden ($i = 1, 2, 3, \ldots z_1$) in einer Phase

s_i^2 ... Einzelfehler-Varianzen der i-ten Runde; nach z_1 Runden liegen $z_1 - 1$ Schätzwerte S_i^2 vor.

$$s = \frac{\sqrt{s_2^2 + s_3^2 + \ldots + s_{z_1}^2}}{\sqrt{z_1 - 1}} \qquad \boxed{z_1 \geq 2} \qquad (13c)$$

↳ Versuchsfehler

s^2 ... (Gesamt-)Fehler-Varianz nach z_1 Runden

s ... Versuchsfehler

Pearson: $S_i = R_i \, f_{m, z_1}$

↳ Variationsbreite

zu 1.4.3:

Es wird die Ausbeute (y) einer Reaktion in Abhängigkeit von der Reaktionszeit (x_1) und der Reaktionstemp. (x_2) untersucht, während sich eine Chargen-Anlage in Betrieb befindet.

Abb. 7

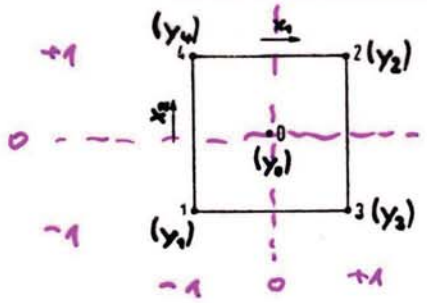
Tab. 1: Faktoren und Faktorniveaus eines 2^2-Designs mit Vergleichsversuch im Zentrum des Designs

	Faktoren	Faktorniveaus −1	0	+1
x_1	Reaktionszeit t	50	60	70
x_2	Reaktionstemperatur ϑ	110	120	130

Tab. 2: Ausbeuten (y) einer in einem diskontinuierlichen Reaktor ablaufenden Reaktion in vier EVOP-Runden

	Versuch	y_0 0	y_1 1	y_2 2	y_3 3	y_4 4
$z_1 = 1$	Runde 1	63,7%	62,8%	63,2%	67,2%	60,5%
$= 2$	Runde 2	62,1%	65,8%	65,5%	67,6%	61,3%
$= 3$	Runde 3	59,6%	62,1%	62,0%	65,3%	64,1%
$= 4$	Runde 4	63,5%	62,8%	67,9%	62,6%	61,7%

Tab. 3: Rechenblatt für ein 2^2-EVOP-Programm, Berechnungen für Anlagenfahrer nach Runde 1



m ≥ n

m: Zahl der Versuchskombinationen (= bei einem Design)

Zahl der Versuchspunkte ≠

Zahl der Gesamtversuche

$$m = 2^p + 1 \Rightarrow m = 2^2 + 1 = 5 \qquad (14)$$

f_{m, z_1} : Faktor zur Berechnung der S_i

2^2-Factorial-Design mit Vergleichsversuch — Projekt ...

Runde $z_1 = 1$ — Phase 6

Zielfunktion: Ausbeute [%] — Datum ...

Berechnung der Mittelwerte						Berechnung des Versuchsfehlers	
Prozeßbedingungen	0 (Versuch)	1	2	3	4	Alter Schätzwert für σ	= 1,8
1. Alte Ergebnissumme						Alte Summe der s_i	=
2. Alter Mittelwert						Alter Mittelwert s	=
3. Neue Ergebnisse (aus Tab. 2 ($z_1 = 1$))	63,7	62,8	63,2	67,2	60,5	s_{neu} = Variationsbreite (R_i) × f_{5, z_1} =	
4. Differenz Zeile 2 — Zeile 3						Variationsbreite	=
5. Neue Ergebnissumme	63,7	62,8	63,2	67,2	60,5	Neue Summe der s_i	=
6. Neuer Mittelwert $\bar{y}_i$ (10b)	63,7	62,8	63,2	67,2	60,5	Versuchsfehler S = Zeile 5/$(z_1 - 1)$ =	

Berechnung der Effekte (↳ aus Daten von Zeile 6)

(12b)	Phasenmittel	$= 1/5(\bar{y}_0 + \bar{y}_1 + \bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4)$	= 63,5
(10a)	(x_1) Zeit-Effekt	$= 1/2(\bar{y}_2 + \bar{y}_3 - \bar{y}_1 - \bar{y}_4)$	= 3,6
(10c)	(x_2) Temperatur-Effekt	$= 1/2(\bar{y}_2 + \bar{y}_4 - \bar{y}_1 - \bar{y}_3)$	= −3,2
(11)	(x_1x_2) Zeit × Temp.-Effekt	$= 1/2(\bar{y}_1 + \bar{y}_2 - \bar{y}_3 - \bar{y}_4)$	= −0,8
(12b)	Change in mean effekt M	= Phasenmittel $- \bar{y}_0$	= −0,2

63,5 63,7

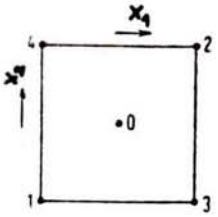
Berechnung der doppelten Standardabweichungen 2σ mit s =

für das neue Mittel s:	$\pm (2/\sqrt{z_1})\, s$	$= \pm 3,6$
für die Effekte:	$\pm (2/\sqrt{z_1})\, s$	$= \pm 3,6$ → (13a)
für M:	$\pm (1,79/\sqrt{z_1})\, s$	$= \pm 3,2$ → (13b)

Faktorentabelle → zu Tab. 3

z_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
f_{5,z_1}		0,30	0,35	0,37	0,38	0,39	0,40	0,40	0,40	0,41
$1/z_1$	1,00	0,50	0,33	0,25	0,20	0,17	0,14	0,12	0,11	0,10
$1/(z_1-1)$		1,00	0,50	0,33	0,25	0,20	0,17	0,14	0,12	0,11
$2/\sqrt{z_1}$	2,00	1,41	1,15	1,00	0,89	0,82	0,76	0,71	0,67	0,63
$1,79/\sqrt{z_1}$	1,79	1,26	1,03	0,89	0,80	0,73	0,68	0,63	0,60	0,57

Tab. 4: Rechenblatt für ein 2^2-EVOP-Programm, Berechnungen nach Runde 2



2^2-Factorial-Design mit Vergleichsversuch

Runde $z_1 = 2$

Zielfunktion: Ausbeute [%]

Projekt ...

Phase 6

Datum ...

Berechnung der Mittelwerte						Berechnung des Versuchsfehlers	
Prozeßbedingungen	0	1	2	3	4	Alter Schätzwert für σ	= 1,8
1. Alte Ergebnissumme	63,7	62,8	63,2	67,2	60,5	Alte Summe der s_i	=
2. Alter Mittelwert +	63,7	62,8	63,2	67,2	60,5	Alter Mittelwert s	=
3. Neue Ergebnisse	62,1	65,8	65,5	67,6	61,3	$s_{2,neu}$ = (Variationsbreite) × f_{5,z_1}	= 1,38
4. Differenz Zeile 2 − Zeile 3	1,6	−3,0	−2,3	−0,4	−0,8	Variationsbreite	= 4,6
5. Neue Ergebnissumme	125,8	128,6	128,7	134,8	121,8	Neue Summe der s_i	= 1,38
6. Neuer Mittelwert $\bar{y}_i$ = Zeile 5 / z_1	62,9	64,3	64,4	67,4	60,9	Versuchsfehler s = Zeile 5 / (z_1 − 1)	= 1,38

Zeilen 5,6 von Tab. 3 → aus Tab. 2: ($z_1 = 2$)

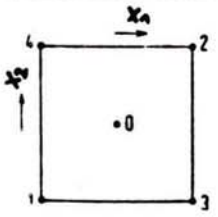
(4.6 A 0.3)

(106) ← 1.38 / 2−1

Berechnung der Effekte			Berechnung der doppelten Standardabweichungen 2σ mit $s = \sigma = 1,8$	
Phasenmittel	= $1/5(\bar{y}_0 + \bar{y}_1 + \bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4)$	= 64,0	für das neue Mittel s: $\pm(2/\sqrt{z_1})\,s$	= ±2,5
(x_1) Zeit-Effekt	= $1/2(\bar{y}_2 + \bar{y}_3 - \bar{y}_1 - \bar{y}_4)$	= 3,3	für die Effekte: $\pm(2/\sqrt{z_1})\,s$	= ±2,5
(x_2) Temperatur-Effekt	= $1/2(\bar{y}_2 + \bar{y}_4 - \bar{y}_1 - \bar{y}_3)$	= −3,2	für M: $\pm(1,79/\sqrt{z_1})\,s$	= ±2,2
(x_1x_2) Zeit × Temp.-Effekt	= $1/2(\bar{y}_1 + \bar{y}_2 - \bar{y}_3 - \bar{y}_4)$	= 0,2		
Change in mean effekt M	= Phasenmittel − $\bar{y}_0$	= 1,1		

Faktorentabelle wie in Tab. 3 (64.0, 62.9)

Tab. 5: Rechenblatt für ein 2^2-EVOP-Programm, Berechnungen nach Runde 3



2^2-Factorial-Design mit Vergleichsversuch

Runde $z_1 = 3$

Zielfunktion: Ausbeute [%]

Projekt ...

Phase 6

Datum ...

Berechnung der Mittelwerte						Berechnung des Versuchsfehlers	
Prozeßbedingungen	0	1	2	3	4	Alter Schätzwert für σ	= 1,8
1. Alte Ergebnissumme	125,8	128,6	128,7	134,8	121,8	Alte Summe der s_i	= 1,38
2. Alter Mittelwert +	62,9	64,3	64,4	67,4	60,9	Alter Mittelwert s	= 1,38
3. Neue Ergebnisse	59,6	62,1	62,0	65,3	64,1	$s_{2,neu}$ = (Variationsbreite) × f_{5,z_1}	= 2,28
4. Differenz Zeile 2 − Zeile 3	3,3	2,2	2,4	2,1	−3,2	Variationsbreite	= 6,5
5. Neue Ergebnissumme	185,4	190,7	190,7	200,1	185,9	Neue Summe der s_i	= 3,66
6. Neuer Mittelwert $\bar{y}_i$ = Zeile 5 / z_1	61,8	63,6	63,6	66,7	62,0	Versuchsfehler s = Zeile 5 / (z_1 − 1)	= 1,83

Zeilen 5,6 von Tab. 4 → aus Tab. 2: ($z_1 = 3$)

(4.5 A 0.5)

(2.28) ← 1.38

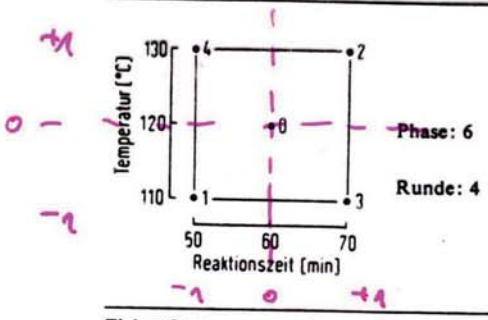
Berechnung der Effekte			Berechnung der doppelten Standardabweichungen 2σ mit $s = 1,83$	
Phasenmittel	= $1/5(\bar{y}_0 + \bar{y}_1 + \bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4)$	= 63,5	für das neue Mittel s: $\pm(2/\sqrt{z_1})\,s$	= ±2,1
(x_1) Zeit-Effekt	= $1/2(\bar{y}_2 + \bar{y}_3 - \bar{y}_1 - \bar{y}_4)$	= 2,4	für die Effekte: $\pm(2/\sqrt{z_1})\,s$	= ±2,1
(x_2) Temperatur-Effekt	= $1/2(\bar{y}_2 + \bar{y}_4 - \bar{y}_1 - \bar{y}_3)$	= −2,4	für M: $\pm(1,79/\sqrt{z_1})\,s$	= ±1,9
(x_1x_2) Zeit × Temp.-Effekt	= $1/2(\bar{y}_1 + \bar{y}_2 - \bar{y}_3 - \bar{y}_4)$	= −0,8		
Change in mean effekt M	= Phasenmittel − $\bar{y}_0$	= 1,7		

Faktorentabelle wie in Tab. 3 (62.5, 61.8)

$\frac{3.66}{3-1} = 1.83$

Nach jeder Runde z_1 wird eine Informationstafel angefertigt, die in Tabelle 6 nach Abschluß der Runde 4 (Phase 6) gezeigt ist:

Tab. 6. Informationstafel nach der vierten Runde $z_1 = 4$



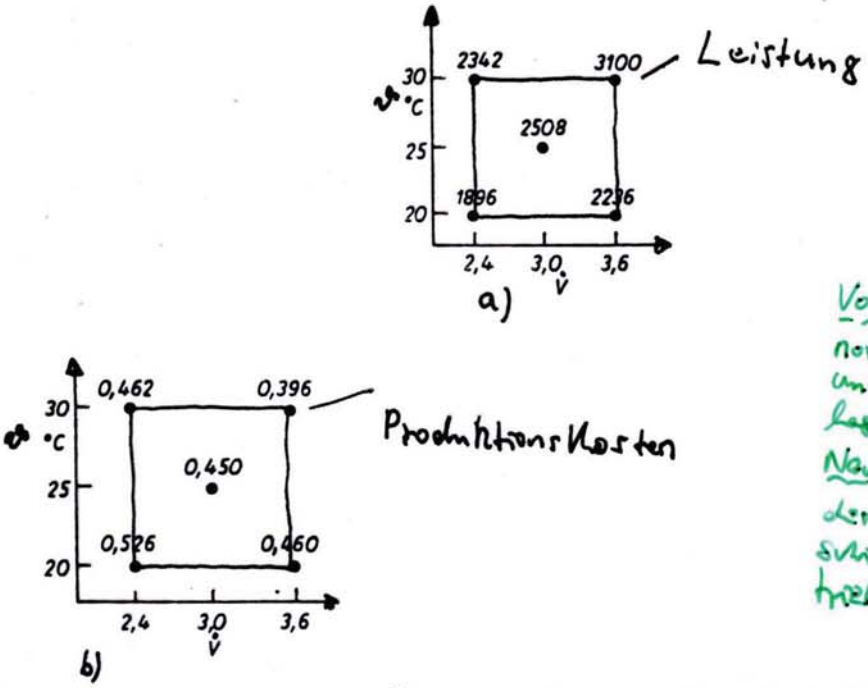
Zielgrößen:	→ Ausbeute, %
einzuhaltende Bedingungen:	Ausbeutemaximum
Mittelwerte der Versuchsergebnisse:	4 61,9 — 64,6 2; 62,2; 1 63,4 — 65,7 3 → t
doppelte Standardabweichung der Mittelwerte	± 2,3
Effekte und doppelte Standardabweichung:	Effekte
Phasenmittel:	63,6
(X1) Zeit:	2,3 ± 2,3
(X2) Temperatur:	−1,3 ± 2,3
$t \times T$:	0,2 ± 2,3
Change in mean:	1,4 ± 2,0
Versuchsfehler s:	2,3
Erfahrungswert des Versuchsfehlers:	1,8

$2\sigma_{Effekte}$

allein der Effekt (x_1 = 2.5) der Reaktionszeit ist größer als $2\sigma_{Eff}$ (±2.3), d.h. signifikant.

EVOP muß auch für andere Zielgrößen durchgeführt werden:

andere Zielgrößen: z.B. Leistung, Produktionskosten



zu 1.4.4

Vorteile: EVOP lässt sich von normalen Betriebspersonal überwachen und führt zur Leistungssteigerung der Anlage.

Nachteile: großer Zeitaufwand. Innerhalb der Untersuchungszeit darf keine Veränderung des Optimums zu anderen Betriebsbedingungen auftreten.

Abb. 9: Graphische Darstellung der Evolutionsmethode
(In den Abbildungen sind die Versuchsergebnisse der ersten Phase dargestellt. Auf der Abszisse wurde der Durchsatz $\dot{V}$, auf der Ordinate die Temperatur ϑ abgetragen.)

a) Leistung
b) Produktionskosten

EVOP wird solange fortgesetzt bis die Kosten für Versuche größer sind als der für die nächsten Jahre zu erwartende Gewinn.

zu 1.5:

Es handelt sich hier um eine verbesserte Hill-Climbing-Suchmethode, die von Spendley(1962) entwickelt wurde. Sie eignet sich sowohl für die experimentelle Ermittlung des Optimums als auch für die rechnerische Ermittlung des Optimums einer mehrdimensionalen Zielfunktion.

zu 1.5.1:

Regulärer Startsimplex besteht aus (p+1)-Ecken ⇒:

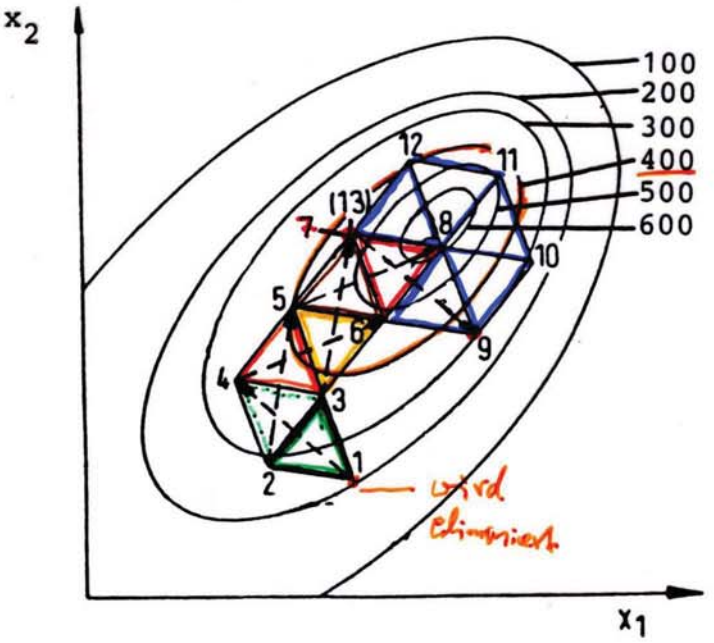
p = 2 : gleichseitiges Dreieck

p = 3 : Tetraeder

Die Koordinaten der Eckpunkte des Startsimplex werden abhängig von p- berechnet, d.h. sind also festgelegt.

zu 1.5.2:

Grundregel: der Eckpunkt eines Simplexes für den die Zielfunktion y den ungünstigsten Wert hat wird eliminiert. Eliminiert heißt: er wird an den restlichen p Ecken gespiegelt, so daß sich ein neuer Suchpunkt ergibt, der mit den restlichen Ecken einen neuen Simplex bildet. (→ Abb. 10).



Maximum-Suche

p=2

Abb. 10: Simplex-Methode für ein zweidimensionales Optimierproblem

bei Eckpunkt 7 und 9: Optimumssuche oszilliert, da Spiegelpunkte die ungünstigen Versuchspunkte sind.
(400, 300)

Abhilfe : der Eckpunkt mit dem zweitungünstigsten Wert (→ Eckpunkt 6) der Zielfunktion wird eliminiert.

Wenn Eckpunkt nahe Extremum um **Eckpunkt 8** rotieren mehr als m Simplexe. (Eliminieren von 6 führt zu 12; 9 → 11; 6 → 10) **Abhilfe:** nach m Spiegelungen wird die Optimumssuche mit nur noch halb so großen Simplexen fortgeführt.

kritische Anzahl der Spiegelungen

$$m = 1{,}65\ p + 0{,}05\ p^2$$

für p=2: m=3,5, d.h. nach **m=4 Spiegelungen** (Stufen) sollten die Simplexe nur halb so groß sein wie der Startsimplex.

zu 1.5.3:

Berechnen eines Spiegelpunktes (Abb. 11)

Der Vektor $\vec{R}'_j = \begin{pmatrix} x_{1,j} \\ x_{2,j} \\ \vdots \\ x_{p,j} \end{pmatrix}$ eines Spiegelpunktes berechnet sich nach (Abb. 11):

$$\vec{R}'_j = \frac{2}{p}\,(\vec{R}_1 + \vec{R}_2 + \dots + \vec{R}_{j-1} + \vec{R}_{j+1} + \dots\dots \vec{R}_{p+1}) - \vec{R}_j$$

$\vec{R}_j$: Vektor, der zu der ungünstigsten Ausbeute zeigt

j : Eckpunkte des Simplex

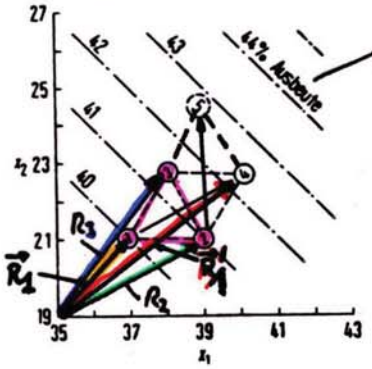
speziell gilt für den Spiegelpunkt 4 (j=1) bei p=2:

$$\boxed{\vec{R}'_1} = \frac{2}{2}\,(\boxed{\vec{R}_2} + \boxed{\vec{R}_3}) - \boxed{\vec{R}_1} \qquad \text{(a)}$$

Die Berechnung von (a) erfolgt in den Zeilen 4 bis 8 der Tab. 7 (→ Abb. 11)

②, ③, ④
↑
④, ②, ③

Abb. 11: Zur Berechnung eines neuen Simplexes aus einem Startsimplex.



Tab. 7: Auswertung eines Simplexdesigns mit zwei Variablen

Zeile	Versuch (Eckpunkte)	x_1	x_2	y		
1	1	37	21,0	40,0	niedrigstes Ergebnis	Startsimplex
2	2	39	21,0	41,0		
3	3	38	22,8	41,4		
4		77	43,8	82,4	Summe der Koordinaten der nicht eliminierten Versuche ($R_2 + R_3$)	Berechnungsgang des Vektors R'_1 nach Gl. (a)
5		154	87,6	164,8	(Zeile 4) x 2	
6		77	43,8	82,4	(Zeile 5)/p mit p = 2	
7		37	21,0	40,0	Koordinaten des eliminierten Versuchs (R_1)	
8	4	40	22,8	42,4	Koordinaten des neuen Versuchs = Zeile 6 − Zeile 7, d.h. R'_1	

Beweis von Gl. (a):

$\vec{R}_1 + \vec{13} = \vec{R}_3$

$\vec{R}_2 + \vec{24} = \vec{R}'_1$

→ Gl. (a) mit $\vec{13} \equiv \vec{24}$

1.5.4

Vorteile:
- einfacher als EVOP
- Simplex der Ordnung (p+2) keine Lücken-Stellen (weiterer Eckpunkt wird hinzugefügt) aus Simplex der Ordnung (p+1): ⇒ konstant gehaltene Einflussgröße kann zu beliebigem Zeitpunkt als Variable in Versuchsplan aufgenommen werden.

Nachteil: Simplex der in schmalem Tal konstruiert ist, kann nicht mehr expandieren, d.h. Simplex schreitet nur noch langsam voran.

3. Literaturhinweise

[1] Bandermann F (1972) *Statistische Methoden beim Planen und Auswerten von Versuchen*. In: Ullmanns Encyklopädie der technischen Chemie, Bd. 1, S. 293–360

[2] Bandermann F (1972) *Optimierung chemischer Reaktionen*. In: Ullmanns Encyklopädie der technischen Chemie, Bd. 1, S. 361–418

[3] Scheffler E (1997) *Statistische Versuchsplanung und -auswertung*. Wiley-VCH

[4] Hoffmann U, Hofmann H (1971) *Einführung in die Optimierung*. Verlag Chemie, Weinheim

[5] Erfurth H, Bieß G (1975) *Optimierungsmethoden*. VEB, Leipzig

[6] Retzlaff G, Rust G, Waibel J (1978) *Statistische Versuchsplanung*. Verlag Chemie, Weinheim

[7] Stahel WA (2000) *Statistische Datenanalyse*. Vieweg, Braunschweig