ANÁLISIS DE REGRESIÓN NO LINEAL

2- EL MÉTODO SIMPLEX

Javier Armijo C.

Facultad de Química e Ingeniería Química, Universidad Nacional Mayor de San Marcos

RESUMEN

Se presenta el algoritmo del método Simplex y dos ejemplos de cálculo.

Palabras claves: Simplex, regresión, no lineal, modelos, parámetros.

ABSTRACT

This reports presents the algorithm of Simplex method and two examples of computations.

Keywords: Simplex, regression, nonlinear, models, parameters.

INTRODUCCIÓN

La determinación de los parámetros óptimos de un modelo matemático por ajuste con datos experimentales conduce al problema de minimizar la función:

$$Minimizar \quad \phi = \sum_{i=1}^{n} w_i \left[Y_i - \eta_i (x_k, \beta_j) \right]^2 \tag{1}$$

Donde Y_i son los datos experimentales, w_i representa la calidad o peso de los datos experimentales (varia entre 0 y 1) y η representa al modelo matemático no lineal:

$$\eta = \eta(x_1, x_2, ...x_q, \beta_1, \beta_2, ...\beta_m)$$

En esta última ecuación x representa a la variable independiente y β son los parámetros (m es el número total de parámetros).

En la parte 1[1] de esta serie, se describieron las técnicas más comunes de optimización, así como los procedimientos iterativos de cada una de ellas.

En esta segunda parte presentamos el diagrama de flujo del método Simplex implementado en un programa de computadora, así como dos ejemplos de cálculo.

EL MÉTODO SIMPLEX[2,3,4]

Un conjunto de (m+1) puntos equidistantes en el espacio de m-dimensiones forma un simplex regular. Un simplex general es un simplex donde los vértices no son equidistantes. El método simplex compara los valores de la función objetivo en los (m +1) vértices de un simplex general y mueve este hacia el punto óptimo. El movimiento se consigue a través de las operaciones de reflexión, contracción y expansión. La figura N.º 1 muestra un simplex regular de 4 vértices para el caso de 3 parámetros.

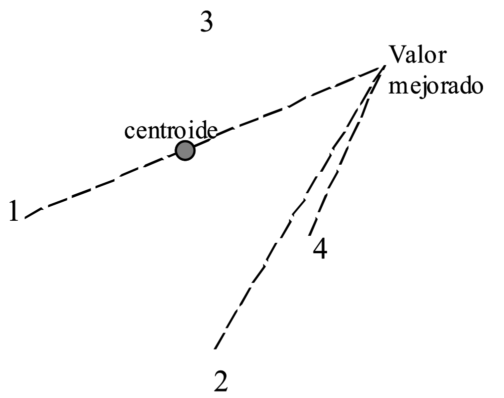

Figura N.°1. Un simplex regular para tres parámetros. El punto 1 de menor valor en la función objetivo se proyecta a través del centroide

Las ecuaciones utilizadas en el método simplex y el procedimiento iterativo se presentan en la primera parte(1) de esta serie.

ALGORITMO DEL MÉTODO SIMPLEX

La figura N° 2 muestra el diagrama de flujo del algoritmo implementado en un programa de computadora, a través de una interfaz amigable como Visual Basic. El usuario ingresa información respecto al modelo y los datos experimentales. El programa está estructurado en diferentes subrutinas de fácil comprensión. En una subrutina denominada *Modelo matemático* (que no se muestra en el diagrama de flujo), el usuario escribe la ecuación del modelo cuyos parámetros desea determinar.

El método Simplex no utiliza la derivada del modelo matemático, lo cual facilita las operaciones en el caso de que el modelo sea una función demasiado compleja.

EJEMPLOS DE CÁLCULO

Los parámetros verdaderos son β_1, β_2 y sus estimados se representan por b_1 y b_2.

Ejemplo 1: Modelo de reacción catalítica

Se dispone de datos experimentales de una reacción catalítica de hidrogenación en un reactor tubular. A temperatura constante se desea ajustar los datos al modelo empírico:

$$r = \frac{\beta_1 P}{1 + \beta_2 P}$$

donde *r* es la velocidad inicial de reacción y *P* es la presión total. Los datos experimentales a 164°C se dan en la Tabla N.º 1.

Tabla N.° 1. Datos experimentales para el ejemplo 1.

	Velocidad de reacción mol /h g de catalizador	Presión psia
1	0.068	20
2	0.0858	30
3	0.0939	35
4	0.0999	40
5	0.113	50
6	0.1162	55
7	0.119	60

Los resultados de los cálculos se presentan en la Tabla N° 2. Se realizaron dos secuencias de cálculo. La primera con un máximo de 50 iteraciones y la segunda con un máximo de 100 iteraciones. En ambos casos se inicia con los mismos parámetros $b_1 = 1$ y $b_2 = 1$; y la tolerancia es de 10^{-12}. En la tabla, SDS es la desviación estándar calculada con los valores de la función objetivo de los tres vértices. El SDS se compara con la tolerancia dada por el usuario.

En la primera secuencia el algoritmo finaliza porque se superó el máximo número de iteraciones (50).

En la segunda secuencia (máximo 100 iteraciones), el algoritmo finaliza porque el SDS es menor que la tolerancia permisible dada por el usuario.Los valores de los parámetros óptimos son $b_1 = 5.154 \times 10^{-3}$ y $b_2 = 2.628 \times 10^{-2}$; la función objetivo es = 4.7604×10^{-6}.

Ejemplo 2: Modelo de ecuación de estado

Se desea estimar los parámetros de la ecuación de estado de Berthelot:

Tabla N.° 2. Resultados del ajuste con el método Simplex para el ejemplo 1.

Iteración	SDS	Simplex	Objetivo	Parámetro (1)	Parámetro (2)
1	3.47370E+00	1	9.79103E+00	1.48296E+00	1.12941E+00
		2	5.34804E+00	1.00000E+00	1.00000E+00
		3	2.94409E+00	1.12941E+00	1.48296E+00
50	1.21830E-05	1	1.66863E-03	5.09590E-02	4.66701E-01
		2	1.65958E-03	3.91579E-02	3.44780E-01
		3	1.64451E-03	3.18803E-02	2.71834E-01
1	3.47370E+00	1	9.79103E+00	1.48296E+00	1.12941E+00
		2	5.34804E+00	1.00000E+00	1.00000E+00
		3	2.94409E+00	1.12941E+00	1.48296E+00
90	5.46220E-13	1	4.76045E-06	5.15437E-03	2.62842E-02
		2	4.76045E-06	5.15404E-03	2.62810E-02
		3	4.76045E-06	5.15412E-03	2.62820E-02

$$P = \frac{RT}{V-\beta_2} - \frac{\beta_1}{TV^2}$$

Donde *P* es la presión en átmosferas, *T* es la temperatura en kelvin y *V* es el volumen molar en cm^3/mol. Para el SO_2 los datos experimentales se dan en la Tabla N.º 3.

Tabla N.° 3. Datos experimentales para el ejemplo 2.

	P (atm)	V (cm3/mol)	T (Kelvin)
1	5.651	4339.84	323.15
2	7.338	3256.448	323.15
3	8.118	2897.92	323.15
4	5.767	4668.544	348.15
5	8.237	3174.592	348.15
6	15.71	1493.184	348.15
7	5.699	5130.88	373.15
8	9.676	2922.496	373.15
9	16.345	1618.176	373.15
10	24.401	978.24	373.15
11	5.812	5413.184	398.15
12	11.12	2731.2	398.15
13	19.017	1502.72	398.15
14	27.921	943.04	398.15
15	20.314	1530.432	423.15
16	25.695	1167.424	423.15
17	51.022	466.7968	423.15
18	63.73	298.0928	423.15
19	26.617	1323.84	473.15
20	47.498	678.08	473.15
21	74.19	374.2784	473.15

Los resultados de los cálculos con el programa se presentan en la Tabla N.°4. Como en todos los métodos iterativos, se necesita tener un estimado inicial de los parámetros para iniciar el algoritmo.

En este ejemplo realizamos 4 secuencias de cálculo iniciando con diferentes valores de los parámetros. Fijamos como 500 el máximo de iteraciones y la tolerancia = $1x\ 10^{-18}$.

En la primera secuencia b_1=1, b_2=1 se alcanza el máximo de iteraciones con los valores b_1= -2.1797×10^1, b_2= -2.001×10^2 .

Para la segunda secuencia se inician los cálculos con estos últimos valores (b_1= -2.2×10^1, b_2= -2.0×10^2) y se terminan los cálculos por que el SDS se reduce por debajo de la tolerancia predeterminada realizando 241 iteraciones. Ahora los parámetros son b_1= 2.6995×10^9, b_2= 3.95518×10^1, y la función objetivo(f) = 5.7983.

Para la tercera secuencia iniciamos el proceso con otros valores de parámetros: b_1= 10, b_2=100. La iteración termina porque el SDS es menor que la tolerancia predeterminada realizando 77 iteraciones. Los parámetros son ahora b_1= -2.66205×10^1, b_2= -2.00126×10^2 y la función objetivo(f) = 9.7523. Estos últimos parámetros se ingresan para la última secuencia. Después de 500 iteraciones la función objetivo(f) = 5.7983, b_1= 2.6995 x 10^9 b_2= 3.95518 x 10^1, estos valores son los mismos que se obtuvieron en la secuencia 2.

Los resultados muestran que los parámetros óptimos (f = 5.7983) son b_1= 2.6995 x 10^9 b_2= 3.95518 x 10^1.

CONCLUSIONES

El método Simplex resulta ser una técnica eficiente y versátil que no requiere derivar la función objetivo, por lo que es apropiado para trabajar con funciones demasiadas complejas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Armijo C. Javier; «Análisis de regresión no lineal: 1-técnicas para determinar parámetros.», Rev. Per. Quím. Ing. Quím. Vol 7 N.° 1, 2004, pp. 63-68.

[2] Himmelblau David M.; *Process Analysis by Statistical Methods,* John Wiley & Sons Inc, 1970.

[3] Jacoby S.L., J.S. Kowalik, J.T. Pizzo; *Iterative methods for nonlinear optimization problems,* Prentice Hall Inc, 1972.

[4] Murray W. *Numerical methods for unconstrained optimization*, Academic Press, 1972.

Tabla N.°4. Resultados del ajuste con el método Simplex para el ejemplo 2.

Iteración	SDS	Vértice simplex	Función objetivo	Parámetro (1)	Parámetro (2)
1	1.73230E+01	1	4.53349E+03	1.12941E+00	1.48296E+00
		2	4.50897E+03	1.48296E+00	1.12941E+00
		3	4.50003E+03	1.00000E+00	1.00000E+00
500	9.84560E-14	1	9.75230E+01	-2.17974E+01	-2.00126E+02
		2	9.75230E+01	-2.17974E+01	-2.00126E+02
		3	9.75230E+01	-2.17974E+01	-2.00126E+02
1	8.61650E-03	1	9.75396E+01	-2.18706E+01	-1.99517E+02
		2	9.75259E+01	-2.15170E+01	-1.99871E+02
		3	9.75237E+01	-2.20000E+01	-2.00000E+02
241	0.00000E+00	1	5.79833E+00	2.69950E+09	3.95518E+01
		2	5.79833E+00	2.69950E+09	3.95518E+01
		3	5.79833E+00	2.69950E+09	3.95518E+01
1	7.44500E+01	1	1.97463E+04	1.01294E+01	1.00483E+02
		2	1.96409E+04	1.04830E+01	1.00129E+02
		3	1.96025E+04	1.00000E+01	1.00000E+02
77	0.00000E+00	1	9.75230E+01	-2.66205E+01	-2.00126E+02
		2	9.75230E+01	-2.66205E+01	-2.00126E+02
		3	9.75230E+01	-2.66205E+01	-2.00126E+02
1	8.61650E-03	1	9.75396E+01	-2.58706E+01	-1.99517E+02
		2	9.75259E+01	-2.55170E+01	-1.99871E+02
		3	9.75237E+01	-2.60000E+01	-2.00000E+02
500	1.23070E-14	1	5.79833E+00	2.69950E+09	3.95518E+01
		2	5.79833E+00	2.69950E+09	3.95518E+01
		3	5.79833E+00	2.69950E+09	3.95518E+01

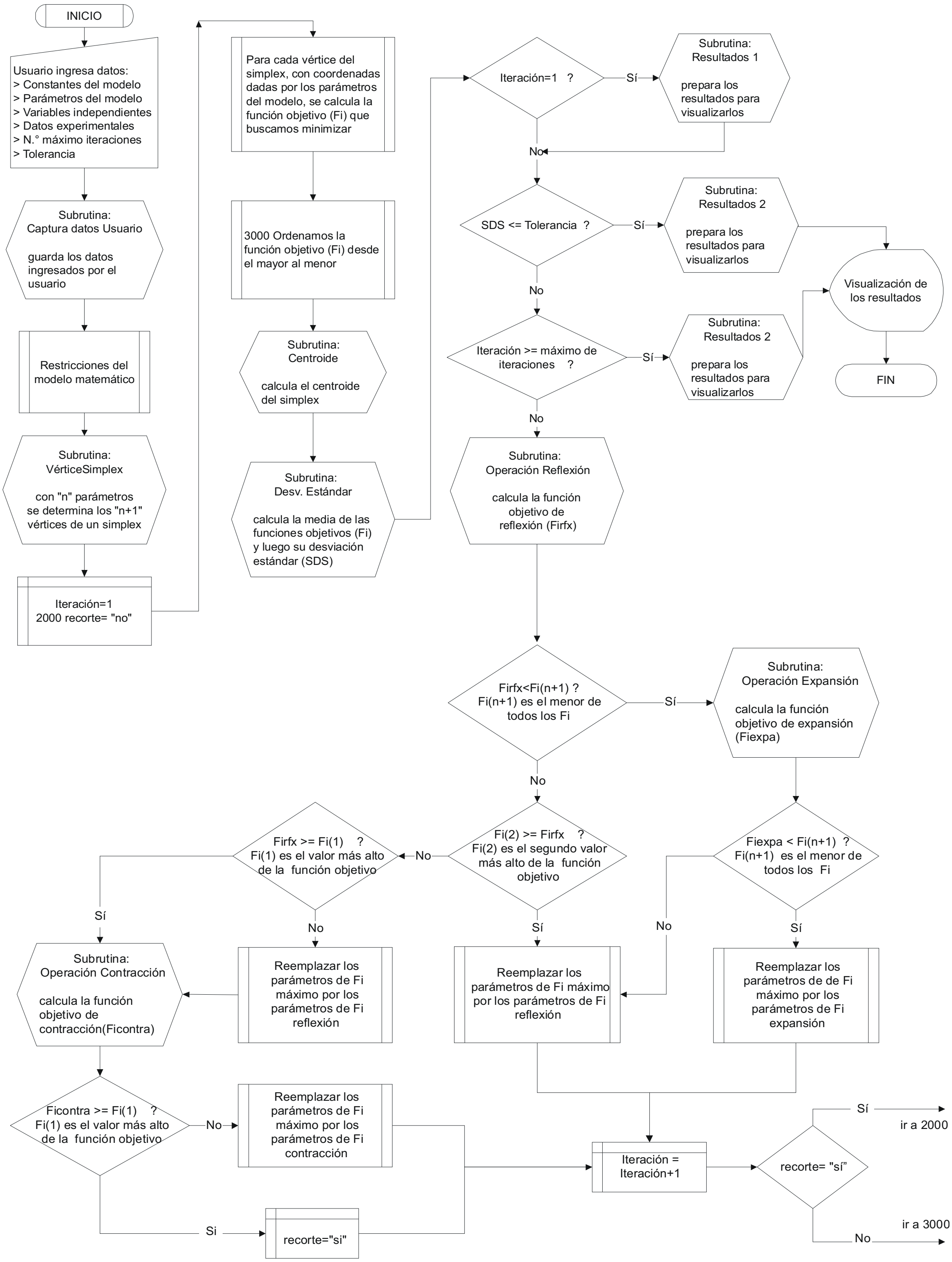

Figura N.° 2. Algoritmo Simplex: Diagrama de flujo para minimizar una función.