УДК 61.13.15:519.7
Ахмадиев Ф.Г. – доктор технических наук, профессор
Гильфанов Р.М. – кандидат технических наук, доцент
E-mail: Akhmadiev@kgasu.ru
Казанский государственный архитектурно-строительный университет
Адрес организации: 420043, Россия, г. Казань, ул. Зеленая, д. 1

Математическое моделирование и оптимизация «состав-свойство» многокомпонентных смесей

Аннотация

Предложен подход для решения задачи подбора оптимального состава многокомпонентных смесей и разработан пакет программ для численной реализации этого подхода. Суть этого подхода заключается в следующем. Путем анализа априорной информации выбирается такой план для проведения экспериментов, чтобы после обработки результатов экспериментов методом наименьших квадратов можно было построить адекватные математические модели, описывающие зависимости свойств и экономических критериев от компонентного состава. С помощью этих математических моделей формулируется задача оптимизации. Далее выполняется исследование особенностей этой задачи, по результатам которого осуществляется выбор наиболее эффективного метода её решения. Применение этого подхода проиллюстрировано в работе на примере решения задачи подбора оптимального состава стержневой смеси.

Ключевые слова: многокомпонентные смеси, стержневые смеси, диаграммы «состав-свойство», задача оптимизации.

Сырьевые материалы (вяжущие, заполнители, наполнители, смолы и химические добавки), используемые при производстве изделий, строительных и других материалов, как правило, представляют собой смеси из различных веществ, порошков, зерен разной крупности. Состав (рецептура) таких смесей задается концентрациями компонентов в виде массовых, объемных или мольных долей (процентов) z_i при этом $0 \leq z_i \leq 1$, $\sum_{i=1}^{n} z_i = 1$.

Системы, свойства которых зависят только от соотношения компонентов $\bar{z} = (z_1, z_2, ..., z_n)$ и не зависят от количества смеси, а также от условий переработки и других факторов, называются системами «состав-свойство» или многокомпонентными смесями.

В строительстве, химической технологии, литейном производстве часто приходится решать задачи подбора состава многокомпонентных смесей так, чтобы определенные свойства этих смесей принимали свои наилучшие возможные значения с учетом экономических требований.

Если известны теоретические зависимости свойств смеси и экономических требований, по которым производится выбор оптимального состава смеси, то формулируется задача оптимизации.

Если же теоретических зависимостей свойств смеси и экономических критериев от компонентного состава нет, то на основе анализа априорной информации о характере этих зависимостей выбирается наиболее подходящий план экспериментов. Обычно в качестве таких планов выбираются симплекс-решетчатые композиционные и полукомпозиционные планы [1]. Поскольку, как правило, у исследователя нет исчерпывающей информации о характере интересующих его зависимостей, он из практических соображений должен начинать с применения планов для построения наиболее простых моделей. Далее проводятся эксперименты по выбранному плану. Результаты экспериментов обрабатываются методом наименьших квадратов и строятся математические модели. Затем построенные математические модели проверяются на адекватность. Если построенные модели оказываются адекватными, то далее формулируется задача оптимизации.

Если же какие-то из построенных моделей для свойств смеси или экономических критериев оказываются неадекватными, то в план экспериментов добавляются дополнительные точки для проведения опытов, необходимые для построения более сложных моделей. Этот процесс продолжается до построения только адекватных моделей. После построения адекватных математических моделей свойств смеси и экономических критериев формулируется задача оптимизации компонентного состава смеси.

Математическая формулировка таких задач в общем случае имеет вид:

$$\max(\min)\, y_j(z_1, z_2, ..., z_n),\ j = \overline{1,m};\ \max(\min)\, L_k(z_1, z_2, ..., z_n), k = \overline{1,p} \tag{1}$$

$$\text{при } 0 \le z_i \le 1,\ \sum_{i=1}^{n} z_i = 1, \tag{2}$$

здесь $y_j(z_1, z_2, ..., z_n)$ $j = \overline{1,m}$ – функции свойств многокомпонентной смеси, представляющие собой полиномы Шеффе, построенные путем обработки результатов экспериментов, проведенных по специальным планам [1], $L_k(z_1, z_2, ..., z_n)$, $k = \overline{1,p}$ – экономические критерии.

Решение многокритериальной задачи оптимизации (1)-(2) в общем случае приводит к большим математическим трудностям поскольку, как правило, свойства смеси, по которым производится подбор компонентного состава смеси, носят противоречивый характер. Выбор метода решения многокритериальной задачи оптимизации (1)-(2) и преодоление возникающих при этом математических проблем могут быть осуществлены только после построения функций свойств $y_j(z_1, z_2, ..., z_n)$ $j = \overline{1,m}$ многокомпонентной смеси с учетом конкретных особенностей решаемой задачи, а также особенностей экономических критериев $L_k(z_1, z_2, ..., z_n), k = \overline{1,p}$. Построенные функции $y_j(z_1, z_2, ..., z_n)$, $j = \overline{1,m}$ и $L_k(z_1, z_2, ..., z_n)$, $k = \overline{1,p}$ представляют собой математическую модель задачи определения оптимального «состав-свойство» многокомпонентных смесей.

Возможность реализации такого подхода проиллюстрируем на примере решения задачи подбора оптимального компонентного состава стержневой смеси, используемой на литейном производстве предприятий машиностроительной промышленности.

Требуется подобрать компонентный состав (x_1– крепитель 4ГУ «В», x_2 – КБЖ + вода и x_3 – песок + асбестовая крошка) стержневой смеси, чтобы ее физико-механические показатели: y_1 – газопроницаемость, y_2 – влажность, y_3 – предел прочности на сжатие (прочность по сырому), y_4 – предел прочности на растяжение (прочность по сухому) удовлетворяли соответствующим требованиям ГОСТов или принимали max(min) значения и чтобы при этом стоимость смеси была минимально возможной. При этом содержание компонентов в трехкомпонентной смеси может изменяться в следующих пределах: ($1 \le x_1 \le 3$) %, ($4 \le x_2 \le 6$) %, ($91 \le x_3 \le 95$) %.

В данной постановке задача оптимизации является многокритериальной. Для ее решения как самый простой подход можно использовать метод выделения главного критерия, в качестве которого выбрать стоимость смеси.

Для определения вида зависимостей $y_j(z_1, z_2, ..., z_n)$ $j = \overline{1,4}$ был реализован эксперимент по 13-точечному плану Дрепера-Лоуренса [2] для трехкомпонентных систем. В результате обработки опытных данных в терминах трансформированных (кодированных) переменных z_1, z_2, z_3 методом наименьших квадратов были получены аппроксимирующие полиномы:

$$\begin{aligned} y_1(\bar{z}) = {} & 379{,}97z_1^3 - 252{,}52z_1^2 z_2 - 114{,}96z_1^2 z_3 + 1011{,}87z_1 z_2^2 + 2613{,}16z_1 \cdot \\ & z_2 z_3 + 789{,}34z_1 z_3^2 + 472{,}33z_2^3 - 441{,}17z_2^2 z_3 + 818{,}96z_2 z_3^2 + 300{,}43z_3^3, \end{aligned} \tag{3}$$

$$y_2(\bar{z})=6{,}16z_1^3+7{,}34z_1^2z_2+7{,}36z_1^2z_3+18{,}57z_1z_2^2+4{,}20z_1\cdot z_2z_3+19{,}16z_1z_3^2+0{,}09z_2^3+11{,}97z_2^2\cdot z_3+14{,}38z_2z_3^2+1{,}64z_3^3, \tag{4}$$

$$y_3(\bar{z})=0{,}082z_1^3+0{,}203z_1^2\cdot z_2+0{,}098z_1^2\cdot z_3+0{,}323z_1z_2^2+0{,}166z_1\cdot z_2z_3+0{,}325z_1z_3^2+0{,}001z_2^3+0{,}456z_2^2z_3+0{,}145z_2z_3^2+0{,}066z_3^3, \tag{5}$$

$$y_4(\bar{z})=12{,}85z_1^3+5{,}45z_1^2z_2+58{,}59z_1^2z_3+24{,}95z_1z_2^2+17{,}99z_1\cdot z_2z_3-21{,}88z_1z_3^2+4{,}85z_2^3+22{,}46z_2^2z_3+13{,}29z_2z_3^2+9{,}43z_3^3, \tag{6}$$

Построенные модели (3)-(6) были проверены на адекватность по двухстороннему критерию Стьюдента в двух контрольных точках, и все они оказались адекватными. Причем погрешность аппроксимации для всех уравнений не превышает (10-12) %. На рис. 1-4 показаны диаграммы «состав – свойство», построенные по моделям (3)-(6).

Связи между натуральными и кодированными переменными x_i и z_i выражаются соотношениями:

$$x_1 = 0{,}03 - 0{,}02\,z_2 - 0{,}02\,z_3,\quad x_2 = 0{,}06 - 0{,}02\,z_2,\quad x_3 = 0{,}91 + 0{,}04\,z_2 + 0{,}02\,z_3.$$

Используя построенные математические модели (3)-(6), была решена задача оптимизации, в которой в качестве целевой функции была выбрана стоимость одной единицы готовой смеси, которая может быть представлена в виде:

$$L(\bar{x})=\sum_{i=1}^{3}a_i\cdot x_i, \tag{7}$$

где a_i – стоимость единицы i – ой компоненты (сырья) смеси.

В соответствии с технологическими требованиями, предъявляемыми к стержневой смеси в производственных условиях, были определены следующие ограничения на y_j (j = 1, 2, 3, 4):

$$y_1 \ge 150;\ 3 \le y_2 \le 4;\ 0{,}065 \le y_3 \le 0{,}15;\ 8 \le y_4 \le 12. \tag{8}$$

С учетом стоимостей единицы (тонны) компонентов смеси целевая функция L($\bar{z}$) в терминах z_i записывается в виде:

$$L(\bar{z})=77000x_1+2000x_2+135x_3=2552{,}85-1574{,}60z_2-1537{,}30z_3. \tag{9}$$

Тогда исходную задачу оптимизации можно представить в виде:

найти $\min L(\bar{z})$, при:

$$\begin{gathered} z_1 + z_2 + z_3 = 1,\ 0 \le z_1, z_2, z_3 \le 1, \\ y_1 \ge 150;\ 3 \le y_2 \le 4;\ 0{,}065 \le y_3 \le 0{,}15;\ 8 \le y_4 \le 12. \end{gathered} \tag{10}$$

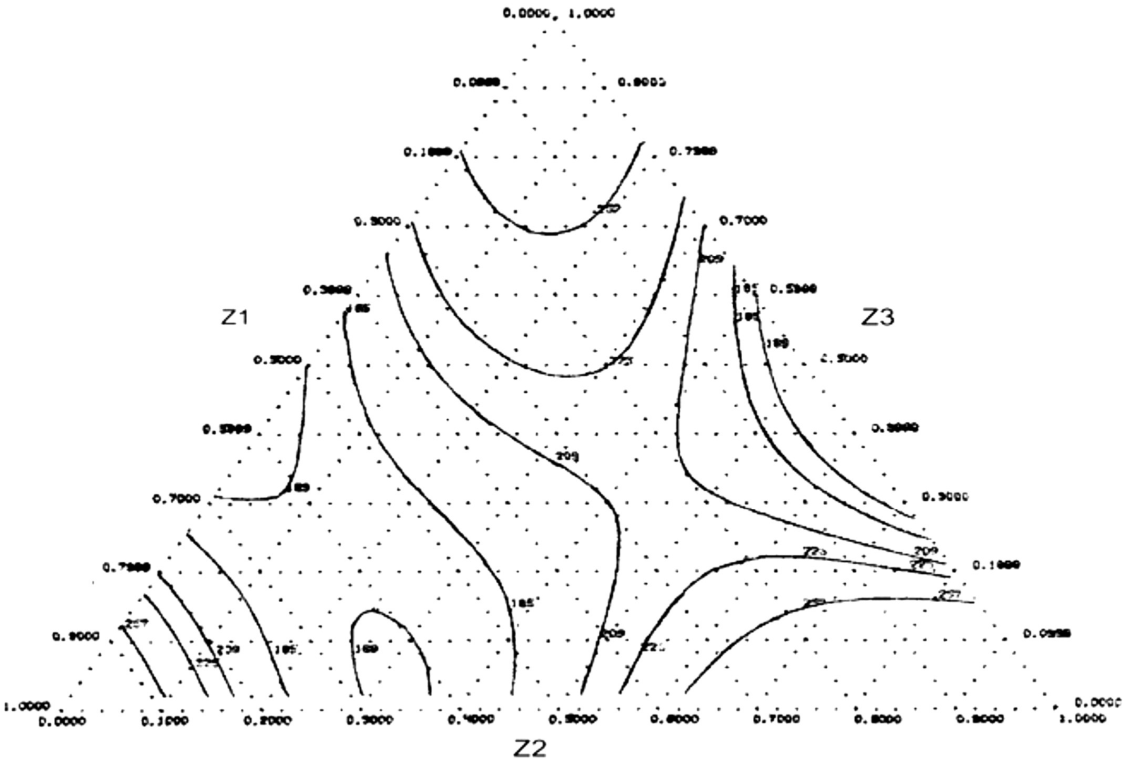

Рис. 1. Диаграмма «состав – свойство» для газопроницаемости смеси y_1

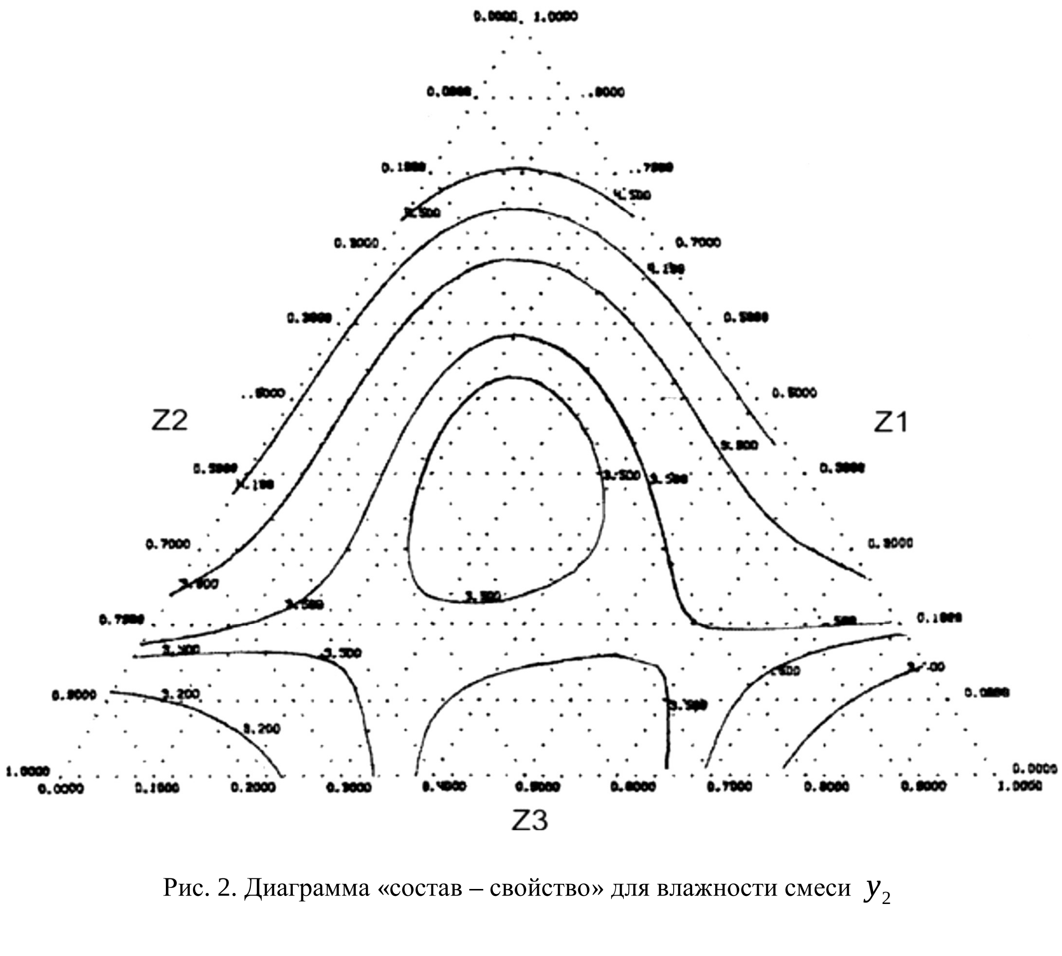

Рис. 2. Диаграмма «состав – свойство» для влажности смеси y_2

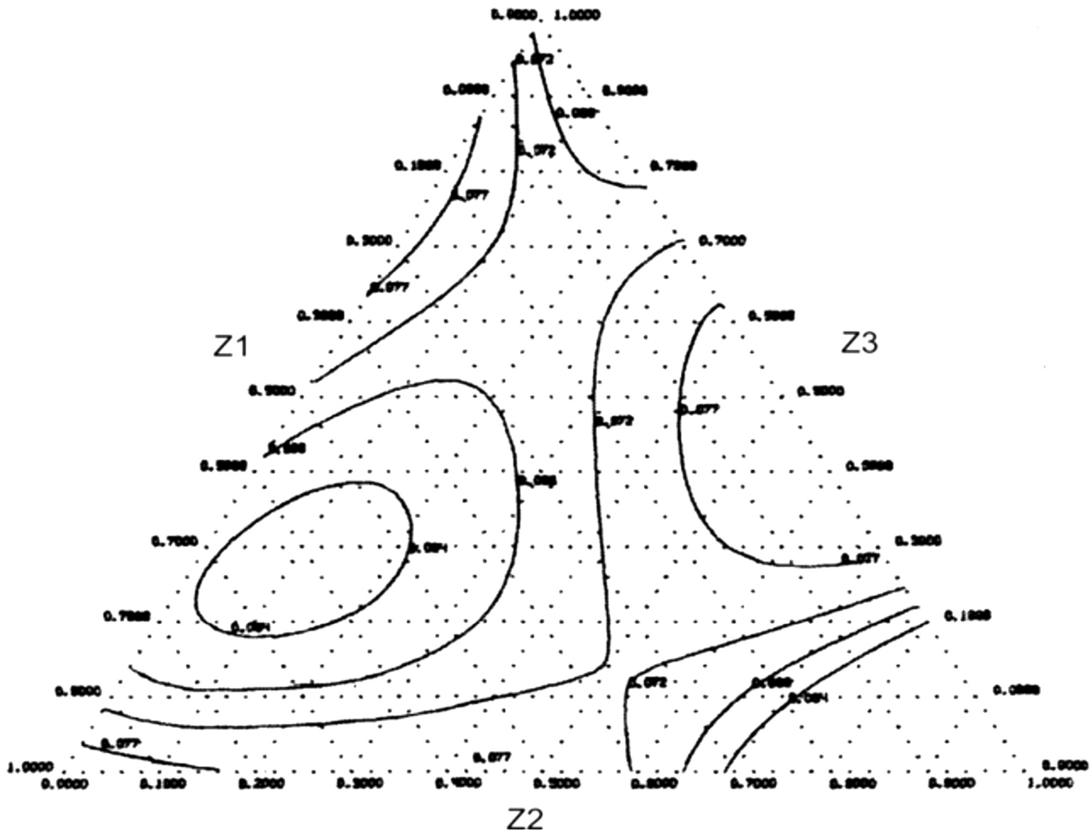

Рис. 3. Диаграмма «состав – свойство» для предела прочности на сжатие смеси y_3

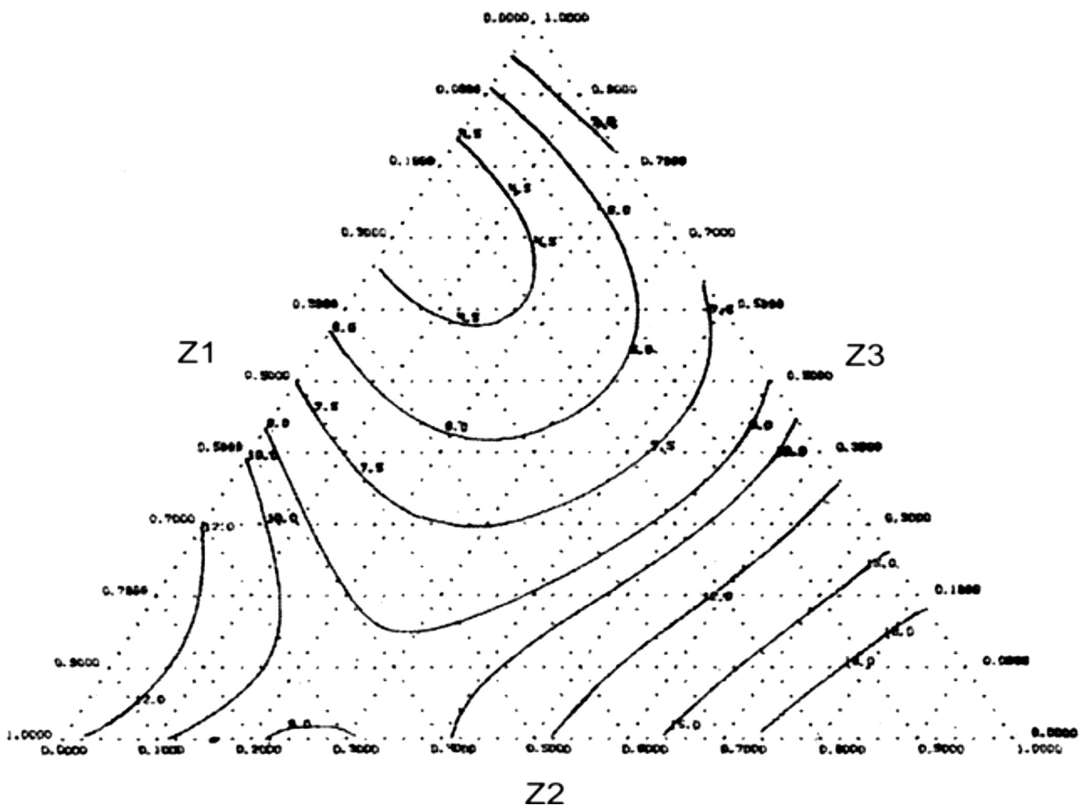

Рис. 4 Диаграмма «состав – свойство» для предела прочности на растяжение смеси y_4

В стандартной форме записи исходная задача нелинейного программирования (10) примет вид:

$$\text{найти } \min L(\bar{z}), \text{ при } g_1(\bar{z}) = z_1 + z_2 + z_3 - 1 = 0, \tag{11}$$

$$\begin{gathered} h_1(\bar{z}) = z_1 \geq 0, \quad h_2(\bar{z}) = 1 - z_1 \geq 0, \quad h_3(\bar{z}) = z_2 \geq 0, \quad h_4(\bar{z}) = 1 - z_2 \geq 0, \\ h_5(\bar{z}) = z_3 \geq 0, \quad h_6(\bar{z}) = 1 - z_3 \geq 0, \quad h_7(\bar{z}) = y_1(\bar{z}) - 150 \geq 0, \quad h_8(\bar{z}) = y_2(\bar{z}) - 3 \geq 0, \\ h_9(\bar{z}) = 4 - y_2(\bar{z}) \geq 0, \quad h_{10}(\bar{z}) = y_3(\bar{z}) - 0{,}065 \geq 0, \quad h_{11}(\bar{z}) = 0{,}15 - y_3(\bar{z}) \geq 0, \\ h_{12}(\bar{z}) = y_4(\bar{z}) - 8 \geq 0, \quad h_{13}(\bar{z}) = 12 - y_4(\bar{z}) \geq 0. \end{gathered} \tag{12}$$

В задаче оптимизации (11)-(12), как видно из рис. 1-4, присутствуют нелинейные невыпуклые функции. Применение для ее решения градиентных методов не дает положительных результатов. Поэтому для решения задачи (11)-(12) был выбран метод «ψ-преобразования» [3]. Сущность этого метода заключается в том, что объектом исследования и анализа является не сама целевая функция $L(\bar{z})$, а некоторая функция $\psi(\varsigma)$, образуемая в результате преобразования $L(\bar{z})$. В основе этого метода преобразования лежит понятие разбиения, применяемого для построения интеграла Лебега. Причем, если оригинал $L(\bar{z})$ является измеримой функцией, определенной на множестве E из пространства R^n и не терпящей симметричного разрыва первого рода, то преобразуемая функция $\psi(\varsigma)$ является монотонно убывающей, и нуль этой функции соответствует значению глобального экстремума (max) целевой функции. Преимуществом метода «ψ-преобразования» является то, что он позволяет найти глобальный экстремум в задачах оптимизации с многоэкстремальными целевыми функциями.

Для решения задач нелинейного программирования при наличии ограничений типа равенств и неравенств можно воспользоваться так называемыми штрафными функциями, благодаря которым задача с ограничениями сводится к задаче без ограничений.

Применение штрафных функций упрощает попадание в область допустимых решений, благодаря чему сокращается время, расходуемое на статистические испытания [3].

Для применения метода штрафных функций формируем обобщенную целевую функцию $\tilde{L}(\bar{z})$, которая для задачи (11)-(12) примет вид:

$$L(\bar{z}) + \sum_{j=1}^{13} r_k \cdot j\,(h_j(\bar{z})) + p_k \cdot h(g_1(\bar{z})), \tag{12'}$$

где $r_k \to 0$, $p_k \to \infty$ при $k \to \infty$; функционалы $f(h_j(\bar{z}))$ и $h(g_1(\bar{z}))$ удовлетворяют заданным требованиям [4].

Если решение задачи (12') существует, то точки экстремума функций $\tilde{L}(\bar{z})$ *и* $L(\bar{z})$ совпадают.

Алгоритм решения задачи (12') или (11)-(12) методом «ψ-преобразования» следующий.

1. Производится l_n раз генерация случайного вектора $\bar{z} = (z_1, z_2, ..., z_n)$, и вычисляются $\tilde{L}_j(\bar{z})$ $j = \overline{1, l_n}$. Среди $\tilde{L}_j(\bar{z})$ определяется $\tilde{L}_{m\,пред.}(\bar{z}) = \max \tilde{L}_j(\bar{z})$ и вычисляется $\tilde{L}_{ср.пред}(\bar{z}) = \frac{1}{l_n} \sum_{j=1}^{l_n} \tilde{L}_j(\bar{z})$. При этом случайный вектор генерируется по закону равномерно распределенных чисел в интервале изменения переменных z_i $(i = \overline{1, n})$.

2. Интервал $\left[\widetilde{L}_{ср.пред}(\bar{z}), \widetilde{L}_{m\,пред.}(\bar{z})\right]$ делится на s равных частей и определяется Δς: $\Delta V = \dfrac{\widetilde{L}_{m\,пред.}(\bar{z}) - \widetilde{L}_{ср.пред}(\bar{z})}{s}$, и вычисляется $V_j = \widetilde{L}_{ср.пред}(\bar{z}) + \Delta V \cdot (j-1),\ j = \overline{1,s}$.

3. Производится l статистических испытаний в точках $\bar{z}$, и вычисляется в этих точках $\widetilde{L}(\bar{z})$, и если для данного испытания оказывается $\widetilde{L}(\bar{z}) \geq V_j$, то определяются

$$y_j = \sum_{k=1}^{x_j} \left[\widetilde{L}(\bar{z}) - V_j\right]_k^p,$$

и определяются:

$$s_{ij} = \sum_{k=1}^{x_j} \left\{ z_i \cdot \left[\widetilde{L}(\bar{z}) - V_j\right]^p \right\}_k,\ \ j = \overline{1,s};\ i = \overline{1,n},$$

где x_j – число тех статистических испытаний, для которых выполняется условие $\widetilde{L}(\bar{z}) \geq V_j$, а $p = 1, 2, 3, \ldots$ – число, зависящее от желаемой точности решения задачи.

4. Вычисляются:

$$y_j = y(V_j) = y_j / \mathbf{l},$$

$$z_{ij} = z_i(V_j) = \frac{s_{ij}}{y_j},\ j = \overline{1,s};\ i = \overline{1,n}.$$

5. Осуществляется методом наименьших квадратов параболическая аппроксимация значений $y_j,\ \ j = \overline{1,s}$.

6. Находится наименьший положительный корень q^* параболы, определенной в пункте 5.

7. Производится аппроксимация параболой значений z_{i1}, z_{i2}, ..., z_{is}, и определяются коэффициенты этих парабол $b_0^i,\ b_1^i,\ b_2^i\ (i = \overline{1,n})$.

8. Подстановкой значения q^*, вычисленного в пункте 6, вместо переменных парабол, число которых равняется n, определяются значения переменных z_i^* глобального экстремума целевой функции по формуле $z_i^* = b_0^i \cdot q^{*2} + b_1^i \cdot q^* + b_2^i\ \ (i = \overline{1,n})$.

9. Вычисляется значение $\widetilde{L}(\bar{z})$ в точке z_i^*.

10. Значение $\overline{L}(z_1^*, z_2^*, \ldots, z_n^*)$ сравнивается со значением глобального экстремума q^*, совпадение в пределах допустимой ошибки означает, что задача решена правильно.

11. Далее производится уточнение решения. Для этого q^* дается приращение ΔV и строятся две последовательности векторов:

$$\bar{z}^k = \bar{z}(V_k), \quad \text{где } V_k = q^* + k \cdot \Delta V \quad (k = 1, 2, \ldots),$$

$$\text{и } \ \bar{z}^j = \bar{z}(V_j), \text{ где } V_j = q^* - j \cdot \Delta V \quad (j = 1, 2, \ldots).$$

12. Значения k и j увеличиваются до тех пор, пока выполняются следующие условия соответственно:

$$\begin{aligned} &\widetilde{L}(\bar{z}^k) \geq \widetilde{L}(\bar{z}^{k-1}), \\ &\widetilde{L}(\bar{z}^j) \geq \widetilde{L}(\bar{z}^{j-1}). \end{aligned} \tag{13}$$

Пусть m_k и m_j – максимальные значения параметров k и j, при которых выполняются условия (13), тогда за $\max \widetilde{L}(\bar{z})$ принимается $\max\left\{\widetilde{L}(\bar{z}^{m_k}), \widetilde{L}(\bar{z}^{m_j})\right\} = \widetilde{L}(\bar{z}^m)$.

Координатой глобального экстремума будет являться $\bar{z}^m$.

13. В случае, если в результате операции, проведенной согласно пункту 11, удовлетворительное решение не получено с требуемой точностью, то необходимо для окрестности точки $\bar{z}^* = (z_1^*, z_2^*, ..., z_n^*)$, полученной в пункте 8, провести дополнительные статистические испытания с целью повышения точности решения. Далее все повторяется, начиная с пункта 1, с той лишь разницей, что статистические испытания проводятся в окрестности точки $\bar{z}^* = (z_1^*, z_2^*, ..., z_n^*)$.

При проведении численных расчетов нами были приняты следующие значения параметров: $\mathbf{l}_n$ = 100, S = 7, l = 10000, p = 4. Расчеты были повторены для суженной области в окрестности точки, полученной в первой реализации алгоритма решения задачи. В результате было получено $\min \tilde{L}(\bar{z})$=1829,82 при z_1 = 0,531; z_2 = 0,0545; z_3 = 0,4145 (x_1 = 0,0206; x_2 = 0,0589; x_3 = 0,9205). Далее эти данные были уточнены методом Нелдера-Мида [5]. После уточнения был получен следующий результат:

$$\min \tilde{L}(\bar{z}) = 1805{,}66 \text{ при } x_1 = 0{,}0203;\ x_2 = 0{,}0591;\ x_3 = 0{,}9212.$$

При этом y_1 = 173,2402; y_2 =3,9924; y_3 = 0,0661; y_4 = 8,0005.

Стержневая смесь с оптимальным компонентным составом, найденным в результате решения задачи (12’) или (11)-(12), полностью удовлетворяет технологическим требованиям, предъявляемым к ней. При этом в производственных условиях для оптимального компонентного состава были получены следующие значения физико-механических показателей смеси: y_1 = 170,202; y_2 = 3,750; y_3 = 0,073; y_4 = 8,300, которые хорошо согласуются с расчетными значениями y_j, $j = 1, 2, 3, 4$. Определение оптимального компонентного состава стержневой смеси и применение его в производственных условиях позволило уменьшить использование ценного продукта крепителя 4ГУ «В» с 3 до 2 %. Подобранный состав смеси был приготовлен эмульсионным способом в полунепрерывном режиме [6] в производственных условиях.

Разработан пакет программ, позволяющий численно реализовывать алгоритм предложенного подхода к подбору оптимального состава многокомпонентных смесей для задачи (1)-(2) в наиболее ее общей постановке. Данный подход может быть реализован и для смесей с числом компонент n ≥ 4.

Список литературы

1. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В, Огарков Б.Л. Численное методы решения строительно-технологических задач на ЭВМ. – Киев: Выща школа, 1989. – 326 с.
2. Зедгинидзе И.Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. – М.: Наука, 1976. – 390 с.
3. Чичинадзе В.К. Решение невыпуклых нелинейных задач оптимизации. – М.: Наука, 1983. – 256 с.
4. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. – М.: Мир, 1975. – 536 с.
5. Есипов Б.А. Методы исследования операций. – СПб. – М. – Краснодар: ЛАНЬ, 2010. – 254 с.
6. Ахмадиев Ф.Г. Математическое моделирование кинетики технологических процессов переработки дисперсных систем. // Известия КГАСУ, 2011, № 3 (17). – С. 257-267.

Akhmadiev F.G. – doctor of technical sciences, professor.
Gilfanov R.M. – candidate of technical sciences, associate professor.
E-mail: Akhmadiev@kgasu.ru
Kazan State University of Architecture and Engineering
The organization address: 420043, Russia, Kazan, Zelenaya st., 1

Mathematical modeling and optimization of the «compozition-property» of multicomponent mixtures

Resume

The approach to the solution of a problem of selection of optimum structure of a multicomponent mixture is offered and the software package is developed for its realization. The essence of this approach consists in the following. If theoretical dependences of properties of a mixture and economic requirements on which are known the choice of optimum structure of a mixture is made, the problem of optimization is formulated.

If theoretical dependences of properties of a mixture and economic criteria on componental structure aren't present. That on the basis of the analysis of aprioristic information on nature of these dependences gets out the most suitable plan of experiments. Experiments by the set plan are made. Results of experiments are processed by a method of the smallest squares and mathematical models are under construction. Then the constructed mathematical models are checked on adequacy. After creation of adequate mathematical models of properties of a mixture and economic criteria the problem of optimization of componental structure of a mixture is formulated.

As a rule problems of optimization of componental structure of a mixture are problems of optimization with many criteria. For a choice of the most effective method of the decision the analysis of mathematical model of a task is carried out and on its basis the method gets out. In work it is given an example solutions of a problem of selection of componental structure of a rod mixture having the minimum cost and possessing the physical and chemical characteristics lying in set ranges. For the solution of this task the method «ψ-transformations» which allows to solve not convex nonlinear problems of optimization with multiextreme criterion functions is used.

Keywords: multicomponent mixture, rod mixture, diagrams «composition-property», the optimization problem.

References

1. Voznesensky V.A., Ljashenko T.V., Ogarkov B.L. Numerical methods for solving construction and engineering tasks on a computer. – Kiev: Visha shkola, 1989. – 326 p.
2. Zedginidze I.G. The design of experiments for the study of multicomponent systems. – M.: Nauka, 1976. – 390 p.
3. Chichinadze V.K. The solution of nonconvex nonlinear optimization problems. – M.: Nauka, 1983. – 256 p.
4. Himmelblau D. Applied nonlinear programming. – M.: Mir, 1975. – 536 p.
5. Esipov B.A. Methods of operations research. – SPb. – M. – Krasnodar: LAN, 2010. – 254 p.
6. Akhmadiev F.G. Mathematical modelling of kinetics technological of conversions of processing of disperse environments. – Kazan: Izvestiya KSUAE, 2011, № 3 (17). – P. 257-267.