

С.В. Брановицька, С.Г. Бондаренко, А.Г. Данилкович, О.В. Сангінова, В.О. Червінський

БАГАТОКРИТЕРІАЛЬНА УМОВНА ОПТИМІЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ ДУБЛЕННЯ ЗА МОДИФІКОВАНИМ МЕТОДОМ ХУКА-ДЖИВСА

S.V.Branovitskaja, S.G.Bondarenko, A.G.Danilkovich, O.V.Sanginova, V.A. Chervinsky
APPLICATION OF MODIFIED HOOKE- JEEVES METHOD FOR MULTI-OBJECTIVE OPTIMIZATION

1. Вступ

Використання методів багатокритеріальної оптимізації при вирішенні завдань хімічної технології дозволяє з багатьох допустимих рішень вибирати найкращі [1]. Проте математичне формулювання таких завдань і питання їх коректності, як правило, вимагають спеціального розгляду. Труднощі, перш за все, пов'язані з отриманням опису процесу і складністю граничних умов. Як правило, технологічні процеси характеризуються великим числом фізико-хімічних, теплофізичних і конструктивних параметрів, що істотно ускладнює задачу.

Величезний досвід вирішення оптимізаційних задач дозволяє отримувати рішення як для конкретних застосувань [2], так і в узагальненому вигляді [2, 3]. Проте ряд технологічних завдань вимагає спеціального опрацювання. У даній роботі розглянуто процес дублення шкіряного напівфабрикату, який характеризується використанням великої витрати води, хімічних реагентів, попаданням їх в стічні води і значною тривалістю процесу [4, 6]. У разі хромового дублення в реакції беруть участь іонізовані карбоксильні групи бічних радикалів колагенових макромолекул і гідроксісульфатохромові комплекси дубителя [4, 5]. Суть процесу дублення шкіряного напівфабрикату полягає в дифузії дублячих комплексів в структуру напівфабрикату до активних груп колагенових макромолекул з подальшою взаємодією з ними. Процес отримання шкіри з необхідними фізико-механічними і санітарно-гігієнічними властивостями з напівфабрикату складається зі стадій наповнення, жирування, фарбування, виділення вологи і покривного фарбування.

Вказані недоліки можна ліквідувати як за рахунок удосконалення технологічного процесу із застосуванням ефективних дублячих речовин, так і за рахунок оптимізації параметрів дублення. Оптимізація процесу дублення шкіряного напівфабрикату дозволить скоротити тривалість процесу дублення, скоротити об'єм відпрацьованих технологічних розчинів і концентрацію в них невідпрацьованих хімічних реагентів, заощадити витрату дефіцитного дубителя і підвищити якість шкіряного матеріалу.

2. Аналіз досліджень і публікацій

Вибір методу оптимізації, спосіб формування критерію оптимальності мають істотний вплив на якість отримуваних рішень. Аналіз публікацій, що стосуються розробки ресурсозберігаючих і екологічно ефективних технологій в області обробки шкур великої рогатої худоби, показав, що пошук оптимальних рішень базується переважно на експериментально-статистичному підході, а формування узагальненого критерію оптимізації виконується з використанням функції бажаності Харрінгтона [7-9]. Методи планування експерименту дозволяють отримати математичний опис процесу. Критерій оптимізації формується з використанням функції бажаності і для відшукування екстремуму зазвичай використовується метод сканування [4, 6].

Такий підхід до рішення задачі багатокритеріальної оптимізації супроводжується складністю у формалізації критерію і вимагає значного об'єму обчислень. При цьому вибір напряму дослідження (руху до оптимуму) безпосередньо залежить від досвідченості дослідника. У роботах [1, 10] показано, що у ряді випадків неправильний вибір напряму руху дослідником не приводить до оптимуму.

При цьому хороші результати при вирішенні задач оптимізації дає використання методу Хука-Дживса [3]. Класичний метод не дозволяє враховувати обмеження на параметри – як лінійні, так і нелінійні. Важливою перевагою є і хороша програмуємість методу.

3. Постановка задачі

У даній роботі вирішена задача багатокритеріальної умовної оптимізації хромового дублення шкіряного напівфабрикату, отриманого зі шкур великої рогатої худоби, яка враховує технологічні обмеження на параметри з використанням модифікованого методу Хука-Дживса.

4. Результати досліджень

Важливим моментом при вирішенні задач багатокритеріальної оптимізації є правильне формування критерію оптимальності. У загальному вигляді задача багатокритеріальної оптимізації формулюється таким чином. Якість об'єкту оптимізації оцінюється вектор-функцією

$$f(\bar{x}) = (f_1(\bar{x}), f_2(\bar{x}), \dots, f_k(\bar{x})), \quad (1)$$

компоненти якої $f_i(\bar{x})$ ($i=1,2,\dots,k$) – задані функції вектора $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$. На змінні x_i ($i=1, n$), як правило, накладаються лінійні або нелінійні обмеження. Вектор \bar{x} , таким чином, належить множині X його можливих значень. Потрібно знайти таку точку $\bar{x}^* \in X$, яка забезпечить оптимальне значення функцій $f_1(\bar{x}), f_2(\bar{x}), \dots, f_k(\bar{x})$. Критерії $f_i(\bar{x})$ ($i=1, k$), як правило, мають різну фізичну природу, і, відповідно, різну розмірність. Тому в багатоцільовій оптимізації використовують нормування локальних критеріїв, за допомогою якого замість «натурального» критерію розглядається його відношення до деякої нормуючої величини, яка вимірюється в тих же одиницях, що і сам критерій [2, 12]. В результаті такої операції всі критерії $f_i(\bar{x})$ ($i=1, k$) будуть безрозмірними величинами. У даній роботі безрозмірні критерії $f_i(\bar{x})$ визначалися за формулою:

$$f_i^*(\bar{x}) = \frac{f_i(\bar{x})}{f_{i\max}(\bar{x}) - f_{i\min}(\bar{x})}, \quad (2)$$

де $f_i(\bar{x})$ – «натуральне» значення i -го критерію.

Для вирішення завдання багатокритеріальної оптимізації процесу дублення шкіряного напівфабрикату в приведеній постановці був використаний наступний спосіб побудови узагальненого критерію оптимальності:

$$f(\bar{x}) = \sum_{i=1}^k \alpha_i f_i(\bar{x}), \quad (3)$$

де α_i – вагові коефіцієнти, $\sum_{i=1}^k \alpha_i = 1$. Як правило, α_i визначаються на основі експертних оцінок [3, 4].

Для розв'язання задачі багатокритеріальної умовної оптимізації (1) – (3) був використаний метод Хука-Дживса [3]. Оскільки вказаний метод використовували для рішення задачі умовної оптимізації, його було модифіковано з метою врахування обмежень, що накладаються на технологічний процес. Алгоритм модифікованого методу наведено нижче. Вибір методу для вирішення задачі оптимізації обумовлений його простотою, надійністю роботи і зручністю для програмування. Він добре зарекомендував себе для вирішення різних завдань нелінійного програмування. Метод на кожному кроці використовує інформацію про значення цільової функції і функції обмежень завдання.

Постановка задачі оптимізації: нехай потрібно мінімізувати функцію $f(\bar{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, де $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ визначається явними обмеженнями: $l_j \leq x_j \leq u_j$ ($j=1,2,\dots,n$), (4)

а також неявними обмеженнями $q_i(\bar{x}) \leq b_i$ ($i=1,2,\dots,m$). (5)

Процедура оптимізації за методом Хука-Дживса складається з досліджуючого пошуку навколо базової точки з метою визначення характеру локальної поведінки цільової функції і напрямку максимізації чи мінімізації, а також з прискорюючого пошуку за зразком. Відповідно до модифікованого методу Хука-Дживса запропонований наступний алгоритм (рис.1).

Перший крок передбачає відшукування початкової допустимої точки. Допустимою є точка, що задовольняє умовам (4) і (5).

Початкову допустиму точку $\bar{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ можна задати, якщо це можливо, або скористатися формулою $x_j = l_j + r_j(u_j - l_j)$, ($j=1,2,\dots,n$), (6)

де r_j – випадкові числа, рівномірно розподілені на інтервалі (0; 1).

Отримана таким чином точка перевіряється на допустимість обчисленням функцій $q_i(\bar{x})$, ($i=1,2,\dots,m$), що входять у обмеження (5). Процес продовжується доти, доки не буде знайдена точка, що задовольняє всім обмеженням задачі. Також на цьому етапі задають крок h_j ($j=1,2,\dots,n$) для кожної змінної, коефіцієнт зменшення кроку $\alpha > 1$, параметр завершення пошуку $\varepsilon < 0$ та встановлюють номер кроку оптимізації: $k=1$.

На другому кроці проводять досліджуючий пошук навколо базової точки:

- координатам точки $\bar{x}^{(1)}$ присвоюють значення координат базової точки $x_j^{(1)} = x_j^{(0)}$ ($j=1,2,\dots,n$);

- обчислюють значення цільової функції в точці $\bar{x}^{(1)}$ та перевіряють, чи є точка допустимою. Якщо точка недопустима, крок зменшують у α разів;

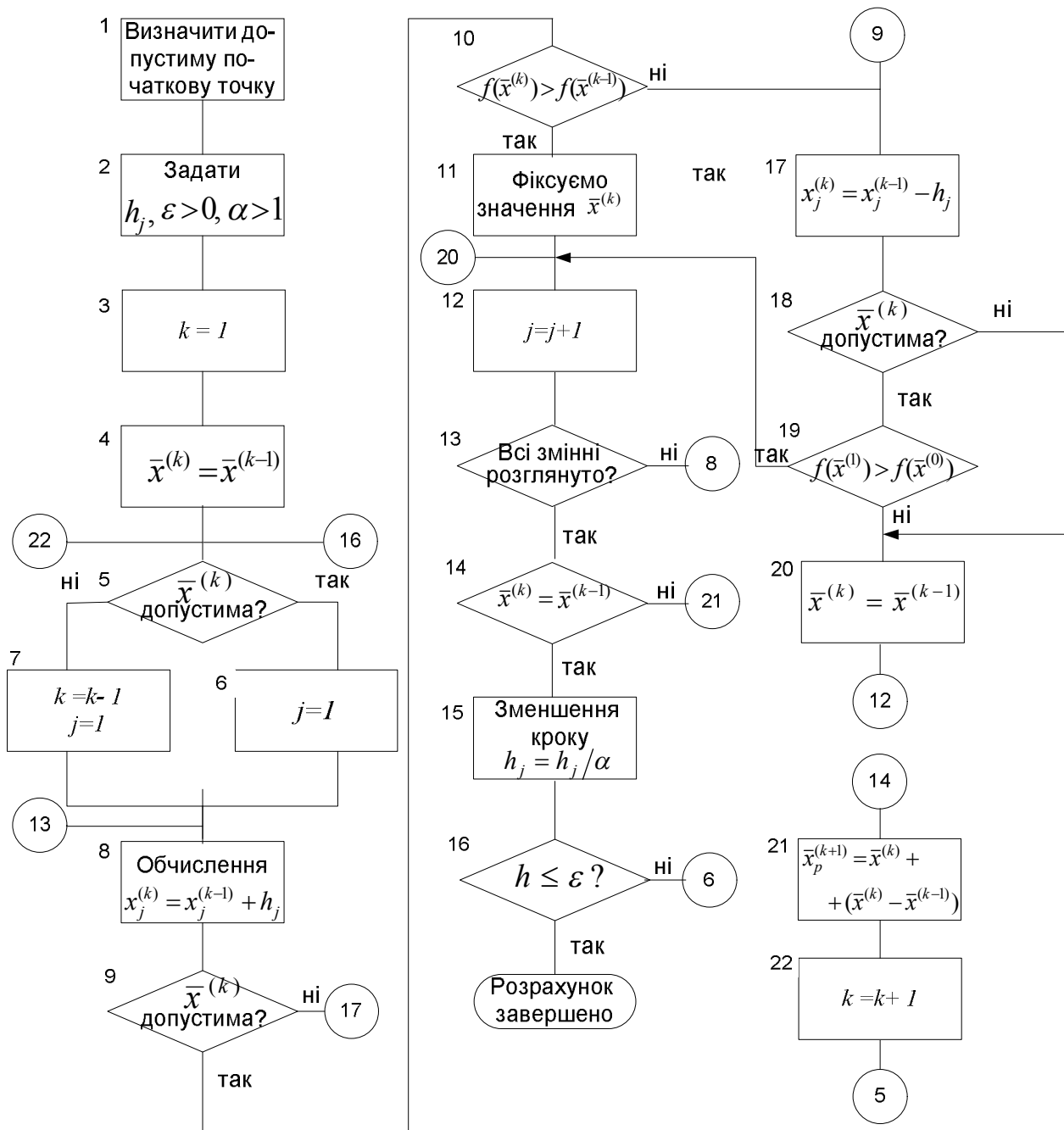


Рис. 1. Алгоритм модифікованого методу Хука-Дживса

- в циклічному порядку змінюють значення всіх змінних, починаючи з першої, причому кожен раз змінюється тільки одна змінна; значення j -ої координати збільшується на крок h_j , так що $x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} + h_j$. Якщо значення функції в отриманій точці буде більше, ніж у точці $\bar{x}^{(k-1)}$, то нова точка приймається за точку $\bar{x}^{(k-1)}$ і значення $f(\bar{x})$, яке було в точці $\bar{x}^{(k)}$, замінюється новим для наступних порівнянь. Якщо нова точка не є допустимою, або якщо значення функції зменшилось порівняно з точкою $\bar{x}^{(k-1)}$, то j -та координата зменшується на крок h_j , знову порівнюється значення в двох точках і краща точка приймається за точку $\bar{x}^{(k-1)}$. Якщо значення функції не покращується ні при $x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} + h_j$, ні при $x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - h_j$, то $\bar{x}^{(k)}$ залишається без змін;

- після того, як значення змінних зміняться для всіх $j = 1, 2, \dots, n$, досліджуваний пошук закінчується;

Якщо нова точка $\bar{x}^{(k)}$ і точка $\bar{x}^{(k-1)}$ не співпадають, то відбувається пошук за зразком; в іншому випадку крок зменшують у α разів і, якщо крок більший деякого заданого значення ε , то повторюється досліджуваний пошук; в іншому випадку процес оптимізації припиняється.

На третьому кроці пошук за зразком відбувається на основі інформації, отриманої в процесі досліджувачого пошуку. Оскільки переміщення в напрямку $\bar{x}^{(k-1)} - \bar{x}^{(k)}$ привело до збільшення цільової функції, то наступна базова точка обчислюється за формулою

$$\bar{x}^{(k+1)} = \bar{x}^{(k)} + (\bar{x}^{(k)} - x^{(k-1)}), \quad (7)$$

Якщо $f(\bar{x}^{(k+1)}) > f(\bar{x}^{(k)})$, то точку $\bar{x}^{(k+1)}$ приймають за нову базову точку, інакше $\bar{x}^{(k+1)} = \bar{x}^{(k)}$. Далі крок оптимізації збільшують на одиницю: $k = k + 1$ і обчислення повторюють з другого кроку.

Описаний алгоритм був покладений в основу програмного модуля, який реалізований за допомогою об'єктно-орієнтованої мови програмування Visual Basic for Application. Розроблений програмний модуль використаний для пошуку оптимальних значень узагальненої цільової функції.

Завдання визначення оптимального складу трьохкомпонентної суміші, використовуваної при дубленні шкіряного напівфабрикату, розглядалося як завдання нелінійного програмування. Головне вікно програми представлено на рис. 2 і передбачає візуалізацію як початкових даних, так і результатів розрахунку. При розробці програмного модуля передбачена можливість роботи з явними і неявними обмеженнями.

Основні вихідні змінні, які характеризують як процес, що досліджується, так і виробничу якість готової продукції і впливають на її собівартість, в даному дослідженні є параметрами оптимізації.

Рис. 2. Головне вікно програмного модуля

Розглянута маловідходна технологія дублення шкіряного напівфабрикату [10] передбачає використання сухого хромового дубителя (СХД) ТУ 2141-033-541386-2003. В якості вихідні змінних досліджуваного процесу з технологічних і екологічних міркуваннях вважають: поглинання СХД напівфабрикатом в процесі дублення y_1 (% Cr_2O_3 початкової кількості); температура гідротермічної стійкості y_2 ($^{\circ}C$); об'ємний вихід y_3 ($cm^3/100g$ білкової речовини); зменшення площі напівфабрикату щодо площі зеленого напівфабрикату – y_4 (%). Відповідно, чинниками, що істотно впливають на процес хромового дублення є: витрата СХД x_1 (% Cr_2O_3 маси зеленого напівфабрикату), основність¹ СХД x_2 (%) і витрата електролітостійкої жирової емульсії x_3 (% маси зеленого напівфабрикату).

Математичний опис процесу дублення отриманий на основі композиційного ротатбельного плану Бокса-Хантера другого порядку з 6 нульовими точками в центрі плану і представлено чотирма регресійними рівняннями [11]:

$$y_1 = 98,40 - 6,56x_1 + 1,41x_2 + 2,08x_3 + 0,09x_1x_2 - 0,138x_1x_3 - 0,21x_2x_3 - 4,22x_1^2 - 1,54x_2^2 - 1,89x_3^2$$

¹ Показує співвідношення пов'язаних з іонами хрому(III) гідроксильних груп до ступеня його окислення (визначає ступінь скріплення дубителя).

$$\begin{aligned}
 y_2 &= 106,26 + 7,55x_1 - 0,34x_2 + 1,59x_3 + 0,62x_1x_2 + \\
 &\quad + 0,38x_1x_3 + 0,38x_2x_3 - 4,03x_1^2 - 1,91x_2^2 - 1,03x_3^2 \\
 y_3 &= 235,87 + 22,57x_1 - 2,06x_2 + 10,92x_3 + 3,12x_1x_2 - \\
 &\quad - 0,88x_1x_3 + 0,12x_2x_3 - 12,35x_1^2 - 7,40x_2^2 - 6,87x_3^2 \\
 y_4 &= -4,095 + 1,61x_1 - 0,74x_2 + 1,26x_3 - 0,1x_1x_2 - \\
 &\quad - 0,05x_1x_3 - 0,25x_2x_3 - 2,18x_1^2 - 1,77x_2^2 - 1,40x_3^2
 \end{aligned}$$

Обмеження вибрані відповідно до технологічних міркувань [4]:

$$\begin{aligned}
 0,9 < x_1 < 1,5 & \qquad \qquad \qquad 98 < y_1 < 99 \\
 26 < x_2 < 42 & \qquad \qquad \qquad 103 < y_2 < 107 \\
 0,2 < x_3 < 0,8 & \qquad \qquad \qquad 228 < y_3 < 240 \\
 & \qquad \qquad \qquad 3,7 < y_4 < 5,0
 \end{aligned}$$

Виходячи з технологічних і економічних вимог процесу, вихідні величини y_1, y_2, y_3 максимізували, а величину y_4 мінімізували. Узагальнена цільова функція отримана за формулою (3). Вагові коефіцієнти функції α_i відповідно до експертних оцінок варіювалися на 12 рівнях, представлених в таблиці 1. Вид цільової функції для першого випадку ($\alpha_1=0,4$; $\alpha_2=0,1$; $\alpha_3=0,15$; $\alpha_4=0,35$):

$$\begin{aligned}
 f(\bar{x}) &= 46,07 - 2,59x_1 + 0,80x_2 + 0,67x_3 + 0,12x_1x_2 + \\
 &\quad + 0,067x_1x_3 + 0,16x_2x_3 + 2,01x_1^2 - 0,28x_2^2 - 0,49x_3^2
 \end{aligned}$$

Узагальнена цільова функція максимізувалася.

Таблиця 1 – Вагові коефіцієнти цільової функції

№	Вагові коефіцієнти			
	α_1	α_2	α_3	α_4
1	0,4	0,1	0,15	0,35
2	0,45	0,1	0,15	0,3
3	0,5	0,1	0,15	0,25
4	0,6	0,1	0,15	0,15
5	0,4	0,1	0,1	0,4
6	0,5	0,1	0,1	0,3
7	0,55	0,1	0,1	0,25
8	0,6	0,1	0,1	0,2
9	0,5	0,05	0,2	0,25
10	0,5	0,1	0,15	0,25
11	0,5	0,15	0,1	0,25
12	0,5	0,2	0,05	0,25

Відповідно, отримані оптимальні значення факторів і вихідних змінних, що задовольняють заданим умовам. Результати розрахунків представлені в таблиці 2. Значення узагальноної цільової функції приведені в останній колонці.

Таблиця 2 – Розрахункові значення узагальноної цільової функції

№	x_1	x_2	x_3	y_1	y_2	y_3	y_4	$f(\bar{x})$
1	0,9	36,8312	0,6648	98,6661	105,9856	235,9101	4,5856	46,3058
2	0,9	37,8243	0,5149	98,6657	105,9655	235,8597	4,6079	51,0667
3	0,9	41,9436	0,5535	98,6741	105,8895	235,7068	4,6961	55,8410
4	0,9	38,4220	0,3670	98,6642	105,9522	235,8224	4,6221	65,3349
5	0,9	38,6043	0,6276	98,6698	105,9534	235,8442	4,6229	45,5111
6	0,9	39,3337	0,2484	98,6638	105,9335	235,7760	4,6428	55,8268
7	0,9	42,0000	0,5766	98,6746	105,8888	235,7070	4,6971	59,7931
8	0,9	42,0000	0,7009	98,6771	105,891	235,7205	4,6979	64,4728
9	0,9	42,0000	0,5015	98,6731	105,8875	235,6989	4,6980	55,4959
10	0,9	42,0000	0,6887	98,6768	105,8908	235,7192	4,6958	55,8426

11	0,9	41,9436	0,5535	98,6741	105,8895	235,7068	4,6961	56,5304
12	0,9	42,0000	0,3464	98,6720	105,9164	235,7628	4,66512	56,5245

Таким чином, в результаті проведених розрахунків знайдено оптимальні значення параметрів процесу хромового дублення шкіряного напівфабрикату і відповідних значень цільової функції. Як видно з приведеної таблиці, максимальні значення цільової функції 65,33 і 64,47 отримані відповідно у 4 і 8 рядках таблиці 2. Ці значення відповідають певним ваговим коефіцієнтам цільової функції (таблиця 1). Можна припустити, що при таких вагових коефіцієнтах в цільовій функції обраний критерій оптимальності щонайкраще описує поставлену задачу. При цьому найкращими значеннями параметрів процесу є: $x_1 = 0,9$; $x_2 = 38,42$; $x_3 = 0,37$; $y_1 = 98,664$; $y_2 = 105,95$; $y_3 = 235,82$; $y_4 = 4,62$.

Як видно, пошук екстремуму функції задовольняє умовам (4) та (5), тобто запропонована модифікація методу Хука-Дживса може бути використана для розв'язання задач умовної оптимізації.

Висновки

Розв'язано задачу багатокритеріальної умовної оптимізації хромового дублення шкіряного напівфабрикату із застосуванням модифікованого методу Хука-Дживса.

Критерій оптимальності для процесу хромового дублення шкіряного напівфабрикату представлений у вигляді узагальненої цільової функції. Відповідно до обраного критерію визначені оптимальні значення параметрів процесу дублення.

Запропонований метод може бути використаний для оптимізації аналогічних технологічних процесів.

Література

1. Данилкович А.Г. Использование метода Бокса в задачах многокритериальной оптимизации [Текст] / А. Г. Данилкович, С.В. Брановицкая, С.Г. Бондаренко, О.В.Сангинова // Восточно-европейский журнал передовых технологий. – 2013. – № 3/4 (63). – С. 4-8.
2. Островский Г. М. Оптимизация химико-технологических процессов. Теория и практика [Текст] / Г. М. Островский, Т. А. Бережинский. – М. : Химия, 1984. – 240 с.
3. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс [Текст] Перевод с англ. / Б. Банди. – М. : Радио и связь, 1988. – 129 с.
4. Інноваційні технології виробництва шкіряних і хутрових матеріалів та виробів : монографія / А. Г. Данилкович, І. М. Грищенко, В. І. Ліщук [та ін.] ; за ред. А. Г. Данилковича. – К. : Фенікс, 2012. – 344 с.
5. Данилкович А. Г. Особливості взаємодії гідрокосульфатохромових комплексів з колагеном / А. Г. Данилкович // Вісник КДУТД. – 2001. – № 1. – С. 151-153.
6. Екологічно орієнтовані технології виробництва шкіряних та хутрових матеріалів для створення конкурентоспроможних товарів [у 2 ч.] : монографія, Ч. I / А. Г. Данилкович, В. І. Ліщук, В. П. Плавач, Е. С. Касьян, О. Г. Жигоцький ; за ред. А. Г. Данилковича. – К. : Фенікс, 2011. – 437, [3] с.
7. Данилкович А. Г. Оптимизация композиции для гидрофобизации эластичных материалов // А. Г. Данилкович, Н. В. Омельченко, А. М. Шахновский // Вісник ХНУ. – 2012. – № 1. – С. 74-78.
8. Ліщук В. І. Використання багатокритеріальної оптимізації для пошуку компромісної області процесу зоління / В. І. Ліщук, Т. Г. Войцеховська, А. Г. Данилкович // Легка промисловість. – 2007. – № 1. – С. 37-39.
9. Данилкович А. Г. Підвищення якості вторинного покриття шляхом оптимізації покривної композиції / А. Г. Данилкович, А. С. Браїлко, Н. В. Омельченко // Вісник ХНУ. – 2010. – № 3. – С. 129-134.
10. Данилкович А. Г. Основы научных исследований в высшем учебном заведении (на украинском языке) [Текст] / Данилкович А. Г. – К. : КНУТД, 2010. – 296 с.
11. Данилкович А. Г. Розробка технології сухого дублення недвоєної голини та її багатокритеріальна оптимізація / А. Г. Данилкович, А. Г. Петрань // Вісник Державної акад. легкої пром-ті України. – 1999. – № 2. – С. 170-173.
12. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование [Текст] / Д. Химмельблау. – М. : Мир, 1975. – 534 с.