

УДК 677.072.6

РЕЗАНОВА В.Г.

Київський національний університет технологій та дизайну

## ПЕРЕТВОРЕННЯ ЗАДАЧІ ОПТИМІЗАЦІЇ ПРИ ДОСЛІДЖЕННІ ЧОТИРИКОМПОНЕНТНИХ СУМІШЕЙ ПОЛІМЕРІВ

**Мета.** Пошук підходів до розв'язання задачі оптимізації складу чотирикомпонентних сумішей полімерів. Перетворення та спрощення задачі для забезпечення можливості подальшого розв'язання. Створення спеціального програмного забезпечення.

**Методика.** В постановці задачі використовується математична модель специфічного волокноутворення, побудована за методом найменших квадратів на основі результатів планування експерименту. Подальше перетворення та спрощення задачі здійснюється за методом лінійної згортки. Програмне забезпечення розроблялося мовою Object Pascal у середовищі Delphi.

**Результати.** Розроблено програмне забезпечення для перетворення задачі оптимізації складу чотирикомпонентних сумішей полімерів при реалізації специфічного волокноутворення. Воно дозволяє спрощувати багатокритеріальну задачу оптимізації, зводячи її до однокритеріальної.

**Наукова новизна.** Розроблене програмне забезпечення дозволяє перетворювати задачу оптимізації складу чотирикомпонентних сумішей полімерів до вигляду, зручного для подальшого розв'язання. В свою чергу, розв'язання задачі оптимізації є складовою частиною теоретичного дослідження специфічного волокноутворення.

**Практична значимість.** Багатокритеріальна задача умовної оптимізації є надзвичайно складною для розв'язання, тоді як перетворена однокритеріальна задача може бути в подальшому розв'язана одним з відомих методів.

**Ключові слова:** волокноутворення, багатокритеріальна задача, однокритеріальна задача, умовна оптимізація, програмне забезпечення.

**Вступ.** Сучасна людина оточена великою кількістю різних товарів, матеріалів й виробів, одержаних із застосуванням високомолекулярних сполук (полімерів). Характеризуючи сучасну епоху можна сказати, що це "століття полімерів". І це має сенс, адже ступінь застосування полімерних матеріалів в соціальній сфері та економіці є важливим критерієм рівня науково-технічного прогресу в країні.

Вітчизняний й світовий досвід свідчать, що найраціональнішим вирішенням проблеми створення полімерних матеріалів із унікальними новими характеристиками є не розробка нової сировини, а модифікація полімерів, яка вже випускається промисловістю.

Змішування полімерів й додавання спеціальних добавок – компатибілізаторів, пластифікаторів, речовин у наностані - дає можливість не тільки поєднувати характеристики кількох компонентів, а й отримувати унікальні ефекти і сучасні матеріали з властивостями, що нехарактерні вихідним полімерам.

У даний час нанотехнології є однією з найперспективніших та важливих галузей знань. Із ними пов'язують надії на нові напрями й швидкі прориви розвитку у багатьох технологічних і технічних сферах. Швидкий розвиток нанотехнологій зумовлений тим, що при наноструктуруванні отримують якісно нові характеристики, а також непередбачену поведінку матеріалів. Зокрема, вуглецеві нанотрубки характеризуються комплексом

унікальних електричних, теплофізичних й механічних властивостей. У останні роки одним з перспективних напрямків техніки й науки є розроблення принципів отримання нанонаповнених волокон й нанокompозитів.

**Постановка завдання.** Явище специфічного волокноутворення реалізується у відповідних умовах при течії розплавів суміші полімерів. У його основі лежать мікрореологічні процеси такі, як деформація крапель компонентів дисперсної фази та об'єднання рідких струменів у напрямку течії. Керування цими процесами можна здійснювати за допомогою зміни ступеню сумісності компонентів суміші на межі поділу фаз. Компатибілізатори – це речовини, що покращують сумісність. Процес компатибілізації – явище, що дозволяє модифікувати властивості розплавів сумішей полімерів за рахунок зміни їх морфології [1-2].

Багато досліджень у хімічній технології зводяться до розв'язання задач, які спрямовані на пошук оптимальних умов перебігу процесів або на оптимальний вибір складу багатокомпонентних систем. Дані літератури (зокрема, [3-4]) свідчать, що суміші з кількістю компонентів більше чотирьох майже не мають практичного застосування. Науковий та практичний інтерес представляють в основному три- та чотирикомпонентні системи. Розглянемо задачу оптимізації складу чотирикомпонентної полімерної композиції при реалізації специфічного волокноутворення. Першим етапом розв'язання є чітке формулювання задачі оптимізації, а також її перетворення та спрощення з метою зведення до зручного для подальшого розв'язання вигляду.

**Результати та їх обговорення.** Для оптимізації вмісту багатокомпонентних систем удаються до діаграм склад-властивість [3-4]. Для чотирикомпонентної суміші характерна умова  $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$  тому, що концентрація компонентів суміші нормується.  $x_1, x_2, x_3, x_4$  – це відповідно вмісти компонентів суміші.

В результаті планування експерименту, отримуємо множину точок факторного простору, в яких необхідно провести досліди. Маючи результати експериментів, математичну модель задачі будуємо за методом найменших квадратів.

Досліджуємо чотирикомпонентну сумішеву систему, яка складається із двох полімерів (волокноутворюючий – поліпропілен (ПП) та матричний – співполіамід (СПА) та двох добавок (компатибілізатор та модифікуюча нанодобавка). Вмісти компонентів суміші:  $x_1$  – вміст ПП;  $x_2$  – вміст СПА;  $x_3$  – вміст компатибілізатора;  $x_4$  – вміст нанодобавки. На вміст компонентів в суміші накладено певні обмеження.

Контроль якості отриманого полімерного композиту відбувається за наступними показниками:  $y_1$  – середній діаметр мікрволокон;  $y_2$  – масова частка безперервних волокон;  $y_3$  – фільтерна витяжка.

Математична модель задачі, отримана із застосуванням вищеописаних підходів, має вигляд [5]:

$$y_1 = 3.12 \cdot x_1 + 3.16 \cdot x_2 + 3.09 \cdot x_3 + 1.04 \cdot x_4 + 3.24 \cdot x_1 \cdot x_2 + 3 \cdot x_1 \cdot x_3 - \\ - 3.23 \cdot x_1 \cdot x_4 - 24.5 \cdot x_2 \cdot x_3 - 2.42 \cdot x_2 \cdot x_4 - 4.7 \cdot x_3 \cdot x_4 - 74.03 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 - \\ - 16.3 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_4 + 0.54 \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot x_4 + 151.26 \cdot x_2 \cdot x_2 \cdot x_4$$

$$y_2 = 63.9 \cdot x_1 + 61.5 \cdot x_2 + 64.2 \cdot x_3 + 48.7 \cdot x_4 + 73 \cdot x_1 \cdot x_2 + 69.1 \cdot x_1 \cdot x_3 + \\ + 92.2 \cdot x_1 \cdot x_4 + 152.7 \cdot x_2 \cdot x_3 + 49.1 \cdot x_2 \cdot x_4 + 149.5 \cdot x_3 \cdot x_4 + 1764 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 - \\ - 89 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_4 + 34.7 \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot x_4 + 379.1 \cdot x_2 \cdot x_2 \cdot x_4$$

$$y_3 = 8365.5 \cdot x_1 + 8344.1 \cdot x_2 + 8460.2 \cdot x_3 + 9780.7 \cdot x_4 + 8613 \cdot x_1 \cdot x_2 + 8599 \cdot x_1 \cdot x_3 + \\ + 11149 \cdot x_1 \cdot x_4 + 36824 \cdot x_2 \cdot x_3 + 13952 \cdot x_2 \cdot x_4 + 20227 \cdot x_3 \cdot x_4 + 168363 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 + \\ + 18664 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_4 + 4166 \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot x_4 - 311057 \cdot x_2 \cdot x_2 \cdot x_4$$

$$0.2 \leq x_1 \leq 0.35$$

$$0.65 \leq x_2 \leq 0.8$$

$$0.001 \leq x_3 \leq 0.01$$

$$0.01 \leq x_4 \leq 0.04$$

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$$

Маємо на меті здійснити багатокритеріальну оптимізацію системи, що являє собою процес одночасної оптимізації кількох конфліктуючих між собою цільових функцій в певній області визначення.

В загальному випадку задачу багатокритеріальної оптимізації формулюють наступним чином [6], [7]:

$$\min_{\vec{x}} \{f_1(\vec{x}), f_2(\vec{x}), \dots, f_k(\vec{x})\}, \quad \vec{x} \in S$$

де  $f_i : R^n \rightarrow R$  - це  $k$  ( $k \geq 2$ ) цільових функцій.

(при цьому цільові функції, що досліджуються на максимум, перетворюють на функції, що досліджуються на мінімум, за наступною формулою  $\min(y) = -\max(y)$ ).

Вектор розв'язків  $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$  належить до непорожньої області визначення  $S$ .

Задача багатокритеріальної оптимізації здійснює пошук вектора змінних, що буде задовольняти накладеним обмеженням й оптимізувати векторну функцію, елементи якої відповідають цільовим функціям. Дані функції створюють математичний опис критерію задовільності й, майже завжди, взаємно конфліктують. Тож, «оптимізувати» – це знайти розв'язок, при якому значення цільових функцій стали б прийнятними для постановки задачі.

В нашому випадку задача багатокритеріальної оптимізації матиме вигляд:

$$y_1 = 3.12 \cdot x_1 + 3.16 \cdot x_2 + 3.09 \cdot x_3 + 1.04 \cdot x_4 + 3.24 \cdot x_1 \cdot x_2 + 3 \cdot x_1 \cdot x_3 - \\ - 3.23 \cdot x_1 \cdot x_4 - 24.5 \cdot x_2 \cdot x_3 - 2.42 \cdot x_2 \cdot x_4 - 4.7 \cdot x_3 \cdot x_4 - 74.03 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 - \\ - 16.3 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_4 + 0.54 \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot x_4 + 151.26 \cdot x_2 \cdot x_2 \cdot x_4 \rightarrow \min$$

$$y_2 = 63.9 \cdot x_1 + 61.5 \cdot x_2 + 64.2 \cdot x_3 + 48.7 \cdot x_4 + 73 \cdot x_1 \cdot x_2 + 69.1 \cdot x_1 \cdot x_3 + \\ - 89 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_4 + 34.7 \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot x_4 + 379.1 \cdot x_2 \cdot x_2 \cdot x_4 \rightarrow \max$$

$$+11149 \cdot x_1 \cdot x_4 + 36824 \cdot x_2 \cdot x_3 + 13952 \cdot x_2 \cdot x_4 + 20227 \cdot x_3 \cdot x_4 + 168363 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 + \\ + 18664 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_4 + 4166 \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot x_4 - 311057 \cdot x_2 \cdot x_2 \cdot x_4 \rightarrow \max$$

$$0.2 \leq x_1 \leq 0.35$$

$$0.65 \leq x_2 \leq 0.8$$

$$0.001 \leq x_3 \leq 0.01$$

$$0.01 \leq x_4 \leq 0.04$$

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$$

При розробці методів розв'язання багатокритеріальних задач потрібне вирішення ряду специфічних проблем [6-7].

1. Проблема нормалізації. Окремі критерії, як правило мають різні масштаби та одиниці виміру, при цьому є неможливе їх безпосереднє порівняння.

2. Проблема врахування пріоритету критеріїв виникає, коли у критеріїв різна значимість. У цьому випадку потрібно віднайти математичне визначення пріоритету й ступінь його впливу на вирішення задачі.

3. Проблема визначення області компромісу виникає при вирішенні багатовимірних нелінійних задач, тому для їх вирішення потрібно використовувати методи, що гарантують ефективне рішення.

Усі складні задачі прийняття рішень є багатоцільовими, тому що при виборі кращого варіанту потрібно врахувати багато різних вимог й серед них зустрічаються ті, що суперечать одна одній. Тож часто багатоцільову задачу намагаються звести до одноцільової. З вихідної багатокритеріальної задачі у відповідності з обраним методом, формується задача, до складу якої входить один критерій, а до вихідної системи обмежень додається одне або кілька додаткових обмежень.

Очевидно, що не має універсального способу розв'язку багатокритеріальних задач математичного програмування. Тому, вибір й коректне використання будь-якого із представлених способів лишається за суб'єктом прийняття рішень.

Скаляризація багатокритеріальної задачі

Найбільш поширеним евристичним прийомом вирішення тієї чи іншої конкретної багатокритеріальної задачі є її зведення до рішення деякої скалярної (однокритеріальної) задачі, цільова функція якої найчастіше являє собою певну комбінацію наявних критеріїв  $f_1, f_2, \dots, f_m$ .

Такий прийом носить назву скаляризації багатокритеріальної задачі. Залежно від способу комбінування наявних декількох критеріїв в єдиний скалярний, отримуємо той чи інший тип скаляризації, який обираємо виходячи із суті розв'язуваної задачі і наявності додаткової інформації про переваги.

Найпростіший спосіб скаляризації заснований на використанні так званої лінійної згортки критеріїв:

$$F(x) = \sum_{i=1}^m \alpha_i \cdot f_i(x) \rightarrow \min$$

$$\alpha_i \geq 0, i = 1, \dots, m, \sum_{i=1}^m \alpha_i = 1$$

На практиці процес скаляризації починають з підбору коефіцієнтів лінійної згортки, тобто чисел  $\alpha_i, i = 1, \dots, m$ . Ці числа трактують, як якісь «ваги» або «коефіцієнти важливості» відповідних критеріїв, так що більш важливому з них призначають більший коефіцієнт в лінійній згортці критеріїв, а менш важливому менший.

Даний метод зручний у використанні, бо дозволяє зберегти лінійність вихідних функцій. Іншими словами, коли вихідні критерії лінійні, тоді результуючий критерій також буде лінійним.

Зведемо багатокритеріальну задачу до однокритеріальної за допомогою методу лінійної згортки. Задаємо вагові коефіцієнти, які визначають ступінь важливості кожного критерію:  $\alpha_1 = 0.34$ ;  $\alpha_2 = 0.33$ ;  $\alpha_3 = 0.33$ .

Враховуючи, що всі цільові функції потрібно мінімізувати, для цього ті функції, що досліджуються на максимум були перетворені на функції, що досліджуються на мінімум, за наступною формулою  $\min(y) = -\max(y)$ .

Мінімізуємо лінійну комбінацію цільових функцій, тобто розв'язуємо задачу:

$$F = \alpha_1 \cdot y_1 + \alpha_2 \cdot y_2 + \alpha_3 \cdot y_3 \rightarrow \min$$

Одержуємо математичну модель задачі однокритеріальної оптимізації наступного вигляду:

$$\begin{aligned} F = & -0.4750 \cdot x_1 - 0.4095 \cdot x_2 - 0.5421 \cdot x_3 - 2.9493 \cdot x_4 - 0.5153 \cdot x_1 \cdot x_2 - \\ & - 0.7193 \cdot x_1 \cdot x_3 - 8.0168 \cdot x_1 \cdot x_4 - 39.0697 \cdot x_2 \cdot x_3 - \\ & - 7.9289 \cdot x_2 \cdot x_4 - 13.2600 \cdot x_3 \cdot x_4 - 148.8703 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 - 22.4162 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_4 - \\ & - 1.2639 \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot x_4 + 262.3487 \cdot x_2 \cdot x_2 \cdot x_4 \rightarrow \min \end{aligned}$$

$$0.2 \leq x_1 \leq 0.35$$

$$0.65 \leq x_2 \leq 0.8$$

$$0.001 \leq x_3 \leq 0.01$$

$$0.01 \leq x_4 \leq 0.04$$

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$$

Всі описані дії реалізуються програмно у спеціально створеному програмному додатку [8], [9]. Коефіцієнти змінних задачі ( $y_1, y_2, y_3$ ) зчитуються із файлу *y.txt* (рис.1).

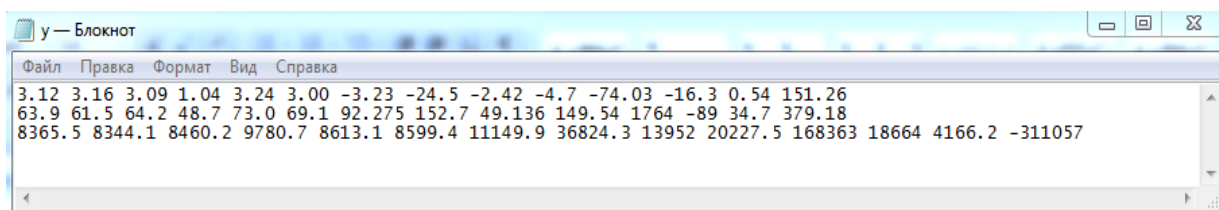
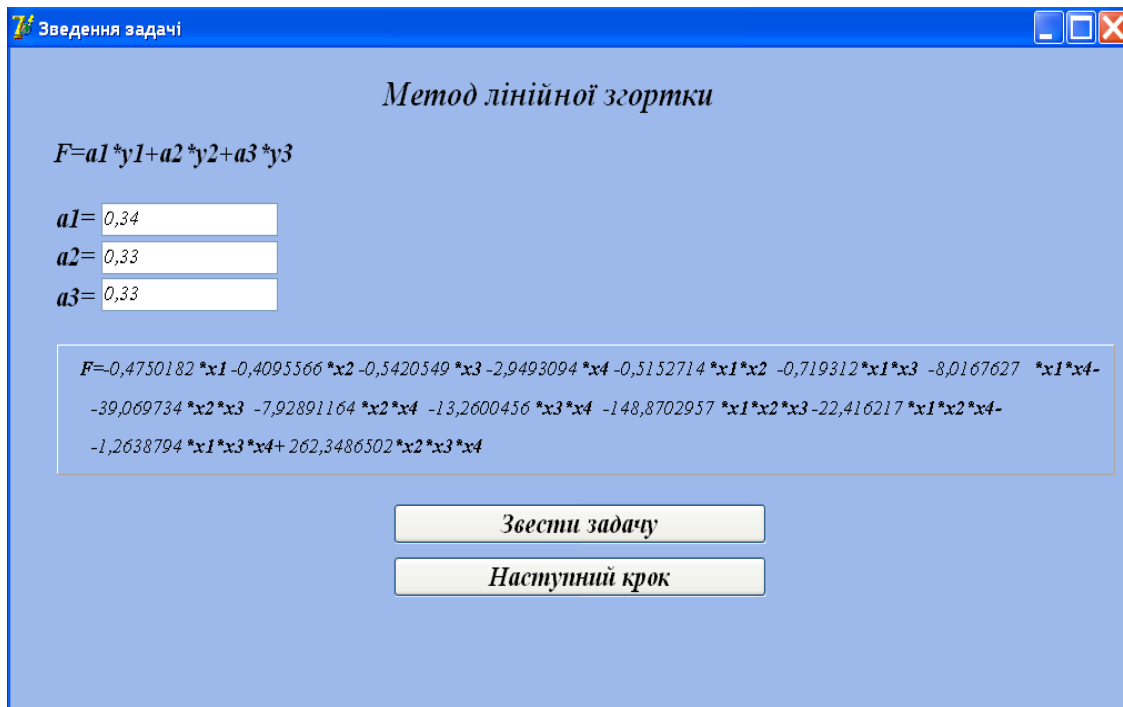


Рис.1. Файл *y.txt* – коефіцієнти математичної моделі

Вагові коефіцієнти згортки задаються на формі. При натисненні кнопки «Звести задачу» на формі з'явиться однокритеріальна задача, що була отримана в результаті обчислень (рис. 2)



Зведення задачі

Метод лінійної згортки

$$F = a1 * y1 + a2 * y2 + a3 * y3$$

$a1 = 0,34$

$a2 = 0,33$

$a3 = 0,33$

$$F = -0,4750182 * x1 - 0,4095566 * x2 - 0,5420549 * x3 - 2,9493094 * x4 - 0,5152714 * x1 * x2 - 0,719312 * x1 * x3 - 8,0167627 * x1 * x4 - 39,069734 * x2 * x3 - 7,92891164 * x2 * x4 - 13,2600456 * x3 * x4 - 148,8702957 * x1 * x2 * x3 - 22,416217 * x1 * x2 * x4 - 1,2638794 * x1 * x3 * x4 + 262,3486502 * x2 * x3 * x4$$

Звести задачу

Наступний крок

Рис.2. Форма працюючої програми з результатами зведення задачі

**Висновки.** Реалізація специфічного волокноутворення для чотирьохкомпонентної полімерної суміші являє великий науковий і практичний інтерес, оскільки дає можливість отримувати мікрволокна з унікальними властивостями. Знання оптимального складу суміші дасть змогу керувати процесом волокноутворення. Математичною моделлю процесу є багатокритеріальна задача умовної оптимізації, яка є надзвичайно складною для розв'язання. Отримана в результаті проведених досліджень однокритеріальна задача є значно простішою і може бути в подальшому розв'язана одним з відомих методів. Це є предметом подальших наукових досліджень.

#### Список використаних джерел

1. Глубіш П. А., Ірклеї В. М., Цебрєнко М. В. та ін. «Високотехнологічні конкурентоспроможні і екологічноорієнтовані волокнисті матеріали та вироби з них» - К.: «Арістей», 2007, 263 с.
2. Цебрєнко М.В. Ультратонкие синтетические волокна. - М.: Химия, 1991. - 214с.
3. Зедгенідзе И. Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем, М., «Наука», 1976.
4. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. – М.: Высшая школа, 1985. – 328 с.

5. Резанова В.Г. Дослідження властивостей чотирикомпонентних систем методом математичного моделювання / К.: Вісник КНУТД. – 2014. – № 3. – С. 113-120.
6. Васильев Ф. П. Методы оптимизации – М.: Факториал Пресс, 2002. – 415 с.
7. Лотов А. В., Поспелова И. И. Конспект лекций по теории и методам многокритериальной оптимизации / А. В. Лотов, И. И. Поспелова– М.: ВМиК МГУ, 2006. – 130 с.
8. Алексеев М. О. Delphi. Основы програмування / Алексеев М. О., Кандзюба С. П., Коротенко Л. М., Шевцова О. С. – Д.: Державний ВНЗ «Національний гірничий університет», 2012. – 272 с.
9. Культин Н. Основы программирования в Delphi 7. С-Пб.: БХВ-Петербург, 2011. – 416 с.

## **ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЕЙ ПОЛИМЕРОВ**

РЕЗАНОВА В.Г.

*Киевский национальный университет технологий и дизайна*

**Цель.** Поиск подходов к решению задачи оптимизации состава четырехкомпонентных смесей полимеров. Преобразование и упрощение задачи для обеспечения возможности дальнейшего решения. Создание специального программного обеспечения.

**Методика.** В постановке задачи используется математическая модель специфического волокнообразования, построенная по методу наименьших квадратов на основе результатов планирования эксперимента. Дальнейшее преобразование и упрощение задачи осуществляется методом линейной свертки. Программное обеспечение разрабатывалось языке Object Pascal в среде Delphi.

**Результаты.** Разработано программное обеспечение для преобразования задачи оптимизации состава четырехкомпонентных смесей полимеров при реализации специфического волокнообразования. Оно позволяет упрощать многокритериальную задачу оптимизации, сводя ее к однокритериальной.

**Научная новизна.** Разработанное программное обеспечение позволяет преобразовывать задачу оптимизации состава четырехкомпонентных смесей полимеров к виду, удобному для дальнейшего решения. В свою очередь, решение задачи оптимизации является составной частью теоретического исследования специфического волокнообразования.

**Практическая значимость.** Многокритериальная задача условной оптимизации является чрезвычайно сложной для решения, тогда как преобразованная однокритериальная задача может быть в дальнейшем решена одним из известных методов.

**Ключевые слова:** *волокнообразование, многокритериальная задача, однокритериальная задача, условная оптимизация, программное обеспечение.*

## TRANSFORMATION OF OPTIMIZATION PROBLEM IN THE STUDY OF FOUR-COMPONENT POLYMER MIXTURE

REZANOVA V.G.

*Kyiv National University of Technology and Design*

**Purpose.** Search for approaches to solving the problem of optimization the composition of the four-component mixtures of polymers. Conversion and simplifying of the problem for opportunity of further solving. Creation of a special software.

**Method.** In the formulation of the problem is used a mathematical model of the specific fiber-formation, built by the method of least squares on the basis of the results of experimental planning. Further transformation and simplification of problems was carried out by the method of linear convolution. The software was developed on Object Pascal language in Delphi environment.

**Results.** The software to transform the problem of optimizing the composition of the four-component polymer mixtures at the implementation of specific fiber-formation has been developed. It allows to simplify multi-criteria optimization problem by reducing it to a one-criterion.

**Scientific novelty.** The developed software allows you to transform the problem of optimizing the composition of the four-component polymer mixtures to a form, suitable for further solution. In turn, the solution of the problem of optimization is an integral part of the theoretical study of specific fiber-formation.

**The practical significance.** Multi-criteria constrained optimization problem is extremely difficult to solve, while the transformed one-criterion problem can be solved in the future by one of the known methods.

**Keywords:** *fiber-formation, multi-criteria problem, one-criterion problem, conditional optimization, software.*