1. Сокольская А. М — Каталитические реакции в жидкой фазе. Алма-Ата, Наука, 1972, с. 317.
2. Павленко Н. В., Трипольский А. И., Голодец Г. И., Тельбиз Г. М. — Кин. и кат., 1985, т. 26, с. 115.
3. Trlpolsky A. J., Pavlenko N. V., Talbiz G. N., Golode G. J. — React. kin. and Catal. lett., 1983, vol. 3, № 4, p. 367.
4. Поладян Е. А., Гукасян П. С., Налбандян А. Б. — ДАН СССР, 1984, т. 274, № 6, с. 1417.
5. Поладян Е. А., Гукасян П. С., Налбандян А. Б. — Арм. хим. ж., 1985, т. 38, № 4, с. 268.
6. Поладян Е. А., Гукасян П. С., Налбандян А. Б. — Арм. хим. ж., 1985, т. 38, № 8, с. 507.
7. Поладян Е. А., Гукасян П. С., Налбандян А. Б. — Арм. хим. ж., 1985, т. 38, № 8, с. 510.

Армянский химический журнал, т. 40, № 4, стр. 249—251 (1987 г.)

УДК 54—148+519.24

ОПТИМИЗАЦИЯ МНОГОФАКТОРНЫХ ПРОЦЕССОВ СО МНОГИМИ ПАРАМЕТРАМИ ВЫХОДА

А. Л. САРКИСЯН, С. Л. МКРТЧЯН, А. В. АГАСАРЯН и С. А. ДАДАЯН

Научно-производственное объединение «Полимерклей»
им. Э. Л. Тер-Газаряна, Кировакан

Поступило 25 VII 1985

При оптимизации многофакторных процессов со многими параметрами выхода обычно поступают следующим образом. Оптимизируют каждый параметр в отдельности, получают адекватное уравнение регрессии, а затем ставят и решают задачу линейного или нелинейного программирования. Такое решение вопроса требует большого числа экспериментов. С целью сокращения числа опытов в работе [1] был предложен метод квазикрутого восхождения. Но этот метод, во-первых, дает эффективные результаты, когда число параметров выхода равно двум, во-вторых, неоднозначно определяет направление оптимизирующего вектора.

В настоящей работе предложен метод оптимизации многофакторных процессов со многими параметрами выхода, позволяющий сравнительно малым числом опытов решить поставленную задачу.

Пусть в замкнутой ограниченной области G n -мерного пространства x^n заданы непрерывные функции $f_i(x_1, \dots, x_n)$, $1 \leq i \leq k$. Тогда эти функции достигают своих наибольших и наименьших значений в области G [2]. Надо найти точку $(x_1^0, \dots, x_n^0) \in G$ такую, что: $f_i(x_1^0, \dots, x_n^0) \geq Y_i$, $1 \leq i \leq m$ и $f_j(x_1^0, \dots, x_n^0) \leq Y_j$, $m+1 \leq j \leq k$. Пусть $\max f_i(x_1, \dots, x_n) = M_i \geq Y_i$, $1 \leq i \leq m$ и $\min f_j(x_1, \dots, x_n) = m_j \leq Y_j$, $m+1 \leq j \leq k$. Составим вспомогательную функцию

$\Phi(x_1, \dots, x_n)$, равную сумме относительных отклонений функций $f_t(x_1, \dots, x_n)$, $1 \leq t \leq k$, от соответствующих экстремумов:

$$\begin{aligned} \Phi(x_1, \dots, x_n) &= \sum_{i=1}^m \frac{M_i - f_i(x_1, \dots, x_n)}{M_i} + \sum_{j=m+1}^k \frac{f_j(x_1, \dots, x_n) - m_j}{m_j} = \\ &= 2m - k - \left[\sum_{i=1}^m \frac{f_i(x_1, \dots, x_n)}{M_i} - \sum_{j=m+1}^k \frac{f_j(x_1, \dots, x_n)}{m_j} \right] = \\ &= 2m - k - \varphi(x_1, \dots, x_n). \end{aligned}$$

Очевидно, что чем меньше значение функции $\Phi(x_1, \dots, x_n)$, тем ближе значение функции $f_t(x_1, \dots, x_n)$, $1 \leq t \leq k$ к требуемым. Нахождение минимума функции $\Phi(x_1, \dots, x_n)$ равносильно нахождению максимума функции.

$$\varphi(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^m \frac{f_i(x_1, \dots, x_n)}{M_i} - \sum_{j=m+1}^k \frac{f_j(x_1, \dots, x_n)}{m_j}.$$

Так как функция $\varphi(x_1, \dots, x_n)$ непрерывна и ограничена сверху числом $2m - k$ в замкнутой ограниченной области G , то она достигает там своего наибольшего значения [2]. Для нахождения максимума функции $\varphi(x_1, \dots, x_n)$ можно использовать обычные методы оптимизации. Если решение поставленной задачи существует, то в процессе оптимизации мы получим это решение или же попадем в „почти стационарную“ область, где надо будет ставить эксперименты по планам более высокого порядка для нахождения максимума функции $\varphi(x_1, \dots, x_n)$. Так как функция $\varphi(x_1, \dots, x_n)$ может иметь несколько локальных максимумов в области G , то целесообразно процесс оптимизации провести несколько раз с различных начальных планов.

Может случиться, что мы найдем максимум функции $\varphi(x_1, \dots, x_n)$, но некоторые параметры в этой точке не будут удовлетворять нашим требованиям. В этом случае по имеющимся экспериментам надо получить уравнение регрессии, поставить и решить задачу линейного или нелинейного программирования. Если число опытов недостаточно для получения уравнений регрессии, то в «почти стационарной» области надо поставить дополнительные опыты.

Описанный метод дает ряд преимуществ перед общезвестными. Во-первых, резко сокращается число экспериментов, что становится особенно наглядным при большом числе параметров выхода. Во-вторых, метод обладает большой адаптивностью, т. к. на каждом шагу можно поменять те значения M_i и m_j , которые были выбраны неудачно. В-третьих, если для какого-то i_0 , $1 \leq i_0 \leq m$, функция чрезмерно увеличивается, то можно начиная с некоторого шага положить $Y_{i_0} = m_{i_0}$ и рассматривать её на минимум. Аналогично для некоторого j_0 , $m+1 \leq j_0 \leq k$, если $f_{j_0}(x_1, \dots, x_n)$ чрезмерно уменьшается, положим $M_{j_0} = Y_{j_0}$ и будем рассматривать её на максимум. Это особенно важно при наличии ограничений типа $\alpha_t \leq f_t(x_1, \dots, x_n) \leq \beta_t$.

Описанный алгоритм применялся при оптимизации клея ГИПК-154, имеющего следующий состав: смола эпоксинодиановая марки ЭД-20 (x_1), низкомолекулярный полиамид марки Л-20 (x_2), фенилглицидиловый эфир (x_3), меламин (x_4). Параметрами оптимизации служили прочности на сдвиг при 20° (f_1), 50° (f_2), 100° (f_3), 200° (f_4), прочность на изгиб при склеивании образцов из стали марки Ст-3 (f_5). Были поставлены следующие требования: $f_1 \geq 20$ МПа, $f_2 \geq 15$ МПа, $f_3 \geq 6$ МПа, $f_4 \geq 2,5$ МПа, $18 \text{ кн/м} \leq f_5 \leq 30 \text{ кн/м}$.

Априори были выбраны следующие пределы варьирования факторов:

$$80 \leq x_1 \leq 120$$

$$30 \leq x_2 \leq 50$$

$$15 \leq x_3 \leq 25$$

$$1 \leq x_4 \leq 9$$

Функцию $\varphi(x_1, x_2, x_3, x_4)$ максимизировали симплекс-методом с нерегулярными симплексами [3]. В качестве начального был выбран следующий симплекс:

№	x_1	x_2	x_3	x_4	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5
1	110	42,89	21,02	5,632	17,6	16,8	4,5	1,14	31,5
2	90	42,89	21,02	5,632	21,8	9,15	4,9	1,33	31,2
3	100	34,22	21,02	5,632	18,2	11,3	2,3	1,28	36,2
4	100	40	16,94	5,632	18,4	9,6	4,5	2,3	33,3
5	100	40	20	2,472	19,2	14,9	6,4	1,8	42,8

Так как значения f_5 для всех вершин симплекса больше требуемого, то параметр f_5 минимизировался, а остальные параметры максимизировались. Поэтому функция $\varphi(x_1, x_2, x_3, x_4)$ имела вид:

$$\varphi(x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{f_1(x_1, x_2, x_3, x_4)}{f_{1 \max}} + \frac{f_2(x_1, x_2, x_3, x_4)}{f_{2 \max}} + \frac{f_3(x_1, x_2, x_3, x_4)}{f_{3 \max}} + \frac{f_4(x_1, x_2, x_3, x_4)}{f_{4 \max}} - \frac{f_5(x_1, x_2, x_3, x_4)}{f_{5 \min}},$$

где

$$f_{1 \max} = 20 \text{ МПа}, \quad f_{2 \max} = 15 \text{ МПа}, \quad f_{3 \max} = 6 \text{ МПа},$$

$$f_{4 \max} = 2,5 \text{ МПа}, \quad f_{5 \min} = 18 \text{ кн/м}.$$

После трех шагов, сделав всего 14 опытов, получили следующий состав: $x_1 = 97,94$, $x_2 = 41,05$, $x_3 = 19,49$, $x_4 = 4,53$. Параметры выхода имели следующие значения: $f_1 = 21,9$ МПа, $f_2 = 16,3$ МПа, $f_3 = 9,3$ МПа, $f_4 = 3,1$ МПа, $f_5 = 15,4$ кн/м.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ясаков А. И. — Зав. лаб., № 1, 1976.
2. Ильин В. А., Садовничий В. А., Сендов Б. Х. — Математический анализ, М., Наука, 1980, с. 558.
3. Овселян В. С. — Симплексный метод с нерегулярными симплексами и его применение для цифровой оптимизации и планирования экспериментов, Труды «НИИ Авто-матика», вып. 43, с. 27—38, Кировакан, 1979.