

УДК 630\*841.1

***Ю.А. Варфоломеев, М.А. Амбросевич***

Варфоломеев Юрий Александрович родился в 1953 г., окончил в 1975 г. Архангельский лесотехнический институт, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой инженерных конструкций и архитектуры Архангельского государственного технического университета, заслуженный деятель науки РФ. Имеет около 300 научных трудов в области обеспечения долговечности древесины в строительстве экологически безопасными методами.



Амбросевич Мария Адольфовна родилась в 1973 г., окончила в 1996 г. Поморский государственный университет, старший преподаватель, и.о. заведующего кафедрой математики Архангельского государственного технического университета. Имеет 4 публикации в области алгебраических систем и математического моделирования процессов биопоражения древесины.



**ОПТИМИЗАЦИЯ РЕЦЕПТУРЫ АНТИСЕПТИКОВ ПО КРИТЕРИЮ СТОИМОСТИ С УЧЕТОМ ЗАЩИЩАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ**

На основе алгоритма симплекс-метода разработана математическая модель оптимизации рецептуры многокомпонентных антисептиков с учетом их стоимости и защищающей способности; подобрана оптимальная рецептура трехкомпонентного антисептика на базе соединения четвертичного аммония.

антисептик, рецептура, испытания, содержание компонентов, оптимизация.

Рецептуры новых антисептиков с улучшенными эксплуатационными и экологическими свойствами создают на основе результатов микологических испытаний деревянных образцов по методике лаборатории защиты древесины ЦНИИМОД [6], разработанной Т.М. Поромовой.

Опыты проводят на образцах размером  $5 \times 15 \times 180$  мм, изготовленных из заболонной древесины сосны. Их опускают в водные растворы разрабатываемых антисептиков, подсушивают и инфицируют суспензией спор чистых культур плесневых и деревоокрашивающих грибов, которые наиболее распространены на территории России. Инфицированные образцы выдерживают в течение 50 сут в герметичных эксикаторах при комнатной температуре. Через каждые 10 сут производят визуальную оценку обрастания их поверхности грибами. Обрастание выражают в долях от общей площади поверхности образца.

При создании новых многокомпонентных антисептиков (препаратов) на основе явления синергизма основной задачей является подбор оптимального соотношения ингредиентов.

Цель настоящей работы – решая задачу математического программирования с использованием аппроксимации экспериментальных данных по оценке биологической активности многокомпонентного препарата с различным сочетанием ингредиентов, подобрать их оптимальное соотношение с учетом стоимости и защищающей способности.

Результаты лабораторных микологических испытаний [6] трехкомпонентного препарата на основе соединения четвертичного аммония в сочетании с двумя другими составляющими представлены в табл. 1.

Рассмотрим общую задачу оптимизации рецептуры препарата, состоящего из  $n$  компонентов  $k_1, k_2, \dots, k_n$ . Состав препарата характеризуется долевым содержанием  $x_1, x_2, \dots, x_n$  ингредиентов. При этом должны выполняться следующие ограничения:  $m_j \leq x_j \leq M_j, j = \overline{1, n}$  ( $m_j, M_j$  – соответственно минимально и максимально допустимое содержание соответствующего компонента  $k_j$  в препарате). Кроме того, должно соблюдаться условие

$$\sum_{j=1}^n x_j = 1.$$

Таблица 1

Порядковый номер рецептуры	Соотношение компонентов в антисептике			Сохранность поверхности образцов через период времени, сут				
	$k_1$	$k_2$	$k_3$	10	20	30	40	50
1	0,640	0,110	0,250	0,970	0,910	0,890	0,870	0,860
2	0,620	0,120	0,260	0,990	0,950	0,880	0,875	0,870
3	0,650	0,110	0,240	0,965	0,930	0,875	0,865	0,855
4	0,670	0,100	0,230	0,970	0,910	0,875	0,825	0,810
5	0,600	0,130	0,270	0,955	0,900	0,850	0,810	0,790
6	0,680	0,090	0,230	0,860	0,840	0,820	0,800	0,780
7	0,640	0,100	0,260	0,960	0,920	0,875	0,860	0,850

Обозначим  $c_1, c_2, \dots, c_n$  – цена за 1 кг компонентов  $k_1, k_2, \dots, k_n$ . Тогда стоимость 1 кг многокомпонентного антисептика составит

$$\sum_{j=1}^n c_j x_j.$$

Защищающую способность антисептиков с различными рецептурами определяют в моменты времени  $t_1, t_2, \dots, t_m$ . Для всех препаратов в момент времени  $t = 0$  выполняется условие  $y = 1$  ( $y$  – показатель сохранности). Рецептуры антисептиков характеризуются разными значениями показателя  $y$  ( $0 \leq y \leq 1$ ). Обозначим  $b_i$  – минимально допустимая сохранность препарата в момент времени  $t_i, i = \overline{1, m}$ .

С учетом всех указанных выше ограничений необходимо составить рецептуру препарата, имеющего минимальную стоимость.

Поставленная задача носит одновременно динамический (временной) и оптимизационный характер. Для ее решения в момент времени  $t$  используем методы математического программирования [2–4].

При построении модели исходим из того, что сохранность антисептированного деревянного образца зависит от факторов  $x_j$ ,  $j = \overline{1, n}$  и времени, прошедшего с момента начала испытаний (инфицирования грибами). Таким образом,

$$y = F(x_1, x_2, \dots, x_n, t).$$

Учитывая, что в процессе лабораторных или производственных испытаний [6] контроль за количественными показателями защищающей способности препаратов осуществляют лишь в дискретные моменты времени  $t_i$ ,  $i = \overline{1, m}$ , строим следующую систему функций:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = F|_{t=t_i}(x_1, x_2, \dots, x_n, t).$$

При этом  $f_0 = F|_{t=0} = 1$ .

Построение функции  $F$  (соответственно и функций  $f_i$ ) производим на основании обработки экспериментальных данных.

При известных аналитических выражениях для  $f_0, f_1, \dots, f_m$  построение модели сводится к следующей задаче оптимизации:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n c_j x_j \rightarrow \min ; \\ f_0(x_1, x_2, \dots, x_n) = 1; \\ f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq b_i, i = \overline{1, m}; \\ \sum_{j=1}^n x_j = 1; \\ m_j \leq x_j \leq M_j, j = \overline{1, n}. \end{cases}$$

Если все функции  $f_i$  линейны, то рассматриваемая модель является моделью задачи линейного программирования и может быть решена с использованием алгоритма симплекс-метода [4].

Анализ данных микологических испытаний антисептированных деревянных образцов [6], проведенный методом конечных разностей [1, 5], дает основание с достаточно высокой точностью в качестве аппроксимирующих функций  $f_i$  выбрать линейные зависимости.

Принимая гипотезу о линейной форме связи, находим коэффициенты соответствующего выражения по методу наименьших квадратов (МНК) [4]. Целесообразность применения этого метода при решении подобных задач обусловлена тем, что общий вид зависимости можно определить на основании теоретического анализа, а в ходе экспериментальных исследований требуется установить значения некоторых параметров этой зависимости. Кроме того, весьма типичной для практики является задача аналитического сглаживания данных результатов эксперимента (с помощью кривой). Для

данного вида функциональной зависимости  $\hat{y}_t$ , необходимо так подобрать параметры, ее определяющие, чтобы по возможности более точно отразить наблюдаемую в экспериментах связь. Решая эту задачу, следует сгладить незакономерные случайные отклонения, связанные с неизбежными погрешностями экспериментов. Для установления адекватности сглаживания проверяется ряд свойств остаточной компоненты  $\varepsilon$ , приведенных в табл. 2.

Выбор критериев обусловлен их реализацией в широко используемых пакетах анализа данных.

О точности сглаживания можно судить по среднему относительному коэффициенту аппроксимации  $\bar{\varepsilon}_{\text{от}} = \frac{1}{m} \sum_{t=1}^m \left| \frac{y_t - \hat{y}_t}{y_t} \right| \cdot 100\%$ , который, как правило, не должен превышать 5 ... 10 % [5].

Показателем качества полученных линейных аппроксимаций  $f_i$  являются совокупные коэффициенты детерминации [1, 5], выражающие степень объясняемости изменения результирующего показателя при изменении влияющих факторов.

Таблица 2

Проверяемое свойство	Предлагаемый статистический показатель
Случайность колебаний уровней	Критерий «пиков»
Соответствие нормальному закону распределения	Критерий Пирсона
Равенство нулю математического ожидания	t – Критерий Стьюдента
Отсутствие существенной автокорреляции остатков	Критерий Дарбина – Уотсона

5

На принятом уровне качества строим модель задачи линейного программирования с целью минимизации стоимости соответствующего многокомпонентного препарата.

Положим, что все функции  $f_i$  линейны, т.е.

$$f_i = a_0 + \sum_{j=1}^n a_j x_j, i = \overline{1, m}.$$

Располагая результатами контрольных замеров  $y$  в моменты времени  $t_i$ ,  $i = \overline{1, m}$  (при  $t = 0$  имеем  $y = 1$ ) для соответствующих рецептов препаратов, найдем коэффициенты  $a_j$  ( $i = \overline{1, m}, j = \overline{1, n}$ ) по методу МНК. При достаточно больших значениях совокупного коэффициента детерминации  $R_i^2$  используем задачу линейного программирования:

$$\sum_{j=1}^n c_j x_j \rightarrow \min ;$$

$$\begin{cases} a_0 C + \sum_{j=1}^n a_j x_j \geq b_i, i = \overline{1, m}; \\ \sum_{j=1}^n x_j = 1; \\ m_j \leq x_j \leq M_j, j = \overline{1, n}. \end{cases}$$

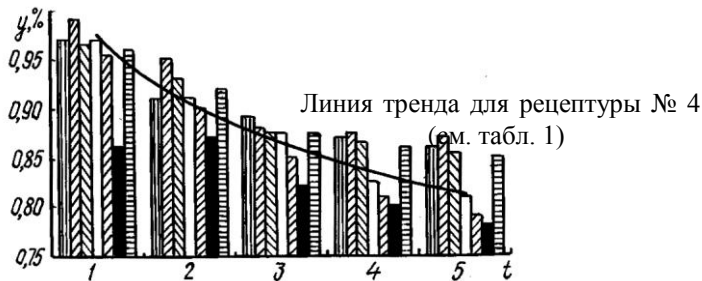
Показателем качества модели является  $\min_{i=1, m} R_i^2$ .

Например, для заданного эксперимента

$$f_{50} = 0,635981 + 0,030956x_1 - 0,033632x_2 + 0,718039x_3.$$

Условные ограничения задачи линейного программирования выбираем по результатам эксперимента, зная динамику показателя  $y$  при различных составах рецептуры препарата.

Современное программное обеспечение позволяет подобрать кривую, «сглаживающую» экспериментальные данные с наибольшим коэффициентом достоверности аппроксимации  $R^2 = 0,98$  (см. рисунок).



Контрольные замеры показали, что у испытанных образцов показатель сохранности  $y = y(t)$  хорошо аппроксимируется логарифмической кривой

$$y = a + b \ln t.$$

Поэтому в качестве «контрольной» выберем кривую

$$y = 0,95 - 0,062 \ln t,$$

которая обеспечивает сохранность 0,95 на 10-е сутки и 0,85 на 50-е сутки. Минимальный показатель сохранности образцов (0,85 после 50 сут испытаний) определен по методике [6]. По контрольной кривой рассчитаны ограничения для 20, 30 и 40 сут (на рисунке – соответственно  $t_i = 2, 3, 4$ ). При этом коэффициент достоверности для имеющихся данных составляет 0,95 ... 0,99.

Дальнейшие исследования устойчивости структуры многокомпонентного препарата можно проводить с применением теории двойственности [2, 4].

Для наработки экспериментальной партии испытываемого препарата были согласованы следующие цены за 1 кг (без учета транспортных затрат): 1-й компонент – 2,78 руб, 2-й – 49,50 руб, 3-й – 33,00 руб. С учетом этого, предложена следующая модель задачи линейного программирования:

$$2,78x_1 + 49,5x_2 + 33x_3 \rightarrow \min .$$

$$\begin{cases} 0,635981 + 0,030956 x_1 - 0,033632 x_2 + 0,718039 x_3 \geq 0,85; \\ 0,946469 - 0,205823 x_1 + 1,605981 x_2 - 0,143462 x_3 \geq 0,95; \\ 0,727359 - 0,002103 x_1 + 1,156027 x_2 + 0,229523 x_3 \geq 0,91; \\ 2,563441 - 1,766637 x_1 - 1,32677 x_2 - 1,678663 x_3 \geq 0,88; \\ 1,673162 - 0,971859 x_1 - 1,015289 x_2 - 0,380545 x_3 \geq 0,86; \\ x_1 + x_2 + x_3 = 1; \\ 0,62 \leq x_1 \leq 0,65; \\ 0,1 \leq x_2 \leq 0,12; \\ 0,24 \leq x_3 \leq 0,26. \end{cases}$$

В результате решения задачи линейного программирования, составленной на основании экспериментальных данных, получено оптимальное содержание (в долях) компонентов в рассматриваемом антисептике:  $x_1 = 0,62$ ,  $x_2 = 0,12$ ,  $x_3 = 0,26$ .

Стоимость 1 кг препарата такой рецептуры составляет 16,24 руб.

#### Выводы

1. На основе алгоритма симплекс-метода разработана математическая модель оптимизации рецептуры многокомпонентных антисептиков, учитывающая их стоимость и защищающую способность.

2. Высокие показатели коэффициента достоверности ( $R > 0,95$ ) и применение теории двойственности подтвердили устойчивость разработанной модели оптимизации при изменении в большом диапазоне показателей биотестирования, количества компонентов и их соотношений в рецептурах антисептиков.

3. При помощи разработанной модели подобрана оптимальная рецептура трехкомпонентного антисептика на базе соединения четвертичного аммония.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д. Прикладная статистика: исследование зависимостей. – М.: Финансы и статистика, 1985. – 487 с.

2. *Гермейер Ю.Б.* Введение в теорию исследования операций. – М.: Наука, 1971. – 383 с.
3. *Демьянов В.Ф., Малоземов В.Н.* Введение в минимакс. – М.: Наука, 1972. – 368 с.
4. *Лесин В.В., Лисовец Ю.П.* Основы методов оптимизации. – М.: МАИ, 1998. – 344 с.
5. *Мостеллер Ф., Тьюки Д.* Анализ данных и регрессия. – М.: Финансы и статистика, 1982. – Вып. 2. – 238 с.
6. *Чащина Л.М., Поромова Т.М.* Методика испытаний защитных средств против деревоокрашивающих и плесневых грибов // Сушка и защита древесины: Науч. тр. / ЦНИИМОД. – 1985. – С. 120–127.

Архангельский государственный  
технический университет

Поступила 26.03.02

*Yu.A. Varfolomeev, M.A. Ambrosevich*

### **Optimization of Preservative Composition according to Cost Criterion on Protective Ability Basis**

Mathematical model of composition optimization based on simplex-method algorithm has been developed for multiple preservatives on cost and protective ability basis; the optimal composition of three-component preservative based on quarternary ammonium compound has been chosen.

