

Optimalizácie zmesi m -látok o n -zložkách pomocou počítača

EVA SŮROVÁ — PAVEL SŮRA — PETER KOHAUT

Súhrn. Program uvedený v článku rieši štyri verzie kombinácie sústavy troch látok, v ktorých sledujeme päť zložiek rozličnej koncentrácie tak, aby sme dostali výslednú zmes najviac podobnú požadovanej látke D. Program v jazyku BASIC je dostupný u autorov článku a možno ho využiť v laboratórnej aj priemyselnej praxi.

V praxi sa často vyskytuje potreba zmiešať m -látok, z ktorých každá obsahuje n -zložiek tak, aby sme dostali zmes zložením čo najviac podobnú požadovanej látke. Z matematickej stránky sa problém orientuje na sústavu m -rovníc o n neznámych, ktorá môže mať jediné riešenie iba v prípade, ak $m = n$. Ak je sledovaných n -zložiek viac ako miešaných látok, je problém nejednoznačný a vhodný miešací pomer $P : Q : R : \dots : Z$ treba hľadať postupom, ktorý sa používa na hľadanie minima funkcie viacerých premenných (v našom prípade zmesi m -látok ide o funkciu $m - 1$ premenných). Pochopiteľne, že s množstvom premenných sa výpočet sťažuje a predlžuje, preto sa ďalej obmedzíme (bez újmy na všeobecnosti) na prípad zmesi 3 látok, A, B, C, o n zložkách, $a_1, a_2, \dots, a_n, b_1, b_2, \dots, b_n, c_1, c_2, \dots, c_n$, ktoré treba zmiešať v pomere $P : Q : R$ tak, aby výsledkom zmiešania bola látka D o zložkách d_1, d_2, \dots, d_n . Za kritérium, do akej miery sa výsledná látka podobá požadovanej, treba vziať metódu najmenších štvorcov, t. j. v našom prípade hľadať minimum výrazu

$$F = \sum_{i=1}^n (d_i - Pa_i - Qb_i - Rc_i)^2, \quad (1)$$

kde F je funkciou dvoch premenných, pretože veličiny P, Q, R sú naviac viazané vzťahom $P + Q + R = 1$.

RNDr. Eva Sůrová, Katedra chémie a technológie sacharidov a potravín, Chemicko-technická fakulta SVŠT, Jánska 1, 812 37 Bratislava.

RNDr. Pavel Sůra, CSc., RNDr. Peter Kohaut, Katedra experimentálnej fyziky, Matematicko-fyzikálna fakulta UK, Mlynská dolina F-2, 842 15 Bratislava.

Ukazuje sa, že minimalizovanie výrazu (1) je výhodné vtedy, ak jednotlivé zložky látok sú percentuálne približne rovnako zastúpené. V opačnom prípade je vhodnejšie, ak zložky 1 až n vstupujú do výrazu (1) s rovnakou štatistickou dôležitosťou, t. j. je výhodnejšie hľadať minimum funkcie

$$F = \sum_{i=1}^n [(d_i - Pa_i - Qb_i - Rc_i)/d_i]^2. \quad (2)$$

Je možné, že sa vyskytne prípad, že máme eminentný záujem na tom, aby jedna zo zložiek (napr. k -ta) bola v zmesi dodržaná čo najpresnejšie. V takom prípade riešime rovnicu

$$d_k - Pa_k - Qb_k - Rc_k = 0, \quad (3)$$

z ktorej vyplýva

$$d_k - Pa_k - Qb_k - (1 - P - Q)c_k = 0$$

$$Q = [d_k - c_k - P(a_k - c_k)]/(b_k - c_k)$$

a potom minimalizujeme výraz

$$F = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^n (d_i - Pa_i - Qb_i - Rc_i)^2, \quad (3a)$$

resp.

$$F = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^n [(d_i - Pa_i - Qb_i - Rc_i)/d_i]^2, \quad (3b)$$

ak chceme zaistiť pre všetky zložky rovnakú štatistickú dôležitosť.

Posledná metóda vedie k tomu, že k -ta zložka v zmesi bude dodržaná presne, pravda, rozptyl ostatných zložiek bude väčší ako v prípade (1), resp. (2).

(Poznámka: Pre zmes 3-látok môžeme požadovať, aby boli presne dodržané 2 zložky, potom ale zastúpenie ostatných $n - 2$ zložiek nijako nemôžeme ovplyvniť.)

Na praktické využitie uvedeného matematického postupu sme vytvorili program pre kalkulátor TI-58/59, resp. program v jazyku BASIC pre mikro-

počítač PMD-85. Kalkulátor TI-58/59, aj keď kapacitou pamäte postačuje, je na tento problém pomalý (výpočet zmesi 3 látok o 5 zložkách trvá asi 3 h), preto uvidíme program v jazyku BASIC aj s jeho vývojovým diagramom, ktorý počítač PMD-85 zvládne pre ten istý prípad (3 látky, 5 zložiek) asi za 4 min. Program je univerzálny, t. j. používateľ má možnosť na pokyn z displeja zvoliť, či chce hľadať riešenie pomocou vzťahu (1) alebo (2), resp. či zvolí metódu podľa rovnice (3) a (3a), ktorú sme označili ako verziu 3.1, alebo podľa (3) a (3b), čo je verzia 3.2. Je písaný tak, že si počítač požadované údaje (t. j. obsahy jednotlivých zložiek a_i , b_i , c_i , d_i ($i = 1$ až n) a verziu, podľa ktorej má počítať) vyžiada od používateľa sám. Spôsob tlačenia výsledkov je zrejmý z ukážkového príkladu, kde je optimalizovaná zmes 3 látok o 5 zložkách všetkými spôsobmi (verzia 1, 2, 3.1 a 3.2). V prípade verzie 3.1 a 3.2 je to prvá zložka, ktorú požadujeme dodržať v zmesi úplne presne. (Pri zadávaní údajov dáme k -te zložky na začiatok údajov.)

Napríklad plynovou chromatografiou sme v troch frakciách získaných destiláciou drevného dechtu zistili obsah 2-hydroxy-3-metylcyklopentén-1-ónu v rozsahu 0,19—10,11 %, gvajakolu 7,22—24,33 %, 4-metylgvajakolu 2,05—9,95 %, 4-etylgvajakolu 2,88—23,96 % a syringolu 8,42—31,67 %. Z týchto frakcií chceme získať výsledný produkt, ktorý by mal zloženie uvedených zlúčenín v poradí 5, 18, 5, 10, 21 %. Jednotlivé prípady sú riešené počítačom a uvedené ďalej (schéma 1).

Zmes troch n -zložkových látok A, B, C v pomere $P : Q : R$ zložením najviac podobná látke D

*A	*B	*C	*D
10.11	0.19	2.15	5
24.33	7.22	22.48	18
5.47	9.95	2.05	5
23.96	2.88	8.6	10
8.42	13.4	31.67	21

Verzia 1

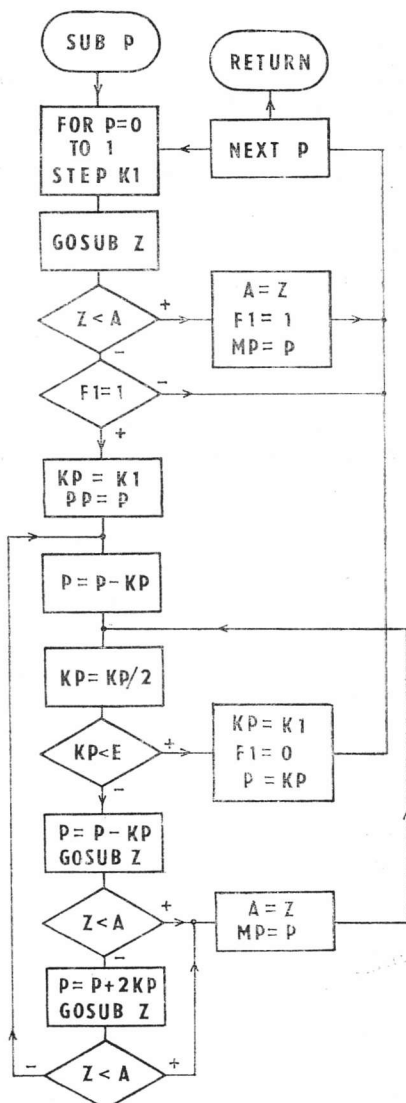
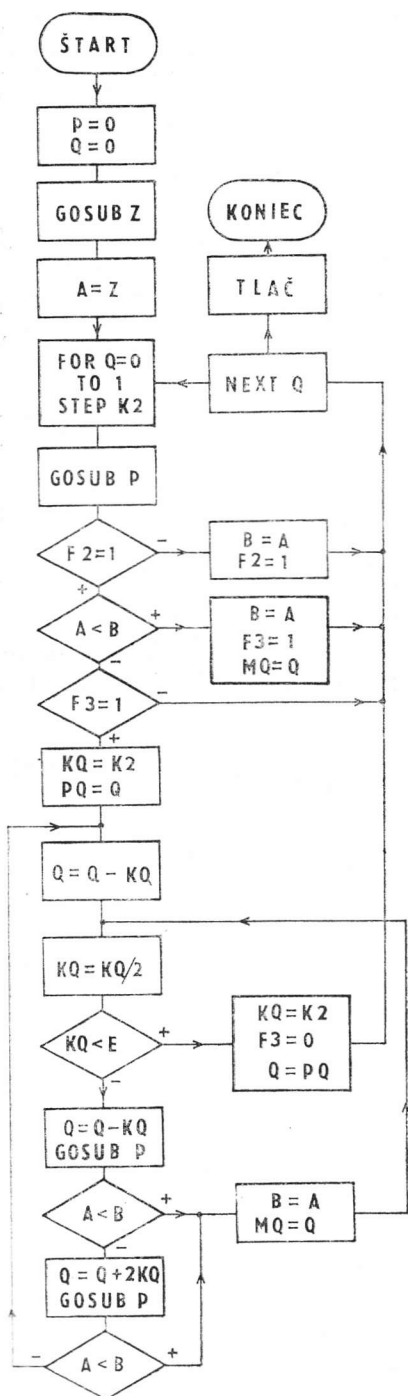
Hodnota minima a jeho súradnice

2.92973

$P = 0.23125$ $Q = 0.3$ $R = 0.46875$

Zloženie látky D

V zmesi	Požadované	Ich rozdiel
3.40275	5	—1.59725
18.3298	18	0.329813
5.21088	5	0.210876
10.436	10	0.436001
20.8124	21	—0.187563



Zmes troch n -zložkových látok A, B, C v pomere $P : Q : R$ zložením najviac podobná látke D

*A	*B	*C	*D
10.11	0.19	2.15	5
24.33	7.22	22.48	18
5.47	9.95	2.05	5
23.96	2.88	8.6	10
8.42	13.4	31.67	21

Verzia 2

Hodnota minima a jeho súradnice

0.0738976

$P = 0.295313$ $Q = 0.25625$ $R = 0.448438$

Zloženie látky D

V zmesi	Požadované	Ich rozdiel
3.99844	5	—1.00156
19.116	18	1.11595
5.08434	5	0.0843434
11.6703	10	1.67025
20.1223	21	—0.877701



Schéma 1.

Z 1

$$\sum_{i=1}^n [d_i - a_i P - b_i Q - c_i (1 - P - Q)]^2$$

Z 2

$$\sum_{i=1}^n \{ [d_i - a_i P - b_i Q - c_i (1 - P - Q)] d_i \}^2$$

Z 31

$$Q = [d_1 - c_1 - P(a_1 - c_1)] / (b_1 - c_1)$$

$$\sum_{i=2}^n = [a_i - d_i P - b_i Q - c_i (1 - P - Q)]^2$$

Z 32

$$Q = [d_1 - c_1 - P(a_1 - c_1)] / (b_1 - c_1)$$

$$\sum_{i=2}^n \{ [d_i - a_i P - b_i Q - c_i (1 - P - Q)] d_i \}^2$$

K — počiatočný krok, KQ , KP — kroky v jednotlivých rezoeh, E — požadovaná presnosť, MP , MQ , — súradnice P , Q , pre ktoré je Z minimálne, PP , PQ — pomocná hodnota súradníc P , Q , $F \emptyset$, $F1$, $F2$, $F3$ — príznaky (flagy) na vetvenie programu, $F1 = F3 = 1$ ak funkcia $Z(P, Q)$ klesala, $F \emptyset = F2 = 0$ pre 1. beh programu.

Zmes troch n -zložkových látok A, B, C v pomere $P : Q : R$ zložením najviac podobná látke D

*A	*B	*C	*D
10.11	0.19	2.15	5
24.33	7.22	22.48	18
5.47	9.95	2.05	5
23.96	2.88	8.6	10
8.42	13.4	31.67	21

Verzia 3.1

Hodnota minima a jeho súradnice

24.1195

$P = 0.401563$

$Q = 0.176754$

$R = 0.421684$

Zloženie látky D

V zmesi	Požadované	Ich rozdiel
5	5	0
20.5256	18	2.52563
4.8197	5	—0.180302
13.757	10	3.75697
19.1044	21	—1.89561

Zmes troch n -zložkových látok A, B, C v pomere $P : Q : R$ zložením najviac podobná látke D

*A	*B	*C	*D
10.11	0.19	2.15	5
24.33	7.22	22.48	18
5.47	9.95	2.05	5
23.96	2.88	8.6	10
8.42	13.4	31.67	21

Verzia 3.2

Hodnota minima a jeho súradnice

0.165996

$P = 0.409375$

$Q = 0.208482$

$R = 0.382143$

Zloženie látky D

V zmesi	Požadované	Ich rozdiel
5	5	4.76837E-07
20.0559	18	2.05591
5.09707	5	0.0970707
13.6955	10	3.69548
18.3431	21	—2.65693

Оптимизация смеси m -веществ, имеющих n -компоненты посредством ЭВМ

Резюме

В программе, которая приводится в статье, разрабатываются четыре версии комбинации системы трех веществ, в которых подвергается наблюдению пять составных частей разной концентрации так, чтобы получить окончательную смесь, как можно больше приближающуюся к требуемому веществу. Программа на языке BASIC находится в распоряжении авторов статьи и ее можно применить в лабораторной и промышленной практике.

Optimization of mixture of m -substances with n -components by computer

Summary

The program described in this paper solves four versions of combining the system of three substances, in which five components with different concentrations are tested in order to obtain a resulting mixture which would resemble as much as possible the required substance D. The program in BASIC is available at the authors of the paper and it may be applied in both laboratory and industrial practice.