

В.М.Баланюк, В.М.Юзевич, д.ф-м.н., професор, О.І.Лавренюк (Львівський державний університет безпеки життєдіяльності)

ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЦЕПТУРИ АЕРОЗОЛЬОУТВОРЮВАЛЬНОЇ СПОЛУКИ НА ОСНОВІ БІНАРНОЇ СУМІШІ СОЛЕЙ КАЛІЮ

Проведено дослідження залежностей зміни параметрів рецептури аерозольоутворювальної сполуки і розроблено процедуру відповідних числових оцінок, які дозволяють формувати рекомендації щодо зменшення часу ефективної дії. В матричній формі запропоновано співвідношення, яке моделює кореляційні зв'язки між різними наборами значень параметрів складу вогнегасної суміші. Дане співвідношення має нелінійний характер. Встановлено екстремальні параметри вогнегасної суміші.

Для моделювання процедури оптимізації складу суміші у відповідності до вдосконалення параметрів вогнегасіння використано методи кореляційного аналізу [1]. Відповідні дані подано в таблиці 1.

Таблиця 1

Вогнегасні концентрації (M_0) при гасінні метану

Компоненти	№ 1	№ 2	№ 3	№ 4	№ 5	№ 6	№ 7
A %, KNO_3	65	65	60	60	57,5	55	50
B %, $KClO_3$	15	10	10	5	5	5	12,5
C %, C	20	25	30	35	37,5	40	37,5
M_p , г/м ³	13,77	11,77	10,80	12,04	13,17	14,31	14,73

Параметри суміші приведемо до нормованих безрозмірних значень, зокрема, до Mm^* , поділивши на Mm_{max} , тобто

$$Mm^* = Mm/Mm_{max}; s_1 = A/A_{max}; s_2 = B/B_{max}; s_3 = C/C_{max} \quad (1)$$

Розглянемо кореляційну відповідність між початковими параметрами суміші (I_d) і параметрами суміші (I_a); числові значення параметрів встановлено експериментально.

Коефіцієнт кореляції знаходимо на основі відомого співвідношення [1]:

$$K_k = \frac{\sum(z_i - \bar{z})(q_i - q)}{(\sum(z_i - \bar{z})^2 \sum(q_i - q)^2)^{0,5}} \quad (2)$$

Тут $z_i = z_1, z_2, \dots, z_4$ – значення параметрів (I_a) для конкретного складу суміші ($i = 1, 2, 3, 4$); $q_i = q_1, \dots, q_4$ – значення параметрів (I_d) для конкретного іншого складу суміші ($i = 1, 2, 3, 4$) при зміні умов; $\bar{z} = (z_1 + z_2 + z_3 + z_4)/4$ – середнє значення I_a ; $q = (q_1 + q_2 + q_3 + q_4)/4$ – середнє значення I_d ; i – порядковий номер параметра.

Відповідні числові значення параметрів занесено як елементи матриці у задані файли комп'ютера і використано для обчислювального експерименту. Методи та засоби відбору інформації для I_a та I_d функціонують у відповідності із стандартними інструкціями.

Для моделювання процедури оптимізації складу суміші у відповідності до вдосконалення параметрів вогнегасіння використано методи теорії ймовірностей та математичної статистики [2]. Відповідні дані подано в таблиці 2, використавши порівняння різних складів вогнегасних сумішей для гасіння метану, які подані в таблиці 1.

Таблиця 2

Коефіцієнти кореляції K_k при порівнянні різних складів вогнегасних сумішей для гасіння метану

Пари сумішей	№ 1 і № 2	№ 2 і № 3	№ 3 і № 4	№ 4 і № 6	№ 6 і № 7
K_k	$K_{12}=0,984$	$K_{23}=0,992$	$K_{34}=0,98716$	$K_{45}=0,98737$	$K_{56}=0,993$

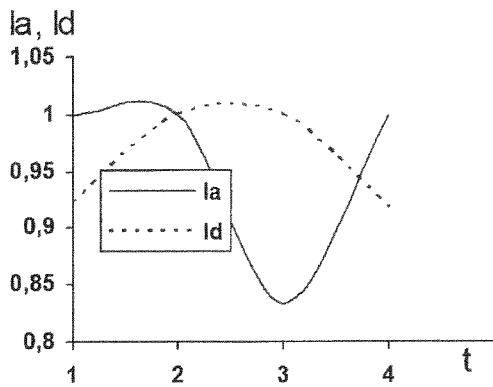


Рис. 1. Розподіли для вогнегасних сумішей ($K_k = K_{23} = 0,992$)

зробити висновок, що коефіцієнти кореляції K_k змінюються в більш вузьких межах порівняно з Mm . При визначенні екстремального (мінімального) значення Mm інформацію щодо змін K_k ($K_k = K_{ij}$) вважаємо допоміжною і використовуємо для уточнення проміжкових даних в процесі обчислювального експерименту.

Зміни коефіцієнта кореляції між $Id = f(t)$ та $Ia = f(t)$ оцінимо за допомогою відношення:

$$w_v = 2 \cdot (K_{23} - K_{34}) / (K_{23} + K_{34}) = 0,00489 \quad (3)$$

Як бачимо з даних табл. 2 коефіцієнти кореляції K_{ij} ($i, j=1, 2, \dots, 6$) незначно відрізняються. Отже, між даними табл. 1 достатньо добрий кореляційний зв'язок.

Серед приведених вище залежностей коефіцієнт K_{23} приймає максимальне значення. Встановлено, що при віддаленні від екстремального значення для даної серії експериментів $Mm = 10,8 \text{ г/м}^3$ (табл. 1) відношення w_v зростає і навпаки. Такі закономірності змін w_v коефіцієнта кореляції K_k дозволяють припустити, що на основі регулювання параметрами суміші можна розробляти алгоритми, які з використанням відповідності між довільними $Id = f(t)$ та $Ia = f(t)$ дозволяють наближати розраховані значення Mm до екстремального.

Алгоритм визначення екстремального значення Mm розбиваємо на етапи. На першому етапі будуємо лінійну систему рівнянь, яка зв'язує Mm з параметрами суміші:

$$Mm = x_1 \cdot A + x_2 \cdot B + x_3 \cdot C \quad (4)$$

Тут x_1, x_2, x_3 – коефіцієнти пропорційності.

Якщо застосувати рівняння типу (4) до даних табл. 1, то задовільного розв'язку не знайдемо, оскільки отримаємо переозначену систему 6 лінійних рівнянь з 6 невідомими. Тому ускладнюємо рівняння (4).

Другий етап алгоритму – x_1, x_2, x_3 вважаємо нелінійними і подамо у вигляді:

$$x_i = x_{i0} + \text{abs}(y_i) \cdot \text{abs}(C - C_0), \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5)$$

Тут y_1, y_2, y_3, C_0 – параметри, які знайдемо чисельно, використавши дані табл. 1. Відзначимо, що в першому наближенні обмежимося вибором виразу $\text{abs}(C - C_0)$. Підставивши (5) у (4) і, використавши дані табл. 1, отримаємо систему нелінійних рівнянь, з яких визначимо невідомі параметри для співвідношення (5):

$$\begin{aligned} x_{10} &= 0,04841; \quad x_{20} = 0,25323; \quad x_{30} = 0,17875; \quad C_0 = 30; \\ y_1 &= 0,00315; \quad y_2 = 0,00364; \quad y_3 = 0,00329 \end{aligned} \quad (6)$$

Оскільки система рівнянь (5) і (4) з даними табл. 1 нелінійна, то використано також паралельно інформацію про коефіцієнти кореляції K_k , з допомогою яких оптимізовано

процедуру отримання розв'язку (6). Таке моделювання проведено за допомогою матричного співвідношення для двох різних розподілів параметрів суміші $I_d(S_i)$, $I_a(S_j)$, наприклад:

$$I_d = \begin{pmatrix} A1 \\ B1 \\ C1 \\ M\epsilon1 \end{pmatrix}; \quad I_a = \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \\ C_j \\ M\epsilon_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A5 \\ B5 \\ C5 \\ M\epsilon5 \end{pmatrix} + t_a \cdot \begin{pmatrix} A6 \\ B6 \\ C6 \\ M\epsilon6 \end{pmatrix} + t_n \cdot \begin{pmatrix} A7 \\ B7 \\ C7 \\ M\epsilon7 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

тобто,
$$I_d = I_d(S_{ki}); \quad I_a(S_{kj}) = I_0(S_{k(j+1)}) + t_a \cdot I_t(S_{k(j+2)}) + t_n \cdot I_n(S_{k(j+3)}) \quad (8)$$

Тут $I_0(S_{k(j+1)})$ – початкове значення параметрів суміші; t_a, t_n – числові параметри, за допомогою яких можна регулювати коефіцієнт кореляції; $A_j=S_{1j}$; $B_j=S_{2j}$; $C_j=S_{3j}$; $Mm_j=S_{4j}$. Мета досліджень – за допомогою зміни t_a, t_n уточнювати значення коефіцієнта кореляції K_k .

Додаткова умова: $A_j + B_j + C_j = A_j + B_j + C_j = 100$ (%) (9)

Початкові значення параметрів t_a, t_n вибираємо такими: $t_{a0} = -0,1$; $t_{n0} = 0,1$.

Оскільки метою розрахунку є зменшення Mm , то параметри t_a, t_n будуть мати протилежні знаки. При $t_{a0}=0, t_{n0}=0$ коефіцієнт кореляції приймає значення $K_0=0,8686$. Якщо $t_{a0}=0,1; t_{n0}=-0,1$, то $K_{01}=0,866$. Для $t_{a0}=-0,1; t_{n0}=0,1$ – $K_{01}=0,871$, тому зрозумілим стає вибір від'ємного значення t_{a0} і додатнього t_{n0} . Надалі поступово змінюємо параметри t_a, t_n так, щоб досягнути збільшення коефіцієнта кореляції K_j і одночасного зменшення Mm .

В результаті для даних (7) отримано:

$$t_{aj} = -2,2; \quad t_{nj} = 2,28; \quad K_j = 0,93; \quad A_j = 49; \\ B_j = 22,125; \quad C_j = 28,875; \quad Mm_j = 11,32 \text{ г/м}^3 \quad (10)$$

Детальний аналіз результатів розрахунку, зокрема (6), (9), дозволив установити, що оптимальне значення третього параметра приймає значення $C_0 = 30$. Для оцінки оптимальних значень двох інших параметрів A_j і Mm_j використано нову серію експериментальних даних.

Задачі типу (4), (5), (7)–(9) належать до задач оптимізаційного типу і для їх розв'язку можна застосувати відомі методи [3–6]. Деякі з цих методів застосуємо до визначення параметрів t_a, t_n , які входять у рівняння типу (8) та аналізу їх похибок. Оскільки в загальному випадку залежності (4) і (8) нелінійні, то використовуємо підхід нелінійної оптимізації, тобто метод багатовимірного пошуку [5, 6].

На перший погляд може здатись, що відмінність між методами багатовимірного й одновимірного пошуку полягає лише в тому, що перші потребують більшого об'єму обчислень і що методи, придатні для функцій однієї змінної, можна застосовувати і для функцій багатьох змінних. Проте це не так, оскільки багатовимірний простір якісно відрізняється від одновимірного. Із збільшенням числа вимірювань зменшується вірогідність унімодалності цільової функції. Крім того, безліч елементів, які створюють багатовимірний простір, набагато потужніші за безліч елементів одновимірного простору. Об'єм обчислень, необхідних для звуження інтервалу невизначеності в багатовимірному просторі, є функцією, показник якої рівний розмірності простору. Так, якщо у випадку одновимірного простору для досягнення $f=0,1$ вимагається обчислити 19 значень цільової функції, то у випадку двовимірного простору це число становить 361. У нашому випадку розглядали тривимірний простір, якому відповідають параметри A_j, B_j, Mm_j , але оскільки на другому етапі було встановлено $C_0=30$, то невідомих параметрів залишилось тільки два – A_j і Mm_j .

Методи оптимізації в багатовимірному просторі поділяються на дві великі групи – прямі і непрямі. Стратегія прямих методів – поступове наближення до оптимуму; при використанні непрямих методів прагнуть знайти розв'язок, не досліджуючи неоптимальні точки. У даному варіанті підходу використаємо інформацію про найпоширеніші алгоритми, вживані для розв'язку багатовимірних задач оптимізації. При цьому врахуємо порівняння деяких елементів програм їх реалізації і загальні вказівки щодо вибору алгоритму для розв'язання задачі визначення оптимальних значень параметрів A_j, Mm_j .

Можливий метод розв'язання, названий методом покоординатного підйому, не завжди дозволяє знайти оптимальне рішення. Особливість двовимірної цільової функції, що відповідає розв'язку задачі цим методом, полягає у тому, що лінії рівня близькі за формою до кіл або еліпсів, осі яких паралельні осям координат [5, 6]. Якщо ж ці осі нахилені до осей координат, то ефективність алгоритму знижується, оскільки для знаходження оптимуму доводиться обчислювати набагато більше значень цільової функції. Метод покоординатного підйому абсолютно непридатний, якщо лінії рівня мають точки зламу. В розглядуваній задачі ліній зламу немає.

Оскільки лінії рівня такого типу вельми часто зустрічаються в інженерній практиці, то перш, ніж скористатися вказаним методом, слід переконатися, що розв'язувана задача не має подібного недоліку. Не дивлячись на це, метод покоординатного підйому можна використати на першій стадії реалізації алгоритму для розв'язку задачі моделювання оптимального складу суміші, застосовуючи потім складніші методи.

Знаючи з літературних даних наскільки ефективно методи одновимірного пошуку дозволяють скорочувати інтервал невизначеності, застосуємо ту ж методику і до двовимірного простору, який відповідає представленій в даному підрозділі задачі [5, 6]. Один з найочевидніших методів виключення областей називається методом дотичної до лінії рівня, оскільки в ньому використовуються дотичні до ліній рівня цільової функції.

Представимо цей метод для двовимірної цільової функції, яка відповідає співвідношенню (4). Нехай довільно вибрана точка простору проектування лежить на лінії рівня, що проходить трохи нижче за пік, відповідний оптимальному рішенню. Проведемо через цю точку дотичну до лінії рівня. Зробити це неважко, оскільки дотична повинна лежати в площині лінії рівня і бути перпендикулярною локальному градієнту поверхні цільової функції. Якщо цільова функція достатньо гладка і унімодальна, то дотична до лінії рівня розділить простір проектування на дві частини, в одній з яких вірогідність знаходження оптимуму велика, а в іншій мала. Користуючись цим прийомом в декількох вдало вибраних точках, для яких відомі значення цільової функції, вдається істотно звужити область пошуку. Однак якщо лінії рівня увігнуті, а не опуклі, то може виявитися виключеною область, що містить екстремум. Крім того, область невизначеності може мати конфігурацію, мало придатну для застосування інших алгоритмів.

Одним з методів виключення є метод сіткового пошуку, розроблений Мішке [5, 6]. В даному випадку розміри звуженої області невизначеності можна визначити наперед. Розглянемо цей метод для випадку простору проектування, що визначається двома змінними. Початкову область невизначеності відобразимо на одиничний квадрат, куб або гіперкуб. Це дозволить вести пошук в нормованій області із стороною, рівною одиниці. У гіперкубі побудуємо сітку, утворену попарно симетричними взаємно ортогональними площинами, паралельними до координатних напрямів, уздовж яких змінюються проектні параметри. Ці площини перетинаються по прямих, які, в свою чергу, перетинаються в точках, названих надалі вузлами. Обчислимо значення цільової функції у вузлах і в центрі куба. У випадку $M=2$ проектних параметрів отримаємо $2^{M+1}=2^3$. Серед значень цільової функції виберемо найменше Mm . Приймемо відповідний вузол за центр гіперкуба менших розмірів і продовжимо дослідження. Процес продовжимо поки не буде досягнутий необхідний ступінь звуження інтервалу невизначеності. Якщо у області допустимих значень позначити ступінь звуження уздовж якої-небудь осі координат через r , то лінійне звуження для b -вимірного гіперкуба буде рівне $f = r^b$, а число обчислених значень цільової функції Мішке рекомендує вибирати r в інтервалі значень $2/3 < r < 1$. Дослідження показують, що у разі трьох і більше змінних велику ефективність забезпечують не кубічні, а зіркоподібні області [5, 6].

Встановлено, що громіздкість обчислень у разі багатовимірного простору на прикладі числа значень цільової функції, які необхідно обчислити, щоб, користуючись методом сіток, одержати $f=0,1$, і було показано, що це число росте як статична функція, показник степеня якої рівний розмірності простору [5, 6]. Оригінальний підхід, що дозволяє обійти цю трудність, запропонований Бруксом [5] і ґрунтується на випадковому пошуку. Нехай простір проектування є кубом або гіперкубом із стороною, рівною одиниці, і розділеною на кубічні

осередки шляхом розподілу на 10 рівних частин кожної сторони куба, відповідної одному з проектних параметрів. При $N=2$ число осередків рівне 100, оскільки у загальному випадку при N вимірюваннях число осередків рівне $10 \cdot N$. Вірогідність того, що вибраний навмання осередок ввійде в число 10% найперспективніших осередків, рівна 0,1, оскільки при $N=1$ нас цікавитиме один осередок з 10, при $N=2$ – один з десяти кращих при загальній кількості осередків 100 і т.д. Вірогідність того, що ми пропустимо один з 10% найперспективніших осередків, становить 0,9. Якщо випадковим чином вибрати два осередки, то вірогідність пропуску буде $0,9^2$, тобто 0,81. Взагалі вірогідність знаходження принаймні одного осередку серед найперспективніших, частка яких рівна f , після N спроб становитиме:

$$P = 1 - (1 - f)^N \quad (11)$$

На основі проведених досліджень встановлено, що при випадковій вибірці 44 осередків вірогідність досягнення $f=0,1$ буде рівна 99% [6]. Хоча метод випадкового пошуку не дозволяє безпосередньо знайти оптимальне рішення, він створює відповідні передумови для застосування надалі інших методів пошуку. Тому його часто застосовують в поєднанні з одним або декількома методами інших типів.

У багатьох алгоритмах багатовимірної оптимізації використовується інформація про градієнти [5, 6]. Хоча будь-який шлях, що веде вгору, приведе дослідника до вершини, найкоротшим з них буде найкрутіший. Припустимо тимчасово, що задача оптимізації не містить обмежень. Пізніше ми включимо їх в схему пошуку. Метод оптимізації, в основу якого покладена ідея руху по найкрутішому шляху, називається методом найбільш короткого підйому або найбільш короткого спуску. Вектор градієнта перпендикулярний до лінії рівня і вказує напрям до нової точки в просторі проектування. Відзначимо, що градієнтний метод, на відміну від методу дотичної до лінії рівня, можна використовувати стосовно будь-якої унімодалної функції, а не тільки тих, у яких ця властивість явно виражена.

Щоб краще зрозуміти ідею градієнтних методів, докладніше зупинимося на властивостях градієнтів. Розглянемо систему незалежних одиничних векторів $e_1, e_2, e_3, \dots, e_N$, направлених вздовж осей координат $x_1, x_2, x_3, \dots, x_N$, що є в той же час проектними параметрами. Вектор градієнта довільної цільової функції $F(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)$ має вигляд:

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} \cdot e_1 + \frac{\partial F}{\partial x_2} \cdot e_2 + \dots + \frac{\partial F}{\partial x_N} \cdot e_N, \quad (12)$$

де часткові похідні обчислюються в даній точці. Цей вектор направлений вгору, у напрямі підйому; зворотний йому вектор вказує напрям спуску.

Одиничний вектор градієнта часто представляють у вигляді:

$$v_1 \cdot e_1 + v_2 \cdot e_2 + \dots + v_N \cdot e_N, \quad (13)$$

де

$$v_i = \frac{\partial F}{\partial x_i} / \left(\sum_{j=1}^N \left[\left(\frac{\partial F}{\partial x_j} \right)^2 \right]^{1/2} \right) \quad (14)$$

Іноді характер цільової функції буває достатньо добре відомий, так що можна обчислити компоненти вектора градієнта з допомогою безпосереднього диференціювання. Якщо у такий спосіб часткові похідні одержати не вдається, то можна знайти їх наближені значення в безпосередньому околі даної точки:

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = (F(x_1, x_2, \dots, x_i + \Delta, \dots, x_N) - F(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_N)) / \Delta \quad (15)$$

Тут Δ – невеликий зсув у напрямі x_i . Одержану інформацію про напрям градієнта можна використовувати різним чином для побудови алгоритму пошуку.

Ряд методів пошуку заснований на зсуві на постійний крок і у напрямі градієнта з подальшим обчисленням цільової функції. Якщо її величина виявляється більшою за попередню, обчислюється градієнт в новій точці, і вся процедура повторюється, причому часто при цьому крок збільшують. Якщо ж величина цільової функції не змінюється, то крок зсуву

від попередньої точки зменшують і повторюють всю процедуру обчислень. Так діють до того часу, поки подальше зменшення кроку вже не приводить до поліпшення результату.

У деяких варіантах задачі (4), (5) інформація про градієнт використовується для реалізації одновимірної пошуку у напрямі найшвидшого спуску, причому використовується співвідношення:

$$x_{i,нов} = x_{i,ст} + S \cdot v_i, \quad (16)$$

де S – новий одновимірний параметр, значення якого відраховують у напрямі градієнта. Одержавши одновимірний оптимум у напрямі даного градієнта, знаходять новий градієнт і повторюють процес до того часу, поки подальші обчислення дозволяють покращувати одержаний результат. Перевагою цього методу є те, що параметр S можна використовувати і як незалежну змінну для пошуку за методом Фібоначчі [4, 5], і це забезпечує високу ефективність методу. Іншою перевагою градієнтного методу [4, 5] є те, що він дозволяє йти від сідлових точок поверхні, описаної цільовою функцією. Відзначимо, проте, що для мультимодальних функцій градієнтні методи дозволяють знайти лише локальний оптимум. Тому, якщо характер поверхні недостатньо добре відомий, слід випробувати декілька початкових точок і переконатися, що у всіх випадках виходить одне і те ж оптимальне рішення. Іншою причиною, що знижує ефективність градієнтних методів, є злами ліній рівня цільової функції. Оскільки такі точки відповідають розриву в нахилах ліній контура, то тут можливі помилки у визначенні напрямку подальшого пошуку. Тому пошук може сповільнитися і йти зигзагами уперек лінії зламу, а час, необхідний для отримання рішення, буде такий великий, що обчислення доведеться припинити. Насправді більшість досліджуваних поверхонь має одну або більш ліній зламу, які нерідко проходять через точку оптимуму. Тому, наткнувшись на лінію зламу, слід надалі рухатися уздовж неї.

Для реалізації цієї ідеї розроблено ряд алгоритмів [5, 6]. Один з таких алгоритмів відповідає методу Девідона-Флетчера-Пауелла і представляє собою алгоритм оптимізації, який застосовується для пошуку безумовного мінімуму цільової функції, яка залежить від декількох змінних і має вигляд:

$$M = F(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (17)$$

Необхідно визначити часткові похідні цільової функції по незалежних змінних. Оскільки в основі методу лежить припущення про унімодальність цільової функції, то в тих випадках, коли можна припустити, що вона не є такою, слід брати декілька початкових точок.

Алгоритм виконується таким чином. Спочатку в просторі проектування вибирають відповідну початкову точку. Потім, обчислюючи складові вектора градієнта, визначають напрям пошуку з урахуванням співвідношення.

$$v_i = \frac{\sum_{j=1}^N H_{i,j} \left(\frac{\partial F}{\partial x_j} \right)^{(k)}}{\left[\sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^N H_{i,j} \frac{\partial F}{\partial x_j} \right)^2 \right]^{1/2}}, \quad i=1,2, \dots, N \quad (18)$$

Тут k – номер ітерації, а $H_{i,j}$ – елементи симетричної позитивно визначеної матриці розмірності $N \times N$. В процесі ітерацій ця матриця перетворюється в матрицю, обернену матриці Гессе, елементами якої є другі часткові похідні цільової функції. Оскільки звичайно матриця наперед невідома, то як початкову можна вибрати будь-яку симетричну позитивно визначену матрицю. Як правило, беруть найпростішу з них – одиничну матрицю.

В цьому випадку пошук починається уздовж лінії найбільш швидкого спуску. Одновимірний пошук ведеться уздовж початкового напрямку відповідно до співвідношення:

$$x_{i,нов} = x_{i,ст} + S \cdot v_i, \quad i=1,2, \dots, N \quad (19)$$

де S – величина кроку у напрямі пошуку. Знайшовши одновимірний оптимум, перевіряють результат на збіжність і, якщо вона досягнута, пошук припиняють. В іншому випадку для подальшого пошуку вибирають новий напрям, причому використовують колишнє співвідношення і нову матрицю H , визначену формулою:

$$H^{(k+1)} = H^{(k)} + A^{(k)} - B^{(k)} \quad (20)$$

Елементи матриць $A^{(k)}$ і $B^{(k)}$, що мають розмірність $N \times N$, обчислюють за формулами:

$$A^{(k)} = \frac{\Delta x^{(k)} (\Delta x^{(k)})^T}{(\Delta x^{(k)})^T \Delta G^{(k)}}, \quad B^{(k)} = \frac{H^{(k)} \Delta G^{(k)} (\Delta G^{(k)})^T H^{(k)}}{(\Delta G^{(k)})^T H^{(k)} \Delta G^{(k)}}, \quad (21)$$

де верхнім індексом t позначені транспоновані матриці, а $\Delta x^{(k)}$ і $\Delta G^{(k)}$ – відповідно вектори-стовпці різних значень x_i і градієнтів в двох точках. Вектори-стовпці визначаються виразами:

$$\Delta x^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}, \quad \Delta G^{(k)} = \frac{\partial F^{(k+1)}}{\partial \tau} - \frac{\partial F^{(k)}}{\partial \tau} \quad (22)$$

Відповідно до правил матричного обчислення чисельники виразів для $A^{(k)}$ і $B^{(k)}$ є матрицями розмірності $N \times N$, а знаменники – скалярами. Визначивши новий напрям пошуку, проводять одновимірний пошук і продовжують ітераційний процес. При виконанні описаного алгоритму пошук після першої спроби ведеться в тих напрямках, за якими цільова функція в найближчому околі має значення, що наближається до оптимального. Лише в окремих випадках ці напрями збігаються з напрямом градієнта. Тому даний алгоритм часто називають методом «відхиленого» градієнта. Вказана властивість методу Девідона – Флетчера-Пауелла дозволяє обходити труднощі, пов'язані з розривами похідних в просторі проектування. Поширена думка, що цей метод є найефективнішим зі всіх градієнтних методів [6]. На відміну від методу Флетчера-Ривса [5, 6] він дає повну інформацію про кривизну поверхні цільової функції в точці мінімуму, проте при цьому потрібен більший об'єм пам'яті і більший час рахунку для обробки матриці H .

Покращення процедури наближення до оптимального значення M_B можна досягнути комплексними заходами, направленими на розпаралелювання задачі з використанням двох алгоритмів: а) алгоритм задачі (4), (5); а) алгоритм задачі (7), (8).

В даному підході застосовано розпаралелювання алгоритмів розв'язку задачі з використанням при програмуванні функцій системних викликів Win32 для стандартного транслятора (Fortran) [7, 8]. При цьому вручну організовано структури даних для передачі параметрів підпрограмам, виконуваних у двох паралельних напрямках, а також синхронізацію виконання і доступу до даних.

Одним з найбільш простих і ефективних підходів, який було використано для організації паралельних обчислень, є метод пула (банку) завдань (*pool of tasks*) [7]. Він полягає в розщепленні обчислювального процесу на сегменти, що послідовно вибираються з пула чи потоками процесами. Цей механізм організовано за допомогою апарата критичних секцій (у середовищі Windows). Критична секція – це ділянка програмного коду, доступна тільки для одного потоку, так що інші потоки, що бажають увійти в критичну секцію, повинні очікувати її звільнення. Глобальна синхронізація відповідного обчислювального процесу здійснюється з використанням апарату подій [7, 8]. Слід зазначити, що метод пула завдань добре підходить для розпаралелювання досить однорідних алгоритмів, що виконується у запропонованій задачі визначення оптимального складу суміші M_B .

Таким чином, для другого алгоритму матимемо варіант реалізації зворотнього зв'язку, який отримуємо із (3.8) і символічно представимо у вигляді співвідношення:

$$I_d(S_{ki}) = f(I_0(I_d(S_{ki}))) \quad (23)$$

При цьому залежність (23) у загальному випадку нелінійна, а аналіз функціональної залежності $f(I_0(I_d(S_{ki})))$ і параметрів t_a, t_n дозволяє встановити оптимізаційними методами [5, 6], в якому напрямку та як здійснювати заходи регулювання і прогнозувати відповідне покращення оптимального значення M_B .

Обчислювальний експеримент дозволяє встановити певні обмеження, які накладаються на параметри t_a , t_n та результати розрахунків. Зокрема, це стосується і граничних значень відношення w_v (3). Такі оцінки необхідні для статистичного обґрунтування залежностей типу (8).

Третій етап досліджень – вважаємо, що x_1 , x_2 , x_3 є нелінійними і подаємо у вигляді:

$$Mm = x_1 \cdot A + x_2 \cdot B + x_3 \cdot C \quad (24)$$

$$x_i = x_{i0} + \text{abs}(y_i) \cdot \text{abs}(A - A_0), \quad (i = 1, 2, 3) \quad (25)$$

Тут x_{i0} , y_1 , y_2 , y_3 , C_0 – параметри, які знайдемо чисельно, використавши дані табл. 3.

Таблиця 3

Вогнегасні концентрації (M_b) при гасінні метану

Компоненти	№ 1	№ 2	№ 3	№ 4	№ 5	№ 6	№ 7
А %, KNO_3	70	65	62,5	60	50	45	40
Б %, KClO_3	–	5	7,5	10	20	25	30
С %, С	30	30	30	30	№ 5	30	30
M_b , г/м^3	12,25	11,54	11,18	10,8	10,65	11,35	12,09

Відзначимо, що на третьому етапі обчислювального експерименту обмежимося у співвідношенні (25) вибором виразу $\text{abs}(A - A_0)$. Підставивши (25) у (24) і використавши дані табл. 3, отримаємо систему нелінійних рівнянь, з яких визначимо:

$$\begin{aligned} x_{10} = 0,05840; \quad x_{20} = 0,003908; \quad x_{30} = 0,2070; \quad A_0 = 55; \\ y_1 = 0,001277; \quad y_2 = 0,002206; \quad y_3 = 0,001355 \end{aligned} \quad (27)$$

Відповідно до отриманих значень (27) визначили екстремальні значення:

$$A = 55\%; \quad B = 15\%; \quad C = 30\%; \quad M_b = 10,0 \text{ г/м}^3 \quad (28)$$

Встановлено, що якщо продовжити процедуру пошуку оптимального значення M_b у напрямку уточнення параметра С, то така методика суттєвого результату не дає. Тому обмежимося оптимальними значеннями вогнегасної суміші (28).

Результати і висновки: В матричній формі запропоновано співвідношення, яке моделює кореляційні зв'язки між різними наборами значень параметрів складу вогнегасної суміші. Дане співвідношення має нелінійний характер. Проведено дослідження залежностей зміни параметрів складу вогнегасної суміші і розроблено процедуру відповідних числових оцінок, які дозволяють формулювати рекомендації щодо зменшення часу ефективної дії. Встановлено екстремальні параметри вогнегасної суміші: $A=5\%$; $B=15\%$; $C=30\%$; $M_b=10,0 \text{ г/м}^3$.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ:

1. Налимов В.В. *Применение математической статистики при анализе вещества.* – Москва: Гос. изд.-во физ.-мат. литературы, 1968. – 430 с.
2. Копич І.М., Сороківський В.М. *Елементи теорії ймовірностей і математичної статистики: Теорія та практикум.* – Львів: ЛКА, 2001. – 336 с.
3. Васильєва Л.В. *Анализ результатов многокритериальной оптимизации параметров технологических процесов // Вимірювальна та обчислювальна техніка в технологічних процесах: Збірник наукових праць.* – Хмельницький: ТУП, 2001. – С. 491–493.
4. Шуп Т. *Решение инженерных задач на ЭВМ: практическое руководство.* Пер. с англ. – Москва: Мир, 1982. – 238 с.
5. Иванов В.В. *Методы вычислений на ЭВМ. Справочное пособие.* – К.: Наук. думка, 1982. – 584 с.
6. Банди Б. *Методы оптимизации: Пер. с англ.* – М.: Радио и связь, 1988. – 128 с.

7. Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. – М.: Мир, 1988. – 367 с.
8. Allan R.J., Müller C.J. *Parallel Application Software on High Performance Computers. Tutorial on Shared-Memory Programming Paradigms. Report of CLKC Daresbury Laboratory, 1999 (available from <http://www.cse.clrc.ac.uk/Activity/HPCI>).*

УДК 614.8

В.В.Попович (Львівський державний університет безпеки життєдіяльності)

ПРО САМОЗАЙМАННЯ ПОРОДНИХ ВІДВАЛІВ ВУГІЛЬНИХ ШАХТ ТА МЕТОДИ ЙОГО ПОПЕРЕДЖЕННЯ

Розглянуто процес samozаймання породних відвалів вугільних шахт, наведено основні способи попередження samozаймання та подолання наслідків.

Забезпечення пожежної та техногенної безпеки є невід'ємною частиною державної діяльності щодо охорони життя та здоров'я людей, національного багатства і навколишнього природного середовища [1].

Попри пожежі, аварії, стихійні лиха, надзвичайні ситуації техногенного та природного характеру, людина також піддається небезпеці інших, не настільки яскраво виражених, факторів, які в окремих випадках бувають більш небезпечними. До таких факторів належить samozаймання на териконах – породних відвалах вугільних шахт. Продукти горіння, що виділяються внаслідок горіння териконів, як і при класифікованій пожежі, негативно впливають на людський організм та довкілля.

Самозаймання – це самочинне виникнення горіння внаслідок поступового накопичення тепла у певній речовині [2]. Воно спостерігається під час різкого збільшення швидкості екзотермічних реакцій тоді, коли швидкість виділення тепла перевищує швидкість його розсіювання [3]. Цей процес може тривати від декількох днів до декількох місяців. Він супроводжується інтенсивним виділенням продуктів термічного розкладу речовин, що мають специфічний запах [4]. Простір, у якому виникає samozаймання, умовно можна поділити на три зони: горіння, теплової дії і задимлення. Горіння териконів – гетерогенне, і характеризується процесами термічного розкладу та випаровуванням небезпечних речовин; водночас відбувається теплообмін між розігрітим відвалом та навколишнім середовищем. Унаслідок тривалого горіння відбувається забруднення повітря вуглеводнями, пилом та золою [5, 6, 7].

Горіння породних відвалів відбувається поблизу поверхні з боку надходження повітря. Продукти окисної зони за температур вищих за 800°C вступають у вторинні реакції. За низьких температур вони є лише теплоносієм, і на своєму шляху підігрівають породну масу. При нагріванні її до 105°C відбувається виділення вологи. З підвищенням температури до 200°C виділяються аклюдовані у вугіллі газу, що складаються в основному з вуглекислоти і вуглеводнів. За температури 200 – 250°C починається вже помітне розкладання горючої речовини, підсилюється виділення вуглекислоти, близько 300°C – з'являються смоляні продукти. Між 350 – 500°C відбувається інтенсивне розкладання вугілля. Різко підвищується кількість виділених газів, які у цей період стають горючими, оскільки містять крім вуглекислоти ще і значну кількість вуглеводнів, метану і водню. За температури 550 – 1100°C газу виділяється в 4 – 5 разів більше, ніж у діапазоні температур з 200 до 500°C. Ці газу містять метан, водень та азот.