

DIPLOMAMUNKA

(KIVONAT)

**Keverési feladatok az operációkutatásban
Gázkeverékek és Színreceptszámítás**

Winkler László

Témavezető: Dr. Illés Tibor
egyetemi docens
BME Matematika Intézet,
Differenciálegyenletek Tanszék

**BME
2013**

1. Keverési feladatok

Az operációkutatásban a keverési modellek és feladatok egy igen sokat kutatott téma rengeteg nyitott kérdéssel és megoldandó feladattal. E feladatok közé tartoznak például a beton- és benzin keverési feladatok, világítástechnikai alkalmazások, gázkeverékek koncentrációjának meghatározása, fedőfestékek színkeverése, színreceptszámítása. A dolgozatban ez utóbbi két témával fogunk foglalkozni. Betekintünk a mindennapi alkalmazásba, hogyan merültek fel az adott problémák. Milyen megoldandó feladatok állnak előttünk. Hogyan néznek ki a feladatok matematikai modelljei, és miként lehet őket megoldani, milyen módszerek jöhetnek szóba. Numerikus megoldásokat és eredményeket fogunk közölni a gázkeverési feladattal kapcsolatban, és megvizsgáljuk, hogy adott paraméterek hogyan befolyásolják az optimumot.

A keverési modellek általában nemlineáris - sokszor nemkonvex - optimalizálási feladatokhoz vezetnek, és a legkisebb négyzetek feladatokhoz állnak közel. Komoly kémiai, fizikai és mérnöki ismereteket is fel kell használni a modellezés során és a megoldáshoz vezető úton. Minden egyes problémához egy-egy speciális algoritmus fejleszthető. Ami operációkutatási szempontból nagyon fontos, hogy a duális feladatok általában nem ismertek.

A keverési feladatok általános formája a következő:

$$\min_{x \in K} D(x||c),$$

ahol $K \subseteq \mathbb{R}^n$ a lehetséges keverések halmaza, $c \in \mathbb{R}^n$ a célkeverék és $D(x||c)$ egy mérhető függvény, amely az x és a c keverékek távolságát méri valamilyen metrika szerint. A legtöbb esetben K egy egyenlőtlenségekkel definiált konvex poliéder. $D(x||c)$ általában az euklideszi távolság, ez a mi esetünkben a színreceptszámításnál is így lesz.

2. Gázkeverés

Hajógázoknak egy a kéményre szerelt lézeres mérőműszer segítségével szóródási és elnyelési paramétereiket mérünk. Ezek a gáz fizikai paramétereitől függenek úgy, mint hőmérséklet, a gázkeverék összetétele, nyomás. A mérőműszer által szolgáltatott adatokon keresztül szeretnénk következtetéseket levonni arra vonatkozóan, hogy a gáz összetételét hogyan lehet kevésbé környezetszennyezővé tenni.

A mérési folyamatban a gáz elnyelési (abszorpció) spektrumának vizsgálata alapján kapunk olyan információt, amellyel a szükséges számításokat el lehet végezni. Ez úgy történik, hogy egy fényforrás segítségével fénynyalábokat juttatnak át a gázon, majd egy prizma segítségével létrehozzák az elnyelési spektrumot.

Definiáljuk az elnyelési spektrum egyenletét ($S(\nu)$):

$$S(\nu) = \sum_{i=1}^N L(\nu, a_i), \quad (1)$$

ahol N az elnyelési vonalak száma a spektrumban, ν a mérési frekvencia és a_i egy paraméter halmaz, amely az i -edik elnyelési sáv jellemzőit tartalmazza, úgymint intenzitás, sáv szélesség, sávcentrum helye. Amit a mérőműszerrel meg tudunk mérni azt $S_m(\nu)$ -vel fogjuk jelölni.

A képletek átalakítása és segédváltozók és paraméterek bevezetése után végül a következő gyakorlati modellt állíthatjuk fel.

$$L_{ji}(x, y, z) = \frac{\bar{b}_i x + \bar{c}_i(10^6 - x)y}{(b_i x + c_i(10^6 - x)y)^2 + (d_{ji} - z)^2},$$

ahol $0 \leq x \leq 10^6$, és NO esetén $0,8 \leq y \leq 1,2$, illetve $-0,5 \leq z \leq 0,5$.

Ekkor már egy legkisebb négyzetek feladathoz jutunk, nevezetesen a

$$\min_{(x,y,z)} \sum_j (S_{mj} - x \sum_i L_{ji}(x, y, z))^2$$

feladathoz (1) alapján, a már korábban felsorolt feltételek mellett. S_{mj} a mért elnyelési spektrum.

Az optimalizálás során két algoritmust is használtunk. Az egyik az *fminsearch*, a MATLAB beépített optimalizáló rutinja. A másik egy jól használható algoritmus az ún. Levenberg-Marquardt féle iterációs eljárás, amely tulajdonképpen ötvözi a Gauss-Newton módszer és a gradiens módszer előnyeit. Ezt az eljárást a legkisebb négyzetes függvényközelítési probléma megoldására használják, így használható nemlineáris függvények gyökösszegének minimalizálására is, azaz az

$$F(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (f_i(x))^2 \rightarrow \min \quad (2)$$

feladat megoldására.

A vizsgálatokból kiderült, hogy a MATLAB beépített függvénye jóval hatékonyabban oldja meg a feladatot, mint a Levenberg-Marquardt algoritmus.

3. Színreceptszámítás

Mindennapos probléma különböző iparágakban, hogy meghatározott színű terméket kell előállítani. A színreceptszámítás feladatában adott néhány alapszín, és ezek keverésével kell minél jobban megközelíteni egy előírt célszín. Amilyen adatok a rendelkezésre állnak, azok az alapszínek néhány próbakeverékének a receptje és az előírt célszín bizonyos fizikai paramétereinek a mért értékei.

A kérdésnek pigmentrétegekre vonatkozó megoldásával elsőnek P. Kubelka és F. Munk foglalkozott, közleményük 1931-ben jelent meg. A színreceptszámítás operációkutatási modelljét ezen elmélet segítségével építjük fel.

A fizikai háttérrel mellőzve a következő matematikai modellt állíthatjuk fel.

A következő összefüggés kapcsolatot teremt a diffúzan visszaverő pigmentréteg K elnyelési és S szóródási együtthatója, valamint a végtelen vastagnak tekinthető réteg R_∞ diffúz (minden irányban egyenletes a visszaverése) belső reflektanciája között:

$$\frac{K(\lambda)}{S(\lambda)} = \frac{(1 - R_\infty(\lambda))^2}{2R_\infty(\lambda)}, \quad (3)$$

ahol λ az aktuális hullámhossz.

A K és S paramétereket numerikus számításokkal lehet meghatározni. Ahhoz, hogy bármit tudjunk mondani azt illetően, hogy a megadott alapszínekből milyen célszínek

keverhetők ki, illetve hogy milyen közel tudunk kerülni egy adott célszínhez, először meg kell határozni az alapszínek K és S értékeit. Erre szolgál az ún. kalibrációs eljárás. Próbakeverékeket állítunk elő az alapszínekből, melyekben tudjuk az egyes összetevők koncentrációját, a keverék reflexiós paraméterét pedig meg tudjuk mérni.

Az eljárásban adottak az alapszínek mért reflexiós paraméterei az emberi szem által érzékelhető hullámhossz tartományban, 20nm-es lépésközökkel, azaz $\lambda = 380, 400, \dots, 740nm$.

Most nézzünk egy példát a fent említett kalibrációra. Használunk egy tiszta fehér (W), egy fekete (B), és egy színes (G) pigmentet. $S_W = 1$ rögzített érték, az elméleti fehér szóródási paramétere 1. Ezek után készítünk 5 próbakeveréket. Ezekből 1 a már említett elméleti fehér értékre vonatkozik, 3 a fekete és a fehér szín kalibrációját szolgálja, a továbbiak a színesre vonatkoznak. Ennek egyik előnye, hogy az első 4 egyenletet változatlanul felhasználhatjuk, és többiben pedig csak a színeset kell kicserélnünk ahhoz, hogy egy új színt tudjunk kalibrálni.

$$\begin{aligned}
S_W &= 1 \\
K_W - r_1 S_W &= 0 \\
C_{B_2} K_B + C_{W_2} K_W - r_2 C_{B_2} S_B - r_2 C_{W_2} S_W &= 0 \\
C_{B_3} K_B + C_{W_3} K_W - r_2 C_{B_3} S_B - r_2 C_{W_3} S_W &= 0 \\
C_{W_4} K_W + C_{G_4} K_G - r_2 C_{W_4} S_W - r_2 C_{G_4} S_G &= 0 \\
C_{B_5} K_B + C_{G_5} K_G - r_2 C_{B_5} S_B - r_2 C_{G_5} S_G &= 0,
\end{aligned} \tag{4}$$

ahol

$$r_i = \frac{(1 - R_i)^2}{2R_i}.$$

A fenti egyenletrendszer meg kell oldani mind a 19 mért λ hullámhosszon. Ezek alapján kapjuk meg a keresett K és S szóródási és elnyelődési paramétereket a keresett színekre.

Ezek után mérni szeretnénk valamilyen metrika szerint a célszín $R_\infty(\lambda)$ és a kikevert szín $R_K(\lambda, c)$ reflektanciájának eltérését. Hiszen ez az, amit szeretnénk minimalizálni. Ezt az euklideszi távolsággal fogjuk megadni.

A feladat modellje a következőképpen néz ki.

Feltételek:

$$\sum_{j=1}^n c_j = 1 \quad (5)$$

$$c_j \geq 0, \quad c_j \in \mathbb{R} \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (6)$$

ahol c_j a j -edik szín koncentrációja a keverékben. Megadjuk a pozitivitási feltételeket:

$$\sum_{j=1}^n c_j S_j(\lambda) > 0, \quad \lambda = 380, 400, \dots, 740nm, \quad (7)$$

és

$$\sum_{j=1}^n c_j K_j(\lambda) > 0, \quad \lambda = 380, 400, \dots, 740nm, \quad (8)$$

ahol $S_j(\lambda)$ a szóródási, $K_j(\lambda)$ pedig az elnyelési együtthatója a j -edik színnek a λ hullámhosszon.

Legyen $\widehat{R}_\infty(\lambda) = \frac{(1-R_\infty(\lambda))^2}{2R_\infty(\lambda)}$, majd tekintsük az alábbi két kimenetelt:

$$\sum_{j=1}^n c_j \left(K_j(\lambda) - \widehat{R}_\infty(\lambda) S_j(\lambda) \right) > 0, \quad \lambda = 380, 400, \dots, 740nm, \quad (9)$$

$$\sum_{j=1}^n c_j \left(K_j(\lambda) - \widehat{R}_\infty(\lambda) S_j(\lambda) \right) < 0, \quad \lambda = 380, 400, \dots, 740nm, \quad (10)$$

A fentiek segítségével definiáljunk két halmazt:

$$M = \{c \in \mathbb{R}^n | (5), (6), (7), (8), (9)\},$$

$$N = \{c \in \mathbb{R}^n | (5), (6), (7), (8), (10)\},$$

ahol c az ún. koncentráció vektor, c_j : a j -edik szín koncentrációja a keverékben.

Az M és N halmazok mindegyike konvex poliéder. A célfüggvény ezek után a következő:

$$\min_{c \in M} \sum_{\lambda} (R_K(c, \lambda) - R_\infty(\lambda))^2.$$

$R_K(c)$ a keverék reflektancia vektora, melyet a Kubelka-Munk formula alapján számítunk ki, az R_∞ pedig az elméleti reflektancia vektora a célszínnek. M a megengedett keverések halmaza. Ha az M halmaz helyett az N halmazt vesszük, mint megengedett keverések hamazát, akkor egy teljesen hasonló modellt kapunk, ugyanazokkal a konvexitási feltételekkel.

4. Összefoglalás

4.1. Eredmények összegzése

A gázkeverési feladat egy úgymond tesztfeladata a színreceptszámításnak. A két feladat fizikai háttérében hasonlóság az optika. A gázkeverésnél fényforrást és detektort használunk ahhoz, hogy jellemzni tudjuk a gázt, amit vizsgálunk. A színreceptszámításhoz pedig az adatokat szolgáltató mérőműszerrel a célszín paramétereit kaphatjuk meg. Így mindkét feladathoz elengedhetetlenek fizikai optikai ismeretek. A 3. fejezet utolsó részében fellelhető az operációkutatási kapcsolat a két feladat között, mégpedig abban a tekintetben, hogy konvex nemlineáris optimalizálási feladatokról van szó. A lényegi eltérés az, hogy míg a gázkeverési modellben 3 változó szerint optimalizálunk, addig a színkeverésnél n db alapszín esetén $2n$ változóban kell minimumot keresni.

A gázkeveréssel kapcsolatban elmondható, hogy gyakorlati problémára kidolgozott matematikai modell megoldása során sokkal jobb eredményeket lehet elérni, ha MATLAB környezetben programozunk a beépített MATLAB optimalizálóval, mint egy külső beprogramozott algoritmussal, amit kifejezetten legkisebb négyzetek feladatok megoldására használnak leginkább.

4.2. További kutatási irányok

A megoldáshoz vezető algoritmusok terén való fejlesztés egy a lehetséges további kutatási irányok közül. Az adott alkalmazási területtől függ, hogy milyen mértékű toleranciát fogadunk el az optimumra. Ezzel egyidejűleg vagy rövidebb futásidejű, vagy pontosabb értékeket adó algoritmusok fejleszthetők.

A matematikai modellek mindkét esetben olyan feladatra vezetnek, ahol négyzetes eltéréseket kell minimalizálni. A kidolgozásukkor ez is volt a cél, hiszen az ilyen jellegű feladatok sok vizsgálat tárgyát képezik, és több megoldó algoritmust is létre hoztak már a kezelésükre. Ennek ellenére fejleszthető egy-egy speciális algoritmus, amely hatékonyabb mint a dolgozatban tárgyalt Levenberg-Marquardt, vagy az `fminsearch` optimalizáló.

Egy ilyen ötlet az, hogy a numerikus számítás során a változók szerint sorban optimalizálunk a következőképpen. Megkeressük a célfüggvény legkisebb értékét az első változójában, majd eltávolítjuk a változás mértékét, és az 1. változót rögzítjük abban a pozícióban, ahol megtaláltuk a célfüggvény értékek közül a legkisebbet. Ha több ilyen is

van, tetszőlegesen választunk. A következő lépésben a 2. változó szerint keressük meg a minimumot, és így tovább. Amikor az utolsó változóban is elvégeztük az optimalizálást, előlről kezdjük, a változókon ismét végighaladva. Ezúttal viszont csak akkor optimalizálunk egy adott változó szerint, ha az előző ciklusban a célfüggvény értékének változása egy bizonyos korlátot meghalad. Ezzel heurisztikusan azt szeretnénk elérni, hogy olyan változók szerint optimalizáljunk, ahol nagy változást remélünk. Ezt a toleranciát pedig ciklusról ciklusra csökkenthetjük.

Ez az elsődleges további kutatási irány, amely első sorban a több változóra optimalizálható színreceptszámításra nyújtana megoldást.