



DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2025.3.6>

УДК 519.6:678.5

ББК М143

Дата поступления статьи: 16.03.2025

Дата принятия статьи: 18.06.2025

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ НЕКОРРЕКТНОЙ ЗАДАЧИ, ВОЗНИКАЮЩЕЙ ПРИ ВЫЧИСЛЕНИИ ПАРАМЕТРОВ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОПТИМИЗАЦИИ СОСТАВА ПОЛИМЕРНОЙ КОМПОЗИЦИИ

Егор Федорович Феоктистов

Аспирант,

Волгоградский государственный университет

freshstyler@mail.ru

<https://orcid.org/0000-0002-1053-0000>

просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Аннотация. В статье рассматривается проблема оптимизации состава полимерной композиции, возникающая из-за недостаточности экспериментальных данных о взаимодействиях ингредиентов и их влиянии на свойства материала. В условиях ограниченных данных предлагается метод для оценки неизвестных параметров модели, использующейся для оптимизации состава, таких как вектор и матрица взаимодействий добавок и их влияние на целевые свойства полимерной композиции. Для решения задачи используется регуляризация некорректной задачи, возникающей при попытке найти параметры модели на основе ограниченного числа рецептур. Основной подход заключается в минимизации нормы разности между правой и левой частями системы уравнений, что позволяет получить приближенные значения искомых параметров. Работа включает в себя вычислительный эксперимент, в рамках которого исследуются рецептуры из двух патентов, что иллюстрирует практическую применимость предложенного метода для реальных полимерных композиций. Регуляризация позволяет корректно оценить параметры даже при несовместимости исходных данных, что делает метод эффективным инструментом для предварительного моделирования и сокращения объема натурных экспериментов в химической технологии.

Ключевые слова: задача квадратичного программирования, полимерные композиции, машинное обучение, малые данные, некорректные задачи, регуляризация.

Введение

Математическое моделирование занимает центральное место в химической технологии, где оно применяется для проектирования, оптимизации и управления технологическими процессами. Особенно важно моделирование при создании полимерных композиций, так как это позволяет прогнозировать свойства материалов и определять оптимальные параметры их состава. Однако построение таких моделей сталкивается с серьезными трудностями, связанными с ограниченностью и неполнотой информации, доступной из предметной области. Полимерные системы являются сложными многокомпонентными структурами, свойства которых сильно зависят от состава, что создает дополнительную сложность при обработке данных.

Одним из подходов к решению таких задач является применение методов машинного обучения, которые демонстрируют значительные успехи в анализе сложных систем. Например, алгоритмы машинного обучения широко используются для прогнозирования свойств материалов на основе экспериментальных данных [1]. Однако в случае полимерных композиций существует важное ограничение: даже небольшое изменение состава может привести к значительным изменениям свойств системы. Это означает, что данные, полученные для одной композиции, уже не применимы к другой, что резко сокращает объем доступной обучающей выборки. Такая ситуация создает проблему малых данных, при которой традиционные методы машинного обучения оказываются малоэффективными из-за недостаточной информативности исходных данных. Для преодоления этой проблемы разрабатываются методы машинного обучения, адаптированные для работы с малыми данными, такие как подходы с переносом знаний или использование априорной информации.

В контексте описанных ограничений возникает необходимость регуляризации некорректных задач, что позволяет построить устойчивые модели даже при неполноте данных. Регуляризация направлена на минимизацию ошибок, вызванных недостаточной определенностью исходной информации, и является ключевым инструментом для обеспечения надежности и точности моделирования полимерных композиций.

Регуляризация некорректных задач является важной темой в области химической технологии, поскольку она играет значительную роль, расширяя возможности математического моделирования. Существует достаточно большое количество методов их решения, которые были постулированы известными математиками, однако их имплементация в области химической технологии еще не изучена достаточно подробно и имеет небольшое практическое значение.

Одним из распространенных методов, используемых для регуляризации, является регуляризация Тихонова, которая заключается в добавлении члена регуляризации к целевой функции, чтобы управлять значениями параметров через систему штрафов и тем самым предотвратить переобучение. Этот подход широко использовался в химической технологии для решения прямых и обратных задач, таких как оценка параметров и идентификация систем на молекулярном уровне [10–12].

Другим популярным методом регуляризации является регуляризация с полной вариацией, которая способствует разреженности решений, накладывая штраф на общую вариацию параметров. Этот подход особенно полезен для задач, включающих разреженные или кусочно-постоянные решения, таких как устранение размытия изображений и шумоподавление при химической визуализации [13].

В дополнение к этим традиционным методам регуляризации, для регуляризации

в химической технологии также применяются подходы машинного обучения, такие как глубокое обучение. Модели глубокого обучения, такие как сверточные нейронные сети, показали многообещающие результаты в решении некорректных обратных задач путем изучения сложных взаимосвязей в данных и неявной регуляризации решения через сетевую архитектуру [6; 7].

Кроме того, байесовские методы использовались для регуляризации в химической технологии, чтобы включить предварительные знания или ограничения в формулировку обратной задачи. Байесовская регуляризация позволяет количественно оценить неопределенность решения и обеспечивает принципиальную основу для включения предварительной информации в процесс регуляризации [8; 9].

1. Постановка задачи

Так как зачастую можно говорить только о конечных свойствах полимерной композиции, то обычно неизвестно множество важных деталей самого процесса построения химической системы: как взаимодействовали добавки и ингредиенты между собой в процессе синтеза, функции каждого из ингредиентов и его свойства могут по-разному проявляться в разных полимерных композициях, функция влияния каждого ингредиента на композицию зависит не только от его концентрации в веществе, но и от других факторов, таких как состав полимерной композиции, технологический процесс ее производства и т. п.

Большинство этих данных возможно получить лишь экспериментальным путем, однако проведение такого количества экспериментов для глубокого понимания данной предметной области слишком затратно. Здесь возникает необходимость предварительного, хотя бы приблизительного, моделирования для уменьшения объема натурального эксперимента. Итак, рассмотрим следующую задачу.

Пусть есть полимер, который обозначен как P . На основе P доступны рецепты, обозначаемые через F_i , где $i = 1, \dots, n$. Каждая рецептура описывает состав некоторой полимерной композиции, причем ингредиенты в этих полимерных композициях одни и те же, а рецепты отличаются только концентрацией ингредиентов. Ингредиенты, входящие в состав полимерных композиций, обозначены через $s_j, j = 1, \dots, m$. Концентрация каждого ингредиента s_j в F_i обозначена через c_{ij} , соответственно получили матрицу $C = (c_{ij})_{i=1, j=1}^n m$. Q_k будет обозначать свойство $P, k = 1, \dots, r$. Через x_{ik} обозначено значение свойства Q_k полимерной композиции в рецептуре F_i , соответственно $x_k = (x_{ik})_{i=1}^n$. На данном этапе в рамках задачи рассматривается некоторое фиксированное свойство Q_{k^*} .

Решается задача получить новую полимерную композицию с теми свойствами, которые в наибольшей степени удовлетворяют запросам потребителя. Для решения этой задачи используется модель для оптимизации состава полимерной композиции [5], но для использования данной модели необходимо знать параметры l и D , однако при изменении ингредиентов эти параметры меняются, поскольку их значения зависят от того, как взаимодействуют друг с другом данные ингредиенты. Определение этих параметров для каждой подобной композиции вызывает трудности и для решения этой проблемы посвящена данная статья — вычисление данных параметров l и D , чтобы в дальнейшем можно было вычислить оптимальную ингредиентов для наилучших проявлений необходимых свойств.

В работе [5] была предложена формула

$$\begin{aligned} x_{ik^*} &= c_i l_{k^*} - c_i D_{k^*} c_i^T \rightarrow \max, \\ \sum_{i=1}^n c_i &\leq p, c_i \leq p_i^{\max}, c_i \geq p_i^{\min}, i = \overline{1, n}, \end{aligned} \quad (1)$$

где элементы матрицы $D_{k^*} = (d_{j_1 j_2 k^*})_{j_1, j_2=1}^m$ показывают удельное на единицу концентрации взаимодействие пары добавок s_{j_1} и s_{j_2} , а элементы вектора $l_{k^*} = (l_{jk^*})_{j=1}^m$ — удельное воздействие добавки s_j на проявление свойства Q_{k^*} , c_i — вектор из c_{ij} , через $p_i^{\min}$ обозначена минимально возможная концентрация s_i , через $p_i^{\max}$ обозначим максимально возможную концентрацию s_i , через p — наибольшую суммарную концентрацию всех ингредиентов.

Для решения задачи (1) необходимо определить параметры, значения которых, вообще говоря, неизвестны. Нахождению значений этих параметров и посвящена данная работа. Задача состоит в том, чтобы, имея заданный набор рецептур $F_i, i = 1, \dots, n$, определить значения D_{k^*} и l_{k^*} .

2. Метод решения задачи

При моделировании таких сложных химических систем, как полимерные композиции, часто возникают параметры, которые характеризуют природу конкретных компонентов системы. Вообще говоря, эти параметры можно установить экспериментально, применяя методы предметной области, но, как правило, это довольно дорого и не всегда возможно. Другой способ — это применить методы машинного обучения и на основе известных подобных систем оценить нужные параметры. Но для этого требуется довольно много представителей данного класса систем, тогда как на практике обычно имеется всего несколько десятков или даже единиц представителей исследуемого класса систем.

В результате возникает задача, когда буквально по десятку (или около того) представителей исследуемого класса систем необходимо оценить параметры конкретной системы (в данном случае полимерной композиции).

На данном этапе будем полагать, что в модели (1) параметры D_{k^*} и l_{k^*} постоянны и от концентрации ингредиентов не зависят. Поэтому, зная из рецептур F_i проявление x_{ik^*} свойства Q_{k^*} для определенного набора концентраций c_{ij} ингредиентов s_j , подставим эти значения в целевую функцию (1) и получим систему уравнений относительно l_{k^*} и D_{k^*} :

$$\{x_{ik^*} = c_i l_{k^*} - c_i D_{k^*} c_i^T, i = 1, \dots, n. \quad (2)$$

Основной проблемой такого подхода является возникновение некорректных задач. Выходом из этой ситуации может быть регуляризация некорректной задачи для получения приближенного решения [4].

При оценке указанных параметров l_{k^*} и D_{k^*} могут возникать разные случаи, приводящие к нарушению корректности задачи. В данной работе рассматривается случай, когда система (2) не имеет решений. Это может иметь место, например, когда $n > m$, и многие системы тогда оказываются несовместны.

То есть получается переопределенная система уравнений, которая во многих случаях не имеет решений. В результате имеется некорректная задача, для решения которой

предлагается применить регуляризацию. Для регуляризации данной некорректной задачи можно минимизировать норму разности между правой и левой частью системы уравнений (2), что представлено в (3):

$$\|z\|_2 \rightarrow \min, \quad (3)$$

$$z_i = c_i l_{k*} - c_i D_{k*} c_i^T = x_{ik*}, \quad z = (z_i)_{i=1}^n.$$

Решение задачи (3) не представляет особой сложности — конкретный пример будет приведен в следующем разделе. В результате минимизации (3) было получено приближенное решение системы уравнений (2).

3. Вычислительный эксперимент

В качестве вычислительного эксперимента предлагается оценить два патента: композиционный полимерный материал для вибропоглощающих покрытий [2] и многослойный огнестойкий антистатический материал технического назначения [3].

В каждом из этих патентов представлен ряд рецептов идентичных по составу, но различных по концентрациям. Таким образом, получено две группы рецептов. Для каждой из них выбрано по два анализируемых свойства. В первом случае это деформация, выражаемая в миллиметрах.

Таблица 1

Концентрации c_{ij} и проявление свойства x_{ik} в первом патенте [2]

Номер рецептуры, j	Ингредиент, i , ед. изм.		Свойство, k , ед. изм.	
	Пластификатор, 1, % концентрации	Антипирен, 2, % концентрации	Деформация, $k^* = 1$, мм	Деформация, рассчитанная по модели (1)
1	16,5	0,4	0,55	0,55
2	11,7	0,3	0,55	0,54
3	10	0,04	0,48	0,47
4	8	0,2	0,47	0,46
5	9	0,3	0,47	0,47
6	16,6	0,3	0,55	0,55
7	7	0,2	0,49	0,47
8	8	0,06	0,50	0,48
9	10	0,2	0,48	0,48
10	12,1	0,4	0,55	0,54

Рассмотрим первый патент и приведенные рецепты, положив $i = 1, \dots, 10$ — номер ингредиента в полимерной композиции. Номер свойства деформации принят, как значение индекса $k^* = 1$. Информация, данная в рецептурах, позволяет приближенно рассчитать вектор l и матрицу D , используя систему уравнений (2) и регуляризацию (3). Данные из патента [2] приведены в таблице 1. В последнем столбце указаны значения, которые будут рассчитаны ниже.

Подобным образом из второго патента были взяты данные рецептов ПК, где в качестве свойства рассматривается твердость (табл. 2). Номера рассмотренных рецептов во втором патенте обозначены через значения индекса $i = 11, \dots, 20$, а номер свойства твердости принят за значение $k^* = 2$.

При подстановке значений из таблицы 1 в систему (2) для первого патента с десятью испытаниями и аналогично для второго из таблицы 2 были получены две системы

Таблица 2

Концентрации c_{ij} и проявление свойства x_{ik} во втором патенте [3]

Номер рецептуры, j	Ингредиент, i , ед. изм.		Свойство, k , ед. изм.	
	Пластификатор, 1, % концентрации	Антипирен, 2, % концентрации	Деформация, $k^* = 1$, мм	Деформация, рассчитанная по модели (1)
11	46	4	7,5	7,49
12	43	4	7,4	7,25
13	46	3	7,3	7,36
14	52	6	7,2	7,21
15	50	5	7,2	7,21
16	45	4	7,5	7,44
17	47	6	7,4	7,43
18	52	5	7,2	7,31
19	50	4	7,3	7,34
20	50	3	7,3	7,33

линейных уравнений относительно $d_{j_1 j_2 k^*}$, l_{jk^*} , где $j = 1, \dots, m$. Как и следовало ожидать, вышло, что у этих систем уравнений нет решений, так как они несовместны. В связи с этим, как было предложено выше, используем регуляризацию (3), которая представляет собой метод наименьших квадратов. Решение задачи методом наименьших квадратов общеизвестно, поэтому здесь не приводится. В результате применения метода наименьших квадратов было получено приближенное решение задачи (2) для обеих систем линейных уравнений.

В качестве примера приведем подстановку данных из первой строки таблицы 1, в результате чего получается одно из уравнений системы линейных уравнений:

$$0,55 = (16,5 \quad 0,4) \begin{pmatrix} l_{1k^*} \\ l_{2k^*} \end{pmatrix} - (16,5 \quad 0,4) \begin{pmatrix} d_{11k^*} & d_{12k^*} \\ d_{21k^*} & d_{22k^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 16,5 \\ 0,4 \end{pmatrix}$$

$$l_1 = (4,765, 3,9); D_1 = \begin{pmatrix} 4,765 & 390,2 \\ 390,2 & 3,9 \end{pmatrix}$$

$$l_2 = (895,5, 73826,7); D_2 = \begin{pmatrix} 895,5 & 74101 \\ 74101 & 73826,7 \end{pmatrix}$$

Затем для оценки погрешности данного решения полученные параметры l_{k^*} и D_{k^*} были подставлены в задачу (1) наряду с концентрациями из соответствующих таблиц (табл. 1 и 2), чтобы сравнить измеренные значения свойств и значения свойств, рассчитанные при помощи модели (1). Результаты приведены в таблицах 1 и 2 в правом крайнем столбце. Максимальная относительная погрешность для рассчитанных значений по данным патента 1 составила 0,041, а для патента 2 — 0,014.

Подставляя полученные параметры в модель (1) и решая ее, используя алгоритм квадратичного программирования по Хилдреду и Пауэллу, известный как QLD и используемый в программном обеспечении SciLab, получается следующая оптимальная концентрация ингредиентов для наилучшего проявления свойств в заданных условиях: 16,8 % пластификатора и 0,44 % антипирена для первого патента, и 47 % и 5 % для этих же добавок во втором случае.

Заключение

Была рассмотрена известная модель квадратичного программирования, которая использовалась для приближенного решения задачи оптимизации состава полимерной ком-

позиции. Эта модель в данной области не используется ввиду сложности получения параметров l и D предложенной модели. В статье предложен метод, позволяющий приближенно оценивать эти параметры, и на этой основе проиллюстрировано на примерах решение задачи определения оптимального состава полимерной композиции.

В данной работе была рассмотрена проблема моделирования свойств полимерных композиций на основе ограниченного количества доступных данных о рецептурах и концентрациях ингредиентов. Особое внимание уделено использованию метода регуляризации для решения возникающих некорректных задач, связанных с оценкой параметров модели, определяющих поведение системы. Проблема некорректности, связанная с отсутствием решения, характерна для таких задач из-за ограниченности данных и сложности взаимодействий ингредиентов в полимерных композициях.

Для решения этих проблем предложено применение методов регуляризации, которые позволяют получать решение и обеспечивать его интерпретируемость. Среди рассмотренных методов особое внимание уделено регуляризации методом минимизации нормы разности, которая доказала свою эффективность в задачах оценки параметров и идентификации систем. Кроме того, перспективным направлением в данной области является использование методов машинного обучения, таких как глубокое обучение, нечеткие и байесовские подходы, которые позволяют учитывать априорную информацию о системе и оценивать неопределенность решений.

Полученная математическая модель позволяет количественно оценить как влияние каждого ингредиента полимерной композиции на проявление целевых свойств, так и учитывать их взаимодействие. Однако для успешного применения предложенной модели необходимо корректно определить параметры модели. Как показано в работе, одним из ключевых этапов является построение надежных методов регуляризации, которые не только позволяют получить конкретную модель для предоставленных данных, но и предоставляют содержательные результаты, применимые в реальных условиях.

Основные результаты исследования подчеркивают важность интеграции математического моделирования, регуляризационных методов и современных подходов машинного обучения для решения сложных задач химической технологии. Такой междисциплинарный подход позволяет не только преодолеть ограничения, связанные с недостатком экспериментальных данных, но и улучшить качество прогнозирования свойств композиционных материалов.

В качестве дальнейших направлений исследования можно выделить расширение базы данных, используемой для обучения моделей, что позволит применять более сложные и точные алгоритмы машинного обучения. Также перспективным является развитие гибридных методов, комбинирующих преимущества различных типов регуляризации и машинного обучения, что позволит более точно учитывать специфику химических систем.

Таким образом, данная работа вносит определенный вклад в развитие методов математического программирования, применимых в области химической технологии, и открывает новые возможности для анализа и моделирования сложных полимерных композиций в условиях ограниченности данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гермашев, И. В. Применение моделей нечеткой математики для решения задач медицинской диагностики / И. В. Гермашев, В. И. Дубовская // Математическая физика и компьютерное моделирование. — 2021. — Т. 24, № 4. — С. 53–66. — DOI: <http://dx.doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2021.4.4>
2. Композиционный полимерный материал для вибропоглощающих покрытий и способ их монтажа. Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам. — URL: https://new.fips.ru/registers-doc-view/fips_servlet?DB=RUPAT&DocNumber=2534242&TypeFile=html
3. Материал многослойный огнестойкий антистатический технического назначения. Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам. — URL: https://new.fips.ru/registers-doc-view/fips_servlet?DB=RUPAT&DocNumber=2810017&TypeFile=html
4. Самарский, А. А. Введение в численные методы / А. А. Самарский. — М. : Наука, 1987. — Т. 3. — 269 с.
5. Феоктистов, Е. Ф. Оптимизация концентрации ингредиентов полимерной композиции в условиях нечетко заданного взаимодействия активных добавок / Е. Ф. Феоктистов, И. В. Гермашев // Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). — 2023. — № 64 (90). — С. 113–119. — DOI: <http://dx.doi.org/10.36807/1998-9849-2023-64-90-113-119>
6. Alaifari, R. Ill-Posed Problems: From Linear to Nonlinear and Beyond / R. Alaifari // Harmonic and Applied Analysis: From Radon Transforms to Machine Learning. — 2021. — P. 101–148.
7. A Machine Learning Framework for Real-Time Inverse Modeling and Multi-Objective Process Optimization of Composites for Active Manufacturing Control / K. D. Humfeld, D. Gu, G. A. Butler, K. Nelson, N. Zobeiry // Composites Part B: Engineering. — 2021. — Vol. 223. — P. 109150.
8. Bayesian Regularization Networks for Micropolar Ternary Hybrid Nanofluid Flow of Blood with Homogeneous and Heterogeneous Reactions: Entropy Generation Optimization / B. K. Sharma, P. Sharma, N. K. Mishra, S. Noeiaghdam, U. Fernandez-Gamiz // Alexandria Engineering Journal. — 2023. — Vol. 77. — P. 127–148.
9. Data Fusion by Joint Non-Negative Matrix Factorization for Hypothesizing Pseudo-Chemistry Using Bayesian Networks / A. Puliyaanda, K. Sivaramakrishnan, Z. Li, A. de Klerk, V. Prasad // Reaction Chemistry & Engineering. — 2020. — Vol. 5, № 9. — P. 1719–1737.
10. Honerkamp, J. Tikhonovs Regularization Method for Ill-Posed Problems: A Comparison of Different Methods for the Determination of the Regularization Parameter / J. Honerkamp, J. Weese // Continuum Mechanics and Thermodynamics. — 1990. — Vol. 2. — P. 17–30.
11. Lu, S. Regularization Theory for Ill-Posed Problems: Selected Topics / S. Lu, S. V. Pereverzev // Walter de Gruyter. — 2013. — Vol. 58
12. Parallel Computing in the Tikhonov Regularization Method for Solving the Inverse Problem of Chemical Kinetics / K. Barkalov, M. Ursova, L. Enikeeva, D. Dubovtsev, I. Gubaidullin // International Conference on Parallel Computational Technologies. — Cham : Springer Nature Switzerland, 2023. — P. 167–181.
13. Total Generalized Variation Regularization for Multi-Modal Electron Tomography / R. Huber, G. Haberfehlner, M. Holler, G. Kothleitner, K. Bredies // Nanoscale. — 2019. — Vol. 11, № 12. — P. 5617–5632.

REGULARIZATION OF AN ILL-POSED PROBLEM ARISING WHEN CALCULATING THE PARAMETERS OF A MATHEMATICAL MODEL FOR OPTIMIZING THE COMPOSITION OF A POLYMER COMPOSITE

Egor F. Feoktistov

Postgraduate Student,
Volgograd State University
freshstyler@mail.ru
<https://orcid.org/0000-0002-1053-0000>
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Abstract. The article considers the problem of optimization of the polymer composition, which arises due to the insufficient experimental data on the interactions of ingredients and their effect on the properties of the material. Under conditions of limited data, a method is proposed for estimating unknown parameters of the model used to optimize the composition, such as the vector and matrix of interactions of additives and their effect on the target properties of the polymer composition. To solve the problem, regularization of the ill-posed problem is used, which occurs when trying to find the model parameters based on a limited number of recipes. The main approach is to minimize the norm of the difference between the right and left parts of the system of equations, which allows obtaining approximate values of the sought parameters. The work includes a computational experiment in which recipes from two patents are studied, which illustrates the practical applicability of the proposed method for real polymer compositions. Regularization allows you to correctly estimate the parameters even with incompatible initial data, which makes the method an effective tool for preliminary modeling and reducing the volume of natural experiments in chemical engineering.

Key words: quadratic programming problem, polymer composites, machine learning, small data, ill-posed problems, regularization.