Сибирский федеральный университет

Электронный учебно-методический комплекс

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И ОБЪЕКТОВ В МЕТАЛЛУРГИИ

Учебная программа дисциплины

➤ **Конспект лекций**

Лабораторный практикум

Методические указания по самостоятельной работе

Методические указания по выполнению курсовой работы

Банк тестовых заданий в системе UniTest

Красноярск
ИПК СФУ
2008

УДК 669:519.216
ББК 34.3-02
М74

Авторы:
Б. М. Горенский, Л. А. Лапина, А. Ш. Любанова, А. В. Паршаков, Р. А. Шигапов, С. В. Капустина

Электронный учебно-методический комплекс по дисциплине «Моделирование процессов и объектов в металлургии» подготовлен в рамках инновационной образовательной программы «Многоуровневая подготовка специалистов и инновационное обеспечение горно-металлургических предприятий по сертификации, управлению качеством, технологической и экономической оценке минерального, вторичного и техногенного сырья», реализованной в ФГОУ ВПО СФУ в 2007 г.

Рецензенты:
Красноярский краевой фонд науки;
Экспертная комиссия СФУ по подготовке учебно-методических комплексов дисциплин

М74 Моделирование процессов и объектов в металлургии. Версия 1.0 [Электронный ресурс] : конспект лекций / Б. М. Горенский, Л. А. Лапина, А. Ш. Любанова и др. – Электрон. дан. (2 Мб). – Красноярск : ИПК СФУ, 2008. – (Моделирование процессов и объектов в металлургии : УМКД № 214-2007 / рук. творч. коллектива А. Ш. Любанова). – 1 электрон. опт. диск (*DVD*). – Систем. требования : *Intel Pentium* (или аналогичный процессор других производителей) 1 ГГц ; 512 Мб оперативной памяти ; 2 Мб свободного дискового пространства ; привод *DVD* ; операционная система *Microsoft Windows* 2000 *SP* 4 / *XP SP* 2 / *Vista* (32 бит) ; *Adobe Reader* 7.0 (или аналогичный продукт для чтения файлов формата *pdf*).

ISBN 978-5-7638-1276-3 (комплекса)
ISBN 978-5-7638-1465-1 (конспекта лекций)
Номер гос. регистрации в ФГУП НТЦ «Информрегистр» 0320802566 от 05.12.2008 г. (комплекса)

Настоящее издание является частью электронного учебно-методического комплекса по дисциплине «Моделирование процессов и объектов в металлургии», включающего учебную программу, лабораторный практикум, методические указания по самостоятельной работе, методические указания по выполнению курсовой работы, контрольно-измерительные материалы «Моделирование процессов и объектов в металлургии. Банк тестовых заданий», наглядное пособие «Моделирование процессов и объектов в металлургии. Презентационные материалы».

В конспекте лекций даны основные понятия и рассмотрены методологические вопросы математического моделирования. Изложены наиболее широко применяемые в настоящее время численные методы исследования моделей. Рассмотрены вопросы идентификации математических моделей. Приведены модели реальных металлургических процессов. Каждая тема снабжена контрольными вопросами и заданиями для самопроверки.

Предназначен для студентов направления подготовки магистров 150100.68 «Металлургия» укрупненной группы 150000 «Материаловедение, металлургия и машиностроение».

© Сибирский федеральный университет, 2008

Рекомендовано к изданию
Инновационно-методическим управлением СФУ

Редактор Л. Г. Семухина

Разработка и оформление электронного образовательного ресурса: Центр технологий электронного обучения информационно-аналитического департамента СФУ; лаборатория по разработке мультимедийных электронных образовательных ресурсов при КрЦНИТ

Содержимое ресурса охраняется законом об авторском праве. Несанкционированное копирование и использование данного продукта запрещается. Встречающиеся названия программного обеспечения, изделий, устройств или систем могут являться зарегистрированными товарными знаками тех или иных фирм.

Подп. к использованию 14.11.2008
Объем 2 Мб
Красноярск: СФУ, 660041, Красноярск, пр. Свободный, 79

Оглавление

ПРЕДИСЛОВИЕ..... 7
ТЕМА 1. ВВЕДЕНИЕ. ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ 8
Лекция 1. Введение в моделирование..... 8
План лекции 8
Объект моделирования 8
Основные понятия и определения..... 8
Место и роль математического моделирования в задачах исследования, проектирования и оптимизации технологических систем 10
Использование моделирования при исследовании и проектировании АСУ..... 11
Классификация процессов как объектов моделирования 12
Постановка задачи моделирования в общем виде..... 13
Лекция 2. Общие сведения о математическом моделировании 15
План лекции 15
Общая классификация моделей 15
Структурно-параметрическое описание и назначение параметров объекта 19
Дискретные и непрерывные модели..... 21
Контрольные вопросы и задания 22
ТЕМА 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТЕРМИНИРОВАННЫХПРОЦЕССОВ. ОБЩИЕ ВОПРОСЫ СИНТЕЗА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ЦВЕТНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ 23
Лекция 3. Моделирование детерминированных процессов 23
План лекции 23
Математический аппарат, используемый при синтезе математической модели..... 23
Метод активного и пассивного эксперимента..... 24
Алгебраические линейные и нелинейные уравнения..... 24
Дифференциальные уравнения 25
Метод аналогий 27
Лекция 4. Стохастические модели..... 28
План лекции 28
Экспериментально-статистические методы математического описания 29
Основные понятия теории случайных величин..... 29
Построение и исследование регрессионных моделей 31

Регрессионный анализ при пассивном и активном эксперименте 34
Контрольные вопросы и задания 34
ТЕМА 3. ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ АНАЛИЗА И РАСЧЕТА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ 36
Лекция 5. Интерполяционные и статистические методы обработки исходных данных 36
План лекции 36
Интерполяционные методы обработки исходных данных 36
Интерполяционная формула Ньютона с разделенными разностями 37
Многочлен Лагранжа 38
Методы первичной обработки статистических данных 41
Лекция 6. Понятие о численных методах решения алгебраических и дифференциальных уравнений 43
План лекции 43
Метод половинного деления для уравнения $f(x) = 0$ 43
Метод итераций для одного уравнения с одним неизвестным 44
Метод Ньютона 46
Лекция 7. понятие о Численных методах решения алгебраических и дифференциальных уравнений 47
План лекции 47
Методы решения дифференциальных уравнений 48
Методы Рунге–Кутта 51
Методы прогноза и коррекции 52
Обзор математических и статистических систем 54
Лекция 8. Численные методы безусловной оптимизации 57
План лекции 57
Постановка задачи и условия оптимальности 57
Математическая постановка задачи: 59
Методы одномерной безусловной минимизации 60
Методы многомерной безусловной оптимизации 62
Контрольные вопросы и задания 64
ТЕМА 4. УПРАВЛЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ ПРОЦЕССАМИ В ДИНАМИКЕ 66
Лекция 9. Постановка и классификация задач условной оптимизации 66
План лекции 66
Понятие о задаче условной оптимизации. Классификация задач оптимизации 66
Понятие о численных методах оптимизации 69
Условия оптимальности в общей задаче оптимизации 70

Лекция 10. Линейное программирование 71
План лекции 71
Постановка и свойства задач линейного программирования 71
Симплекс-метод 77
Лекция 11. Линейное программирование 80
План лекции 80
Теория двойственности 80
Разработка моделей линейного программирования 84
Простейшая задача производственного планирования 84
Транспортная задача 86
Лекция 12. Задачи дискретной оптимизации и динамического программирования 88
План лекции 88
Постановка и примеры дискретных оптимизационных задач 88
Понятие о методе динамического программирования 92
Принцип оптимальности и рекуррентное соотношение 93
Контрольные вопросы и задания 96
ТЕМА 5. ИДЕНТИФИКАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ 98
Лекция 13. методы Идентификации математических моделей 98
План лекции 98
Понятие идентификации 98
Методы структурной идентификации 99
Методы проверки гипотезы об адекватности структуры модели 100
Методы параметрической идентификации 102
Динамические модели 107
Лекция 14. Организация вычислительного эксперимента 108
План лекции 108
Понятие погрешности 108
Источники возникновения погрешности 109
Достоверность результатов вычислительного эксперимента 115
Контрольные вопросы и задания 116
ТЕМА 6. ПРИМЕРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ 118
Лекция 15. Моделирование процесса обжига молибденового концентрата 118
План лекции 118
Описание процесса 118
Лекция 16. Моделирование процесса обжига катодов алюминиевого электролизера 122
План лекции 122
Описание процесса 122

Математическая модель 128
Лекция 17. примеры решения оптимизационных задач в металлургии..... 129
План лекции 129
Математическая модель процесса рудно-термической плавки 130
Анализ влияния основных режимных параметров на технологический процесс плавки в РТП 132
Оптимизация содержания никеля в отвальных шлаках 135
Построение регрессионного уравнения для концентрации никеля в отвальных шлаках 138
Построение регрессионного уравнения для температуры 138
Оптимизация удельного расхода электроэнергии 141
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК 145

ПРЕДИСЛОВИЕ

Внедрение новых информационных технологий в процесс разработки автоматизированных систем способствует дальнейшему развитию математического моделирования. Увеличивается многообразие используемых моделей, самостоятельное значение приобретают математические методы решения вычислительных задач. Совершенствуется и процесс моделирования с использованием не только больших ЭВМ, но и персональной техники, объединенной в информационно-вычислительные системы. Возникают новые перспективные направления в теории математического моделирования, ориентированные на анализ и синтез сложных систем. Математическое моделирование стало средством, позволяющим без капитальных затрат решать проблемы построения сложных систем и управления технологическими процессами.

Предлагаемое учебное издание написано в соответствии с программой дисциплины «Моделирование процессов и объектов в металлургии». Оно состоит из шести тем и включает семнадцать лекций. Первая тема носит вводный характер. Она посвящена общим вопросам теории моделирования, здесь рассмотрены основные понятия и методологические аспекты моделирования. Во второй теме описаны методы построения детерминированных и стохастических математических моделей. В третьей теме дана характеристика численных методов решения основных математических задач, возникающих при моделировании объектов металлургии. Четвертая тема посвящена оптимизационным моделям управления технологическими процессами. Здесь приведены основные сведения о задачах условной оптимизации и методах их решения. В пятой теме изложены вопросы идентификации математических моделей и организации численного эксперимента. В шестой теме рассмотрены вопросы построения математических моделей некоторых реальных металлургических процессов.

Конспект лекций снабжен примерами, в которых применение излагаемых методов моделирования и решения соответствующих математических задач иллюстрируется на конкретном практическом материале и доводится до численного результата. Большое количество контрольных вопросов и заданий, помещенных в конце каждой темы, позволяет использовать конспект для самостоятельного освоения дисциплины и контроля знаний.

При создании конспекта были использованы оригинальные разработки в области математического моделирования металлургических процессов, выполненные авторами на кафедре прикладной математики и АСУ Сибирского федерального университета. Издание предназначено для студентов, аспирантов и преподавателей высших технических учебных заведений.

ТЕМА 1. ВВЕДЕНИЕ. ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

Лекция 1. Введение в моделирование

План лекции

1. Объект моделирования.
2. Основные понятия и определения.
3. Классификация процессов как объектов моделирования.
4. Постановка задачи моделирования в общем виде.

Объект моделирования

Объектом называется все, на что направлена человеческая деятельность. Выработка методологии управления объектами ориентирована на упорядочение получения и обработки информации об объектах, которые существуют вне нашего сознания и взаимодействуют между собой и внешней средой.

Научно-техническое развитие в любой области обычно идет по следующему пути: сначала ведутся наблюдения и ставятся эксперименты, затем выполняются теоретические исследования и, наконец, осуществляется организация производственных процессов. Такой подход дает возможность получить целостное представление об объекте моделирования и выработать рекомендации по управлению технологической системой, позволяющие оптимизировать технологический процесс.

Основные понятия и определения

В наиболее общем смысле теория математического моделирования (ММ) и оптимизации представляет собой совокупность фундаментальных математических результатов и численных методов, ориентированных на нахождение и идентификацию наилучших вариантов из множества альтернатив и позволяющих избежать полного перебора и оценки возможных вариантов. Например, необходимо построить цех по производству никеля. Это может быть реализовано путем строительства как электропечей, так и печей жидкой ванны (ПЖВ) различной мощности. Задача заключается в выборе еще на стадии проектирования наилучшего варианта из возможных. Процесс оптимизации лежит в основе всей инженерной деятельности, т.к. позволяет, с одной стороны, проектировать новые более эффективные и менее дорогостоящие технические системы и, с другой стороны, разрабатывать методы повышения качества функционирования существующих систем.

В теории моделирования и оптимизации нашли широкое применение следующие понятия.

Определение 1.1. *Гипотезой* называется определенное предсказание, основывающееся на небольшом количестве опытных данных, наблюдений.

Так, небольшое количество экспериментальных данных, полученных на промышленных рудно-термических печах (РТП), позволяет предположить возможность использования напряженности магнитного поля $H_м$, наведенного с наружной стороны электропечи, для контроля уровня расплавов в ней. При формулировании и проверке правильности гипотез большое значение в качестве метода суждения может быть использована аналогия.

Определение 1.2. *Аналогией* называется суждение о каком-либо частном сходстве двух объектов.

Причем такое сходство может быть существенным и несущественным. В частности, в качестве аналогии можно рассмотреть дуговые электропечи для плавки черных металлов и электрокорунда. Данные печи обладают тем частным свойством, что для плавления шихты в них используется электрическая дуга трехфазного тока. Гипотезы и аналогии должны обладать наглядностью и сводиться к удобным для исследования логическим схемам или моделям.

Определение 1.3. Строго говоря, *моделью* называется записанная на определенном языке (естественном, математическом и др.) совокупность знаний, представлений и гипотез об объекте или явлении. Соответственно, *моделирование* – это замещение одного объекта другим с целью получения информации о важнейших свойствах объекта-оригинала с помощью объекта-модели.

В качестве модели можно рассмотреть «холодную» модель электролизера, в которой вместо расплава электролита используют раствор электролита. Такие модели с успехом применяют для исследования электрических режимов электролизеров, а также токораспределения в ванне электролизера или рудно-термической электропечи.

Определение 1.4. *Адекватность* модели объекту есть показатель того, что результаты моделирования подтверждаются и могут служить основой для прогнозирования процессов, протекающих в исследуемых объектах.

Адекватность модели зависит от целей моделирования и принятых критериев. Учитывая заложенную при создании неполноту модели, можно утверждать, что идеально адекватная модель принципиально невозможна.

Место и роль математического моделирования в задачах исследования, проектирования и оптимизации технологических систем

Для изучения и оптимизации существующих и проектирования вновь разрабатываемых технологических систем их необходимо представить в виде, удобном для исследования. С этой целью техническую систему упрощают. Такую систему (или ее часть), называемую системой автоматического управления (СУ), можно представить состоящей из двух частей: объекта управления (ОУ) и устройства управления (УУ) (рис. 1.1, *а*). На рис. 1.1, *б* представлен пример системы управления процессом плавки в РТП.

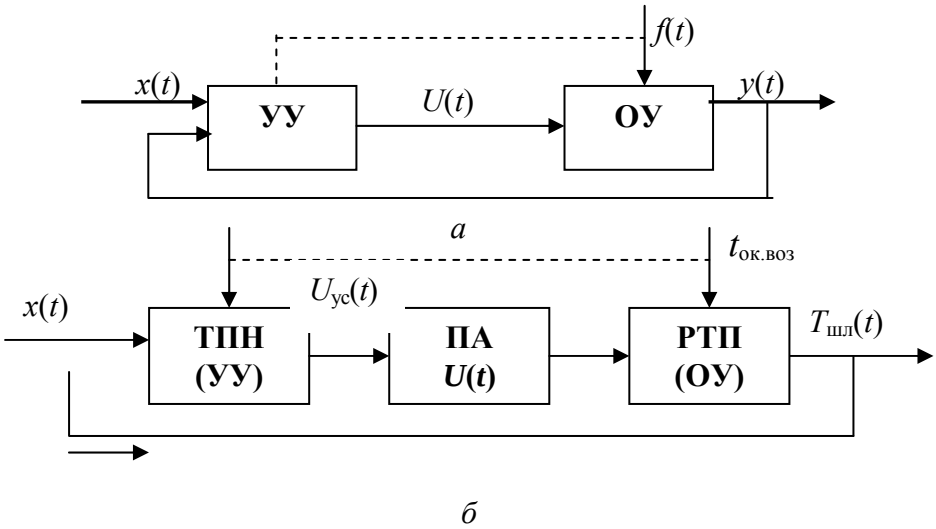

Рис. 1.1. Структурная схема системы автоматического моделирования
а – в общем виде; *б* – система автоматического управления электрическим режимом РТП

Здесь ТПН – это тиристорный преобразователь напряжения; ПА – перемещение электрода; $x(t)$ – входное воздействие; $y(t)$ – выход системы, ОУ; $U_{ус}(t)$ – управляющее воздействие; $f(t)$ – случайные возмущения; РТП – рудно-термическая печь; $T_{шл}(t)$ – температура шлака; $t_{ок.воз}$ – случайное возмущение температуры окружающего воздуха.

Под ОУ применительно к задачам инженерии подразумевается техническое устройство, процессом $y(t)$ на выходе которого надлежит управлять, УУ обобщает все входящие в контур СУ элементы, используемые с целью организации процесса управления. На вход системы управления подается воздействие $x(t)$, определяющее желаемый характер управляемого процесса $y(t)$, УУ на основании информации о процессах $x(t)$ и $y(t)$, а в ряде случаев и на основании данных о возмущениях $f(t)$, рассчитывает управляющее воздействие $U(t)$ на объект с целью приведения процесса $y(t)$ в соответствие с сигналом $x(t)$.

Для решения большинства задач анализа и синтеза СУ необходимо иметь математическую модель ОУ. Построение математической модели за-

ключается в установлении ряда соотношений, позволяющих при каждых входных воздействиях и начальных состояниях найти сигнал на выходе ОУ. Обычно модель получают как математическую формулировку физических законов, которым подчинена работа ОУ. В общем случае ОУ является многомерным и имеет l управляемых процессов – $y_1(t)$, $y_2(t)$, …, $y_l(t)$, m управляющих воздействий – $u_1(t)$, $u_2(t)$, …, $u_m(t)$, k внешних возмущений – $f_1(t)$, $f_2(t)$, …, $f_k(t)$ (рис. 1.2).

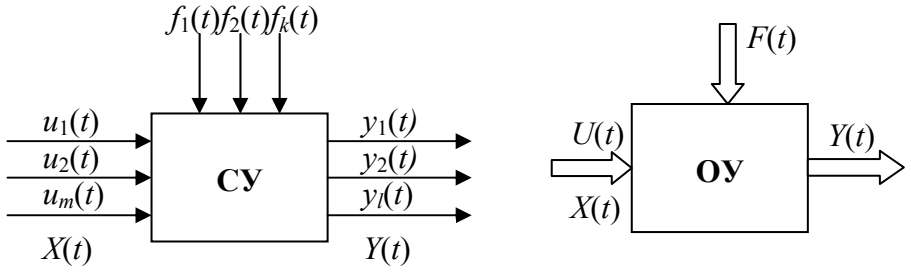

Рис. 1.2. Структурная схема управления объектом моделирования

Математическая запись физических законов, определяющих свойства непрерывного объекта, в большинстве случаев может быть представлена как система нелинейных дифференциальных уравнений, связывающих входные и выходные процессы и их производные:

$$\Phi_i[y_1(t), y_1^{(1)}(t), ..., y_1^{(n)}(t), ..., y_l^{(n)}; u_1, u_1^{(1)}, ..., u_1^{(n)}, u_2(t), ..., u_2^{(n)}, u_m(t), ..., u_m^{(n)};$$
$$f_1, f_1^{(1)}, ..., f_1^{(n)}, f_2(t), ..., f_2^{(n)}, f_m(t), ..., f_m^{(n)}] = 0$$

или

$$\Phi_i[\overline{y}(t), \overline{u}(t), \overline{f}(t)] = 0, \qquad i = 1, 2, ..., l. \tag{1.1}$$

При $l = 1$ объект называют одномерным.

Если функции Φ_i являются линейными относительно управляемых и управляющих процессов и их производных, то объект называют линейным по управлению, аналогично линейным по возмущению.

Математическая модель (1.1) в современной теории оптимальных и адаптивных систем получила ограниченное распространение. Гораздо чаще дифференциальные уравнения (1.1) n-го порядка представляют в виде системы из nl дифференциальных уравнений первого порядка, разрешенных относительно производных.

Использование моделирования при исследовании и проектировании АСУ

Одна из проблем современной науки и техники – разработка и внедрение в практику проектирования новейших методов исследования характеристик АСУ различных уровней. При проектировании обеспечивающих и

функциональных подсистем таких АСУ возникают многочисленные задачи, требующие оценки количественных и качественных закономерностей процессов функционирования систем, проведения их структурного, алгоритмического и параметрического синтеза.

Ограниченность возможностей экспериментального исследования больших систем делает актуальной задачу разработки методики их моделирования, которая бы позволила в соответствующей форме представить процессы функционирования систем, описать протекание этих процессов с помощью математической модели, получить результаты экспериментов с моделями по оценке характеристик исследуемого объекта.

Независимо от того, какие подсистемы составляют АСУ, при *разработке* каждой из них необходимо выполнить внешнее проектирование (макропроектирование) и внутреннее проектирование (микропроектирование).

На стадии макропроектирования должна быть создана обобщенная модель процесса функционирования АСУ, позволяющая разработчику сделать выводы об эффективности различных стратегий управления объектом при его взаимодействии с внешней средой. Например, управление энергетическим режимом электропечи может быть осуществлено с помощью изменения подводимого к электродам напряжения, заглубления электродов или регулированием количества и химического состава загружаемой в электропечь шихты.

На стадии микропроектирования разрабатывают модели с целью создания эффективных обеспечивающих подсистем АСУ. Выбор метода моделирования и необходимая детализация моделей существенно зависят от этапа разработки АСУ.

На этапах *разработки технического и рабочего проектов АСУ* модели отдельных подсистем детализируются и моделирование служит для решения конкретных задач проектирования.

Целевое назначение моделирования на *этапе внедрения и эксплуатации АСУ* – это проигрывание возможных ситуаций для принятия обоснованных и перспективных решений по управлению объектом. Моделирование также широко применяют при обучении и тренировке технологического персонала АСУ. В этом случае моделирование носит характер деловых игр.

Классификация процессов как объектов моделирования

Процессы, для управления которыми создаются АСУ, можно разделить на три группы:

♦ *непрерывные*, которые характеризуются непрерывным режимом работы (электролиз алюминия, электроплавка никелево-медного агломерата в РТП, спекание нефелинового концентрата);

♦ *полунепрерывные* (непрерывно-дискретные), которые характеризуются полунепрерывным режимом работы. Например, при плавке оловянных

концентратов в РТП происходит непрерывная загрузка шихты в течение определенного промежутка времени и затем выпуск продуктов плавки;

♦ *периодические*, которые характеризуются дискретным режимом работы, например, периодической загрузкой материалов в печь, проведением технологического процесса и выгрузкой полученного продукта (выращивание монокристаллов кремния).

В соответствии с приведенной классификацией процессов выделяются АСУ непрерывными, полунепрерывными и периодическими процессами. Наибольшую сложность представляет автоматизация периодических процессов. Для реализации АСУ необходимо промоделировать описание данного технологического процесса.

Постановка задачи моделирования в общем виде

С развитием системных исследований и расширением экспериментальных методов изучения реальных объектов большое значение приобретают математические методы анализа и синтеза. Подобие и моделирование позволяют по-новому описать реальный процесс и упростить экспериментальное его изучение.

Моделирование базируется на некоторой аналогии реального и мысленного эксперимента (выявление влияния изменения химического состава шихты на технико-экономические показатели (ТЭП) процесса плавки). Для объяснения реальных процессов выдвигаются гипотезы, с целью их подтверждения ставится эксперимент, т.е. некая процедура организации и наблюдения явлений, которую осуществляют в условиях, близких к реальным или имитирующих их. Токораспределение при электролизе расплавов солей можно оценить на моделях, использующих электролиз водных растворов электролитов.

В основе любого вида моделирования лежит модель, имеющая соответствие, базирующееся на общем качестве, которое характеризует реальный объект (например, описание с помощью дифференциальных уравнений процессов массопереноса).

В основе моделирования лежат информационные процессы, поскольку само создание модели базируется на информации о реальном объекте. В процессе реализации модели одновременно получается информация об ОУ, которая сравнивается с моделью, и на основе данных сравнения вырабатывается управляющее воздействие на процесс. Поэтому можно сказать, что реализация модели осуществляется одновременно с процессом.

При постановке задачи моделирования можно выделить следующие характерные признаки математической модели: цель функционирования, сложность, целостность, неопределенность, поведенческая стратегия, адаптивность, организационная структура, управляемость, возможность развития.

Цель функционирования определяет степень целенаправленного поведения модели. По этому признаку модели могут быть разделены на одно- и многоцелевые.

Сложность модели можно оценить по общему числу элементов в системе и связей между ними.

Целостность указывает на то, что создаваемая модель является одной общей системой, включает в себя большое количество составных частей, находящихся в сложной взаимосвязи друг с другом.

Неопределенность, которая проявляется в системе, оценивается энтропией. Используя эту характеристику, в ряде случаев можно определить количество управляющей информации для достижения заданного состояния системы.

Поведенческая стратегия позволяет оценить эффективность достижения системой поставленной цели. В зависимости от наличия случайных возмущений можно различать детерминированные и стохастические системы, по своему поведению – непрерывные и дискретные.

Адаптивность – приспосабливаемость к различным внешним возмущающим факторам в широком диапазоне изменения воздействий внешней среды. При этом система управления должна компенсировать изменение случайных факторов. Например, АСУ теплового режима электропечи должна стабилизировать температуру расплава как при изменении влажности шихты в рабочем диапазоне, так и при изменении содержания олова в концентрате, загружаемом в электропечь.

Организационная структура системы моделирования во многом зависит от сложности модели и степени совершенства средств моделирования.

Управляемость модели дает возможность обеспечивать управление процессом в различных условиях, имитирующих реальные. К этому можно отнести управление технологическим процессом как в нормальном, так и в предаварийном состоянии.

Возможность развития модели позволяет создавать мощные системы моделирования для исследования многих сторон функционирования реального объекта. Модель должна быть открытой: обеспечивать включение в ее состав новых подмоделей или подсистем управления (например, подсистем управления энергетическим и тепловым режимами, шихтоподготовкой и выпуском металла и т.д.).

Любую модель строят в зависимости от цели моделирования, поэтому одной из основных проблем при моделировании является проблема целевого назначения. При создании АСУ целью оптимизации может быть максимальная производительность, минимум потерь цветных металлов, снижение себестоимости продукции и некоторые другие цели.

Лекция 2. Общие сведения о математическом моделировании

План лекции

1. Общая классификация моделей.
2. Структурно-параметрическое описание и назначение параметров объекта.
3. Дискретные и непрерывные модели.

Общая классификация моделей

В основе моделирования лежит теория подобия, согласно которой абсолютное подобие может иметь место лишь при замене одного объекта другим, точно таким же. При моделировании невозможно добиться абсолютного подобия и нужно стремиться к тому, чтобы модель достаточно хорошо отражала исследуемую сторону функционирования объекта (например, процессы восстановления или осаждения металла). Поэтому в качестве одного из признаков классификации видов моделирования можно выбрать степень полноты модели и разделить модели в соответствии с этим признаком на полные, неполные и приближенные.

В основе *полного моделирования* лежит полное подобие, которое проявляется как во времени, так и в пространстве. Для *неполного моделирования* характерно неполное подобие модели изучаемому объекту («горячая» модель электролизера). *Приближенное моделирование* опирается на приближенное подобие, при котором отдельные стороны функционирования реального объекта не моделируются совсем («холодная» модель электролизера).

В зависимости от характера изучаемых процессов в системе все виды моделирования могут быть сведены в схему, представленную на рис. 2.1.

Детерминированное моделирование отображает детерминированные процессы (т.е. процессы, в которых предполагается отсутствие всяких случайных воздействий); *стохастическое моделирование* – вероятностные процессы и события.

Статическое моделирование служит для описания поведения объекта в какой-либо момент времени (в статике). *Динамическое моделирование* отражает закон изменения состояния объекта во времени.

Дискретное моделирование служит для описания дискретных процессов. *Непрерывное моделирование* позволяет отразить непрерывные во времени процессы. *Дискретно-непрерывное моделирование* используют, когда необходимо выделить наличие как дискретных, так и непрерывных процессов (непрерывный процесс плавки и периодический выпуск продуктов плавки).

Линейное моделирование применяют для описания линейных процессов, т.е. процессов, связь между входными и выходными параметрами которых линейна. *Нелинейное моделирование* предназначено для описания нелинейных процессов, в которых связь между выходом и входом системы нелинейна.

В зависимости от формы представления объекта можно выделить мысленное и реальное моделирование. При *реальном моделировании* использует-

ся возможность исследования характеристик либо на реальном объекте, либо на его части. Оно подразделяется на натурное и физическое.

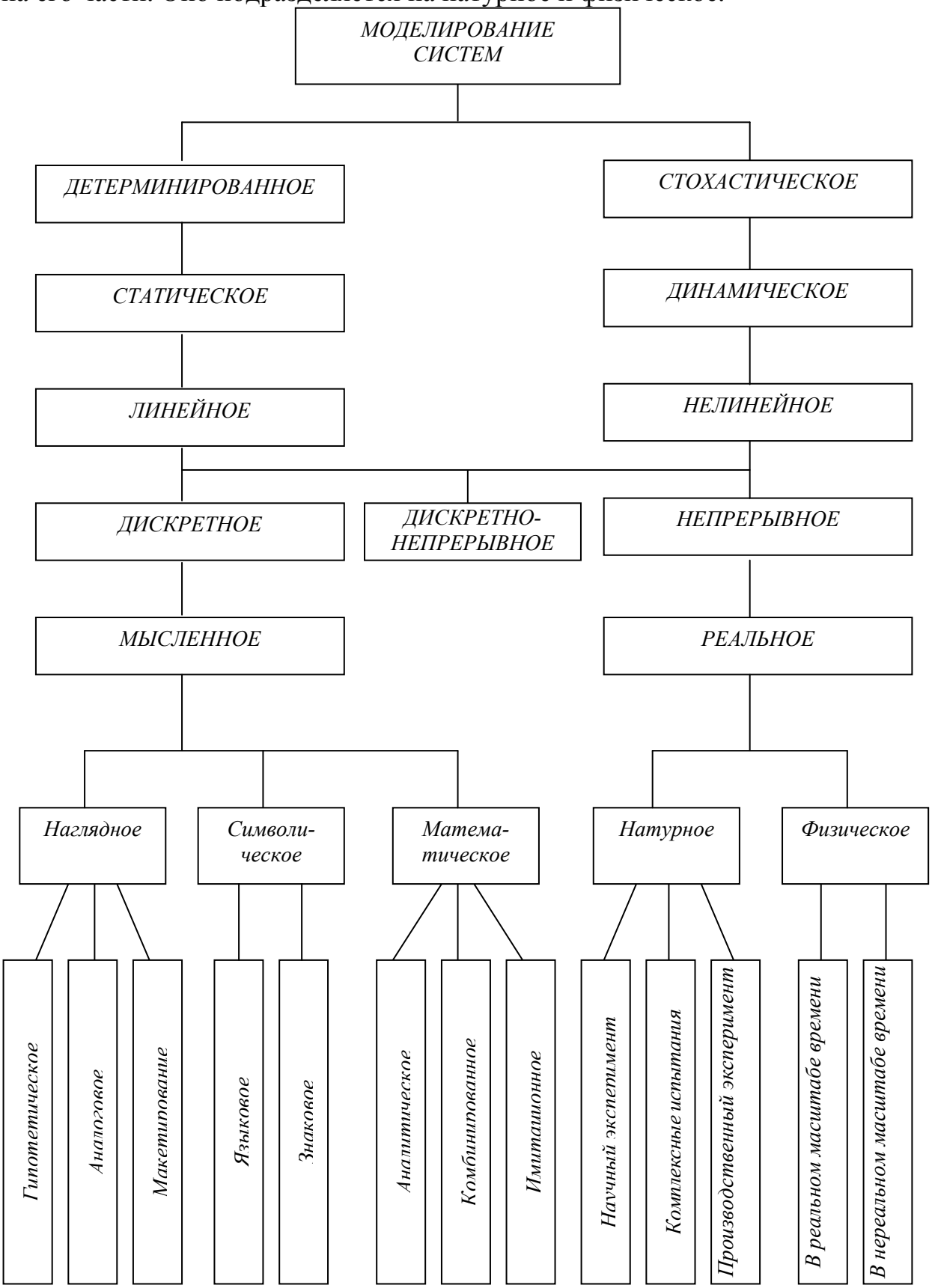

Рис. 2.1. Классификация моделей

Натурное моделирование подразделяют на научный эксперимент, комплексные испытания и производственный эксперимент, реализованные на основе теории подобия и обладающие высокой достоверностью. *Физическое моделирование* отличается от натурного тем, что исследования проводятся на установках, которые сохраняют природу явления и обладают физическим подобием в реальном и нереальном масштабе времени (моделирование процесса электролиза).

Мысленное моделирование часто является единственным способом моделирования объектов, которые либо нельзя реализовать в заданном интервале времени, либо существуют вне условий, возможных для их физического воссоздания. Оно может быть наглядным, символическим и математическим. При *наглядном моделировании* создаются наглядные модели, которые отображают явления и процессы, протекающие в объекте. Наглядное моделирование подразделяется на гипотетическое (в основе гипотезы), аналоговое (аналогии различных уровней) и макетирование (мысленный макет). *Символическое моделирование* представляет собой искусственный процесс создания логического объекта, который замещает реальный и выражает его основные свойства (электрические схемы, чертежи, карты и т.д.). Под *математическим моделированием* понимают процесс установления соответствия данному реальному объекту некоторого математического объекта, называемого математической моделью, и исследование этой модели, позволяющее получать численные характеристики рассматриваемого реального объекта. Математическое моделирование для исследования характеристик процесса функционирования систем можно разделить на аналитическое, имитационное и комбинированное.

Для *аналитического моделирования* характерно то, что процесс функционирования элементов системы (физико-химические превращения, загрузка, выпуск, тепло- и массоперенос) описывается в виде некоторых функциональных соотношений (алгебраических, дифференциальных, конечно-разностных) или логических условий. Аналитическая модель может быть исследована различными методами:

♦ аналитическим, когда искомые характеристики пытаются найти в общем виде;

♦ численным, когда, не зная решения в общем виде, стремятся получить числовые результаты при конкретных начальных условиях;

♦ качественным, когда, не имея решения в явном виде, можно установить некоторые его свойства по самой модели (изменение заглубления электродов приводит к изменению токораспределения по объему ванны РТП).

Аналитический метод широко применяется для простых систем, с усложнением систем использование этого метода возможно при упрощении первоначальной модели. Численный метод по сравнению с аналитическим позволяет исследовать более широкий класс систем, но при этом полученные решения носят частный характер (процесс обжига при известном химическом

составе шихты). Численный метод особенно эффективен при использовании ЭВМ.

При *имитационном моделировании* имитируются элементарные явления, составляющие процесс, с сохранением их логической структуры и последовательности протекания во времени. Основным преимуществом имитационного моделирования перед аналитическим является возможность решения более сложных задач. Имитационные модели позволяют относительно просто учитывать следующие факторы: наличие дискретных и непрерывных элементов, нелинейные характеристики элементов системы, многочисленные случайные воздействия.

Для построения имитационной модели используют машинные реализации случайных величин и функций, полученные методом *статистического моделирования* (Монте-Карло). Данный метод применяется для численного решения аналитической задачи. Особенно эффективны статистические методы при неполной информации о процессе.

Комбинированное моделирование позволяет объединить достоинства аналитического и имитационного моделирования. При этом часть подсистем описывается аналитическими моделями, а часть – имитационными.

Модели математического программирования являются классом моделей, применяемых для решения оптимизационных задач.

В самом общем случае задачи математического программирования имеют следующий вид: найти точки максимума функции

$$Z = F(\vec{n}, \vec{o})$$

при ограничениях

$$g_i(\vec{o}) \le 0,\ i = 1, \ldots, m,$$

$$h_j(\vec{o}) = 0,\ i = m + 1, \ldots, l,$$

Здесь Z – целевая функция; $\vec{n}, \vec{o}$ – векторы управляемых и неуправляемых переменных; $g_i(\vec{o})$, $h_j(\vec{o})$ – известные функции.

Для нахождения решения данной задачи в зависимости от вида структуры целевой функции и ограничений используют:

♦ методы линейного программирования, если $F(c, x)$, $g_i(x)$, $h_j(x)$ линейны относительно переменных x;

♦ методы нелинейного программирования, если $F(c, x)$, $g_i(x)$, $h_j(x)$ нелинейны относительно переменных x;

♦ методы динамического программирования, если $F(c, x)$ имеет специальную структуру;

♦ методы стохастического программирования, когда вектор неуправляемых переменных x случаен;

♦ сетевые модели (позволяют отобразить объем практических взаимообусловленных работ, последовательность их выполнения, а также логическую взаимосвязь);

♦ модели массового обслуживания (для решения задач обслуживания массового потребителя).

Структурно-параметрическое описание и назначение параметров объекта

Применение вычислительной техники и математических методов при проектировании сложных технических систем возможно только в том случае, если имеются их адекватные математические модели. Возможность построения иерархии моделей играет важную роль в процессе автоматизированного проектирования и создания САПР. В математической модели проектируемого объекта выделяют структурно-параметрическое описание собственно объекта и описание поведения объекта во времени и внешней среде. Таким образом, математическая модель проектируемого объекта состоит из двух частей: структурно-параметрического описания объекта с помощью набора проектных параметров и модели функционирования.

Под *структурно-параметрическим описанием* ОУ будем понимать такое его описание, которое показывает, из каких подсистем, блоков, агрегатов, деталей состоит данный объект, как эти компоненты соединены и взаимодействуют между собой, каковы их весовые, габаритные характеристики и т.д. Структурно-параметрическое описание должно давать возможность генерировать множество альтернатив ОУ, быть достаточно подробным, соответствующим этапу проектирования и доставлять информацию для моделей функционирования.

Для сложных объектов существуют различные методы структурно-параметрического описания ОУ: систематического покрытия поля, отрицания и конструирования, морфологического ящика, комбинаторного файла и т.д.

При построении модели наряду со структурным возникает потребность в параметрическом описании ОУ. Обычно такое описание дается конечным набором параметров, варьируя значения которых в определенных пределах с учетом необходимых ограничений, можно вводить в структуру ОУ различные по характеристикам подсистемы.

Параметрическое описание объекта включает в себя выделение совокупности входных переменных (внешних параметров) X_1, X_2, …, X_n, управляющих воздействий U_1, U_2, …, U_k, влияющих на процесс, выходных переменных (зависимых параметров) Y_1, Y_2, …, Y_m, характеризующих протекание процесса, а также внутренних параметров модели P_1, P_2, …, P_l.

Управляющие воздействия U_1, U_2, …, U_k являются целенаправленно изменяемыми переменными и формируются на основе информации о входных переменных, которые называются управляемыми. Остальные входные переменные относятся к возмущающим воздействиям, а выходные переменные – к неуправляемым.

Внутренние параметры модели – это внутренние характеристики объекта, не зависящие от процесса моделирования, например, конструктивные параметры агрегатов, теплофизические свойства объектов и т.п.

Возмущающие воздействия и неуправляемые переменные могут быть контролируемыми (наблюдаемыми) и неконтролируемыми (ненаблюдаемыми).

В математическом моделировании используется различный математический аппарат в зависимости от характера моделируемого процесса или объекта.

Модели функционирования управляемых динамических систем описываются обыкновенными дифференциальными уравнениями. Этот класс систем характеризуется тем, что содержит модели, адекватно отражающие функционирование современных изделий машиностроения, технологических систем и т.д. Модели функционирования подразделяются:

на модели без управления

$$Y = f(t,\ \bar{z}, \vec{o}\ ),$$

используемые для создания систем контроля, диагностики и прогнозирования технических систем, где $\bar{z}$ – вектор фазовых состояний; t – время; $\vec{o}$ – набор параметров;

модели с управлением, применяемые для создания систем автоматического управления:

$$Y = f(t,\ \bar{z}, \vec{o}, \bar{u}\ ,\ \mu),$$

где μ – возмущение; $\bar{u}$ – управляющее воздействие.

Для описания процессов, протекающих в технологических агрегатах, используют математические выражения, которые составляют математическую модель процесса или объекта управления. В зависимости от того, какие математические формулы используют для описания процессов, математические модели подразделяют на линейные и нелинейные.

Линейной называется такая математическая модель описания объекта или процесса, для построения которой используют линейные дифференциальные или другие уравнения, т.е. уравнения, в которых связь между входными и выходными параметрами является линейной.

Нелинейной называется такая математическая модель описания объекта или процесса, для построения которой используют нелинейные уравнения, т.е. уравнения, в которых связь между входными и выходными параметрами является нелинейной.

С помощью линейной модели можно описать, например, реакции, протекающие в объеме ванны металлургического агрегата, теплоперенос в стенках печного агрегата и т.д.:

$$\frac{d(V_1)}{dt} = V_1 C_A - V_2 C_A\ ,$$

$$\frac{d(V_2)}{dt} = V_1 C_B - V_2 C_B$$

где A, B – взаимодействующие вещества, которые имеют концентрации C_A и C_B; V_1, V_2 – скорости изменения объема.

Линейные модели могут использоваться для описания взаимосвязи входных и выходных параметров с помощью парных и множественных вероятностных (регрессионных) уравнений следующего вида:

$$T = a_0 + a_1 p;$$
$$\ddot{I} = b_0 + b_1 p + b_2 G + b_3 C_k + b_4 T + b_5 Y,$$

где T – температура; $П$ – производительность; p, G, C_k, Y – технологические параметры; a, b – коэффициенты регрессионного уравнения, определенные экспериментальным путем.

При описании нелинейных моделей могут использоваться степенные зависимости x^n, показательные e^x, логарифмические, гиперболические, тригонометрические, интегральные, обратные тригонометрические и т.д.

Например, работу газа можно описать следующим выражением:

$$A = \int_{V_1}^{V_2} p dV = \int_{V_1}^{V_2} \frac{\ddot{I}\, RT}{V} dV = nRT \ln \frac{V_2}{V_1},$$

где n – число молей газа в объеме V; R – универсальная газовая постоянная; T – абсолютная температура; V_1, V_2 – изменение объема.

С помощью нелинейных моделей можно описать сложные физико-химические процессы, протекающие в металлургических агрегатах (печь обжига, восстановительно-окислительные процессы), и процессы массопереноса и физических превращений.

Многие взаимосвязи между входными и выходными параметрами могут быть описаны с помощью вероятностных нелинейных уравнений, например, вида

$$\eta_{\grave{o}} = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3,$$

где $\eta_т$ – выход по току; a_i – коэффициенты регрессии, значения которых определяются экспериментально; T – температура электролита.

Дискретные и непрерывные модели

При построении моделей сложных систем большое значение имеет идея прерывности, на основе которой сложные явления поддаются описанию как закономерно составленные из простых частей. Подчеркивая преобладающую роль принципа прерывности, нельзя игнорировать непрерывность модели, где находит отражение одно из важнейших свойств системности, заключающееся в том, что система не есть простая сумма составляющих ее элементов.

Идея прерывности применяется при описании процессов с сосредоточенными и распределенными параметрами.

Используя принципы соответствия, конкретности и прерывности для систем управления отдельными агрегатами, цехами и заводами, можно построить расчленённые модели, обозримые как в целом, так и для каждой из структурных единиц. Чем сложнее система, тем более крупную структурную единицу нужно рассматривать на каждой ступени иерархии, а модель всей системы можно представить как систему подмоделей. Например, децентрализованная систем управления процессом электролиза включает управление электролизерами на базе микропроцессоров и управление корпусом путем изменения установок электролизеров.

При этом между структурными единицами нужно оставить лишь минимум необходимых связей, учитывая, что внутри каждой единицы существует саморегулирование. Например, при децентрализованной системе управления электролизерами ЭВМ верхнего уровня освобождается от управления межполюсным расстоянием (МПР) и питанием электролизеров глиноземом, что возлагается на микропроцессорные системы управления. При этом в функции ЭВМ верхнего уровня остается координация работы микропроцессоров.

Контрольные вопросы и задания

1. Что понимается под объектом моделирования?
2. Что такое гипотеза в моделировании?
3. Дайте определение модели.

4. Что такое математическая модель?
5. Приведите пример аналогии в физических процессах.
6. Дайте классификацию процессов как объектов моделирования.
7. Чем отличаются стохастические процессы от детерминированных?
8. Опишите постановку задачи моделирования в общем виде.
9. Дайте общую классификацию математических моделей.
10. Какова структура модели математического программирования?
11. Что понимают под структурно-параметрическим описанием объекта моделирования?
12. В чем состоит различие между линейными и нелинейными моделями?
13. В каких случаях используется корреляционный коэффициент, а в каких – корреляционное отношение как критерий адекватности модели?
14. Дайте классификацию моделируемых процессов по характеру их протекания.

ТЕМА 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТЕРМИНИРОВАННЫХПРОЦЕССОВ. ОБЩИЕ ВОПРОСЫ СИНТЕЗА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ЦВЕТНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ

Лекция 3. Моделирование детерминированных процессов

План лекции

1. Математический аппарат, используемый при синтезе математической модели.
2. Метод активного и пассивного эксперимента.
3. Алгебраические линейные и нелинейные уравнения.
4. Дифференциальные уравнения.
5. Метод аналогий.

Математический аппарат, используемый при синтезе математической модели

Процесс моделирования можно представить в виде следующих этапов:

1) постановка задачи;

2) выбор и построение модели – выбор структуры, математическое описание отдельных блоков;

3) исследование модели;

4) перенос знаний с модели на оригинал и экспериментальная проверка модели.

Основным этапом является постановка задачи моделирования, которая определяет подход к построению моделей.

Так как выбор структуры моделей мы уже рассматривали, то здесь будет дано математическое описание объекта моделирования.

Для составления математических моделей может использоваться следующий математический аппарат:

♦ метод активного и пассивного эксперимента;
♦ метод аналогий;
♦ метод экспериментально-статистический;
♦ метод параметрической идентификации;
♦ алгебраические линейные и нелинейные уравнения;
♦ дифференциальные уравнения;
♦ регрессионные (вероятностные) уравнения и некоторые другие.

Кроме того, для оптимизации технологических систем практическое применение получили методы линейного, нелинейного, динамического программирования.

Рассмотрим возможные области использования приведенных выше методов и математического аппарата для построения математических моделей технологических процессов.

Метод активного и пассивного эксперимента

Метод пассивного эксперимента используют для определения значений основных технологических параметров и для анализа изменения их динамики при заданном (существующем) способе или законе управления технологическими процессами (ТП). Данный метод используется для построения вероятностных математических моделей технологических процессов и для описания процессов в статике, например, для оценки технико-экономических показателей работы металлургического агрегата или процесса за смену, месяц или год.

Метод активного эксперимента применяют для проверки правильности построения математических моделей процессов, для проверки разработанных методов и законов управления и для настройки коэффициентов регуляторов САУ. Сущность активного эксперимента состоит в том, что управляющие воздействия, определенные расчетным путем, прикладывают к регуляторам и исследуют реакцию системы (технологического процесса) на эти возмущения.

Методом активного эксперимента можно проверить, например, эффективность различных способов гашения анодного эффекта при электролизе алюминия и влияние различных способов управления выращиванием монокристалла кремния на распределение в нем примесей.

Алгебраические линейные и нелинейные уравнения

К алгебраическим относят уравнение вида

$$F(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \ldots + a_{n-1} x + a_n = 0,$$

где коэффициенты a_i – действительные или комплексные числа. $F(x)$ – многочлен степени n относительно X, который называется алгебраическим уравнением степени n с неизвестным x.

Алгебраическое уравнение степени n имеет n корней. Оно называется действительным, если все его коэффициенты a_i являются действительными числами. Математические модели могут описываться алгебраическими уравнениями первой (линейными), второй (квадратными), третьей (кубическими уравнениями) степени и т.д. Например, скорость восстановления металла R_2 углеродом R_1 описывается соотношением

$$R_2 = y_n R_1,$$

где y_n – коэффициент пропорциональности, определяемый для идеальных условий процесса восстановления металла углеродом.

Дифференциальные уравнения

Дифференциальные уравнения позволяют выразить соотношения между изменениями физических величин, поэтому они имеют большое значение в приложениях. Дифференциальные уравнения подразделяют на линейные и нелинейные.

Обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка

$$\frac{dy}{dx} = F(x, y)$$

имеет решение $y = y(x)$, удовлетворяющее условию $y(x_0) = y_0$, если $F(x, y)$ непрерывна в некоторой окрестности точки (x_0, y_0).

Обыкновенные дифференциальные уравнения используют для создания динамических моделей физико-химических процессов, воспроизводящих поведение процессов во времени. Такие модели дают возможность прогнозировать будущее состояние процесса, определять оптимальные траектории его протекания, а следовательно, и пути повышения производительности или экономичности. Дифференциальные уравнения позволяют рассчитывать управляющие воздействия для регулирования технологического процесса в САУ и АСУ. Особенно широкие возможности открываются для использования дифференциальных уравнений при автоматизации процессов с применением ЭВМ. Обыкновенные дифференциальные уравнения используются при описании технологических процессов с сосредоточенными параметрами. Например, дифференциальное уравнение для определения концентрации реагентов системы с сосредоточенными параметрами (ванна плавильной печи) имеет вид

$$\frac{dC_x}{dt} = K(C_A - C_x)(C_B - C_x) \ ,$$

где C_A, C_B – концентрации реагентов; C_x – концентрация продуктов в момент t; K – коэффициент пропорциональности.

Во многих реальных системах наряду с изменением параметров во времени происходит их существенное изменение в пространстве. Для моделирования таких объектов, называемых системами с распределенными параметрами, применяются *дифференциальные уравнения в частных производных*.

Линейное уравнение с частными производными второго порядка в случае двух переменных записывается следующим образом:

$$A\frac{\partial u}{\partial x^2}+2B\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+a\frac{\partial u}{\partial y}+b\frac{\partial u}{\partial x}+cu=F(x,y)\ . \qquad (3.1)$$

В зависимости от знака дискриминанта $D=\grave{A}\tilde{N}-b^2$ уравнение (3.1) относят к уравнениям эллиптического типа при $D > 0$, параболического типа при $D = 0$ и гиперболического типа при $D < 0$. Если уравнение (3.1) меняет тип от точки к точке, его называют уравнением смешанного типа.

В уравнении (3.1) переменные x и y являются независимыми технологическими параметрами процесса (концентрация, вес, температура, производительность); u – скорость изменения выходного параметра во времени; A, B, C – коэффициенты.

К системам с распределенными параметрами прежде всего относятся так называемые сплошные среды. Математические модели процессов, происходящих в газах, жидкостях и твердых телах (движения, теплопереноса, диффузии), обычно строятся в предположении, что вещество сплошь заполняет занимаемый им объем, т.е. оно находится в каждой точке объема. Это допущение вполне обосновано с физической точки зрения, поскольку межмолекулярные расстояния внутри вещества столь ничтожны по сравнению с размерами рассматриваемого объема и масштабами моделируемых явлений, что ими можно пренебречь без особого ущерба для качества моделей.

Математические модели сплошной среды строятся на основе общих физических законов, в частности законов сохранения массы, количества движения, энергии и др.

Металлургические процессы, как правило, протекают при очень высокой температуре и сопровождаются интенсивным теплообменом. Поэтому изучение и моделирование процессов теплопереноса играет очень существенную роль в металлургической практике.

Рассмотрим в качестве примера математической модели такого процесса задачу об остывании неограниченной плоской пластины, если на ее поверхности происходит конвективный теплообмен с окружающей средой, температура которой равна нулю. Процесс остывания описывается уравнением теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right)$$

при $0 \le x \le l, \quad -\infty < y, z < +\infty, \quad 0 < t < +\infty$. Здесь u – температура пластины в точке с координатами (x, y, z) в момент времени t, $u = u(x, y, z, t)$; a^2 – коэффициент температуропроводности; l – толщина пластины. Остывание пластины происходит за счет теплообмена с окружающей средой через поверхность $x = 0$, подчиняющегося закону Ньютона:

$$\lambda\frac{\partial u}{\partial x} = \alpha(u - f) \text{ при } x = 0,$$

где $f(y, z, t)$ – температура плоскости $x = 0$; α – коэффициент теплообмена. Для однозначного определения температуры u необходимо знать ее распределение в начальный момент времени:

$$u\big|_{t=0} = \varphi(x, y, z), \qquad 0 \le x \le l, \quad -\infty < y, z < +\infty.$$

Таким образом, модель процесса остывания пластины представляет собой краевую задачу для уравнения параболического типа.

Моделирование технологических процессов с помощью дифференциальных уравнений сводится, как правило, к решению систем уравнений, в которых число уравнений равно числу неизвестных функций.

Метод аналогий

Операции в аналогово-вычислительных машинах – АВМ (вычислительных машинах специального назначения) осуществляются с непрерывно изменяющимися физическими величинами, например напряжением постоянного тока. Принцип действия АВМ является наглядным примером математического подобия, вытекающего из единства природы и проявляющегося в том, что разные по физической природе процессы и явления могут описываться одинаковыми по форме дифференциальными и другими уравнениями. Так, *закон Фурье* связывает тепловой поток g_T с изменением температуры T:

$$g_T = \lambda\frac{dT}{dx},$$

где λ – коэффициент теплопроводности; x – направление переноса.

Закон Фика отражает перенос вещества g_C в связи с изменением его концентрации C:

$$g_C = -D\frac{d\tilde{N}}{dx},$$

здесь D – коэффициент диффузии.

Закон Ома описывает зависимость силы тока i от напряжения u:

$$i = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{du}{dx},$$

где ρ – электропроводность.

Сравнение показывает, что все три уравнения подобны в смысле математического описания. Для модельного эксперимента наиболее удобна третья зависимость, поскольку все входящие в нее параметры легко поддаются измерению. Поэтому данный принцип был положен в основу построения АВМ.

АВМ – это устройство, состоящее из элементов, которые будучи соединены соответствующим образом, представляют сложную систему, подобную в определенном смысле исходной сложной системе, взятой в качестве объекта для моделирования.

Различают два подхода к моделированию, а в связи с этим и два типа АВМ. В первом случае моделируются по операциям математические уравнения, подлежащие решению, т.е. в основу берется математическое подобие уравнений, при этом в АВМ имеется набор операционных блоков (умножения на постоянный коэффициент, суммирования, интегрирования), соединяя которые определенным образом, можно получить схему, описываемую таким же по форме дифференциальным уравнением, что и исходное. Измеряя непрерывно изменяющуюся величину, например напряжение, на выходе соответствующего операционного блока, получают решение исходного уравнения. Критериальное соотношение между коэффициентами исходного уравнения и машинного находится в соответствии с теоремой подобия.

Во втором случае в основу закладывается физическая природа задачи, исследуемая система моделируется по ее отдельным составным частям. Здесь наиболее последовательно используются принципы моделирования методом поэлементной прямой аналогии. Например, модель для исследования режимов работы электрической системы на постоянном или переменном токе.

Лекция 4. Стохастические модели

План лекции

1. Экспериментально-статистические методы математического описания.
2. Основные понятия теории случайных величин.
3. Построение и исследование регрессионных моделей.
4. Регрессионный анализ при пассивном и активном эксперименте.

Экспериментально-статистические методы математического описания

Наиболее распространенными экспериментально-статистическими методами математического описания являются регрессионный анализ (применительно к активному и пассивному эксперименту), динамический корреляционный анализ (анализ случайных процессов), идентификация и оценивание параметров. Они нашли широкое применение при построении прогнозирующих моделей металлургических процессов.

Все процессы, происходящие в природе, являются результатом взаимодействия многих факторов. Для того чтобы изучить эти процессы и в дальнейшем ими управлять, необходимо выяснить, какую роль в рассматриваемом процессе играет каждый фактор в отдельности. Таким образом, математические методы изучения взаимодействующих факторов требуют умения выражать действия различных факторов количественно. Однако даже самый тщательно подготовленный эксперимент не позволяет выделить интересующий нас фактор в чистом виде, т.к. всегда присутствует элемент случайности, например изменение температуры воздуха.

В основе методологии построения математических моделей стохастических процессов и зависимостей, отражающих взаимосвязи между экспериментальными данными, лежит теория случайных величин и регрессионный анализ.

Основные понятия теории случайных величин

Случайной называется величина, которая в результате одного и того же опыта может принять то или иное заранее неизвестное значение. Случайные величины могут быть *дискретными* (*прерывными*) и *непрерывными*. Дискретные случайные величины принимают изолированные числовые значения, отделенные друг от друга конечными интервалами (например, число попаданий при нескольких выстрелах, число появлений герба при нескольких подбрасываниях монеты). Значения непрерывных случайных величин не могут быть заранее перечислены и непрерывно заполняют некоторый промежуток (например, ошибка измерения, дальность полета снаряда).

Всякое соответствие между возможными значениями случайной величины и вероятностями, с которыми эти значения принимаются, называется *законом распределения* случайной величины. Закон распределения количественно может выражаться в следующих формах: табличной, графической и аналитической.

При количественном описании закона распределения вероятностей можно воспользоваться вероятностью события $X < x$, где x – текущая переменная. Вероятность этого события называется *функцией распределения случайной величины* X и обозначается $F(x)$:

$$F(x) = P(X < x).$$

Одной из форм закона распределения непрерывной случайной величины является *плотность распределения вероятностей* $f(x)$. Она связана с функцией распределения формулой

$$f(x) = F'(x).$$

Наиболее важную роль среди законов распределения непрерывных случайных величин играет нормальный закон. Случайная величина X называется распределенной по нормальному закону, если ее плотность распределения вероятности имеет вид (рис. 4.1)

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2} \right),$$

где m – математическое ожидание величины X; σ – ее среднее квадратическое отклонение.

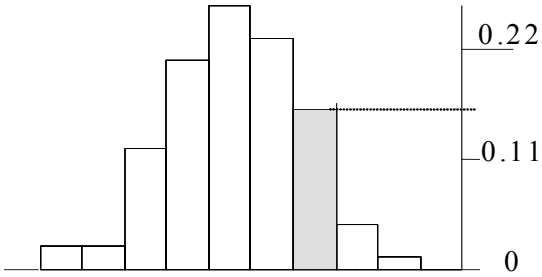

Рис. 4.1. Гистограмма распределения остатков

При решении большинства практических задач закон распределения, т.е. полная характеристика случайной величины, неудобен для использования. Поэтому чаще применяют числовые характеристики случайной величины, наиболее распространенными из которых являются математическое ожидание, дисперсия и среднее квадратическое отклонение.

Математическое ожидание непрерывной случайной величины находится следующим образом:

$$M[X] = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx.$$

Дисперсия $D[X]$ и среднее квадратическое отклонение определяют рассеяние случайной величины около её математического ожидания и вычисляются по формулам

$$D[X] = M[X - M[X]^2],$$

$$\sigma[X] = \sqrt{D[X]}.$$

При практическом применении теории вероятностей очень часто приходится сталкиваться с задачами, в которых результат опыта описывается не одной, а двумя и более случайными величинами, образующими комплекс, или систему. Свойства системы нескольких случайных величин не исчерпываются свойствами отдельных величин, ее составляющих, они включают также взаимные связи (зависимости) между случайными величинами, называемые корреляцией.

Корреляция – это связь между двумя или несколькими величинами или исследуемыми объектами. Корреляция бывает двух видов: *детерминированная* (определяется строгими закономерностями и обычно описывается физико-химическими формулами) и *стохастическая* (случайная, вероятностная – проявляется в том, что одна из величин влияет на изменение другой изменениями своего закона распределения).

Характеристикой системы двух случайных величин, описывающей тесноту связи между ними, является коэффициент корреляции

$$r_{xy} = \frac{M\left[\left(X - m_x\right)\left(Y - m_y\right)\right]}{\sigma_x \sigma_y},$$

где m_x, m_y – сокращенное обозначение математического ожидания величины X и Y, соответственно, $m_x = M[X]$, $m_y = M[Y]$. Если $r_{xy} = 0$, то корреляционная связь между величинами отсутствует.

Построение и исследование регрессионных моделей

Зависимость между случайными величинами называется *регрессией*. Она понимается как зависимость между математическими ожиданиями этих величин.

Форма связи между случайными величинами определяется линией регрессии, показывающей, как в среднем изменяется величина Y при изменении величины X, что характеризуют условным математическим ожиданием $m_{y/x}$ величины Y, вычисляемым при $X = x$. Таким образом, кривая регрессии Y на X есть зависимость условного математического ожидания Y от известного значения X.

Математическая постановка задачи регрессионного анализа: для каждого i-го опыта имеется набор значений входных параметров X_{1i}, X_{2i}, …, X_{ni} и соответствующее этому набору значение выходного параметра Y_i. Необходимо определить зависимость выходного параметра Y от входных факторов X_{1i}, X_{2i}, …, X_{ni}, которая в случае, например, линейной связи может иметь вид

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + \ldots + b_nX_n.$$

Такая зависимость называется *линейной регрессией*. Любая другая зависимость называется *нелинейной регрессией*.

Задача сводится к тому, чтобы при измеренных во время опытов значениях входных переменных X_1, X_2, …, X_n и выходной переменной Y найти коэффициенты уравнения регрессии b_0, b_1, b_2, …, b_n, которые с определенной вероятностью будут отражать связь аргументов X_1, X_2, …, X_n с Y.

Регрессионная зависимость вида $Y = f(X_i)$ называется *однофакторной* или *парной* и описывает связь между двумя переменными: входной X и выходной Y.

Регрессионная зависимость вида $Y = f(X_1, X_2,\ldots, X_n)$ называется *многофакторной* или *множественной* и описывает связь между несколькими входными $X_1, X_2, \ldots, X_n$ и одной выходной переменной Y.

Построение и исследование регрессионной модели можно разбить на четыре этапа.

1-*й этап.* Проверка наличия стохастической связи между исследуемыми величинами. Для этого нужно определить по значению r_{xy}, существует ли корреляционная связь между X и Y.

2-*й этап.* Выбор вида уравнения регрессии. Вид уравнения регрессии выбирается исходя из особенностей изучаемой системы случайных величин. Один из возможных подходов при этом – экспериментальный подбор типа уравнения регрессии по соответствующим критериям адекватности. В случае же, когда имеется определенная априорная (доопытная) информация об объекте, более эффективным является использование для этой цели теоретических представлений о процессах и типах связей между изучаемыми параметрами.

3-*й этап.* Расчет параметров (коэффициентов) уравнения регрессии. Для определения параметров (коэффициентов) уравнения регрессии используется метод наименьших квадратов (МНК). Сущность метода заключается в том, что выбирается такая линия регрессии, при которой сумма квадратов разностей между экспериментальными значениями выходной переменной Y_i, полученными на объекте, и значениями, рассчитанными по выбранной регрессионной формуле (модели) $\tilde{Y}_i = f(X_i)$, будет минимальной:

$$q = \sum_{i=1}^{n}\left(Y_i - \tilde{Y}\right)^2 \Rightarrow \min ,$$

где q – критерий близости модели и объекта, называемый невязкой модели; n – количество экспериментальных данных.

Задача построения линейной модели сводится к минимизации функции невязки следующего вида:

$$q = \sum_{i=1}^{n}\left[Y_i - (b_0 + b_1 x_{1i} + b_2 x_{2i} + \ldots + b_n x_{ni})\right]^2 \Rightarrow \min .$$

В качестве нелинейных регрессионных моделей чаще всего используются полиномы разной степени:

$$Y = b_0 + b_1 X + b_2 X^2 + \ldots + b_m X^m .$$

4-*й этап*. Проверка адекватности структуры модели. Об адекватности структуры модели можно судить по коэффициенту корреляции r или корреляционному отношению η, гистограмме распределения остатков и содержательному анализу остатков модели.

Коэффициент корреляции r характеризует степень тесноты линейной связи между $\tilde{Y}$ и Y. Приближенное значение r определяется по формуле

$$r = \frac{n\sum_{i=1}^{n}\tilde{Y}_i Y_i - \sum_{i=1}^{n}\tilde{Y}_i \sum_{i=1}^{n} Y_i}{\sqrt{\left[n\sum_{i=1}^{n}\tilde{Y}_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n}\tilde{Y}_i\right)^2\right]\left[n\sum_{i=1}^{n}Y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n}Y_i\right)^2\right]}},$$

Коэффициент корреляции изменяется от –1 до +1.

Корреляционное отношение η характеризует степень тесноты нелинейной связи между переменными $\tilde{Y}$ и Y:

$$\eta = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{Y}_i - \bar{Y}\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i - \bar{Y}\right)^2}},$$

где $\tilde{Y}_i$ – текущее значение параметра Y, вычисленное по математической модели; Y_i – текущее значение параметра Y, полученное на объекте; $\bar{Y}$ – выборочное среднее значение,

$$\bar{Y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Y_i .$$

Корреляционное отношение изменяется от 0 до 1.

Следует иметь в виду, что коэффициент корреляции является частным случаем корреляционного отношения и используется обычно только при исследовании линейных моделей.

Выводы о степени адекватности модели делаются на основании значения коэффициента корреляции или корреляционного отношения, которые должны быть близки к 1.

Другим критерием адекватности модели является *содержательный анализ остатков модели*. Он заключается в построении распределения остатков модели в зависимости от входного параметра X. Если закон распределения остатков близок к нормальному закону с математическим ожиданием, равным 0, то модель считается адекватной экспериментальным данным. В этом случае гистограмма распределения остатков приобретает колоколооб-

разный вид (см. рис. 4.1). При неадекватности модели она имеет несимметричный характер или второй горб.

Регрессионный анализ при пассивном и активном эксперименте

Задача регрессионного анализа при пассивном и активном экспериментах ставится следующим образом. Для каждого i-го опыта имеется набор входных параметров $x_1, \ldots, x_n$ и соответствующее значение выходного параметра y. Необходимо определить зависимость выходного параметра y от входных x. При этом коэффициенты $b_0, b_1, \ldots, b_n$ могут быть получены двумя способами: в результате пассивного наблюдения за процессом или посредством постановки активного эксперимента и решения системы уравнений.

При *пассивном эксперименте* данные получают путем наблюдения и регистрации в некоторые моменты времени значений входных и выходных переменных. Однако этот способ имеет следующие недостатки. Во-первых, входные величины x должны измеряться с точностью, значительно превышающей точность измерения. Они должны быть некоррелированны. Во-вторых, выходной параметр y есть случайная величина, подчиняющаяся нормальному закону распределения. Дисперсия выходного параметра не зависит от его абсолютной величины. Так температура расплава при пирометаллургическом получении цветных металлов является одним из определяющих параметров. Однако измерение температуры в металлургических агрегатах в заводских условиях практически не осуществляется, что объясняется техническими трудностями. Поэтому для контроля температуры пирометаллургических процессов можно использовать корреляционный анализ вместо пассивного эксперимента.

При проведении *активного эксперимента* для определения уравнения регрессии линейного вида входные переменные, которые называются варьируемыми факторами, поддерживаются на двух заранее выбранных фиксированных уровнях: верхнем ($x_{\max} = +1$) и нижнем ($x_{\min} = -1$). В соответствии с числами независимых переменных составляют матрицы планирования, в которых не должно быть ни одной повторяющейся комбинации уровней. Число комбинаций обуславливается количеством входных переменных: для двух переменных – 4 комбинации, для трех – 8 комбинаций и т.д.

Выбор того или иного эксперимента (активного или пассивного) осуществляют в зависимости от конкретных условий.

Контрольные вопросы и задания

1. Перечислите основные этапы построения математической модели.

2. Опишите метод активного и пассивного эксперимента. Чем они отличаются?

3. Какой математический аппарат используется при синтезе математических моделей детерминированных процессов?

4. Какие системы относят к системам с распределенными параметрами?

5. Что такое сплошная среда?

6. Каким уравнением в частных производных моделируется процесс теплопереноса?

7. В чем состоит идея метода аналогий?

8. Опишите экспериментально-статистический метод моделирования.

9. Модели каких процессов описываются дифференциальными уравнениями?

10. Сформулируйте, в чем заключается задача регрессионного анализа.

11. Какую величину называют случайной? Опишите основные типы случайных величин.

12. Что такое закон распределения случайной величины?

13. Назовите виды регрессионных зависимостей.

14. Какая характеристика служит для оценки качества линейной модели? Какие она может принимать значения?

15. Опишите суть метода наименьших квадратов.

16. Какая характеристика служит для оценки качества нелинейной модели? Какие она может принимать значения?

17. Что такое корреляция? Какие виды корреляции вы знаете?

18. Как строится линия регрессии?

19. Опишите метод построения гистограммы.

20. В чем заключается содержательный анализ остатков модели?

ТЕМА 3. ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ АНАЛИЗА И РАСЧЕТА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Лекция 5. Интерполяционные и статистические методы обработки исходных данных

План лекции

1. Цели интерполирования и экстраполирования, задача интерполяции, обзор основных методов интерполяции (интерполяционные многочлены, сплайновая интерполяция).

2. Методы первичной обработки статистических данных (статистическое распределение, полигон и гистограмма), основные числовые характеристики выборочной совокупности и их роль в моделировании случайных процессов.

Интерполяционные методы обработки исходных данных

Вычисление значения функции $y = f(x)$ – одна из тех задач, с которой на практике приходится сталкиваться постоянно. Желательно иметь быстрые и надежные алгоритмы вычисления значений используемой функции. Рассмотрим некоторые типичные ситуации.

1. Функция f задана таблицей своих значений:

$$y_i = f(x_i)\ (i = 0, 1, \ldots, n).$$

2. Непосредственное определение значения $y = f(x_i)$ связано с проведением сложных расчетов и требует существенных затрат машинного времени, которые могут оказаться неприемлемыми, если функция вычисляется многократно.

3. При заданном значении x значение функции может быть найдено в результате эксперимента. Такой способ в большинстве случаев нельзя использовать в вычислительных алгоритмах, т.к. он связан с необходимостью прерывания вычислительного процесса для проведения эксперимента. В этой ситуации экспериментальные данные получают до начала расчетов на ЭВМ. Нередко они представляют собой таблицу с тем отличием, что табличные значения y^*_i отличаются от «истинных» значений y_i, т.к. заведомо содержат ошибки эксперимента. Возникающие проблемы нередко удается решить следующим образом. Функцию $f(x)$ приближенно заменяют другой функцией $g(x)$, вычисляемые значения которой и принимают за приближенные значения функции $f(x)$.

Постановка задачи интерполяции: пусть в точках x_0, x_1, …, x_n, расположенных на отрезке $[a, b]$ и попарно различных, задана таблица значений некоторой функции f. Задача интерполяции состоит в построении функции g, удовлетворяющей условию

$$g(x_i) = y_i \qquad (i = 0, 1, \ldots, n).$$

Другими словами, ставится задача о построении функции g, график которой проходит через заданные точки (x_i, y_i). Указанный способ приближения функций принято называть интерполяцией (или интерполированием), а точки x_i – узлами интерполяции. Нетрудно видеть, что выбор функций g неоднозначен.

Постановка задачи экстраполяции: пусть $x_{\min}$ и $x_{\max}$ – минимальный и максимальный узлы интерполяции. В случае, когда интерполяция используется для вычисления приближенного значения функции f в точке x, не принадлежащей отрезку $[x_{\min}, x_{\max}]$ (отрезку наблюдения), принято говорить о том, что осуществляется экстраполяция.

Этот метод приближения часто используют с целью прогнозирования характера протекания тех или иных процессов при значениях параметров, выходящих за пределы отрезка наблюдения. Надежность такого прогноза при значениях x, удаленных на большое расстояние от отрезка $[x_{\min}, x_{\max}]$, как правило, невелика.

Интерполяционная формула Ньютона с разделенными разностями

Пусть имеется табулированная функция $y_i = f(x_i)$. Введем понятие разделенной разности.

Разделенные разности нулевого порядка совпадают со значениями самой функции.

Разделенные разности первого порядка записываются следующим образом:

$$f(x_i, x_j, x_l) = \frac{f\left(x_i, x_j\right) - f\left(x_j, x_l\right)}{x_i - x_l}.$$

Соответственно, *разделенные разности k-го порядка* –

$$f(x_1, \ldots, x_{k+1}) = \frac{f\left(x_1, \ldots, x_k\right) - f\left(x_2, \ldots, x_{k+1}\right)}{x_1 - x_{k+1}}. \qquad (5.1)$$

Пусть $P_n(x)$ многочлен степени n. Разность $P_n(x) - P_n(x_0)$ обращается в нуль при $x = x_0$, следовательно, она делится на $x - x_0$. Тогда разделенная разность первого порядка $P_n\left(x, x_0\right) = \dfrac{P_n\left(x\right) - P_n\left(x_0\right)}{x - x_0}$ – многочлен степени $n - 1$ относительно x.

Разность $P_n(x, x_0) - P_n(x_0, x_1)$ обращается в нуль при $x = x_1$, поэтому разделенная разность второго порядка

$$P_n(x, x_0, x_1) = \frac{P_n(x, x_0) - P_n(x_0, x_1)}{x - x_1}$$

является многочленом степени $n - 2$. Аналогично, $P_n(x, x_0, x_1, x_2)$ – многочлен степени $n - 3$ и т.д.

Разделенная разность $P_n(x, x_0, x_1, \ldots, x_{n-1})$ порядка n – многочлен нулевой степени.

Разделенные разности более высокого порядка обращаются в нуль.

Значение $P_n(x, x_0, x_1, \ldots, x_{n-1})$ от x не зависит, поэтому

$$P_n(x, x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}) = P_n(x_0, x_1, \ldots, x_n).$$

Из определения разделенных разностей следует

$$P_n(x) = P_n(x_0) + (x - x_0)\cdot P_n(x, x_0),$$

$$P_n(x, x_0) = P_n(x_1, x_0) + (x - x_1)\cdot P_n(x, x_0, x_1)$$

и т.д. Отсюда формула для $P_n(x)$ имеет вид

$$P_n(x) = P_n(x_0) + (x - x_0)\cdot P_n(x_0, x_1) + (x - x_0)(x - x_1)\cdot P_n(x_0, x_1, x_2) + \\ + (x - x_0)\cdot(x - x_1)\cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1})\cdot P_n(x_0, \ldots, x_n). \qquad (5.2)$$

Разделенные разности в соответствии с рекуррентной формулой (5.1) выражаются через значения многочлена в узлах $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Если $x_0, x_1, \ldots, x_n$ – узлы интерполяции, $y_0, y_1, \ldots, y_n$ – значения интерполируемой функции в этих узлах, то они однозначно определяют интерполяционный многочлен степени n, значения которого в узлах совпадают с y_i. Тогда разделенные разности многочлена $P_n(x)$ совпадают с разделенными разностями функции $f(x)$. Поэтому интерполяционный многочлен можно записать в форме

$$L_n(x) = f(x_0) + (x - x_0)\cdot f(x_0, x_1) + (x - x_0)(x - x_1)\cdot f(x_0, x_1, x_2) + \ldots + \\ + (x - x_0)(x - x_1)\cdot \ldots \cdot (x - x_n)\cdot f(x_0, \ldots, x_n). \qquad (5.3)$$

Эта форма называется интерполяционным многочленом Ньютона с разделенными разностями.

Многочлен Лагранжа

Пусть задана функция $y = f(x)$. Часто нахождение значений этой функции может оказаться трудоемкой задачей. Например, x – параметр в сложной задаче, после решения которой определяется значение $f(x)$ или $f(x)$ измеряется в дорогостоящем эксперименте. В этих случаях можно получить небольшую таблицу значений функции, но прямое нахождение ее значений при большом количестве значений аргумента нереально. В такой ситуации $f(x)$ заменяется приближенной формулой $g(x)$, которая в определенном смысле близка к функции $f(x)$. Близость обеспечивается введением в функцию $g(x)$ свободных параметров и их соответствующим выбором.

Итак, пусть известны значения функции $f(x)$ в точках $x_0, x_1, \ldots, x_n$, $y_i = f(x_i)$, $i = 0, \ldots, n$, и для некоторой функции $g(x, a_0, a_1, \ldots, a_n)$ выполняются равенства

$$g(x_i, a_0, a_1, \ldots, a_n) = y_i, \quad i = 0, 1, \ldots, n. \tag{5.4}$$

Если выражение (5.4) рассматривать как систему уравнений для определения $a_0, a_1, \ldots, a_n$, то этот способ называется *интерполяцией* (*лагранжевой*).

Если g зависит от a_j нелинейно, то говорят о нелинейной интерполяции. В противном случае интерполяция называется линейной. Для линейной интерполяции можно записать

$$g(x, a_0, a_1, \ldots, a_m) = \sum_{j=0}^{m} a_j \cdot \varphi_j(x), \tag{5.5}$$

где $\varphi_j(x)$ – система линейно независимых функций.

Подставим выражение (5.5) в равенство (5.4). Относительно a_j получаем линейную систему уравнений:

$$\sum_{j=0}^{m} a_j \cdot \varphi_j(x_i) = y_i \quad (i = 0, \ldots, n) \ . \tag{5.6}$$

Для однозначной разрешимости системы должно быть $m = n$.

Для того чтобы задача интерполирования имела единственное решение, система функций $\varphi_j(x)$ должна удовлетворять условию

$$\begin{vmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_0(x_1) & \ldots & \varphi_0(x_n) \\ \varphi_1(x_0) & \varphi_1(x_1) & \ldots & \varphi_1(x_n) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \varphi_n(x_0) & \varphi_n(x_1) & \ldots & \varphi_n(x_n) \end{vmatrix} \neq 0 \ . \tag{5.7}$$

Система функций, удовлетворяющая условию (5.7), называется *чебышевской*. Если $\varphi_j(x)$ задаются в виде

$$\varphi_j(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \cdot \ldots \cdot (x - x_n)}{(x_j - x_0)(x_j - x_1) \cdot \ldots \cdot (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdot \ldots \cdot (x_j - x_n)},$$

то формула (5.5) называется интерполяционным многочленом Лагранжа.

Многочлены Чебышева

Пусть $x \in [-1, 1]$. Рассмотрим функцию вида

$$T_n(x) = \cos[n \cdot \arccos(x)]. \qquad (5.8)$$

Очевидно, что $T_0(x) = 1$, $T_1(x) = x$. При $n = 2$ используем тригонометрическое тождество

$$T_2(x) = \cos(2\arccos(x)) = \cos^2(\arccos(x)) - \sin^2(\arccos(x)) =$$
$$= 2\cos^2(\arccos(x)) - 1 = -1 + 2x^2.$$

Пусть $T_n(x)$ – многочлен степени n. Получим рекуррентное соотношение, связывающее $T_{n-1}(x)$, $T_n(x)$ и $T_{n+1}(x)$. Как известно,

$$\cos(n+1)\theta = \cos n\theta \cos\theta + \sin n\theta \sin\theta,$$

$$\cos(n-1)\theta = \cos n\theta \cos\theta - \sin n\theta \sin\theta.$$

Сложив почленно эти равенства, будем иметь

$$\cos(n+1)\theta = 2\cos n\theta \cos\theta - \cos(n-1)\theta.$$

Полагая $\theta = \arccos(x)$, получим

$$T_{n+1}(x) = 2x \cdot T_n(x) - T_{n-1}(x).$$

Коэффициент при x^{n+1} равен 2^n.

Практическое вычисление методом интерполяции

Однозначной задача определения параметров $a_0, \ldots, a_m$ станет, если рассматривать как показатель качества аппроксимации величину

$$\hat{O} = \sum_{i=0}^{n} \varepsilon_i^2 \sum_{i=0}^{n} [\varphi(x_i, \grave{a}_0, \ldots, \grave{a}_m) - \acute{o}_i]^2$$

и искать a_i, минимизирующие функцию $\Phi = \Phi(a_0, \ldots, a_m)$.

Решение задачи о нахождении $a_0, \ldots, a_m$ в такой постановке называется методом наименьших квадратов.

В теории вероятностей показано, что полученные методом наименьших квадратов параметры наиболее вероятны, если отклонения ε_i подчиняются нормальному закону распределения. Необходимые условия минимума функции $\Phi(a_0, \ldots, a_m)$ дают систему уравнений $\frac{\partial \hat{O}}{\partial \grave{a}_J} = 0$, $j = 0, \ldots, m$.

Если $\varphi = \sum_{j=0}^{m} \grave{a}_j \cdot \varphi_j(x)$, где φ_j – линейно независимые функции, тогда система уравнений будет линейной.

На практике часто используются функции $\varphi_j = x_j$. В этом случае $\varphi = a_0 = a_1 \cdot x + \ldots + a_m x^m$ – многочлен степени m, и

$$\frac{\partial \hat{O}}{\partial \grave{a}_0} = 2\sum_{i=0}^{n}(\grave{a}_0 + \ldots + \grave{a}_m x^m - \acute{o}_i)$$

$$\frac{\partial \hat{O}}{\partial \grave{a}_1} = 2\sum_{i=0}^{n}(\grave{a}_0 + \ldots + \grave{a}_m x^m - \acute{o}_i)x_i$$

.....

$$\frac{\partial \hat{O}}{\partial \grave{a}_m} = 2\sum_{i=0}^{n}(\grave{a}_0 + \ldots + \grave{a}_m x^m - \acute{o}_i)x_i^m .$$

Таким образом, получается система следующего вида:

$$\begin{cases} (n+1)\grave{a}_0 + \grave{a}_1\sum_{i=0}^{n} x_i + \ldots + \grave{a}_m\sum_{i=0}^{n} x_i^m = \sum_{i=0}^{n}\acute{o}_i, \\ \grave{a}_0\sum_{i=0}^{n} x_i + \grave{a}_1\sum_{i=0}^{n} x_i^2 + \ldots + \grave{a}_m\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} = \sum_{i=0}^{n}\acute{o}_i x_i, \\ \grave{a}_0\sum_{i=0}^{n} x_i^m + \grave{a}_1\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} + \ldots + \grave{a}_m\sum_{i=0}^{n} x_i^{2m} = \sum_{i=0}^{n}\acute{o}_i x_i^m . \end{cases}$$

При $m = n$ данный многочлен совпадает с интерполяционным многочленом Лагранжа.

Интерполяция сплайнами

Повышение точности интерполяционного многочлена возможно благодаря увеличению его степени, но связано с существенным повышением сложности вычислений. Естественная потребность в наличии аппроксимирующих функций, которые сочетали бы в себе локальную простоту многочлена невысокой степени и глобальную на всем отрезке гладкость, привела к появлению в 1946 г. так называемых сплайн-функций, или сплайнов – специальным образом построенных гладких кусочно-много-членных функций. Дадим строгое определение сплайна.

Определение 5.1. Пусть отрезок $[a, b]$ разбит точками $a = x_0 < x_1 < < \ldots < x_n = b$ на n частичных отрезков $[x_i - x_{i-1}]$. *Сплайном* степени m называется функция $S_m(x)$, обладающая следующими свойствами:

♦ функция $S_m(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$ вместе со своими производными до некоторого порядка p;

♦ на каждом частичном отрезке $[x_i - x_{i-1}]$ функция $S_m(x)$ совпадает с некоторым алгебраическим многочленом $P_{m,\,i}(x)$ степени m.

Наибольшее распространение на практике получили сплайны третьей степени: $S_3(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3$.

Методы первичной обработки статистических данных

В основе методологии построения математических моделей стохастических процессов и зависимостей, отражающих взаимосвязи между

экспериментальными данными, лежит теория случайных величин и регрессионный анализ.

Определение 5.2. *Выборочной совокупностью* (или *выборкой*) называется совокупность случайно отобранных однородных объектов. *Генеральной совокупностью* называется совокупность всех однородных объектов, из которых производится выборка. *Объемом* совокупности (выборочной или генеральной) называется число объектов этой совокупности.

Выборка называется *репрезентативной* (представительной), если она достаточно хорошо представляет количественные соотношения генеральной совокупности.

Расположим результаты выборки в таблице. Пусть $\xi_0, \xi_1, ..., \xi_n$ – различные значения случайной величины X, соответственно, в 1, 2, 3, …, n-м испытаниях. Среди приведенных значений случайной величины X могут быть и равные. Объединив равные значения случайной величины, получим таблицу

X	x_1	x_2	x_3	...	x_l
n_x	n_1	n_2	n_3	...	n_l

где n_i – число появлений значения x_i (i = 1, 2, …, l). Величины n_1, n_2, ..., n_l называются *частотами* соответствующих значений x_1, x_2, …, x_l случайной величины X. Очевидно, что $\sum_{i=1}^{l} n_i = n$, т.е. сумма частот всех значений случайной величины равна объему выборки.

Отношение частоты n_i к объему выборки n называется *относительной частотой* значения x_i и обозначается через w_i (i = 1, 2, …, l). Следовательно, $\sum_{i=1}^{l} w_i = \sum_{i=1}^{l} \frac{n_i}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{l} n_i = \frac{1}{n} n = 1$, т.е. для случайной величины X сумма относительных частот всех ее значений равна единице.

Таблица, устанавливающая соответствие между значениями случайной величины и их относительными частотами, называется *статистическим распределением* случайной величины X:

X	X_1	x_2	x_3	...	x_l
W	w_1	w_2	w_3	...	w_l

Следует заметить, что довольно часто статистическим распределением называют также таблицу, определяющую соответствие между значениями случайной величины и их частотами.

Если X – непрерывная случайная величина, то ее статистическое распределение целесообразно представить в виде

I	(ξ_0, ξ_1)	(ξ_1, ξ_2)	(ξ_2, ξ_3)	...	(ξ_{l-1}, ξ_l)
W	w_1	w_2	w_3	...	w_l

Здесь w_i – относительная частота попадания случайной величины в интервал (ξ_{l-1}, ξ_l), i = 1, 2, …, l.

Для наглядности статистическое распределение дискретной случайной величины иллюстрируется *полигоном* распределения. Для этого последовательные точки (x_1; w_1), (x_2; w_2), …, (x_l; w_l) изображают на координатной плоскости и соединяют их прямолинейными отрезками. Необходимо отметить, что точки, не являющиеся вершинами полигона, не представляют интереса с точки зрения математической статистики.

Для иллюстрации распределения непрерывной случайной величины пользуются диаграммами, которые называются *гистограммами.*

Гистограмма устанавливает зависимость частот от разрядов интервалов, в которые попадают значения случайной величины.

Пусть непрерывная случайная величина X определена таблицей:

I	(ξ_0,ξ_1)	(ξ_1,ξ_2)	(ξ_2,ξ_3)	…	(ξ_{l-1},ξ_l)
n_x	n_1	n_2	n_3	…	n_l

Предполагая, что разности (ξ_i,ξ_{i-1}) постоянны, примем $(\xi_i,\xi_{i-1})=h$ для i = 1, 2, …, l (h – шаг таблицы). На оси $0x$ отметим точки $\xi_0, \xi_1, ..., \xi_l$. Рассмотрим функцию, определенную равенствами $y=n_i/h$, если $x\in(\xi_{i-1},\xi_i)$, i = 1, 2, …, l. Вычислим площади S_i прямоугольников, нижними основаниями которых являются отрезки $[\xi_{l-1},\xi_l]$ оси $0x$, а верхними – соответствующие отрезки графика функции $y=n_i/h$. Имеем

$$S_i=(n_i/h)h=n_i \quad (i=1,2,...,l).$$

При больших объемах выборки гистограмма дает приближенное геометрическое представление о кривой распределения (графике плотности вероятности) генеральной совокупности.

Лекция 6. Понятие о численных методах решения алгебраических и дифференциальных уравнений

План лекции

1. Метод половинного деления.
2. Итерационные методы.
3. Метод Ньютона.

Метод половинного деления для уравнения $f(x) = 0$

Пусть $f(x) = 0$ – некоторое уравнение. Число ξ называется корнем или решением данного уравнения, если оно, будучи подставлено в уравнение, об-

ращает его в равенство, т.е. $f(\xi) = 0$. Число ξ называют нулем функции $y = f(x)$.

Нахождение действительных корней с определенной точностью можно разбить на два типа:

♦ отделение корней, т.е. установление промежутков, в которых содержится один корень уравнения;

♦ вычисление корня, принадлежащего выбранному промежутку, с заданной точностью.

Известно, что если функция $f(x)$ непрерывна и принимает на концах отрезка $[a, b]$ значения разных знаков, т.е. $f(a)f(b) < 0$, то внутри этого промежутка найдется нуль функции.

Отделение корней уравнения $f(x) = 0$ для непрерывной в области определения функции $f(x)$ можно осуществить различными способами.

Первый способ. Составляют таблицу значений функции $y = f(x)$ на определенном промежутке изменения аргумента x, и если окажется, что для соседних значений аргументов значения функции имеют разные знаки, то нуль функции находится между ними.

Второй способ. Уравнение $f(x) = 0$ заменяют равносильным $\varphi(x) = \Psi(x)$. Строят графики функций $y = \varphi(x)$ и $y = \Psi(x)$; искомый корень является абсциссой точки пересечения этих графиков.

Третий способ. Строят график функции $y = f(x)$ на промежутке изменения x; тогда абсцисса ξ точки пересечения графика с осью $0x$ – нуль функции, т.е. $f(\xi) = 0$.

Рассмотрим идею метода половинного деления.

Пусть дано уравнение $f(x) = 0$, причем функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$ и $f(a)f(b) < 0$. Для вычисления корня уравнения, принадлежащего отрезку $[a, b]$, найдем середину этого отрезка $x_1 = a + b/2$. Если $f(x) \neq 0$, то для продолжения вычислений выберем ту из частей данного отрезка $[a, x_1]$ или $[x_1, b]$, на концах которой функция $f(x)$ имеет противоположные знаки. Концы нового отрезка обозначим через a_1 и b_1.

Новый суженный промежуток $[a_1, b_1]$ снова поделим пополам и проведем вычисления по разработанной схеме и т.д.

Метод итераций для одного уравнения с одним неизвестным

Пусть требуется решить уравнение, представленное в виде

$$x = g(x), \tag{6.1}$$

где правая часть уравнения – непрерывная на отрезке $[a, b]$ функция $g(x)$. Суть метода итераций (метода последовательных приближений) состоит в следующем. Начиная с произвольной точки $x^{(0)}$, принадлежащей отрезку $[a, b]$, получаем

$$x^{(1)} = g(x^{(0)}) \text{ (первое приближение)},$$
$$x^{(2)} = g(x^{(1)}) \text{ (второе приближение)},$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \tag{6.2}$$

$$x^{(k+1)} = g(x^{(k)}) \ (k+1\text{-е приближение})$$

.....

Последовательность

$$x^{(0)}, x^{(1)}, \ldots, x^{(k)}, \ldots$$

называется последовательностью приближений для уравнения с начальной точкой $x^{(0)}$. Если все точки принадлежат отрезку $[a, b]$ и существует предел

$$\xi = \lim_{k\to\infty} x^{(k)},$$

то, перейдя к пределу в равенстве (6.2), получим

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k+1)} = \lim_{k\to\infty} g(x^{(k)}),$$

т.е. $\xi = g(\xi)$. Значит, если существует предел последовательности приближений, то он является корнем уравнения. Достаточные условия сходимости метода содержатся в представленной ниже теореме.

Теорема 6.1. Пусть функция $g(x)$ имеет на отрезке $[a, b]$ непрерывную производную и выполнены два условия: $|g'(x)| \le q < 1$ при $x \in [a, b]$; значения функции $y = g(x)$ принадлежат отрезку $[a, b]$ для любого $x \in [a, b]$. Тогда при любом выборе начального приближения $x(0) \in [a, b]$ процесс итераций сходится к единственному корню ξ уравнения на отрезке $[a, b]$.

Оценка погрешности приближения $x^{(k)}$ к корню ξ имеет вид

$$\left|\xi - x^{(k)}\right| \le \frac{q^k}{q-1}.$$

Один из способов преобразования уравнения $f(x) = 0$ к виду $x = g(x)$, допускающему применение метода итераций, состоит в следующем. Для любого числа λ данное уравнение равносильно уравнению (6.1), где $g(x) = = x + \lambda f(x)$. Предположим, что производная $f'(x) > 0$ и непрерывна на $[a, b]$. Пусть

$$M = \max_{a\le x\le b} f'(x), \qquad m = \min_{a\le x\le b} f'(x).$$

Применим $\lambda = -\dfrac{1}{M}$, $q = 1 - \dfrac{m}{M}$ и рассмотрим функцию

$$g(x) = x - \frac{1}{M} f(x). \tag{6.3}$$

Для функции, определенной формулой (6.3), выполняются достаточные условия сходимости метода итераций решения уравнения (6.2).

З а м е ч а н и е 1. Если окажется, что производная $f'(x)$ отрицательна на отрезке $[a, b]$, то уравнение можно заменить на равносильное уравнение $-f(x) = 0$ и использовать указанное преобразование.

З а м е ч а н и е 2. Если определение точного значения числа M затруднительно, то можно заменить его произвольным числом $M_1 > M$. Однако при большом M число q ближе к единице и процесс итераций сходится медленнее.

Метод Ньютона

Геометрический смысл метода Ньютона (метода касательных) заключается в том, что на отрезке $[a, b]$, содержащем корень уравнения $f(x) = 0$, график самой функции $f(x)$ заменяется отрезком касательной в точке $x = a$ или $x = b$. (Предполагается, что функция $f(x)$ дифференцируема на $[a, b]$). При этом используется только одна точка, поэтому необязательно задавать отрезок $[a, b]$, содержащий корень. Достаточно задать некоторое приближение x_0.

Уравнение касательной в точке (x_0, x_0) имеет вид

$$y - f(x_0) = f'(x_0)\cdot(x - x_0).$$

Для точки пересечения с осью $0x$ запишем формулу следующим образом:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Продолжая этот процесс, получаем формулу

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \qquad (6.4)$$

Объем вычислений в методе Ньютона на каждом шаге выше, чем в предыдущих методах, т. к. в точке x_n определяются значения функции и ее производной, что компенсируется более высокой скоростью сходимости этого метода. Но в отличие от предыдущих методов, метод Ньютона сходится не при всяком выборе начального приближения на отрезке, содержащем корень уравнения.

Легко проверить, что одним из условий сходимости метода будет сохранение знака второй производной $f(x)$ на некотором промежутке, содержащем корень, и выбор начального приближения с той стороны от корня, где знак функции совпадает со знаком второй производной. При этом последовательные приближения будут сходиться к корню монотонно.

Другое условие сходимости получается при исследовании скорости сходимости вблизи корня.

Перепишем формулу (6.4) в виде

$$x_{n+1} - x^* = x_n - x^* - \frac{f(x_n) - f(x^*)}{f(x_n)} .$$

Используя для разности $f(x_n) - f(x^*)$ разложение по формуле Тейлора до членов второго порядка, получим

$$x_{n+1} - x^* = \frac{f''(\xi)}{2 \cdot f'(x_n)} (x_n - x^*)^2 .$$

Отсюда

$$\left| x_{n+1} - x^* \right| \le q (x_n - x^*)^2 , \qquad (6.5)$$

где

$$q = \frac{M_2}{2 \cdot m_1}, \quad M_2 = \max \left| f''(x) \right| .$$

Из неравенства (6.5) следует, что

$$\left| x_{n+1} - x^* \right| q \le \left(q \left| x_n - x^* \right| \right)^2 \le \ldots \left(q \left| x_0 - x^* \right| \right)^{2^{n+1}} \to 0$$

при $n \to \infty$, если

$$q (x_0 - x^*) < 1 .$$

Это условие можно рассматривать как ограничение на выбор начального приближения. Выполнение неравенства $\left| x_0 - x^* \right| < \frac{2m_1}{M_2}$ достаточно для сходимости метода.

Если погрешности приближенных решений, полученных некоторым методом, удовлетворяют неравенству вида (6.4), то говорят, что метод имеет квадратичную скорость сходимости. Метод Ньютона является самым эффективным по скорости сходимости из всех существующих методов решения нелинейных уравнений.

Лекция 7. понятие о Численных методах решения алгебраических и дифференциальных уравнений

План лекции

1. Численные методы решения дифференциальных уравнений (понятие конечной и разделенной разности, методы Рунге-Кутта, понятие разностной схемы).

2. Использование математических и общеинженерных пакетов прикладных программ для моделирования металлургических процессов.

Методы решения дифференциальных уравнений

Уравнения, содержащие производную одной переменной, возникают во многих областях прикладной математики. Вообще любая физическая ситуация, где рассматривается степень изменения одной переменной по отношению к другой переменной, описывается дифференциальным уравнением, а такие ситуации, очевидно, встречаются весьма часто.

Существует множество приемов для нахождения решений дифференциальных уравнений через элементарные или через специальные функции. Однако очень часто в практических задачах такие методы или вообще неприменимы, или приводят к таким сложным решениям, что затраты труда на их получение или на соответствующие расчеты превосходят все допустимые пределы. Например, внешне простое уравнение

$$y' = x^2 + y^2$$

не имеет элементарного решения. В большом количестве практических задач коэффициенты или функции в дифференциальном уравнении могут содержать существенные нелинейности или даже задаваться в виде таблиц экспериментальных данных (последний случай сразу снимает вопрос о возможности решения классическими методами).

Таким образом, по многим причинам мы вынуждены обратиться к методам решения, которые могут пригодиться тогда, когда невозможно использовать классические методы.

В этой лекции мы будем в основном рассматривать методы решения задачи Коши для одного обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка

$$y' = f(x, y) \tag{7.1}$$

с начальным условием

$$y(x_0) = y_0 . \tag{7.2}$$

Установим, что понимается под решением данного уравнения с начальным условием и под его численным решением. Уравнение можно рассматривать как определение кривой через производную y' в координатной плоскости xy. Мы знаем, как вычислить производную в каждой точке этой кривой через координаты этой точки x и y. В общем случае уравнению удовлетворяет целое семейство кривых; начальное условие позволяет выбрать из

этого семейства одну определенную кривую, которая проходит через заданную точку.

Условия существования и единственности решения задачи Коши содержатся в следующей теореме.

Теорема. Пусть правая часть дифференциального уравнения (7.1) непрерывна вместе со своей частной производной $\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}$ по переменной y в некоторой области D на плоскости. Тогда при любых начальных данных $(x_0, y_0) \in D$ задача Коши (7.1)–(7.2) имеет единственное решение $y = \varphi(x)$.

При выполнении условий теоремы через точку (x_0, y_0) на плоскости проходит единственная интегральная кривая. Будем считать, что условия теоремы существования и единственности выполняются.

Численное решение задачи Коши (7.1)–(7.2) состоит в том, чтобы получить искомое решение $\varphi(x)$ в виде таблицы его приближенных значений для заданных значений аргумента x на некотором отрезке $[a, b]$:

$$x_0 = a, x_1, \ldots, x_m = b .$$

Точки называют узловыми точками, а множество этих точек – сеткой на отрезке $[a, b]$. Будем использовать равномерную сетку с шагом $h = (b - a)/n$: $x_i = x_{i-1} + h$, $i = 1, 2, \ldots, n$.

Простейшим численным методом решения задачи Коши (7.1)–(7.2) является *метод Эйлера*, называемый иногда *методом ломаных Эйлера*.

Угловой коэффициент касательной к интегральной кривой в точке $P_0(x_0, y_0)$ равен

$$y_0' = f(x_0, y_0) .$$

Найдем ординату y_1 точки на касательной, соответствующей абсциссе $x_1 = x_0 + h$. Уравнение касательной к кривой в точке P_0 имеет вид

$$y - y_0 = y_0'(x_0 - y_0) ,$$

поэтому

$$y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0) .$$

Угловой коэффициент в точке $P_1(x_1, y_1)$ также находится из дифференциального уравнения: $y'_1 = f(x_1, y_1)$. На следующем шаге получаем новую точку $P_2(x_1, y_1)$, причем

$$x_2 = x_1 + h, \qquad y_2 = y_1 + h \cdot f(x_1, y_1) .$$

Продолжая вычисления в соответствии с намеченной схемой, получим формулы Эйлера для m приближенных значений решения задачи Коши с начальными данными (x_0, y_0) на сетке отрезка $[a, b]$ с шагом h:

$$x_i = x_{i-1} + h, \qquad y_i = y_{i-1} + h \cdot f\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right) \quad (i = 1, 2, \ldots, m) .$$

Графической иллюстрацией приближенного решения является ломаная, соединяющая последовательно точки P_0, P_1, P_2, …, P_m, ее называют ломаной Эйлера.

Оценим погрешность метода Эйлера на одном шаге. Для этого запишем разложение точного решения задачи Коши в точке x_1 по формуле Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа:

$$\varphi(x_1) = \varphi(x_0 + h) = \varphi(x_0) + \varphi'(x_0)h + \frac{1}{2}\varphi''(\varepsilon)h^2 = y_0 + hf(x_0, y_0) + \frac{1}{2}\varphi''(\varepsilon)h^2 =$$

$$= y_1 + \frac{1}{2}\varphi''(\varepsilon)h^2, \qquad \varepsilon \in (x_0, y_0).$$

Погрешность метода на одном шаге имеет порядок h^2, т.к.

$$d_0 = \left|\varphi(x_1) - (y_1)\right| = \frac{1}{2}\left|\varphi''(\varepsilon)\right|h^2 \le \frac{1}{2}\max\left|\varphi''(x)\right|h^2 .$$

После m шагов погрешность вычисления значения y_m в конечной точке отрезка возрастет не более чем в m раз. Погрешность метода Эйлера можно оценить неравенством

$$d \le \frac{h^2 m}{2}\max_{a \le x \le b}\left|\varphi''(\varepsilon)\right| = h\frac{b-a}{2}\max_{a \le x \le b}\left|\varphi''(\varepsilon)\right| .$$

Это означает, что метод Эйлера имеет первый порядок точности. В частности, при уменьшении шага h в 10 раз погрешность уменьшится примерно в 10 раз.

Практическую оценку погрешности решения, найденного на сетке с шагом $h/2$, производят с помощью приближенного равенства – *правила Рунге*:

$$\left|\varphi(x_i) - y_i(h/2)\right| \approx \frac{\left|y_i(x) - y_i(h/2)\right|}{2^{p-1}} , \qquad (7.3)$$

где p – порядок точности численного метода. Таким образом, оценка полученного результата по формуле (7.3) вынуждает проводить вычисления дважды: один раз с шагом h, другой – с шагом $h/2$.

Существует два основных класса методов.

В *одноступенчатых*, или *одношаговых*, методах используется только информация о самой кривой в одной точке и не производятся итерации. Практически удобные методы этого класса (а их существует множество) включают в себя методы Рунге–Кутта. Эти методы являются прямыми (без итераций), что, казалось бы, должно привести к экономии машинного времени, но в действительности они требуют многократных повторных вычисле-

ний функции. Кроме того, при использовании этих методов трудно оценивать допускаемую ошибку.

При использовании *многоступенчатых*, или *многошаговых*, методов следующую точку кривой можно найти, не производя так много повторных вычислений функции, как при использовании одноступенчатых методов. Здесь для достижения достаточной точности требуются итерации. Большинство методов этого класса называются методами прогноза и коррекции. К этой группе относятся и разностные методы решения задачи Коши для дифференциальных уравнений высшего порядка, поскольку эти методы используют на каждом шаге несколько предыдущих точек.

Методы Рунге–Кутта

На основе метода Эйлера строятся более точные численные методы решения задачи Коши (7.1), (7.2), называемые методами Рунге–Кутта. Решение этими методами ведется, начиная с данных (x_0, y_0), по следующим рекуррентным формулам:

$$x_i = x_{i-1} + h, \qquad y_i = y_{i-1} + \Delta y_{i-1} \quad (i = 1, 2, \ldots, m),$$

$$\Delta y_{i-1} = \sum_{j=1}^{p} d_j k_j^{[i-1]},$$

$$k_j^{[i-1]} = hf\left(x_{i-1} + c_j h, y_{i-1} + ck_{j-1}^{[i-1]}\right) \ . \qquad (7.4)$$

Метод называют методом Рунге–Кутта порядка p, если он имеет p-й порядок точности по шагу h на сетке. Порядок точности p достигается с помощью формул (7.4) при определенных значениях коэффициентов c_j и d_j, $j = 1, 2, \ldots, p$. Эти коэффициенты вычисляют по следующей схеме:

1) точное решение $\varphi(x_0 + h)$ и его приближение $y_1 = y_0 + \Delta y_0(h)$ представляют в виде разложения по формуле Тейлора в точке x_0 вплоть до слагаемого порядка h^{p+1};

2) из равенства подобных членов при одинаковых степенях h в двух разложениях получают уравнения, решая которые, находят коэффициенты c_j и d_j.

Заметим, что метод Эйлера можно назвать методом Рунге–Кутта первого порядка. Действительно, для $p = 1$, $c_j = 0$, $d_j = 1$ формулы преобразуются в соотношения

$$x_i = x_{i-1} + h, \qquad y_i = y_{i-1} + \Delta y_{i-1} \quad (i = 1, 2, \ldots, m),$$

$$\Delta y_{i-1} = d_1 k_1^{[i-1]} = k_1^{i-1}, \qquad k_1^{[i-1]} = hf\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right)$$

или

$$x_i = x_{i-1} + h, \qquad y_i = y_{i-1} + hf\left(x_{i-1}, y_{i-1}\right).$$

Для вычисления значения y_{m+1} метод Эйлера использует наклон касательной только в точке (x_m, y_m). Этот метод можно усовершенствовать множеством различных способов. Здесь мы рассмотрим только так называемый модифицированный метод Эйлера из семейства методов Рунге–Кутта.

Его схема имеет вид

$$y_{m+1} = y_m + h\hat{O}\left(x_m, y_m, h\right),$$

где

$$\hat{O}\left(x_m, y_m, h\right) = f\left(x_m + \frac{h}{2}, y_m + \frac{h}{2}y'_m\right),$$

$$y'_m = f\left(x_m, y_m\right).$$

Этот метод согласуется с разложением в ряд Тейлора вплоть до членов степени h^2 и потому является методом Рунге–Кутта второго порядка.

Методы прогноза и коррекции

Отличительной чертой методов Рунге–Кутта является то, что при вычислении точки (x_{m+1}, y_{m+1}) используется информация только о точке (x_m, y_m), но не о предыдущих. В методах второго порядка и выше приходится находить значение функции в одной или в нескольких промежуточных точках. Это представляется нерациональным, поскольку если процесс интегрирования уже продвинулся на несколько шагов, то к нашим услугам имеется дополнительная информация (информация о предыдущих точках решения), для использования которой вообще не нужно вычислять никаких функций. Поскольку в методах Рунге–Кутта информация о предыдущих точках решения не используется, а также поскольку для этих методов отсутствуют достаточно простые способы оценки ошибки, то целесообразно было бы рассмотреть некоторые дополнительные методы решения дифференциальных уравнений. Однако с помощью этих методов нельзя начать решение уравнения, т.к. в них не только возможно, но и необходимо использовать информацию о предыдущих точках. Чтобы начать решение уравнения, имея только одну точку, определяемую начальным условием, и изменить шаг h, требуется метод типа Рунге–Кутта. Поэтому, как мы уже говорили, приходится использовать разумное сочетание двух методов решения.

Те методы, которые мы собираемся сейчас рассматривать, известны под общим названием методов прогноза и коррекции. Как ясно из названия, вначале «предсказывается» значение y_{m+1}, а затем используется тот или иной метод для «корректировки» этого значения. Естественно, после этого можно использовать ту же самую формулу для вторичной корректировки однажды уже скорректированного значения y_{m+1}. Этот итерационный процесс можно повторять сколько угодно раз, но в дальнейшем мы увидим, что из сообра-

жений эффективности целесообразно уменьшать число итераций, выбирая должным образом шаг интегрирования.

Для прогноза используем формулу второго порядка

$$y_{m+1}^{(0)} = y_{m-1} + 2h \cdot f\left(x_m, y_m\right),$$

где верхний индекс (0) означает исходное приближение к y_{m+1}, т.е. предсказанное значение. Непосредственно из написания формулы следует, что с ее помощью нельзя найти y_1, т.к. для ее вычисления потребовалась бы точка, расположенная перед начальной точкой y_0. Чтобы начать решение с помощью метода прогноза и коррекции, часто используется метод Рунге–Кутта.

Теперь требуется некоторый метод коррекции предсказанного значения. Так как нам приближенно известна величина y_{m+1}, то можно вычислить наклон касательной в точке $(x_{m+1}, y^{(0)}{}_{m+1})$. Усредним тангенсы углов наклона линий L_1 и L_2 и получим линию $\overline{L}$. Наконец, проведем через точку (x_m, y_m) линию L, параллельную $\overline{L}$, и точка пересечения этой линии с ординатой $x = x_{m+1}$ даст новое приближение к y_{m+1}. Назовем это приближение скорректированным значением $y^{(1)}{}_{m+1}$. Вычислить это значение можно по формуле

$$y_{m+1}^{(1)} = y_m + \frac{h}{2}\left[f\left(x_m, y_m\right) + f\left(x_{m+1}, y_{m+1}^{(0)}\right)\right].$$

Можно попытаться найти новое, по-видимому, еще лучшее приближение к y_{m+1}, используя значение $y^{(1)}{}_{m+1}$ и корректируя снова. В общем случае i-е приближение к y_{m+1} вычисляется по формуле

$$y_{m+1}^{(i)} = y_m + \frac{h}{2}\left[f\left(x_m, y_m\right) + f\left(x_{m+1}, y_{m+1}^{(i-1)}\right)\right]. \qquad (7.5)$$

Для $i = 1, 2, 3, \ldots$ итерационный процесс прекращается, когда

$$\left|y_{m+1}^{(i+1)} - y_{m+1}^{(i)}\right| < \varepsilon \qquad (7.6)$$

для некоторого положительного ε.

Рассмотрим ошибки ограничения прогноза и коррекции. Чтобы определить ошибку ограничения прогноза, вспомним, что ряд Тейлора для $y(x)$ в окрестности $x = x_m$ можно записать в следующем виде:

$$y(x) = y_m + y'_m\left(x - x_m\right) + \frac{y_m}{2}\left(x - x_m\right)^2 + \frac{1}{6}\left(x - x_m\right)^3 y'''(\varepsilon),$$

где ε лежит между x и x_m. Полагая $x = x_{m+1}$, получаем

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot y'_m + \frac{h^2}{2} y''_m + \frac{h^3}{6} y'''(\varepsilon_1), \quad x_m \le \varepsilon_1 \le x_{m+1}.$$

Аналогично, принимая $x = x_{m\text{-}1}$, имеем

$$y_{m-1} = y_m - h \cdot y'_m + \frac{h^2}{2} y''_m - \frac{h^3}{6} y'''(\varepsilon_2), \quad x_{m-1} \le \varepsilon_2 \le x_m .$$

Если одно равенство вычесть из другого и заметить, что

$$\frac{y'''(\varepsilon_1) + y'''(\varepsilon_2)}{2} = y'''(\varepsilon), \quad x_{m-1} \le \varepsilon \le x_{m+1} ,$$

то

$$y_{m+1} = y_{m-1} + 2hy'_m + \frac{h^3}{3} y'''(\varepsilon) .$$

Ошибка прогноза, таким образом, равна

$$E_T^{(n)} = \frac{h^3}{3} y'''(\varepsilon), \quad x_{m-1} \le \varepsilon \le x_{m+1} .$$

Ошибка коррекции определяется формулой

$$E_T^{(k)} = -\frac{h^3}{12} y'''(\eta), \quad x_{m-1} \le \varepsilon \le x_{m+1} .$$

Остается выяснить, при каких требованиях к задаче Коши (7.1), (7.2) и величине шага h может быть удовлетворено неравенство (7.6), т. е. последовательность приближений $y_{m+1}^{(i)}$ сходится. Поскольку коррекция осуществляется методом простых итераций, согласно теореме 6.1 эта последовательность и, соответственно, процесс (7.5) сходятся, если

$$\frac{h}{2}\left|f'_y\right| \le q < 1.$$

При этом значения $y_{m+1}^{(i)}$ стремятся к некоторому пределу при $i \to \infty$, но не обязательно к точному решению задачи (7.1), (7.2). Разница между тем и другим представляет собой ошибку прогноза.

Обзор математических и статистических систем

Новые информационные технологии в значительной степени изменили порядок решения математических задач. Теперь решение задач и выполнение математических преобразований необходимо осуществлять с помощью специальных программ. Рассмотрим некоторые математические и статистические пакеты программ для ЭВМ.

Математические системы Derive, Mathematica, Mathlab, Maple V и Mathcad могут быть успешно использованы при решении большого числа

различных технологических, экономических, статистических и научных задач.

Достоинством системы *Derive* является возможность выполнения аналитических преобразований математических выражений. Процедуру таких преобразований чаще всего называют компьютерной алгеброй или символьной математикой.

Derive является удобным инструментом при дифференцировании, интегрировании, разложении функции в ряды, нахождении пределов. Система имеет полный набор встроенных элементарных функций, а также множество статистических и специальных математических функций. Система позволяет работать с матрицами, выполнять операции регрессионного анализа, проводить преобразования Фурье и Лапласа. Способность системы работать с комплексными числами делает её привлекательной для радиотехнических и электротехнических расчётов.

Система *Mathematica* предоставляет возможность использовать несколько сотен команд символьной математики и формировать графику высокого качества. Порядок работы с этой системой не столь очевиден, как с другими математическими системами. Она ориентирована на решение сложных математических и научно-технических задач.

Mathematica разработана компанией Wolfram Research Inc, основанной известным математиком и физиком Стефаном Вольфрамом. Первая версия программы, появившаяся в 1988 г., стала новым словом в автоматизации математических расчётов. Система характеризуется охватом широкого круга задач, т.к. разработчики старались объединить все известные математические методы, использующиеся для решения научных задач, включая аналитические и численные расчёты в унифицированном согласованном виде.

Mathematica позволяет упрощать алгебраические выражения, дифференцировать, находить определённые и неопределённые интегралы, вычислять конечные и бесконечные суммы и произведения, решать алгебраические и дифференциальные уравнения и системы, а также разлагать функции в ряды и находить пределы.

Mathematica решает численными методами (т.е. приближёнными методами) задачи, которые не поддаются аналитическому решению. Она позволяет решать задачи оптимизации (линейного программирования, нахождения экстремумов функций), задачи математической статистики.

Система снабжена базой помощи. Имеется возможность интерактивного доступа к электронной документации, которая состоит из конструкции пользователя, справочника по стандартным дополнениям, учебника для начинающих и демонстрационных файлов.

Богатые численные и символьные возможности пакета Mathematica, мощные графические возможности (включая анимацию), встроенный язык программирования и удобные средства построения гипертекстовых связей между документами делают эту систему привлекательной как для исследовательской и практической деятельности, так и для обучения студентов.

В основу создания системы *MATLAB* (MATrix LABoratory – математическая лаборатория) положен принцип расширяемости, позволяющий адаптировать систему под задачи пользователя. Сущность этого принципа заключается в том, что пользователь может создавать практически неограниченное число собственных функций, которые хранятся на жёстком диске ЭВМ.

В базовый набор MATLAB входят арифметические, алгебраические, тригонометрические и некоторые специальные функции, функции быстрого прямого и обратного преобразования Фурье и цифровой фильтрации, векторные и матричные функции. MATLAB «умеет» выполнять операции с полиномами и комплексными числами, строить графики в декартовой и полярной системах координат, формировать изображения трёхмерных поверхностей. MATLAB имеет средства для расчёта и проектирования аналоговых цифровых фильтров, построения их частотных, импульсных и переходных характеристик и таких же характеристик для линейных электрических цепей, средства для спектрального анализа и синтеза.

Программа MATLAB компании MathSoft в основном предназначена для численного моделирования систем, содержит элементы универсальных математических пакетов, а именно специальный модуль MatLab Notebook, позволяющий использовать возможности Microsoft Word для оформления документов, а также приобретённый у компании Maple Waterloo модуль основной символьной библиотеки программы Maple V для выполнения аналитических преобразований (компьютерной алгебры).

Для решения задач моделирования программа MATLAB дополнена пакетом SIMULINK с визуально-ориентированным программированием.

Разработчики пакета *Maple V* называют его Symbolic Computation System (Система символьных вычислений) или Computer Algebra System (Система компьютерной алгебры). Maple V – универсальный математический пакет, предназначенный для выполнения разнообразных математических вычислений, как точных (аналитических), так и приближённых (с использованием численных методов), а также для построения двух- и трёхмерных графиков.

Основное преимущество системы – всесторонняя поддержка сложных символьных вычислений, мощные графические возможности и наличие многофункционального внутреннего языка программирования. На этом секторе рынка система занимает лидирующее место. Ближайшим конкурентом является пакет Mathematica фирмы Wolfram Research.

Пакет Maple V даёт возможность пользователю полностью сосредоточиться на решении его конкретной проблемы, не тратя времени на численные решения частных задач. Большое количество встроенных математических функций и детально разобранных примеров позволяют учёным, инженерам и исследователям решать сложные прикладные и теоретические задачи. Студентам и преподавателям пакет помогает глубже понять многие математические методы и проанализировать влияние различных параметров на найденное решение.

Блок символьных вычислений Maple V лицензирован и используется в системах Mathcad, MathWorks и в приложении к пакету MATLAB.

Система *Mathcad* очень естественно вписалась в оболочку Windows. Система имеет удобный интерфейс, хорошо развитые средства помощи и обширную справочную базу. Система позволяет проводить численные расчёты и аналитические преобразования. Многоцветные двух- и трёхмерные графики строятся мгновенно и с автоматическим выбором масштаба.

Отличительной особенностью системы является использование в ней общепринятых в математике символов для обозначения операций интегрирования, дифференцирования, вычисления рядов и т.д. Возможность использования латинских, греческих букв, верхних и нижних индексов позволяет получать формулы в привычном виде. С помощью кириллицы можно делать комментарии на русском языке.

Очень просты в реализации в Mathcad многие численные методы: решение линейных и нелинейных уравнений, вычисление определённых интегралов, оптимизация, решение дифференциальных уравнений, сплайн-интерполяция и т.д.

Многие возникающие проблемы при работе с Mathcad снимаются благодаря наличию электронных учебников и возможности подключения к Интернету. Через глобальную сеть пользователь получает доступ к серверу, из которого можно найти пример решения подобной задачи.

Фирма MathSoft уделяет большое внимание развитию сетевых технологий. Для связи Mathcad с Интернетом используется браузер Microsoft Internet Explorer. Выход в глобальную сеть возможен прямо из математической системы.

Mathcad является интегрирующей системой, позволяющей создавать проекты, в которых данные циркулируют по системе MATLAB, электронным таблицам Excel и пакету научной графики Axum.

Для обработки экспериментальных данных разработаны специализированные статистические пакеты. К *профессиональным* относятся пакеты SAS, BMDP, IMSL, они предназначены в основном для математиков высокой квалификации. *Популярные* (т.е. для всех пользователей) пакеты – STATGRAPHICS, SPSS, SYSTST, STADIA, STATISTICA, Minitab. Перечисленные пакеты являются универсальными и предназначены для решения широкого круга задач.

Лекция 8. Численные методы безусловной оптимизации

План лекции

1. Постановка задачи и условия оптимальности.
2. Методы одномерной безусловной оптимизации.
3. Методы многомерной безусловной оптимизации.

Постановка задачи и условия оптимальности

В настоящее время промышленное производство, а вместе с ним и интенсивность эксплуатации ограниченных природных ресурсов достигли такого уровня, при котором человечество уже не может удовлетворять свои запросы только за счёт увеличения объёма производства и потребления ресурсов. Это заставило специалистов искать пути повышения эффективности производства посредством выбора наиболее выгодного технологического режима, обеспечивающего оптимальный объём выпускаемой продукции и высокое качество.

Кроме того жёсткая конкуренция на рынках сбыта вынуждает уменьшать затраты на сырьё, рабочую силу, сокращать продолжительность производственного цикла, в том числе время на обработку информации.

При всём разнообразии эти проблемы по существу сводятся к одной и той же схеме: имеется набор количественных параметров и некая количественная характеристика, зависящая от этих параметров; нужно найти те значения параметров, при которых данная характеристика достигает максимального или минимального значения, т.е. оптимизируется. Это и есть задача оптимизации.

В данной лекции мы рассмотрим общую постановку задачи оптимизации, затем постановку и условия оптимальности для задачи безусловной оптимизации, а также некоторые методы ее решения.

Постановка задачи оптимизации:

Задано: множество X и функция $f(x)$, определённая на X.

Требуется найти: точки минимума или максимума функции f на X.

Будем записывать задачу на минимум в виде

$$f(x) \to \min, \quad x \in X. \tag{8.1}$$

Задача (8.1) сформулирована как задача нахождения минимума функции $f(x)$, или *минимизации* $f(x)$. На практике же приходится сталкиваться как с задачами минимизации, так и с задачами *максимизации* $f(x)$, т.е. нахождения точек максимума $f(x)$:

$$f(x) \to \max, \quad x \in X.$$

Например, если функция $f(x)$ выражает затраты электроэнергии на какой-либо технологический процесс, то мы будем стремиться минимизировать эту функцию. Если функция $f(x)$ выражает прибыль, то мы будем стремиться максимизировать функцию. С математической точки зрения различия между задачами минимизации и максимизации несущественны, поскольку максимизация $f(x)$ эквивалентна минимизации функции $-f(x)$. Поэтому мы всегда можем ставить задачу оптимизации как задачу минимизации (8.1).

Определение 8.1. Функция $f(x)$ в задаче (8.1), т.е. функция, которую мы минимизируем, называется *целевой функцией.* Множество X в (8.1), на котором мы минимизируем $f(x)$, называется *допустимым множеством* задачи (8.1). Любой элемент $x \in X$ называется *допустимой точкой* задачи (8.1). Допустимая точка $x^* \in X$, в которой целе-

вая функция $f(x)$ достигает своего минимума, называется *решением* задачи (8.1).

Следует иметь в виду, что на практике допустимая точка x может представлять собой некоторый набор параметров $x = (x_1, ..., x_n)$. Причём значения этих параметров могут подчиняться ограничениям или изменяться без ограничений.

Если допустимое множество $X = \mathbf{R}^n$, то задача (8.1) называется задачей *безусловной оптимизации.*

Математическая постановка задачи:

Задано: функция $f(x)$, определенная в $\mathbf{R}^n$.
Требуется найти: точки минимума функции f в $\mathbf{R}^n$.
Будем записывать задачу безусловной оптимизации:

$$f(x) \to \min, \qquad x \in \mathbf{R}^n. \tag{8.2}$$

Теория необходимых и достаточных условий оптимальности в задачах безусловной оптимизации излагается в любом курсе высшей математики. Напомним соответствующие результаты. Пусть

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right)$$

вектор первых частных производных (*градиент*) функции f в точке $x \in \mathbf{R}^n$. Следующая теорема устанавливает необходимое условие оптимальности.

Теорема 8.1. Пусть функция f дифференцируема в точке $x^* \in \mathbf{R}^n$. Если x^* – локальное решение задачи (8.2), то

$$\nabla f(x^*) = 0,$$

что означает равенство нулю всех первых производных функции f в точке x^*:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x^*) = 0, \qquad i = 1, 2, \ldots, n.$$

Достаточное условие безусловного локального минимума связано с производными высшего порядка функции f. При $n = 2$ наличие экстремума в точке x^* зависит от знака определителя

$$D = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x^*) & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x^*) \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x^*) & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(x^*) \end{vmatrix}.$$

Пусть функция f дважды дифференцируема в точке $x^* \in \mathbf{R}^n$ и первые частные производные (градиент) функции f в точке x^* равны нулю. Тогда функция f достигает экстремума в точке x^* при $D > 0$. Причем если

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x^*) > 0,$$

то x^* – точка локального минимума. Если

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x^*) < 0,$$

то x^* – точка локального максимума.

Для функции f числового аргумента ($n = 1$) достаточные условия экстремума означают, что если $f'(x^*) = 0$ и $f''(x^*) > 0$, то x^* – это решение задачи (8.2).

Используя теорему 8.1, задачу отыскания безусловных экстремумов дифференцируемой функции f можно свести к решению системы уравнений $\nabla f(x) = 0$. Однако лишь в отдельных случаях решение этой системы удаётся найти в явном виде. Как правило, задача отыскания корней системы уравнений $\nabla f(x) = 0$ примерно так же сложна, как и задача минимизации функции f, и любую из этих задач приходится решать численно. К тому же методы, разработанные специально для задач минимизации, являются более эффективными, т.к. они позволяют полнее учесть специфику задач.

Методы одномерной безусловной минимизации

Изучение методов безусловной оптимизации начинается с наиболее простого типа оптимизационных задач, в которых целевая функция зависит от одной переменной.

Необходимость отдельного рассмотрения численных методов поиска экстремума функций одной переменной диктуется следующими обстоятельствами. Во-первых, эти методы используются во многих алгоритмах поиска экстремума функций, зависящих от нескольких переменных. Во-вторых, функции одной переменной служат удобной моделью для теоретического исследования эффективности методов оптимизации. В-третьих, иногда удаётся, используя те или иные приёмы, непосредственно с помощью алгоритмов одномерной оптимизации получить решение многомерных задач.

Поскольку универсальных методов, пригодных для минимизации любых функций одной переменной, не существует, приходится строить алгоритмы, ориентированные на различные классы функций, встречающиеся в прикладных задачах.

Рассмотрим методы минимизации так называемых унимодальных функций. Пусть $X = [a, b]$.

Определение 8.2. Функция f называется *унимодальной* на X, если существует такая точка $x^* \in X$, что для любых $x_1, x_2 \in X$

$$f(x_1) > f(x_2), \quad \text{если } x_1 < x_2 < x^*,$$

$$f(x_1) < f(x_2), \quad \text{если } x^* < x_1 < x_2.$$

Для непрерывных функций свойство унимодальности означает наличие у неё единственного локального минимума.

Если известен какой-либо отрезок $[x_k, x_m]$, которому принадлежит x^*, мы будем говорить, что точка минимума x^* *локализована* в отрезке $[x_k, x_m]$. Сам отрезок при этом будем называть *отрезком локализации минимума.* В литературе интервал (x_k, x_m) называется *интервалом неопределённости.*

Приступим к описанию алгоритмов минимизации унимодальных функций. Будем предполагать, если не оговорено противное, что минимизируемая функция унимодальна на отрезке $[a, b]$ и используется информация лишь о значениях самой функции.

Наиболее широкое применение в практике решения задач одномерной минимизации получили так называемые методы исключения интервалов, которые опираются на следующее утверждение.

Теорема 8.2. Пусть функция f унимодальна на X и $x_1 < x_2$. Тогда если $f(x_1) \le f(x_2)$, то $x^* \le x_2$, если же $f(x_1) \ge f(x_2)$, то $x^* \ge x_1$.

Общая схема методов исключения интервалов состоит в следующем:

1. Задаем точность ε.
2. Рассчитываем x_1 и x_2.
3. Вычисляем $e = f(x_1) - f(x_2)$.
4. Если $x_1 > x_2$ и $e \le 0$, то полагаем $a = x_2$. Если $x_1 > x_2$ и $e > 0$, то полагаем $b = x_1$. Если $x_1 < x_2$ и $e \le 0$, то полагаем $b = x_2$. Если $x_1 < x_2$ и $e > 0$, то полагаем $a = x_1$.
5. Увеличиваем j: $j = j + 1$.
6. Если $|b - a| > \varepsilon$, то переходим к п. 2. В противном случае полагаем $x^* \approx x_1$, $f_{\min} \approx f(x^*)$.

Все методы исключения интервалов отличаются друг от друга тем, каким способом вычисляются точки x_1 и x_2. Например, в *методе дихотомии* полагают $x_1 = \frac{a+b}{2} - \delta$, $x_2 = \frac{a+b}{2} + \delta$, где δ – некоторое положительное число, $\delta < \varepsilon$. В процессе поиска очередного отрезка локализации *методом золотого сечения* на первом шаге точка x_1 делит текущий отрезок в отношении золотого сечения. На всех остальных шагах в качестве точки x_1 выбирается точка, уже лежащая внутри отрезка $[a, b]$. Точка x_2 всегда вычисляется по формуле

$$x_2 = a + b - x_1.$$

При практическом использовании описанных выше методов надо иметь в виду, что у каждого из них есть свои достоинства и недостатки. Метод дихотомии (его еще называют методом деления отрезка пополам) – са-

мый простой, но и самый трудоемкий из них. На каждом шаге данного метода нужно находить значение функции $f(x)$ дважды, тогда как в методе золотого сечения это делается на каждом шаге только один раз, что и определяет большую трудоемкость рассчета значения x^* с заданной точностью. А именно, если N раз вычислить значение функции $f(x)$, то методом золотого сечения значение x^* может быть найдено в $1{,}44^N$ раз точнее, чем методом дихотомии.

Методы многомерной безусловной оптимизации

Этот параграф посвящен методам решения задачи (8.2) в случае произвольной размерности пространства $\mathbf{R}^N$ $(N \geq 1)$. Будут рассмотрены две группы классических методов минимизации. Первую группу составляют так называемые методы спуска. Наиболее важным среди методов второй группы является метод Ньютона и его модификации.

Многие методы минимизации относятся к числу методов спуска. В методах спуска направление движения к минимуму на каждом шаге выбирается из числа направлений убывания минимизируемой функции.

Говорят, что вектор $\bar{h} = (h_1, h_2, \ldots, h_n)$ задает *направление убывания* функции f в точке x, если существует такое число $\alpha_0 > 0$, что

$$f(x + \alpha \bar{h}) < f(x)$$

при всех $0 < \alpha < \alpha_0$. Сам вектор $\bar{h}$ также называют направлением убывания. Множество всех направлений убывания функции f в точке x будем обозначать через $U(x, f)$. Таким образом, если любой достаточно малый сдвиг из x в направлении вектора $\bar{h}$ приводит к уменьшению значения функции f, то $\bar{h} \in U(x, f)$.

Заменив неравенство, фигурирующее в определении направления убывания, на противоположное, получим определение *направления возрастания*.

В дальнейшем нам понадобятся следующие необходимое и достаточное условия направления убывания.

Теорема 8.3. *Достаточное условие.* Пусть функция f дифференцируема в точке $x \in \mathbf{R}^n$. Если вектор $\bar{h}$ удовлетворяет условию

$$\left(\nabla f(x), \bar{h}\right) = \frac{\partial f}{\partial x_1}(x)\, h_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2}(x)\, h_2 + \ldots + \frac{\partial f}{\partial x_n}(x)\, h_n < 0,$$

то $\bar{h} \in U(x, f)$.

Необходимое условие. Если $\bar{h} \in U(x, f)$, то $(\nabla f(x), \bar{h}) \leq 0$.

Другими словами, теорема 8.3 утверждает, что вектор $\bar{h}$ задает направление убывания функции f, если он составляет тупой угол с вектором градиента ∇f, указывающим, как известно из курса высшей математики, направление наискорейшего возрастания функции f.

При $n = 2$ решению задачи безусловной оптимизации можно дать геометрическую иллюстрацию. Уравнению $x_3 = f(x_1, x_2)$ соответствует поверхность в трехмерном пространстве. Если функция $f(x)$ достигает локального минимума в точке, то поверхность $x_3 = f(x_1, x_2)$ в некоторой окрестности точки x^* имеет форму чаши.

Геометрическая интерпретация двумерной задачи минимизации основана на понятии линии уровня. Напомним, что линиями уровня функции $f(x_1, x_2)$ называют семейство линий плоскости $\mathbf{R}^2$, на которых функция принимает постоянное значение. Если функция $f(x)$ имеет в $\mathbf{R}^2$ единственную точку локального минимума $x^* = (x_1^*, x_2^*)$, то такая функция называется *мономодальной*. Взаимное расположение ее линий уровня имеет вид, изображенный на рис. 8.1. *Мультимодальными* называются функции, у которых более одного экстремума. Такова, например, функция $f(x) = ((x_1)^2 + \quad + (x_2)^2 + 1)^2 - 4(x_1)^2$, имеющая две точки минимума: (1, 0) и (–1, 0). Линиями уровня этой функции являются так называемые овалы Кассини (рис. 8.2).

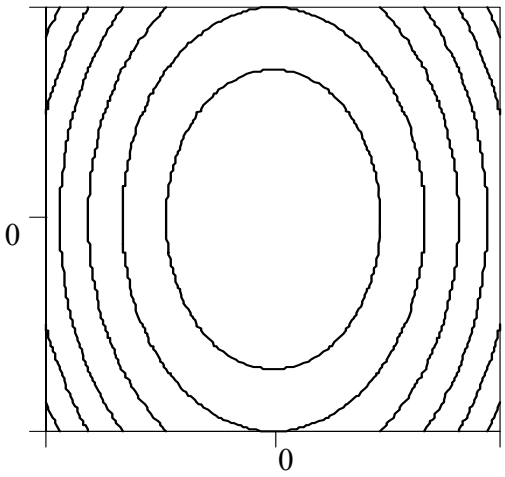

Рис. 8.1. Мономодальная функция

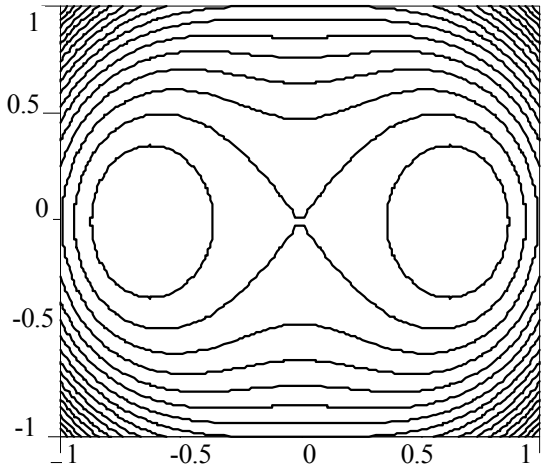

Рис. 8.2. Мультимодальная функция

Общая идея методов спуска состоит в следующем. Для определения точки x^* локального минимума функции $f(x)$ строится последовательность точек $\{x(k)\}$ ($k = 0, 1, 2, \ldots$), сходящаяся к точке x^* таким образом, чтобы последовательность значений функции $f(x(k))$ была монотонно убывающей и ограниченной:

$$f(x^{(0)}) \geq f(x^{(1)}) \geq \ldots \geq f(x^{(k)}) \geq \ldots \geq f(x^*).$$

Геометрически алгоритм решения задачи (8.2) в случае двух переменных напоминает спуск на дно чаши (рис. 8.3). Это мотивирует название «методы спуска».

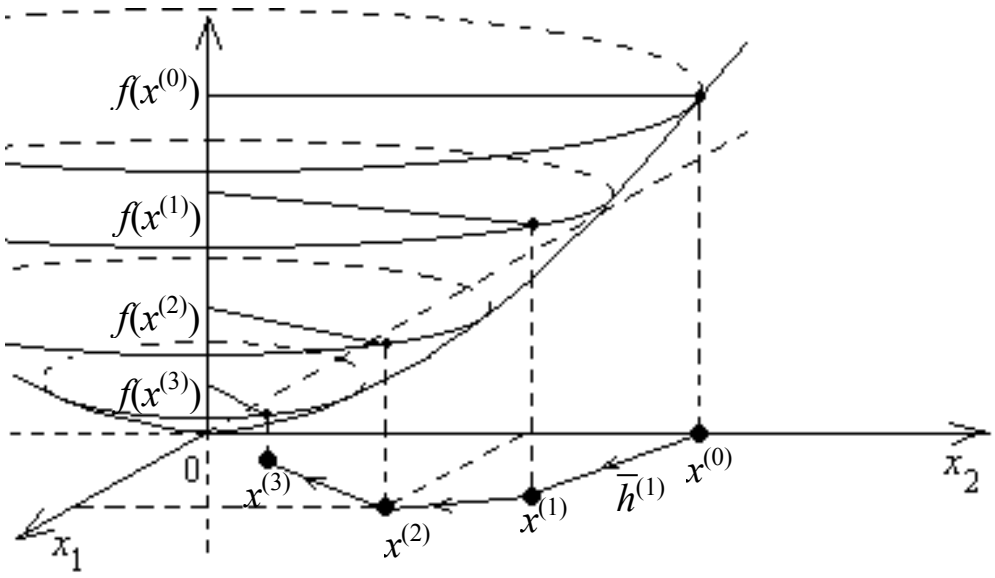

Рис. 8.3. Геометрическая интерпретация методов спуска

Для различных методов спуска сначала выбирают начальную точку последовательности $x^{(0)}$ (рис. 8.3). Дальнейшие приближения $x^{(k)}$ определяются соотношениями

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^k \bar{h}^{(k)} \qquad (k = 0, 1, 2, \ldots), \qquad (8.3)$$

где $\bar{h}^{(k)}$ – вектор направления убывания; α^k – положительная скалярная величина, называемая длиной шага.

Методы спуска различаются выбором направления убывания и длины шага.

Контрольные вопросы и задания

1. Сформулируйте задачу безусловной оптимизации.
2. Каковы необходимые и достаточные условия оптимальности в задачах одномерной безусловной оптимизации?
3. В чем состоит свойство унимодальности функций?
4. Сформулируйте утверждение, на которое опираются все методы одномерной минимизации.
5. Опишите алгоритм, позволяющий найти начальный отрезок локализации минимума.
6. Назовите преимущества и недостатки методов дихотомии, Фибоначчи и золотого сечения.
7. В чем состоит суть интерполяционных методов минимизации?
8. Дайте определение направления убывания. Сформулируйте необходимые и достаточные условия направления убывания.
9. В чем состоит общая идея методов спуска? Укажите хотя бы один метод, являющийся методом спуска.
10. Что такое моно- и мультимодальные функции?

11. Определите хотя бы один отрезок унимодальности функции $f(x) = x - 2x^2 + 0{,}2x^5$.

12. Минимизируйте функцию $f(x) = 3x^2 + 12/x^3 - 5$ на отрезке $0{,}5 \le x \le 2{,}5$, используя а) метод дихотомии, б) метод золотого сечения, в) метод Фибоначчи, г) метод парабол. В каждом случае проведите по четыре вычисления значений функции. Сравните результирующие отрезки локализации минимума.

13. Дана функция Розенброка $f(x) = 100(x_2 - (x_1)^2)^2 + (1 - x_1)^2$ и начальная точка $x^{(0)} = (-1,\ 2;\ 0)$. Найдите точку локального минимума этой функции, пользуясь методом покоординатного спуска, с точностью до 0,2.

14. В процессе поиска точки минимума функции Розенброка (см. предыдущее упражнение) получены две первые точки $x^{(0)} = (-1{,}2;\ 1)$, $x^{(1)} = (-1{,}3;\ 1{,}07)$. Определите направление поиска из точки $x^{(1)}$, пользуясь следующими градиентными методами: а) методом наискорейшего спуска, б) методом Ньютона.

ТЕМА 4. УПРАВЛЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ ПРОЦЕССАМИ В ДИНАМИКЕ

Лекция 9. Постановка и классификация задач условной оптимизации

План лекции

1. Понятие о задаче условной оптимизации. Классификация задач оптимизации.
2. Понятие о численных методах оптимизации.
3. Условия оптимальности в общей задаче оптимизации.

Понятие о задаче условной оптимизации. Классификация задач оптимизации

Ранее мы уже описали общую постановку задачи оптимизации и изучили простейший класс оптимизационных задач без ограничений. В данной лекции мы продолжим разговор о задачах оптимизации как математической основе теории управления технологическими процессами.

Задачи оптимизации находят эффективное применение во всех направлениях инженерной деятельности, и в первую очередь в следующих четырех ее областях.

Проектирование систем и их составных частей. Сфера применения оптимизационных методов в инженерном проектировании достаточно широка: от проектирования отдельных структурных элементов технических систем до проектирования узлов оборудования и составления предварительных проектов промышленных предприятий в целом.

Планирование и анализ функционирования существующих систем. Методы оптимизации в производственном планировании ориентированы главным образом на составление программ производства нескольких видов продукции на отдельном предприятии, а также на координирование производственных планов предприятий, которые связаны хозяйственными отношениями. Задачи анализа функционирования систем обычно возникают в тех случаях, когда требуется адаптировать существующую производственную систему к новым условиям функционирования, отличным от тех условий, которые были предусмотрены проектом этой системы.

Инженерный анализ и обработка информации. Эта область применения оптимизационных методов в инженерной практике связана с задачами инженерного анализа, в частности с задачами нелинейного регрессионного анализа. Среди наиболее общих проблем, возникающих в процессе разработки инженерных моделей, можно выделить проблему определения параметров полуэмпирической модели на основе заданного множества экспериментальных данных. Такого рода задачи приводятся к некоторому виду оптимизационных задач.

Управление динамическими системами. В этой области находит широкое применение наиболее сложный раздел теории оптимизации – математическая теория оптимального управления. Динамические системы могут быть описаны при помощи дифференциальных, интегральных или иных уравнений.

Для любой практической оптимизационной задачи можно выделить следующие основные этапы её реализации:

1. Моделирование рассматриваемой физической ситуации с целью получения математической функции, которую необходимо оптимизировать, а также определение ограничений для параметров.

2. Проверка задачи на существование и единственность решения.

3. Выбор подходящей математической процедуры (метода) для осуществления оптимизации.

4. Реализация выбранной процедуры на практике, в частности на ЭВМ.

5. Анализ математического результата и интерпретация его в терминах физического содержания задачи.

Вернемся к общей постановке задачи оптимизации. Как уже отмечалось в предыдущей лекции, с математической точки зрения различия между задачами минимизации и максимизации несущественны. Поэтому мы всегда можем ставить задачу оптимизации как задачу минимизации (8.1):

$$f(x) \to \min, \quad x \in X.$$

Так же как и в предыдущей лекции, функцию $f(x)$ в (8.1), т.е. функцию, которую мы минимизируем, будем называть *целевой функцией*, множество X в (8.1), на котором мы минимизируем $f(x)$, – *допустимым множеством* задачи (8.1), любой элемент $x \in X$ – *допустимой точкой* задачи (8.1). Допустимую точку $x^* \in X$, в которой целевая функция $f(x)$ достигает своего минимума, будем называть *решением* задачи (8.1).

В задачах условной оптимизации допустимая точка x может представлять собой некий набор параметров $x = (x_1, ..., x_n)$. Значения этих параметров подчиняются некоторым ограничениям. Если, например, x_i выражает количество производимого продукта i-го вида (сплав соответствующей марки и пр.) для каждого $i = 1, ..., n$, то при этом будет существовать ограничение на производственную мощность (например, $0 \le x_i \le a_i$, $\quad i = 1, ..., n$).

Необходимо подчеркнуть, что само понятие точки минимума (решения задачи (8.1)) неоднозначно и требует уточнения.

Определение 9.1. Точка $x^* \in X$ называется точкой *глобального минимума* функции $f(x)$ на множестве X или *глобальным решением* задачи (9.1), если

$$f(x^*) \le f(x) \quad \text{при всех } x \in X. \tag{9.1}$$

Точка $x^* \in X$ называется точкой *локального минимума* f на X или *локальным решением* задачи (9.1), если существует такое подмножество $U_\delta(x^*) = \{x \mid x \in X, \ \|x - x^*\| \le \delta\}$, что

$$f(x^*) \le f(x) \quad \text{при всех} \quad x \in U_\delta(x^*). \tag{9.2}$$

Здесь и далее

$$\|x - x^*\| = \left[\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - x_i^*\right)^2\right]^{1/2}.$$

Очевидно, что глобальное решение является и локальным; обратное неверно.

Определение 9.2. Если неравенство в (9.1) или (9.2) выполняется как строгое при $x \ne x^*$, т. е. $f(x) < f(x^*)$, $x \in X$ (или $x \in U_\delta(x^*)$), то говорят, что x^* – точка *строгого минимума* (*строгое решение*).

Рассмотрим пример, иллюстрирующий введённые понятия.

П р и м е р. Пусть $f(x) = x(x^2 - 3)$. На отрезке $X = [-1{,}5;\ 2]$ функция $f(x)$ достигает строгого локального минимума в точке $x = -1{,}5$ и строгого глобального минимума в точке $x = 1$. На отрезке $X = [-2, 2]$ она достигает глобального минимума в двух точках: $x = -2$, $x = 1$ ($f(-2) = f(1) = -2$).

При изучении задач оптимизации в первую очередь возникает вопрос о *существовании решения.* Условия, гарантирующие разрешимость задачи (8.1), содержатся в следующей теореме из курса высшей математики.

Теорема 9.1 (Вейерштрасса). Пусть X – ограниченное замкнутое множество в $\mathbf{R}^n$, $f(x)$ – непрерывная функция на X. Тогда существуют точки глобального минимума и максимума функции f на X (глобальное решение задачи (8.1)).

Теорема 9.1 отвечает на вопрос о существовании решения, но не даёт конструктивного алгоритма нахождения этого решения. Следует также учесть, что задача оптимизации может иметь несколько решений. Вопрос о единственности решения рассматривается отдельно для каждого класса задач.

Классификацию задач оптимизации можно проводить по нескольким признакам в зависимости от вида исходных данных. Выделим наиболее важные из них.

Задачи безусловной оптимизации – это задачи (8.1), в которых допустимым множеством X является все пространство $\mathbf{R}^n$.

Задачами математического программирования называются задачи (8.1), если их допустимое множество задается системой конечного числа неравенств и уравнений, т. е. $X = \{x \in P \mid g_i(x) \le 0,\ \ i = 1, \ldots, k;\ h_i(x) = 0,\ \ i = k+1, \ldots, m\}$. Среди них важнейшими являются следующие классы задач:

♦ задачи линейного программирования;

♦ задачи нелинейного программирования (задачи квадратичного программирования, задачи выпуклого программирования и др.).

Задачами дискретного программирования называются задачи (8.1), если какие-либо из координат $x_1, \ldots, x_n$ пробегают дискретные множества на числовой оси, когда x пробегает X.

Задачи оптимального управления относятся к классу бесконечномерных задач оптимизации, где в качестве допустимых множеств, по которым ведется минимизация, выступают множества функций.

Понятие о численных методах оптимизации

Любой численный метод (алгоритм) решения задачи оптимизации основан на точном или приближенном вычислении ее *характеристик* (значений целевой функции и функций, задающих границу допустимого множества, а также их производных). На основе полученной информации строится приближение к решению задачи – искомой точке минимума x^* или, если такая точка не единственна, к множеству точек минимума. Иногда, если это требуется, строится приближение к минимальному значению целевой функции f^*.

Алгоритмы, использующие лишь информацию о значениях минимизируемой функции, называются алгоритмами *нулевого порядка*; алгоритмы, использующие также информацию о значениях первых производных, – алгоритмами *первого порядка*; алгоритмы использующие, кроме того, информацию о вторых производных, – алгоритмами *второго порядка*.

Работа алгоритма состоит из двух этапов. *На первом этапе* вычисляются предусмотренные алгоритмом характеристики задачи. *На втором этапе* по полученной информации строится приближение к решению. Обычно для задания алгоритма достаточно указать способ выбора точек приближения $x^k = (x_1^k,\ldots, x_n^k) \in X$, $k = 1, 2, \ldots$ (конечно, при условии, что уже решен вопрос о том, какие именно характеристики задачи следует вычислять).

Определение 9.3. Выбор точек приближения называется *поиском* точек.

Если все точки выбираются одновременно до начала вычислений, то алгоритм минимизации называется *пассивным.* Однако для решения большинства задач точки приближения выбираются поочередно, т.е. точка $x^{(k+1)}$ выбирается тогда, когда уже выбраны точки предыдущих вычислений $x^{(1)}$, $x^{(2)}$, …, $x^{(k)}$ и в каждой из них произведены предусмотренные алгоритмом вычисления. Такие алгоритмы называются *последовательными.*

Определение 9.4. В последовательных алгоритмах вычисление характеристик задачи в точке $x^{(k)}$ и поиск точки $x^{(k+1)}$ вместе составляют *шаг метода*, или, что то же самое, *итерацию метода.*

Методы оптимизации можно условно разделить на две основные группы: конечношаговые и бесконечношаговые. *Конечношаговыми*, или *конечными,* называются методы, гарантирующие отыскание решения задачи за конечное число шагов. *Бесконечношаговыми* называются методы, для которых достижение решения гарантируется лишь в пределе.

Важной характеристикой бесконечношаговых методов оптимизации является сходимость.

Определение 9.5. Будем говорить, что метод *сходится*, если последовательность $x^{(k)} \to x^*$ при $k \to \infty$, где x^* – решение задачи (8.1). Если $f(x^{(k)}) \to f(x^*)$ при $k \to \infty$, то последовательность $x^{(k)}$ называют *минимизирующей*.

Заметим, что минимизирующая последовательность может и не сходиться к точке минимума. Так для функции, график которой изображен на рис. 9.1, минимизирующая последовательность $x^{(k)} = k$ не сходится к точке минимума $x^* = 0$.

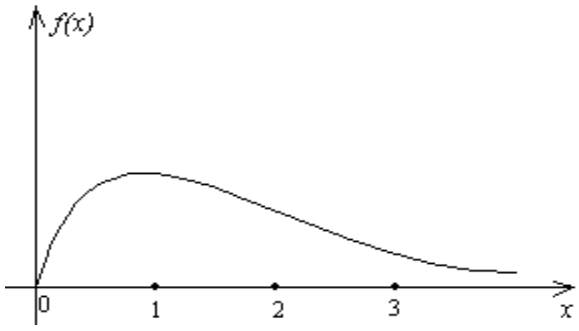

Рис. 9.1. Пример функции, для которой существует расходящаяся минимизирующая последовательность

В случае, когда точка минимума x^* не единственна, под сходимостью метода понимается следующее: для каждой точки x^* минимума функции f можно построить данным методом такую последовательность $x^{(k)} \in X$, что $x^{(k)} \to x^*$ при $k \to \infty$.

Установление факта сходимости дает существенную информацию о выбранном методе минимизации. Прежде всего, требования, которые приходится налагать для обеспечения сходимости на минимизируемую функцию, показывают область применимости метода. Часто условия сходимости включают в себя в явном виде требования к начальному приближению.

В то же время реальный процесс оптимизации не может быть бесконечношаговым. Кроме того, в ряде случаев условия сходимости труднопроверяемы. Поэтому при выборе подходящего метода решения реальных задач приходится во многом руководствоваться здравым смыслом, опытом, интуицией, а также результатами численных экспериментов. Необходимо также учитывать погрешность исходных данных.

Условия оптимальности в общей задаче оптимизации

При изучении любого типа задач оптимизации важное место занимает вопрос об *условиях оптимальности*, или, как еще говорят, условиях экстремума. Различают *необходимые* условия оптимальности, т.е. условия, которым должна удовлетворять точка, являющаяся решением задачи, и *достаточные* условия оптимальности, т.е. условия, из которых следует, что данная точка является решением задачи. Интерес к условиям оптимальности объясняется тем, что они, во-первых, составляют основу качественных методов теории оптимизации, т.е. методов, направленных на изучение свойств задач оптимизации; во-вторых, используются при построении и обосновании численных методов решения этих задач; в третьих, позволяют в простых случа-

ях явно решить задачу. Примером таких условий являются необходимые и достаточные условия локального экстремума, рассмотренные в предыдущей лекции.

В общем случае суть всех критериев оптимальности для задачи (8.1) заключается в том, что из точки x^*, являющейся локальным решением, нельзя осуществить сколь угодно малый сдвиг в каком бы то ни было направлении, приводящий к уменьшению значения целевой функции, и остаться при этом в пределах допустимого множества.

Лекция 10. Линейное программирование

План лекции

1. Постановка и свойства задач линейного программирования.
2. Симплекс-метод.

Постановка и свойства задач линейного программирования

Создание численных методов решения задач оптимизации с ограничениями является еще более трудной проблемой, чем построение методов безусловной оптимизации. Эффективные алгоритмы удается построить лишь для специальных классов задач, к которым в первую очередь следует отнести задачи линейного программирования (ЛП). Именно этому классу задач посвящена данная лекция.

Линейное программирование – это область математики, разрабатывающая теорию и численные методы решения задач нахождения экстремума (максимума или минимума) линейной функции многих переменных при наличии линейных ограничений, т.е. равенств или неравенств, связывающих эти переменные.

Задачи линейного программирования (задачи ЛП) обладают рядом особенностей, позволивших разработать специальные высокоэффективные методы их решения. Но прежде чем приступать к описанию конкретных вычислительных процедур, необходимо сформулировать основные формы задач линейного программирования и изучить их свойства. Так же как и в предыдущих лекциях, мы будем рассматривать только задачу минимизации.

Существует ряд специальных форм записи задач линейного программирования, каждая из которых удобнее других в том или ином круге вопросов. Все они являются частными случаями так называемой *общей* задачи линейного программирования, с которой мы и начнем изучение данного класса задач.

Постановка общей задачи ЛП:

Задано: линейная целевая функции

$$f(x) = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \ldots + c_n x_n, \qquad (10.1)$$

определенная на допустимом множестве $X \subset \mathbf{R}^n$ точек, удовлетворяющих условиям:

$$\begin{array}{c} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n \geq b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n \geq b_2, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{l1}x_1 + a_{l2}x_2 + \ldots + a_{ln}x_n \geq b_l, \\ a_{l+1,1}x_1 + a_{l+1,2}x_2 + \ldots + a_{l+1,n}x_n = b_{l+1}, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n = b_m \quad (m \geq l), \end{array} \tag{10.2}$$

$$x_{s_1} \geq 0, \quad x_{s_2} \geq 0, \quad \ldots, x_{s_k} \geq 0 \quad (1 \leq k \leq n). \tag{10.3}$$

Требуется найти: точки минимума функции $f(x)$ на допустимом множестве X.

Ограничения (10.3) называют *условиями неотрицательности* или *тривиальными ограничениями.* Эти условия могут рассматриваться как частный случай ограничений типа неравенств (10.2), но в силу особой структуры их обычно записывают отдельно.

Определение 10.1. Условие вида

$$a_{j1}x_1 + a_{j2}x_2 + \ldots + a_{jn}x_n \geq b_j, \tag{10.4}$$

содержащееся среди ограничений (10.2), называется *нежестким* ограничением, если существует точка $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)}) \in X$ такая, что

$$a_{j1}x_1^{(0)} + \ldots + a_{jn}x_n^{0} > b_j.$$

В противном случае условие (10.4) называется *жестким* ограничением.

Понятие жесткости применимо и к ограничениям (10.3). Согласно определению 10.1 условия неотрицательности являются нежесткими. Кроме того, из контекста определения следует, что любая точка множества X удовлетворяет жесткому ограничению только со знаком равенства. Поэтому его можно переписать как ограничение типа равенства. Так что мы можем считать жесткими ограничения (10.2) типа равенства и нежесткими ограничения (10.2) типа неравенства.

Определение 10.2. Нежесткое ограничение называется *существенным*, если существует точка $x^{(1)} = (x_1^{(1)}, \ldots, x_n^{(1)})$, удовлетворяющая всем остальным ограничениям (10.2), (10.3) и не принадлежащая множеству X. В противном случае нежесткое ограничение называется *несущественным.*

Несущественные ограничения могут быть исключены из системы условий, определяющих множество X. Более того, в некоторых случаях их необходимо исключать, т. к. они являются одной из причин зацикливания численных алгоритмов при реализации на ЭВМ.

Вообще любую задачу линейного программирования на минимум с ограничениями типа неравенств, направленных в ту или иную сторону, можно представить в форме (10.1)–(10.3). Нередко при моделировании тех или иных практических ситуаций возникают ограничения типа (10.2) со знаком «≤», т.е.

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \ldots + a_{in}x_n \le b_i.$$

Например, так могут быть заданы ограничения мощности производства или ограничения на потребляемые ресурсы. Эти ограничения приводятся к виду (10.2) простым умножением левой и правой частей неравенств на (–1).

Пример 10.1. Множество X задается условиями:

1) $-4x_1 + 2x_2 + x_3 \ge -2$, 2) $4x_1 - 4x_2 - x_3 \ge -5$,

3) $-x_2 + 5x_3 \ge -10$, 4) $2x_2 \ge 3$, 5) $-2x_1 + x_2 + x_3 = 1$.

Определим, какие из ограничений являются жесткими, какие – существенными. Складывая условия 1), 2), 4), получаем $0 \le 0$. Следовательно, в условиях 1), 2), 4) стоит знак равенства и они жесткие. Решая получившуюся при этом систему уравнений 1), 2), 5), найдем $x_1 = {}^1/_4$, $x_2 = {}^3/_2$, $x_3 = 0$. Эта точка удовлетворяет условию 3) со знаком неравенства. Значит, ограничение 3) нежесткое. Но множество X состоит только из одной точки $({}^1/_4, {}^3/_2, 0)$, поэтому ограничение 3) несущественное.

Рассмотрим теперь другие виды задач ЛП.

Определение 10.3. Общая задача ЛП называется *основной* задачей ЛП, если допустимое множество X задано только ограничениями (10.2) типа неравенств, т.е.

$$X\colon\ a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \ldots + a_{in}x_n \ge b_i,\ \ i = 1, 2, \ldots, m.$$

Фактически основная задача ЛП – это одна из форм записи общей задачи ЛП. Задачу линейного программирования можно также сформулировать в канонической форме.

Определение 10.4. *Канонической* задачей ЛП называется задача минимизации целевой функции (10.1) на допустимом множестве X, заданном ограничениями

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \ldots + a_{in}x_n = b_i, \quad i = 1, \ldots, m \ \ (m \le n),$$
$$x_j \ge 0, \quad j = 1, 2, \ldots, n.$$

Подавляющее большинство известных методов решения задач линейного программирования предназначены именно для задач ЛП в канонической форме. Поэтому начальный этап решения всякой общей задачи ЛП обычно связан с приведением ее к некоторой эквивалентной канонической задаче.

Переход от общей задачи ЛП к канонической осуществляется по следующим правилам:

1. Ограничения в виде неравенств (10.2) преобразуются в уравнения за счет введения в левую часть каждого из них фиктивной неотрицательной переменной x_i, $i = n + 1, \ldots, n + l$, которая входит в целевую функцию с коэффициентом 0. Фиктивные переменные x_i добавляются в неравенства (10.2) с отрицательным знаком.

2. Переменные, которые по условию задачи могут принимать значения любого знака, представляются в виде разности двух новых неотрицательных переменных:

$$x_j = x_j' - x_j'' \qquad (x_j' \geq 0, \quad x_j'' \geq 0).$$

Проиллюстрируем применение описанных выше рекомендаций на примере.

Пример 10.2. Пусть задана общая задача ЛП с целевой функцией

$$f(x) = 5x_1 + 3x_2 + x_3 + 2x_4 - x_5$$

и допустимым множеством X, определенным системой уравнений и неравенств:

$$\begin{aligned}
&2x_1 + 4x_2 + 5x_3 = 7,\\
&3x_2 - 4x_3 + 5x_4 + 4x_5 \geq -2,\\
&-3x_1 + 5x_3 - 6x_4 + 2x_5 \geq -4,\\
&x_1 \geq 0, \quad x_3 \geq 0, \quad x_5 \geq 0.
\end{aligned}$$

Тогда в соответствии со сформулированными правилами эквивалентная каноническая задача будет иметь вид

$$f_1(x') = 5x_1 + 3x_2' - 3x_2'' + x_3 + 2x_4' - 2x_4'' - 2x_5 + 0\cdot x_6 + 0\cdot x_7 \to \min$$

на множестве X':

$$\begin{aligned}
&2x_1 + 4x_2' - 4x_2'' + 5x_3 = 7,\\
&3x_2' - 3x_2'' - 4x_3 + 5x_4' - 5x_4'' + 4x_5 - x_6 = -2,\\
&-3x_1 + 5x_3 - 6x_4' + 6x_4'' + 2x_5 - x_7 = -4,
\end{aligned}$$

$$x_1 \geq 0, \quad x_2' \geq 0, \quad x_2'' \geq 0, \quad x_3 \geq 0, \quad x_4' \geq 0, \quad x_4' \geq 0, \quad x_5 \geq 0,$$
$$x_6 \geq 0, \quad x_7 \geq 0.$$

При переходе от общей формы задачи линейного программирования к канонической возрастает ее размерность (количество переменных), что при прочих равных условиях является фактором, усложняющим процесс решения.

Введем некоторые понятия, широко применяемые при решении задач как линейного, так и нелинейного программирования. Допустимое множество X общей задачи ЛП образует так называемое *многогранное* множество. Каждое из равенств (10.2) задает *гиперплоскость* в $\mathbf{R}^n$, а каждое из неравенств определяет *полупространство* в $\mathbf{R}^n$, ограниченное соответствующей гиперплоскостью. Если множество X не пусто, то оно выпукло.

Определение 10.5. Множество M векторов (точек) пространства $\mathbf{R}^n$ называется *выпуклым*, если оно содержит отрезок прямой, соединяющей две его любые точки. Другими словами, из того, что $x \in M$ и $y \in M$, следует, что $\lambda x + (1 - \lambda)x \in M$ для любого λ, $0 \leq \lambda \leq 1$.

Ограниченное многогранное множество называют *многогранником*.

Определение 10.6. Точка x^0 выпуклого многогранного множества M называется его *угловой* точкой, если она не лежит ни на каком отрезке, соединяющем какие-либо две точки множества M.

Угловые точки многогранника называются его *вершинами.*

Для понимания сути численных методов линейного программирования полезно разобраться в том, что представляет собой задача ЛП с геометрической точки зрения. Рассмотрим следующий пример. Пусть дана задача минимизации целевой функции

$$f(x) = 3x_1 - x_2 \rightarrow \min$$

на допустимом множестве

$$X = \{\bar{x} \in \mathbf{R}^2 \mid \quad x_1 + x_2 \leq 6, \quad x_1 - x_2 \leq 2, \quad x_1 \leq 3, \quad x_1 \geq 0, \quad x_2 \geq 0\}.$$

Так как количество переменных в неравенствах, задающих допустимое множество, равно двум, то его можно изобразить на координатной плоскости (рис. 10.1).

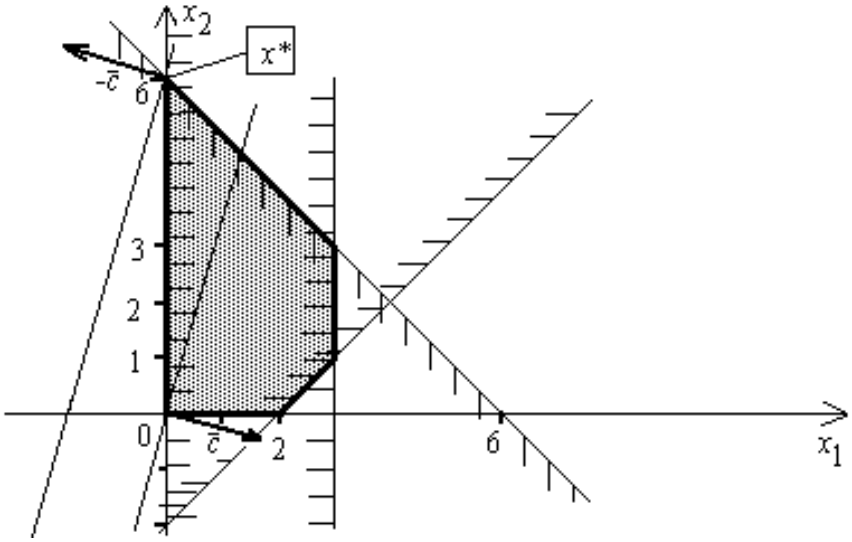

Рис. 10.1. Графический метод решения задачи ЛП

На рис. 10.1 показано, что каждое неравенство определяет некоторую полуплоскость. Соответствующие области для каждого ограничения отмечены штрихами. Пересечение данных полуплоскостей является допустимым множеством задачи. Поведение целевой функции $f(x) = 3x_1 + x_2$ в рамках двумерной иллюстрации может быть охарактеризовано с помощью линий уровня. Для линейной функции двух переменных $f(x) = c_1x_1 + c_2x_2$ линия уровня представляет собой прямую, определяемую уравнением $c_1x_1 + c_2x_2 = \text{const}$. Нормальный вектор этой прямой $\bar{n} = (\tilde{n}_1, \tilde{n}_2)$ одновременно является и градиентом функции f. Тогда вектор $-\bar{n}$ указывает направление убывания этой функции.

Таким образом, с геометрической точки зрения задача минимизации сводится к определению такой точки области X, через которую проходит линия уровня, соответствующая наименьшему из возможных значений. Чтобы найти точку минимума в задаче линейного программирования, мы должны сначала построить линию уровня для некоторого произвольного значения целевой функции (например, $f(x) = 0$). Затем необходимо осуществлять параллельный перенос в направлении $-\bar{c}$ до тех пор, пока не будет достигнута такая точка $x^* \in X$, из которой смещение в направлении вектора $-\bar{c}$ было бы невозможно. Такой метод решения получил название *графического.*

На рис. 10.1 изображен частный случай, для которого решение задачи ЛП достигается в одной угловой точке $x^* = (0,6)$ множества X. Однако возможны и другие варианты. В случае неограниченного допустимого множества X целевая функция может неограниченно убывать, а задача – не иметь решения. Напротив, линия уровня, соответствующая минимальному значению $f(x)$, может касаться грани множества X. Тогда все точки, лежащие на этой грани, являются решениями задачи.

Геометрические построения позволяют выявить характерную особенность задачи линейного программирования: если решение существует, то оно достигается обязательно на границе. Строго говоря, имеет место сле-

дующая теорема, называемая *основной теоремой линейного программирования*.

Теорема 10.1. Пусть $\{x^*\}$ – множество решений задачи (10.1)–(10.3). Тогда $\{x^*\}$ содержит хотя бы одну угловую точку допустимого множества X.

Во всех рассмотренных иллюстрациях допустимое множество задачи ЛП представлялось в виде некоторого многогранного выпуклого множества на плоскости. Такое их представление в литературе получило название *первой геометрической интерпретации* задачи ЛП.

Симплекс-метод

Основным численным методом решения задачи ЛП является так называемый симплекс-метод. В настоящее время теоретические и вычислительные аспекты этого метода хорошо разработаны. Симплекс-метод находит широкое применение при решении разнообразных задач линейного программирования. Наряду с этим он используется в численных методах нелинейной и дискретной оптимизации как вспомогательный инструмент для решения возникающих задач линейного программирования.

Следует отметить, что сам термин «симплекс-метод» не отражает существа этой вычислительной процедуры. Он связан с тем историческим обстоятельством, что первоначально метод был разработан применительно к задаче ЛП, допустимое множество которой имело вид

$$X = \{ x \in \mathbf{R}^n \mid \ x_1 + x_2 + \ldots + x_n = 1, \quad x_i \geq 0, \ i = 1, \ldots, n\}$$

(это множество именуется стандартным симплексом). В литературе данный метод называют также методом последовательного улучшения плана.

Симплекс-метод предназначен для решения задачи ЛП в канонической форме:

$$f(x) = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \ldots + c_n x_n \to \min, \tag{10.5}$$

$$a_{i1} x_1 + a_{i2} x_2 + \ldots + a_{in} x_n = b_i, \qquad i = 1, 2, \ldots, m, \tag{10.6}$$

$$x_j \geq 0, \qquad j = 1, \ldots, n. \tag{10.7}$$

Введем основные понятия, подводящие к главной идее симплекс-метода и необходимые для описания алгоритма. Запишем систему равенств (10.6) в матричной форме

$$Ax = \bar{b}, \tag{10.8}$$

полагая, что

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}, \qquad \bar{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}, \qquad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix}.$$

Обозначим через $\bar{A}_1, \dots, \bar{A}_n$ столбцы матрицы A, т. е.

$$\bar{A}_j = \begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{pmatrix}, \qquad j = 1, 2, \dots, n.$$

Тогда систему (10.8) можно записать в виде

$$\bar{A}_1 x_1 + \bar{A}_2 x_2 + \dots + \bar{A}_n x_n = \bar{b}. \qquad (10.9)$$

В дальнейшем без ограничения общности мы можем полагать, что число уравнений, задающих множество X, меньше или равно числу переменных задачи ($m \le n$). Действительно, если это не так, то либо система уравнений $Ax = \bar{b}$ несовместна (и, значит, множество X пусто), либо содержит избыточные (линейно зависимые) уравнения. Соотношение (10.9) является не чем иным, как разложением вектора $\bar{b}$ по векторам $\bar{A}_i$, $i = 1, 2, \dots, n$, а x_i – коэффициентами этого разложения. Такое разложение получило название *второй геометрической интерпретации* задачи ЛП. Если некоторые m столбцов $\bar{A}_{j1}, \bar{A}_{j2}, \dots, \bar{A}_{jm}$ матрицы A линейно независимы, то они образуют базис в пространстве $\mathbf{R}^m$, и вектор $\bar{b}$ можно представить в виде их линейной комбинации.

Определение 10.7. Точка $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ называется *опорной точкой допустимого множества X*, если существуют номера $j_1, \dots, j_m$, $1 \le j_k \le n$, такие, что система векторов $\bar{A}_{j1}, \dots, \bar{A}_{jm}$ линейно независима и

$$\bar{A}_{j_1} x_{j_1}^{(0)} + \bar{A}_{j_2} x_{j_2}^{(0)} + \dots + \bar{A}_{j_m} x_{j_m}^{(0)} = \bar{b},$$

$$x_{jk}^{(0)} \ge 0, \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad x_s^{(0)} = 0, \text{ если } s \ne j_k.$$

Система векторов $\{\bar{A}_{j1}, \dots, \bar{A}_{jm}\}$ называется *базисом опорной точки* $(x^{(0)})$, а переменные $x_{j1}, \dots, x_{jm}$ – *базисными переменными.*

Переменные, которые не входят в список базисных переменных, называются *небазисными* или *свободными*.

Понятие опорной точки является одним из фундаментальных понятий теории линейного программирования. Следующая теорема трактует понятие опорной точки в терминах первой геометрической интерпретации задачи ЛП. Сформулируем ее без доказательства.

Теорема 10.2. Каждая опорная точка является угловой точкой допустимого множества X.

Если среди базисных переменных нет равных нулю, то опорная точка $x^{(0)}$ называется *невырожденной*, в противном случае – *вырожденной опорной точкой.* Соответственно, если среди опорных точек задачи ЛП нет вырожденных, то она называется *невырожденной,* в противном случае – *вырожденной задачей линейного программирования.*

Исходя из основной теоремы линейного программирования можно заключить, что на принципиальном уровне поиск решений задачи ЛП сводится к последовательному перебору угловых точек допустимого множества или, что то же самое, перебору соответствующих опорных точек. Следует подчеркнуть, что такой перебор для реальных многомерных задач крайне неэффективен даже при условии использования мощной вычислительной техники, ибо при больших n и m он требует огромной вычислительной работы.

Итак, метод полного перебора опорных точек практической ценности не имеет. Но он естественным образом подводит к *основной идее симплекс-метода: полный перебор заменяется упорядоченным, при котором осуществляется переход от текущей опорной точки только к тем опорным точкам, в которых значение целевой функции меньше, чем в текущей.* Действительно, если уже вычислена некоторая опорная точка x, то нет необходимости просматривать те опорные точки, в которых целевая функция принимает большее значение, чем в x: они заведомо не могут быть решением задачи. Несмотря на то что при таком переборе возврат к однажды просмотренным опорным точкам уже невозможен, теоретически не исключается (и такие примеры существуют), что в процессе решения будут пройдены все опорные точки допустимого множества X. Однако большой практический опыт показал, что для подавляющего числа канонических задач ЛП количество итераций находится в пределах от m до $2m$.

Более детальное описание симплекс-метода применительно к невырожденной канонической задаче ЛП можно найти в учебниках по методам оптимизации [1–3].

Одним из достоинств симплекс-метода является возможность его применения для определения начальной опорной точки $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)})$ многогранного множества X, заданного условиями (10.6), (10.7). Соответствующий алгоритм носит название *метода искусственного базиса*. Рассмотрим вспомогательную задачу: минимизировать функцию

$$g(x) = x_{n+1} + x_{n+2} + \ldots + x_{n+m}$$

при ограничениях

$$a_{i1}x_1 + \ldots + a_{in}x_n + x_{n+i} = b_i, \qquad i = 1, \ldots, m, \tag{10.10}$$

$$x_k \geq 0, \qquad k = 1, \ldots, n + m, \tag{10.11}$$

где b_i, a_{ik}, $i = 1, \ldots, m$, $k = 1, \ldots, n$ те же, что и в условиях (10.6), (10.7). Так как $g(x)$ ограничена снизу, эта задача всегда имеет решение. По условию все $b_i \geq 0$, поэтому переменные $x_{n+1}, \ldots, x_{n+m}$ можно принять за базисные пере-

менные, точка $(0, \ldots, 0; b_1, \ldots, b_m)$ является угловой точкой многогранного множества (10.10), (10.11). Применяя симплекс-метод, находим точку $\bar{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)}, x_{n+1}^{(0)}, \ldots, x_{n+m}^{(0)})$, минимизирующую функцию $g(x)$ при ограничениях (10.10), (10.11). Примем $g_{\min} = \alpha$.

Лемма 10.1. Если $\alpha = 0$, то $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)})$ – опорная точка множества X. Если $\alpha > 0$, то допустимое множество X пусто.

Для того чтобы не отделять решение канонической задачи от поиска начальной угловой точки, используется так называемый *М-метод*, в котором минимизируется симплекс-методом функция

$$h(x) = c_1x_1 + \ldots + c_nx_n + M(x_{n+1} + \ldots + x_{n+m}) \qquad (10.12)$$

при ограничениях (10.10), (10.11) и начальной угловой точке $(0, \ldots, 0; b_1, \ldots, b_m)$. Решение задачи (10.5)–(10.7) этим методом опирается на следующее утверждение.

Лемма 10.2. Если разрешима каноническая задача (10.5)–(10.7), то существует такое число $M_0 > 0$, что для всех $M \geq M_0$ в любом решении $\bar{x}^* = (x_1^*, \ldots, x_n^*, x^*_{n+1}, \ldots, x^*_{n+m})$ задачи (10.10)–(10.12) точка $x^* = (x_1^*, \ldots, x_n^*)$ будет решением задачи (10.5)–(10.7), причем $f(x^*) = h(\bar{x}^*)$.

На практике достаточно взять за M произвольное число, превышающее абсолютную величину любого коэффициента функции (10.5) и условий (10.6).

Лекция 11. Линейное программирование

План лекции

1. Теория двойственности.
2. Разработка моделей линейного программирования.
3. Транспортная задача.

Теория двойственности

Любой задаче математического программирования можно поставить в соответствие так называемую двойственную задачу оптимизации. Между этими задачами обнаруживаются тесные связи, изучение которых составляет предмет *теории двойственности*. Эта теория тесно связана с теорией условий оптимальности.

В данной лекции мы рассмотрим теорию двойственности только применительно к задачам линейного программирования.

Двойственная задача к задаче линейного программирования также является задачей линейного программирования, причем, как будет видно из оп-

ределения, ее можно выписать в явном виде с помощью данных исходной задачи.

Определение 11.1. Если задана общая задача ЛП

$$f(x) = c_1x_1 + \ldots + c_jx_j + c_{j+1}x_{j+1} + \ldots + c_nx_n \to \min, \quad x \in X, \tag{11.1}$$

где X определяется системой уравнений и неравенств:

$$\begin{array}{lcl}
a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + \ldots + a_{1,n}x_n & \geq & b_1, \\
\ldots & & \\
a_{i,1}x_1 + a_{i,2}x_2 + \ldots + a_{i,n}x_n & \geq & b_i, \\
a_{i+1,1}x_1 + a_{i+1,2}x_2 + \ldots + a_{i+1,n}x_n & = & b_{i+1}, \\
\ldots & & \\
a_{m,1}x_1 + a_{m,2}x_2 + \ldots + a_{m,n}x_n & = & b_m, \\
x_1 \geq 0, \ \ldots, \ x_j \geq 0, & &
\end{array}$$

то *двойственной* по отношению к ней называется общая задача ЛП

$$g(x) = b_1u_1 + \ldots + b_iu_i + b_{i+1}u_{i+1} + \ldots + b_mu_m \to \max, \quad u \in U, \tag{11.2}$$

где X^* определяется системой уравнений и неравенств:

$$\begin{array}{lcl}
a_{1,1}u_1 + a_{2,1}u_2 + \ldots + a_{m,1}u_m & \leq & c_1, \\
\ldots & & \\
a_{1,j}u_1 + a_{2,j}u_2 + \ldots + a_{m,j}u_m & \leq & c_j, \\
a_{1,j+1}u_1 + a_{2,j+1}u_2 + \ldots + a_{m,j+1}u_m & = & c_{j+1}, \\
\ldots & & \\
a_{1,n}u_1 + a_{2,n}u_2 + \ldots + a_{m,n}u_m & = & c_n, \\
u_1 \geq 0, \ \ldots, \ u_i \geq 0. & &
\end{array}$$

Соответственно, задача (11.1) по отношению к задаче (11.2) называется *прямой* (или *исходной*).

Из определения 11.1 вытекает важное свойство – *симметричность отношения двойственности, т.е. задача, двойственная по отношению к двойственной, совпадает с прямой* (*исходной*) *задачей. Тем самым имеет смысл говорить о паре взаимно двойственных задач*.

Подчеркнем, что перед тем как строить двойственную задачу, исходную задачу ЛП следует привести к виду (11.1). Правила построения задачи, двойственной по отношению к общей задаче ЛП, наглядно представлены схемой (рис. 11.1).

		c_1	…	c_j	c_{j+1}	…	c_n	$\to$	min
		$\leq$		$\leq$	$=$		$=$		max ↑
$0 \leq$	u_1	$a_{1,1}$	…	$a_{1,j}$	$a_{1,j+1}$	…	$a_{1,n}$	$\geq$	b_1

	…		…		…	.			…
$0 \le$	u_i		$a_{i,1}$	…	$a_{i,j}$	$a_{i,j+1}$	…	$a_{i,n}$	$\ge$ b_i
	u_{i+1}		$a_{i+1,1}$	…	$a_{i+1,j}$	$a_{i+1,j+1}$	…	$a_{i+1,n}$	$=$ b_{i+1}
	…		…		…	.			…
	u_m		$a_{m,1}$	…	$a_{m,j}$	$a_{m,j+1}$	…	$a_{m,n}$	$=$ b_m

x_1	…	x_j	x_{j+1}	…	x_n
≥ 0		≥ 0			

Рис. 11.1. Схема построения двойственной задачи

Как следует из приведенной схемы, при переходе от прямой задачи ЛП к двойственной:

1. Тип оптимума меняется на противоположный, т.е. максимум на минимум, и наоборот.

2. Вектор коэффициентов целевой функции c и столбец ограничений b меняются местами.

3. Матрица ограничений A транспонируется.

4. Множество индексов переменных, на которые наложено условие неотрицательности в прямой задаче (например, $x_j \ge 0$), определяют номера ограничений, имеющих форму неравенств в двойственной задаче.

5. Множество номеров ограничений, имеющих форму неравенств в прямой задаче, определяют множество индексов переменных в двойственной задаче, на которые налагается ограничение неотрицательности ($u_i \ge 0$).

Особо отметим, как выглядят двойственные задачи к задачам ЛП в упомянутых ранее частных формах. Двойственной к основной задаче ЛП

$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j \to \min, \qquad \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \ge b_i, \quad i = 1, \ldots, m,$$

является ЗЛП в канонической форме

$$\sum_{i=1}^{m} b_i u_i \to \max, \quad \sum_{i=1}^{m} a_{ij} u_i = c_j, \quad j = 1, \ldots, n, \quad u_i \ge 0, \quad i = 1, \ldots, m.$$

Двойственной к ЗЛП в канонической форме

$$\sum_{j=1}^{n} a_j x_j \to \min, \quad \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i, \quad i = 1, \ldots, m, \quad x_j \ge 0, \; j = 1, \ldots, n,$$

является задача ЛП в основной форме

$$\sum_{i=1}^{m} b_i u_i \to \max, \quad \sum_{i=1}^{m} a_{ij} u_i \le c_j, \quad j = 1, \ldots, n.$$

В следующей теореме собраны воедино основные факты теории двойственности в линейном программировании, называемые *теоремами двойственности*. Все они являются прямыми следствиями соответствующих утверждений общей теории двойственности.

Теорема 11.1. 1) Для любых точек $x \in X$, $u \in U$ справедливо неравенство

$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j \geq \sum_{i=1}^{m} b_i u_i;$$

2) точки $x^* \in X$ и $u^* \in U$ являются решениями задач (11.1) и (11.2), соответственно, тогда и только тогда, когда справедливо соотношение двойственности

$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j^* = \sum_{i=1}^{m} b_i u_i^*; \qquad (11.3)$$

3) задача (11.1) имеет решение тогда и только тогда, когда имеет решение задача (11.2), при этом в соответствии с (11.3) значения их целевых функций в точках оптимума совпадают;
4) если допустимые множества задач (11.1) и (11.2) непусты, то обе они имеют решение;
5) если допустимое множество прямой задачи (11.1) непусто, а задачи (11.2) пусто, то целевая функция прямой задачи неограничена снизу, и наоборот, если допустимое множество двойственной задачи (11.2) непусто, а задачи (11.1) пусто, то целевая функция двойственной задачи неограничена сверху;
6) пусть x^* и u^* – решения задач (11.1) и (11.2), тогда если j-я компонента точки x^* строго положительна ($x_j > 0$), то соответствующее j-е ограничение двойственной задачи (11.2) выполняется как равенство; если же j-я компонента точки x^* имеет нулевое значение ($x_j = 0$), то j-е ограничение задачи (11.2) выполняется как неравенство.

Утверждение 2) теоремы 11.1 имеет ключевое значение в теории линейного программирования, т.к. оно дает необходимые и достаточные условия оптимальности, т.е. *критерий оптимальности* для данного класса задач.

Практическое значение теорем двойственности состоит в том, что они позволяют заменить процесс решения прямой задачи на решение двойственной, которое в определенных случаях может оказаться более простым. Например, задача, допустимое множество которой описывается двумя уравнениями, связывающими шесть переменных ($m = 2$, $n = 6$), не может быть решена графическим методом. Однако данный метод может быть применен для решения двойственной к ней задачи, которая имеет только две переменные.

Разработка моделей линейного программирования

Модели линейного программирования широко применяются при решении военных, экономических, промышленных и социальных задач. К числу главных пользователей моделей ЛП большой размерности относятся, например, нефтяные компании, применяющие их для решения задач распределения и транспортировки нефтепродуктов.

Термин «разработка» означает построение моделей ЛП практических задач. Построение моделей не стоит рассматривать только как науку, скорее это искусство, которое постигается с опытом. Разработка модели ЛП включает следующие основные этапы: определение переменных задачи, представление ее ограничений в виде линейных уравнений или неравенств; задание линейной целевой функции, подлежащей минимизации или максимизации. В качестве примера, иллюстрирующего основные этапы разработки модели ЛП, рассмотрим построение классической экономико-математической модели.

Простейшая задача производственного планирования

Пусть имеется некоторый экономический объект (предприятие, цех, артель и т. п.), который может производить некоторую продукцию n видов. В процессе производства допустимо использование m видов ресурсов (сырья, рабочего времени и пр.). Применяемые технологии характеризуются нормами затрат единиц сырья на единицу производимого продукта. Обозначим через $a_{i,j}$ количество i-го ресурса ($i = 1, \ldots, m$), которое тратится на производство единицы j-го продукта ($j = 1, \ldots, n$).

Если j-й продукт производится в количестве x_j, то в рамках описанных выше технологий мы должны потратить $a_{1,j}\, x_j$ первого ресурса, $a_{2,j} x_j$ – второго и так далее, $a_{m,j} x_j$ – m-го. *Сводный план производства* по всем продуктам может быть представлен в виде n-мерного вектора-строки $x = (x_1, x_2, \ldots, x_j, \ldots, x_n)$. Тогда общие затраты i-го ресурса на производство всех продуктов можно выразить в виде суммы

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

Очевидно, что всякая реальная производственная система имеет ограничения на ресурсы, которые она тратит в процессе производства. В рамках излагаемой модели эти ограничения порождаются m-мерным вектором $b = (b_1, b_2, \ldots, b_m)$, где b_i – максимальное количество i-го продукта, которое можно потратить в производственном процессе. В математической форме данные ограничения представляются в виде системы m неравенств:

$$\begin{aligned} a_{1,1} x_1 + a_{1,2} x_2 + \ldots + a_{1,n} x_n &\le b_1, \\ a_{2,1} x_1 + a_{2,2} x_2 + \ldots + a_{2,n} x_n &\le b_2, \\ \ldots \end{aligned} \qquad (11.4)$$

$$a_{m,1}x_1 + a_{m,2}x_2 + \ldots + a_{m,n}x_n \le b_m.$$

Следует учесть, что к ресурсам относятся также производственные мощности. В этом случае соответствующие ограничения в системе (11.4) могут иметь вид, например,

$$x_i \le b_i.$$

К системе (11.4) также должны быть добавлены естественные ограничения на неотрицательность компонентов плана производства:

$$x_1 \ge 0, \ldots, \; x_j \ge 0, \ldots, x_n \ge 0. \qquad (11.5)$$

Обозначив через c_j цену единицы j-го продукта, получим выражение суммарного дохода от выполнения плана производства, задаваемого вектором x:

$$f(x) = c_1x_1 + c_2x_2 + \ldots + c_nx_n. \qquad (11.6)$$

Формулы (11.4)–(11.6) являются не чем иным, как простейшей математической моделью, описывающей отдельные стороны функционирования экономического объекта, поведением которого мы хотим управлять. В рамках данной модели можно поставить различные задачи, но, скорее всего, самой естественной будет задача поиска такого плана производства x, который дает наибольшее значение суммарного дохода, т.е. функции (11.6), и одновременно удовлетворяет системе ограничений (11.4)–(11.5). Кратко такую задачу можно записать в следующем виде:

$$f(x) \to \max, \qquad x \in X, \qquad (11.7)$$

где допустимое множество X определяется ограничениями (11.4), (11.5).

К модели (11.4)–(11.6) сводятся и другие задачи планирования. Например, если c_j означает общие расходы на производство единицы j-го продукта, то суммарные затраты на выполнение всего плана x выражаются также функцией (11.6). Однако в этом случае наиболее естественной задачей для (11.4)–(11.6) будет задача поиска такого плана производства x, удовлетворяющего ограничениям (11.4), (11.5), при котором значение суммарных затрат, т. е. функции $f(x)$, будет наименьшим:

$$f(x) \to \min, \qquad x \in X. \qquad (11.8)$$

Несмотря на условность рассматриваемой ситуации и кажущуюся простоту задач (11.7), (11.8), их решение является далеко не тривиальным и во многом стало практически возможным только после разработки соответствующего математического аппарата. К модели (11.7) или (11.8) могут быть сведены очень многие проблемы различного характера.

Задача технического контроля

В отделе технического контроля (ОТК) некоторого предприятия работают контролеры разрядов 1 и 2. Норма выработки ОТК за восьмичасовой рабочий день составляет не менее 1 800 изделий. Контролер разряда 1 проверяет 25 изделий в час, а контролер разряда 2 – 15 изделий в час.

Расходы предприятия составляют 10 руб. в час на одного контролера разряда 1 и 9 руб. в час на одного контролера разряда 2. Предприятие может использовать не более 8 контролеров разряда 1 и 10 контролеров разряда 2. Руководство предприятия хочет определить оптимальный состав ОТК, при котором ежедневные затраты на контроль будут минимальными.

Пусть x_1 и x_2 обозначают количество контролеров разряда 1 и 2 соответственно. Число контролеров каждого разряда ограничено, т.е. имеются следующие ограничения:

$$x_1 \le 8 \quad \text{(разряд 1)},$$

$$x_2 \le 10 \quad \text{(разряд 2)}.$$

Ежедневно необходимо проверять не менее 1 800 изделий, поэтому должно выполняться неравенство

$$8 \cdot 25x_1 + 8 \cdot 15x_2 = 200x_1 + 120x_2 \ge 1\,800,$$

или

$$5x_1 + 3x_2 \ge 45.$$

Минимизируемая целевая функция, выражающая ежедневные расходы на контроль, имеет вид

$$f = 8(10x_1 + 9x_2) = 80x_1 + 72x_2.$$

Теперь можно сформулировать следующую задачу ЛП:

$$f = 80x_1 + 72x_2 \to \min, \quad x \in X,$$

$$X: \quad x_1 \le 8, \quad x_2 \le 10, \quad 5x_1 + 3x_2 \ge 45, \quad x_1 \ge 0, \quad x_2 \ge 0.$$

Поскольку любая научная модель содержит упрощающие предпосылки, для корректного применения полученных с ее помощью результатов необходимо четкое понимание сути этих упрощений, что в конечном счете и позволяет сделать вывод об их допустимости или недопустимости. Наиболее «сильным» упрощением в рассмотренной модели является предположение о прямо пропорциональной (линейной) зависимости между объемами расхода ресурсов и объемами производства, которая задается с помощью норм затрат $a_{i,j}$. Очевидно, что это допущение далеко не всегда выполняется. Так, объемы расхода многих ресурсов (например, основных фондов) изменяются скачкообразно в зависимости от изменения компонентов объема производства x. К другим упрощающим предпосылкам относятся предположения о независимости цен c_j от объемов x_j, что справедливо лишь для определенных пределов их изменения, пренебрежение эффектом кооперации в технологиях и т. п. Данные «уязвимые» места важно знать еще и потому, что они указывают принципиальные направления совершенствования модели.

Транспортная задача

Одним из наиболее важных частных случаев общей задачи линейного программирования является так называемая *транспортная задача*. Содержательно она формулируется следующим образом.

Пусть в пунктах $A_1, A_2, \ldots, A_m$ производится некоторый однородный продукт, причем объем производства этого продукта в пункте A_i составляет a_i единиц, $i = 1, \ldots, m$. Этот продукт должен быть доставлен в пункты потребления $B_1, B_2, \ldots, B_n$, причем объем потребления в пункте B_j составляет b_j единиц продукта. Предполагается, что транспортировка готовой продукции возможна из любого пункта производства в любой пункт потребления и транспортные издержки, приходящиеся на перевозку единицы продукта из пункта A_i в пункт B_j, составляют c_{ij} денежных единиц. Задача состоит в организации такого плана перевозок, при котором суммарные транспортные издержки были бы минимальными.

План перевозки груза в данной транспортной сети представляет собой массив элементов размерности $m \times n$:

$$x = (x_{1,1}, \ldots, x_{1,n}, x_{2,1}, \ldots, x_{2,n}, \ldots, x_{m,1}, \ldots, x_{m,n}).$$

Если реальная перевозка между пунктами i и j отсутствует, то полагают $x_{i,j} = 0$.

Ограничения на возможные значения $x \in \mathbf{R}^{m\,n}$ имеют вид:

1. Ограничения на удовлетворение потребностей во всех пунктах потребления:

$$\sum_{i=1}^{m} x_{i,j} \geq b_j, \qquad j = 1, \ldots, n. \tag{11.9}$$

2. Ограничения на возможности вывоза запасов из всех пунктов производства:

$$\sum_{j=1}^{n} x_{i,j} \leq a_i, \qquad i = 1, \ldots, m. \tag{11.10}$$

3. Условия неотрицательности компонентов плана:

$$x_{i,j} \geq 0, \qquad i = 1, \ldots, m, \quad j = 1, \ldots, n. \tag{11.11}$$

Математическая постановка транспортной задачи: определить точку минимума функции суммарных транспортных издержек

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} c_{ij} x_{i,j}$$

при ограничениях (11.7)–(11.9).

Существенной характеристикой описываемой задачи является соотношение параметров a_i и b_j. Если суммарный объем производства равен суммарному объему потребления, а именно выполняется *условие баланса*

$$\sum_{i=1}^{m} a_i = \sum_{j=1}^{n} b_j, \tag{11.12}$$

то система называется *сбалансированной*. При выполнении условия баланса разумно накладывать такие ограничения на суммарный ввоз и вывоз груза, при которых полностью вывозится весь груз и не остается неудовлетворенных потребностей, т.е. условия (11.9), (11.10) приобретают форму равенства. При таких ограничениях выполнение равенства (11.12) становится необходимым и достаточным условием для разрешимости транспортной задачи.

Специфическими для транспортной задачи являются следующие два обстоятельства: а) каждая из переменных $x_{i,j}$ входит в два уравнения системы (11.9), (11.10); б) все коэффициенты при переменных $x_{i,j}$ принимают лишь два значения – 0 и 1. Эти особенности позволили разработать для решения транспортной задачи алгоритмы, существенно более простые, чем симплекс-метод.

Наиболее известным из таких алгоритмов является *метод потенциалов*. Этот метод может трактоваться как разновидность симплексных процедур. Он представляет собой итерационный процесс, на каждом шаге которого рассматривается текущая опорная точка, проверяется ее оптимальность с помощью теорем двойственности, а именно утверждения 2) теоремы 11.1, и при необходимости определяется переход к «лучшей» опорной точке.

Лекция 12. Задачи дискретной оптимизации и динамического программирования

План лекции

1. Постановка и примеры дискретных оптимизационных задач.
2. Понятие о методе динамического программирования.

Постановка и примеры дискретных оптимизационных задач

При решении многих оптимизационных задач на искомые переменные в соответствии с физическим смыслом необходимо наложить дополнительные ограничения дискретности. Иными словами, некоторые (возможно все) переменные должны принимать только определенный набор дискретных значений. Это имеет место, например, когда искомыми величинами являются неделимые объекты (машины, комплекты оборудования, предприятия и т.д.). Такие задачи называют *задачами дискретной оптимизации*. Они могут быть как линейными, так и нелинейными. Чаще всего в задачах дискретной оптимизации требуется, чтобы искомые переменные принимали только целые значения, т.е. удовлетворяли условию целочисленности. Если все переменные задачи целочисленны, то ее называют *задачей целочисленного программирования.* Данная лекция посвящена линейным задачам целочисленного программирования.

Под задачей целочисленного линейного программирования (ЦЛП) понимается задача линейного программирования, в которой некоторые (а возможно и все) переменные должны принимать целые значения. Задача ЦЛП называется *полностью* (*частично*) *целочисленной*, если все (некоторые) переменные являются целочисленными.

Математическая постановка задачи ЦЛП в общем виде:

Дано: целевая функция

$$f = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \ , \tag{12.1}$$

определенная на множестве X, заданном системой ограничений

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \geq b_i, \quad i = 1, 2, \ldots, m, \tag{12.2}$$

$$x_j = 0, 1, 2, \ldots, \quad j = 1, 2, \ldots, l, \quad l \leq n \ ;$$

Найти: точку минимума функции f на множестве X.

Задачу ЦЛП можно решить, например, как задачу линейного программирования без учета условий целочисленности переменных, а затем округлить найденное значение с избытком или недостатком. При этом получается некоторое целочисленное решение. Использование такого подхода требует проверки допустимости данного решения. Таким методом часто пользуются при решении практических задач, особенно когда значения переменных настолько велики, что можно пренебречь ошибками округления. Однако при решении задач, в которых целочисленные переменные принимают малые значения, округление может привести к далекому от истинного оптимума целочисленному значению. Кроме того, при решении задач большой размерности такой метод слишком трудоемок. Например, пусть оптимальное решение соответствующей задачи линейного программирования имеет вид $x_1 = 2{,}4$; $x_2 = 3{,}5$. Для получения приближенного оптимального целочисленного решения необходимо рассмотреть четыре точки (2, 3), (2, 4), (3, 3), (3, 4) и выбрать среди них допустимую точку с наилучшим (наименьшим) значением целевой функции. Если в задаче имеются 10 целочисленных переменных, то следует рассмотреть 2^{10} вариантов целочисленного решения, но это не гарантирует получения оптимального целочисленного решения задачи.

Перейдем к построению моделей целочисленного программирования для наиболее важных практических задач.

Задача о рюкзаке

Пусть имеется n предметов, a_j – вес, а c_j – ценность j-го предмета, $a_j > 0$, $c_j > 0$. Требуется загрузить рюкзак, выдерживающий вес b, набором предметов, суммарная ценность которых максимальна.

Введем переменную x_j, принимающую значение 1, если j-й предмет грузится в рюкзак, и 0 – в противном случае, $j = 1, \ldots, n$. Переменные, принимающие значения 0, 1, называются *булевыми*. Задача имеет вид

$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j \to \max,$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_j x_j \le b, \qquad x_j \in \{0, 1\}, \qquad j = 1, \ldots, n.$$

Эта задача является частным случаем целочисленной задачи (12.1), (12.2). Задачу (12.1), (12.2) в данном случае можно трактовать как обобщенную задачу о рюкзаке, если отказаться от предположений о том, что каждый предмет имеется в наличии в единственном экземпляре и может загружаться в рюкзак в единственном экземпляре, заменив условие $x_j \in \{0, 1\}$ условием $x_j \in \{0, 1, 2, \ldots\}$ ($j = 1, \ldots, n$). При этом единственное ограничение на вес заменяется совокупностью m ограничений (ограничиваются суммарный вес, объем и т. д.).

Задача о рюкзаке является классическим представителем класса дискретных оптимизационных задач, называемых «*задачи с неделимостями*». Как нетрудно заметить, представленная в этом пункте математическая модель носит универсальный характер, и к ней могут быть сведены многие экономические и технические задачи. Ярким подтверждением этому служит и тот факт, что в литературе она также известна как задача о загрузке судна.

Задача раскроя, или задача рационального раскроя

Эта задача относится к задачам с неделимостями. Она заключается в выборе такого размещения заготовок в кусках материала, которое дает заготовки, как правило, в требуемой комплектности при минимальном расходе материала. В соответствии с особенностями технологии и организации раскроя различаются математические модели рационального раскроя для массового (серийного) и индивидуального (штучного) производства.

В массовом производстве при поступлении одинаковых кусков материала (например, бревна или листы стального проката одинакового размера), если можно перечислить все $i = 1, 2, \ldots, N$ доступные способы раскроя одного куска материала на некоторые из $j = 1, 2, \ldots, m$ нужных видов заготовок, задача раскроя формулируется следующим образом.

Найти интенсивность применения (*количество раз*) $x_i \ge 0$ *каждого из раскроев, при которых*

$$f = \sum_{i=1}^{N} x_i \to \min$$

и соблюдены условия

$$\sum_{i=1}^{N} a_{ij} x_j \ge b_j, \qquad j = 1, 2, \ldots, N,$$

где a_{ij} *– количество j-х заготовок в i-м раскрое*; b_j *– необходимое на одно изделие количество этих заготовок.*

В условиях массового производства эта задача может быть решена как задача линейного программирования. При индивидуальном производстве (например, в судостроении, в штучном производстве крупных агрегатов) задача раскроя требует вместо линейного программирования решения поставленной выше задачи как задачи целочисленного программирования.

Задача о коммивояжере

Пусть имеется n городов, занумерованных числами 1, …, n. Для любой пары городов (i,j) задано расстояние $c_{ij} \geq 0$ между ними (c_{ij} может означать не только расстояние, но и время, путевые расходы и прочее, поэтому в общем случае не предполагается, что $c_{ij} = c_{ji}$). Выехав из исходного города, коммивояжер должен вернуться в него, побывав во всех остальных городах по одному разу. В качестве исходного может быть выбран любой город. Требуется найти маршрут минимальной длины.

Иными словами, необходимо минимизировать функцию

$$f(x) = c_{i_1 i_2} + c_{i_2 i_3} + \ldots + c_{i_n i_1}$$

на множестве X допустимых маршрутов $x = (i_1, \ldots, i_n, i_1)$, где $(i_1, \ldots, i_n, i_1)$ – произвольная перестановка чисел 1, 2, …, n. Заметим, что множество X содержит $n!$ элементов, поэтому решить задачу методом полного перебора при достаточно больших n нереально.

Описанная задача относится к классу так называемых *комбинаторных задач*, т. е. задач оптимизации функции, заданной на конечном множестве, элементами которого служат выборки из n объектов. Различные ее варианты возникают, например, при отыскании оптимальных маршрутов доставки готовой продукции потребителям.

Величину c_{ij} можно интерпретировать и как стоимость перестройки гибкого автоматизированного производства при переходе от изготовления партии изделий i-го типа к изготовлению партии изделий j-го типа. Требуется минимизировать суммарные издержки при производстве n партий изделий различных типов.

Покажем, что задача о коммивояжере сводится к некоторой задаче ЦЛП. Введем переменную x_{ij}, принимающую значение 1, если коммивояжер из города i приезжает в город j, и 0 – в противном случае, $i, j = 1, \ldots, n$. Тогда задача о коммивояжере принимает вид задачи ЦЛП: *найти точку минимума целевой функции*

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{n} c_{ij} x_{ij} \rightarrow \min$$

при ограничениях

$$\sum_{j=0}^{n} x_{ij} = 1, \qquad i = 0, 1, \ldots, n; \qquad \sum_{i=0}^{n} x_{ij} = 1, \qquad j = 0,\ 1, \ldots, n; \qquad (12.3)$$

$$x_{ii} = 0, \quad i = 1,\ 2,\ \ldots,\ n.$$

Условия (12.3) означают, что в каждый пункт можно въехать и выехать только один раз. Приведенная форма записи задачи о коммивояжере не является самой рациональной и предназначена только для того, чтобы подчеркнуть ее общность с другими задачами дискретного программирования.

При формулировке и решении задач ЦЛП необходимо придерживаться следующих рекомендаций:

1. Количество целочисленных переменных нужно уменьшать насколько возможно. Например, целочисленные переменные, значения которых должны быть не менее 20, можно рассматривать как непрерывные.

2. В отличие от непрерывных задач ЛП добавление новых ограничений, особенно включающих целочисленные переменные, обычно уменьшает время решения задач ЦЛП.

3. Если нет острой необходимости отыскания точного целочисленного оптимума, можно ограничиться получением целочисленного решения, отличающегося от решения соответствующей непрерывной задачи ЛП, например, не более чем на 3 %. Это ведет к значительной экономии машинного времени.

4. Для эффективного решения задач целочисленного программирования с булевыми переменными разработан ряд специальных методов, основанных на неявном переборе допустимых точек.

Они не являются обязательными. Тем не менее их применение на практике часто позволяет уменьшить время вычислений, которое существенно зависит от исходной математической постановки задач ЦЛП.

Понятие о методе динамического программирования

Метод динамического программирования используется как для дискретных, так и для непрерывных оптимизационных задач. *Динамическое программирование** представляет собой математический метод для нахождения оптимальных решений многошаговых (многоэтапных) задач оптимизации.

Некоторые задачи математического программирования обладают специфическими особенностями, что позволяет свести их решение к рассмотрению некоего множества более простых «подзадач». В результате вопрос о глобальной оптимизации целевой функции сводится к поэтапной оптимизации промежуточных целевых функций.

Пусть, например, на период времени T, состоящий из m лет, планируется деятельность группы промышленных предприятий. В начале планируемого периода на развитие предприятий выделяются основные средства Q_0, которые необходимо распределить между предприятиями. В процессе функционирования предприятий выделенные им средства частично расходуются.

Однако каждое из этих предприятий за определенный период времени (хозяйственный год) получает прибыль, зависящую от объема вложенных средств. В начале каждого года имеющиеся средства могут перераспределяться между предприятиями. Требуется определить, сколько средств надо выделить каждому предприятию в начале каждого года, чтобы суммарный доход от всей группы предприятий за период времени T был максимальным.

Эта задача является многошаговой. Шагом управления здесь будет хозяйственный год. Управление процессом состоит в перераспределении средств в начале каждого хозяйственного года.

Обычно методами динамического программирования оптимизируют работу управляемых систем, эффект которой оценивается аддитивной целевой функцией. *Аддитивной* называется функция многих переменных $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ вида

$$f(x_1, x_2, \ldots, x_n)=\sum_{j=1}^{n} f_j(x_j),$$

где каждая функция f_j зависит только от одной переменной x_j. Слагаемые аддитивной целевой функции соответствуют эффекту решений, принимаемых на отдельных этапах управляемого процесса.

---

* Динамическое программирование как научное направление возникло и сформировалось в 1951–1953 гг. благодаря работам Р. Беллмана и его сотрудников.

Отметим, что некоторые из многошаговых задач естественным образом распадаются на отдельные этапы, но имеются задачи, в которых разбиение приходится вводить искусственно.

Принцип оптимальности и рекуррентное соотношение

Метод динамического программирования позволяет одну задачу со многими переменными заменить рядом последовательно решаемых задач с меньшим числом переменных. Процесс решения задачи разбивается на шаги. При этом если задано начальное состояние управляемой системы, то нумерация шагов осуществляется от конца к началу, а если конечное, то – от начала к концу.

Основным принципом, на котором базируется оптимизация многошагового процесса и особенности вычислительного метода динамического программирования, является *принцип оптимальности Р. Беллмана*.

Приведем его формулировку: оптимальное поведение обладает тем свойством, что каковы бы ни были начальное состояние и начальное решение, последующие решения должны составлять оптимальное поведение относительно состояния, полученного в результате начального решения.

Этот принцип можно сформулировать и по-другому: оптимальное поведение в многошаговом процессе обладает тем свойством, что какими бы ни были решение, принятое на последнем шаге, и состояние процесса перед по-

следним шагом, предыдущие решения должны составлять оптимальное относительно этого состояния поведение.

Принцип оптимальности имеет конструктивный характер и непосредственно указывает процедуру нахождения оптимального решения. Математически он записывается выражением вида

$$f_{n-l}(S_l) = \underset{U_{l+1}}{\text{optimum}}\,[R_{l+1}(S_l, U_{l+1}) + f_{n-(l+1)}(S_{l+1})], \qquad (12.4)$$

$l = 0, 1, \ldots, n-1$, где $U_l = (u_l^{(1)}; \ldots; u_l^{(m)})$ – решение (управление), выбранное на l-м шаге; $S_l = (s_l^{(1)}; \ldots; s_l^{(m)})$ – состояние системы на l-м шаге; R_l – непосредственный эффект, достигаемый на l-м шаге; $f_{n\text{-}1}$ – оптимальное значение эффекта, достигаемого за $n-l$ шагов; n – количество шагов (этапов). «Optimum» в выражении (12.4) означает максимум или минимум в зависимости от условия задачи. Формула (12.4) назвается *уравнением Беллмана* или *рекуррентным соотношением*. Процесс вычисления $f_{n\text{-}1}$, $l = 0, \ldots, n-1$, осуществляется при естественном начальном условии $f_0(S_n) = 0$, которое означает, что за пределами конечного состояния системы эффект равен нулю.

Сформулированный принцип и уравнение Беллмана носят общий характер и применяются не только в задачах дискретной оптимизации. Метод динамического программирования широко используется для решения многих экономических и технологических задач, связанных с планированием производственных программ, оптимальным распределением ресурсов (денежных средств, рабочей силы, сырья и т. д.), а также управлением технологическими системами.

Поскольку многие особенности реализации метода динамического программирования определяются конкретными задачами, не имеет смысла подробно описывать вычислительный алгоритм в общем случае. Поясним метод на примере задачи о кратчайшем маршруте.

Задача о кратчайшем маршруте

Пусть требуется перевезти груз из города A в город B. Сеть дорог, связывающих эти города, изображена в виде графа на рис. 12.1. Вершинам графа поставлены в соответствие города, а дугам – транспортные магистрали. Стоимость перевозки груза из города s ($s = 1, \ldots, 6$) в город j ($j = 2, ,7$) проставлена над соответствующими дугами графа. Необходимо найти маршрут, связывающий города A и B, для которого суммарные затраты на перевозку груза были бы наименьшими.

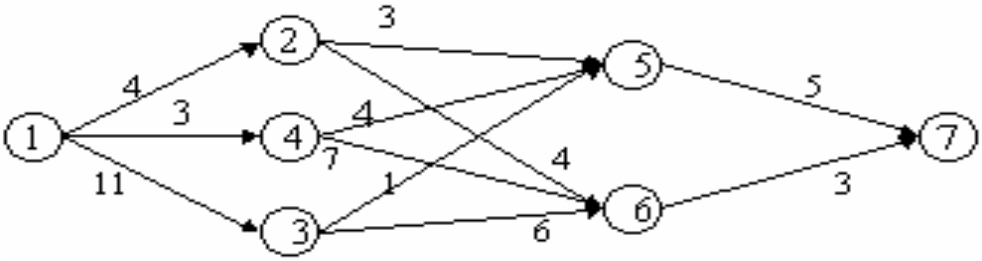

Рис. 12.1. График к задаче о кратчайшем маршруте

Для решения задачи разобьем все множество вершин (городов) на подмножества. В первое подмножество включим исходную вершину 1. Во второе – вершины, в которые входят дуги, выходящие из вершины 1. В третье – вершины, в которые входят дуги, выходящие из вершин второго подмножества. Таким образом, продолжая разбиение дальше, получим четыре подмножества: {1}, {2, 3, 4}, {5, 6}, {7}. Очевидно, что любой маршрут из города 1 в город 7 содержит ровно три дуги, каждая из которых связывает вершины, принадлежащие соответствующим подмножествам. Следовательно, процесс решения задачи (нахождения оптимального маршрута) разбивается на три этапа. На первом этапе принимается решение о том, через какой город, принадлежащий второму подмножеству, везти груз из города 1. На втором этапе необходимо определить, через какой город третьего подмножества везти груз из некоторого города, принадлежащего второму подмножеству. На последнем третьем этапе формируется оптимальный маршрут.

Перенумеруем этапы от конечной вершины графа к начальной и введем обозначения: n – номер шага (n = 1, 2, 3); $f_n(s)$ – минимальные затраты на перевозку груза от города s до конечного города B, если до конечного города осталось n шагов; $j_n(s)$ – номер города, через который надо ехать из города s, чтобы достичь затрат $f_n(s)$; $c_{s,j}$ – стоимость перевозки груза из города s в город j.

Здесь все обозначения несут важную смысловую нагрузку: f – это целевая функция, s – состояние системы (номер города), индекс n отражает динамическую информацию о том, что из города s до конечного города осталось n шагов.

Предположим, что груз доставлен в город 7, следовательно, число оставшихся шагов равно нулю (n = 0) и $f_n(s) = f_0(7) = 0$, т.к. из города 7 груз вести не надо.

Рассмотрим последний шаг (n = 1) и вычислим для него значение функции. Очевидно, что в город 7 груз может быть доставлен из города 5 или из города 6. Вычислим затраты на перевозку для этих двух состояний:

$$f_1(5) = c_{5,7} + f_0(7) = 5 + 0 = 5, \quad s = 5, \quad j_1(5) = 7;$$

$$f_1(6) = c_{6,7} + f_0(7) = 3 + 0 = 3, \quad s = 3, \quad j_1(6) = 7.$$

Чтобы произвести расчет для n = 2, выдвинем гипотезы о месте нахождения груза: 1-я гипотеза – груз находится в городе 2; 2-я гипотеза – груз находится в городе 3; 3-я гипотеза – груз находится в городе 4.

Из города 2 в город 7 можно перевезти груз или через город 5, или через город 6. Поэтому оптимальный маршрут из города 2 определим по выражению

$$f_2(2) = \min\left[c_{2,5} + f_1(5),\ c_{2,6} + f_1(6)\right] = \min\left[3+5, 4+3\right] = 7.$$

Здесь $s = 2$ и $j_2(2) = 6$, т. е. условно-оптимальный маршрут проходит через город 6. Аналогично для $s = 3$ и $s = 4$:

$$f_2(3) = \min\left[c_{3,5} + f_1(5),\ c_{3,6} + f_1(6)\right] = 6, \quad j_2(3) = 5;$$

$$f_2(4) = \min\left[c_{4,5} + f_1(5),\ c_{4,6} + f_1(6)\right] = 9, \quad j_2(4) = 5.$$

Вычисления для третьего шага ($n = 3$) показывают, что

$$f_3(1) = \min\left[c_{1,2} + f_2(2),\ c_{1,3} + f_2(3),\ c_{1,4} + f_2(4)\right] = 11,$$

$j_3(1) = 2$, т. е. минимальные затраты на перевозку груза $f_3(1) = 11$ и оптимальный маршрут проходит через город 2. Далее из вычислений $f_2(2)$ следует, что оптимальный маршрут проходит через город 6, т.к. $j_2(2) = 6$. Наконец, из города 6 груз доставляется в конечный город 7 (место назначения). Таким образом, мы определили оптимальный маршрут $x^* = (1–2–6–7)$, затраты на перевозку груза по которому составляют $f_3(1) = 4 + 4 + 3 = 12$.

Следует отметить, что метод динамического программирования применим только для нахождения кратчайшего пути на связных графах, где любой маршрут состоит из одного и того же числа дуг, как, например, на рис. 12.1. Для графов более общей структуры используются соответствующие алгоритмы теории графов.

Контрольные вопросы и задания

1. Сформулируйте общую задачу оптимизации.
2. Дайте определение следующих понятий: целевая функция, допустимое множество, допустимая точка, решение задачи оптимизации.
3. Перечислите основные этапы реализации оптимизационной задачи.
4. Охарактеризуйте основные направления применения методов оптимизации в инженерной деятельности.
5. Приведите примеры оптимизационных задач из практики.
6. Дайте классификацию задач оптимизации.
7. В чем отличие локального минимума от глобального? Проиллюстрируйте примером.
8. Дайте определение строгого минимума.
9. Сформулируйте теорему Вейерштрасса о существовании решения задачи оптимизации.
10. Что понимается под характеристиками задачи оптимизации?
11. В чем состоит общая суть всех критериев оптимальности допустимой точки?
12. Укажите все глобальные и локальные экстремумы (если они существуют) следующих функций: а) $f = (2 - x)(x + 1)^2$; б) $f = \ln(x^2 + 1)$; в) $f = x - 2\sin x^2$.
13. Сформулируйте общую задачу линейного программирования.

14. Чем отличается основная задача ЛП от общей?

15. Чем отличается общая задача ЛП от канонической?

16. Всегда ли общую задачу ЛП можно привести к канонической форме? Опишите метод приведения общей задачи к каноническому виду.

17. Какие ограничения называют жесткими (нежесткими)?

18. Приведите примеры существенных и несущественных ограничений.

19. Чем отличается выпуклый многогранник от выпуклого многогранного множества?

20. Дайте определение угловой точки выпуклого многогранного множества.

21. Сформулируйте основную теорему линейного программирования.

22. В чем заключается первая геометрическая интерпретация задачи ЛП?

23. В чем состоит идея геометрического метода решения задачи ЛП? Для каких задач он применим?

24. В чем заключается вторая геометрическая интерпретация задачи ЛП?

25. Дайте определения следующих понятий: опорная точка (опорный план) допустимого множества, базис опорной точки, базисные переменные.

26. Дайте определение двойственной задачи ЛП.

27. Каким свойством обладает отношение двойственности?

28. Перечислите основные свойства пары двойственных задач (теоремы двойственности).

29. Каково практическое значение теорем двойственности?

30. Какая из теорем двойственности является критерием оптимальности для задач ЛП и в чем ее суть?

31. Дайте содержательную формулировку и математическую постановку транспортной задачи?

32. Что такое условие баланса и какова его роль в транспортных задачах?

33. Сформулируйте задачу целочисленного линейного программирования.

34. Сформулируйте задачу о рюкзаке. К какому классу задач целочисленного программирования она относится?

35. Сформулируйте задачу о коммивояжере. К какому классу задач целочисленного программирования она относится?

36. В чем состоит суть задачи раскроя?

37. Для каких оптимизационных задач применяется метод динамического программирования?

38. В чем заключается суть метода динамического программирования?

39. Сформулируйте принцип оптимальности Беллмана.

ТЕМА 5. ИДЕНТИФИКАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Лекция 13. методы Идентификации математических моделей

План лекции

1. Понятие идентификации.
2. Методы структурной идентификации.
3. Методы проверки гипотезы об адекватности структуры модели.
4. Методы параметрической идентификации (статических, стохастических моделей).
5. Динамические модели.

Понятие идентификации

Под *идентификацией* объектов понимается построение оптимальных в некотором смысле математических моделей по реализации их входных и выходных сигналов. Задача идентификации заключается в количественной оценке степени идентичности модели реальному объекту (рис. 13.1).

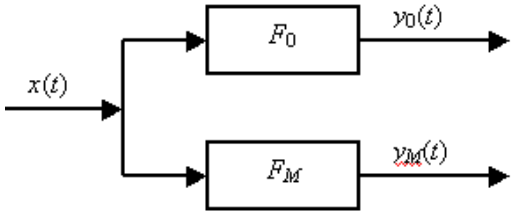

Рис. 13.1. Структурная схема процесса идентификации: F_0 – истинная характеристика ОУ; $F_м$ – оценка объекта по его математической модели; $y_0(t)$ – выход реального объекта; $y_м(t)$ – выход модели

Критерием соответствия модели и объекта является минимум ошибки модели (остатков модели):

$$\varepsilon_i\ (t) = y_0(t) - y_i\ (t)\ .$$

В зависимости от характера априорной информации об объекте различают задачи идентификации в узком и широком смысле.

Задача идентификации в узком смысле (параметрической идентификации) сводится к оценке параметров объекта по результатам наблюдений за входными и выходными сигналами, полученными в условиях функционирования объекта. При этом априорная информация должна быть достаточно велика.

Задача идентификации в широком смысле (структурной идентификации) ставится в случаях, когда априорная информация об объекте недостаточна и возникает необходимость выбора структуры системы и задания класса моделей, оценки степени и формы влияния входных переменных на выходные.

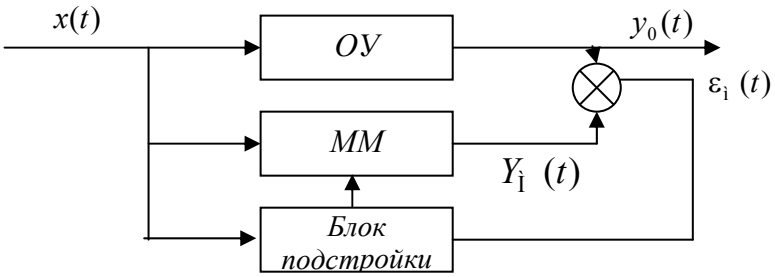

Рис. 13.2. Структурная схема идентификации объекта методом подстраиваемой модели

Построение хорошей модели – это, как правило, многоэтапный процесс, заключающийся в последовательной постановке и проверке гипотез о структуре и параметрах объекта. В настоящее время широкое распространение получили подстраиваемые модели, которые непосредственно используются в контуре управления (рис. 13.2). Корректировка структуры таких моделей и ее параметров (вручную или автоматически) проводится с целью свести к минимуму ошибку модели.

Методы структурной идентификации

Роль структуры модели трудно переоценить, т.к. при неудачном выборе структуры становится неэффективной параметрическая идентификация. С определением структуры объекта связаны следующие задачи:

1. Выделение объекта из среды. Процесс выделения объекта обуславливается целями, для которых строится модель.

2. Ранжирование входов и выходов объекта по степени их влияния на конечный целевой показатель. При построении структуры в нее целесообразно включать не все входные и управляющие параметры, а только те, которые оказывают существенное влияние на целевой показатель.

3. Определение рационального числа входов и выходов объекта, учитываемых в модели. Не следует вводить в модель несущественные параметры, т.к. это приводит к значительному отклонению модели от экспериментальных данных.

4. Определение характера связи между входом и выходом модели объекта, т.е. вида модели $y = F(x)$.

Рассмотрим каждую из этих задач.

Процесс выделения объекта из среды прежде всего определяется целями, для которых строится модель. Выделение объекта из среды или разделение на подобъекты должно выполняться таким образом, чтобы каждый из них имел минимум связей со средой или другими подобъектами. Процесс выделения объекта из среды может осуществляться как последовательный переход от простейших форм объекта к более сложным. В качестве простейшей формы можно рассматривать такую часть среды, которая несет инфор-

мацию, необходимую для проверки выполнимости поставленной цели. Далее происходит расширение объекта за счет присоединения части среды.

В качестве примера приведем процесс нагрева металла в камерной печи. Допустим, целью управления является получение равномерно прогретой заготовки. Если при этом в качестве объекта управления выделить лишь саму заготовку, то заданная цель не достижима. Входным параметром является температура рабочего пространства, выходным – температура центра заготовки. Для комплексного решения задачи необходимо знать расход топлива, запыленность отходящих газов и их температуру.

Важное значение для определения структуры модели имеет отбор входных и выходных параметров модели и выбор из них наиболее существенных. При определении структуры модели могут сравниваться несколько конкурирующих моделей. Гипотезы о структуре модели выдвигаются с учетом физических, физико-химических и других теоретических представлений о конкретных объектах, а для проверки этих гипотез используют экспериментально-статистические методы.

Методы проверки гипотезы об адекватности структуры модели

Как уже отмечалось в лекции 4, об адекватности структуры модели можно судить по статистической оценке коэффициента корреляции, корреляционного отношения, гистограмме распределения и содержательному анализу остатков.

Коэффициент корреляции является показателем тесноты линейной связи между реальными значениями Y и расчетными $\tilde{Y}$.

Коэффициент корреляции r изменяется от –1 до 1. Если он равен –1 или 1, то имеет место полная функциональная связь между $\tilde{Y}$ и Y. При $r = 0$ связь между величинами отсутствует. Структуру модели можно считать адекватной экспериментальным данным, если $0{,}9 \le |r| \le 1$.

Корреляционное отношение характеризует. степень тесноты нелинейной связи между переменными $\tilde{Y}$ и Y. При корреляционном отношении, равном 0, связь между Y и $\tilde{Y}$ отсутствует. Структура модели считается адекватной экспериментальным данным, если $0{,}9 \le r \le 1$.

Высокое значение коэффициента корреляции, или корреляционного отношения, свидетельствует об адекватности модели. Однако этого недостаточно, и чтобы определить ее адекватность, необходимо построить гистограмму распределения остатков содержательного анализа модели.

Для построения *гистограммы распределения остатков* разобьем весь диапазон изменения остатков на несколько поддиапазонов (0–20) и рассчитаем число попаданий ошибки (остатков) в каждый поддиапозон. При этом по оси ординат число попаданий ошибки можно откладывать как в натуральных

показателях, так и в процентном соотношении. При адекватности модели реальному объекту гистограмма распределения имеет колоколообразный вид, при неадекватности модели реальному объекту – несимметричный характер или второй горб (рис. 13.3). Для оценки адекватности также можно использовать количественные критерии.

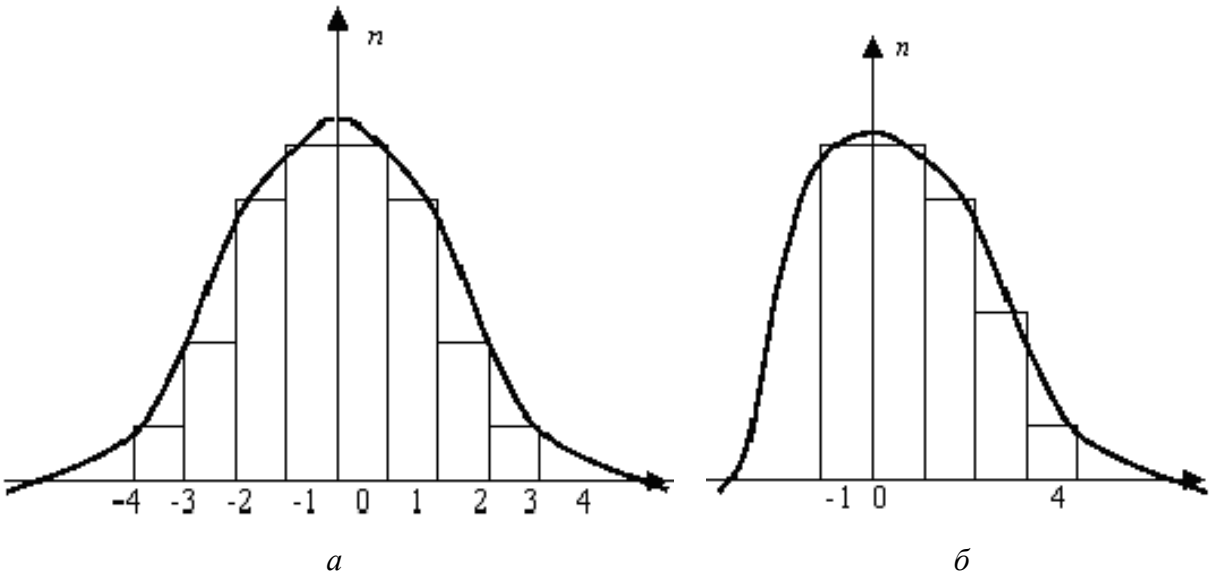

Рис. 13.3. Гистограмма распределения остатков: *а* – при адекватности модели ОУ; *б* – при неадекватности модели ОУ; *n* – число экспериментальных данных

Содержательный анализ остатков модели состоит в построении распределения остатков модели в зависимости от входного параметра *X* (рис. 13.4).

Попадание большинства данных в горизонтальную полосу свидетельствует о том, что наши предположения оправданны, т.е. модель адекватна ОУ. Графики для случаев неадекватности модели ОУ имеют вид, аналогичный рис. 13.4, *б–г*.

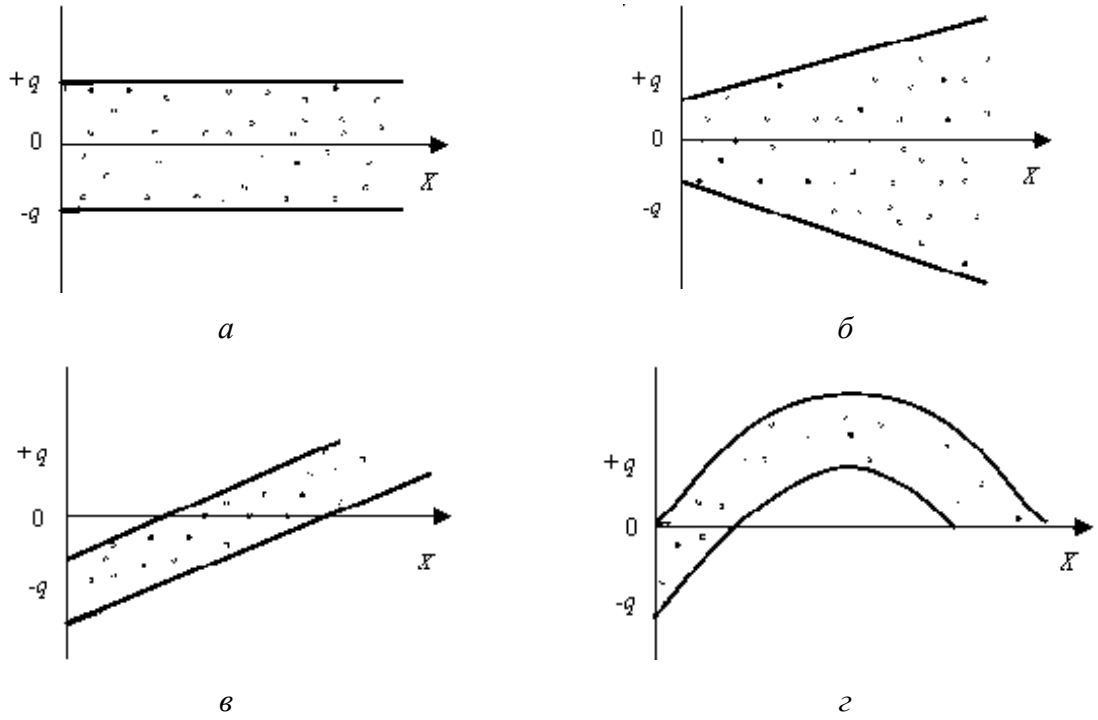

Рис. 13.4. Графики зависимости остатков от *t*: *а* – эффект времени не влияет на ошибку; *б* – дисперсия непостоянна, необходимо использование взвешенного метода наименьших квадратов; *в* – необходимо включить в модель линейный член; *г* – необходимо включить в модель линейный и квадратичный члены

Большой интерес при исследовании остатков могут представлять выбросы, то есть значительные отклонения параметров от установленного закона распределения. С точки зрения получения устойчивых средних значений выбросы за зону шириной $\pm 3\sigma$ рекомендуется не учитывать.

Методы параметрической идентификации

С помощью методов структурной идентификации не всегда удается достичь необходимой адекватности (идентичности) объекта и его математической модели, в этих случаях используются методы параметрической идентификации. Их отбирают по целевой направленности, т.е. зависимости от свойств объектов, отражением которых является математическая модель определенных классов.

С точки зрения методов параметрической идентификации математические модели классифицируются как статические или динамические, детерминированные или стохастические, линейные или нелинейные, непрерывные или дискретные.

В зависимости от структуры связи между входом и выходом объекта и его свойств выбор методов параметрической идентификации осуществляется на основе следующих признаков:

♦ активность (активные и пассивные методы);
♦ адаптивность (неадаптивные и адаптивные);
♦ дискретность (непрерывные и дискретные).

Поэтому число возможных сочетаний моделей и методов довольно велико. Однако из всего многообразия реальных ситуаций можно выделить типовые случаи. Например, идентификация объекта, описываемого статической детерминированной линейной моделью, проводится более простыми методами, чем объекта с динамической стохастической нелинейной моделью.

Рассмотрим некоторые наиболее характерные методы идентификации применительно к металлургическим объектам.

Физический смысл параметрической идентификации *статической детерминированной модели* заключается в изменении (подстройке) внутренних параметров модели в случае несоответствия расчетного значения выходного параметра модели $\tilde{y}$ его истинному (действительному) значению y, полученному на реальном объекте в процессе его функционирования.

Допустим, что поведение объекта моделирования описывается регулярной зависимостью, связывающей вход x и выход y. Тогда его модель также должна представлять собой некоторую регулярную функцию F, т.е. $y = F(x)$.

Рассмотрим линейную модель объекта с n входными и m выходными параметрами:

$$\begin{cases} y_1 = b_{10} + b_{11}x_i + \ldots + b_{1n}x_n, \\ y_2 = b_{20} + b_{21}x_i + \ldots + b_{2n}x_n, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ y_m = b_{m0} + b_{m1}x_i + \ldots + b_{mn}x_n, \end{cases} \qquad (13.1)$$

где идентифицируются $m(n + 1)$ коэффициентов b_{ij} ($i = 1, \ldots, m$; $j = 0, 1, \ldots, n$).

В векторной форме систему (13.1) можно записать следующим образом:

$$\bar{Y} = b_0 + \vec{A}\vec{O},$$

где $\bar{X} = (x_1, \ldots, x_n)$; $\bar{Y} = (y_1, \ldots, y_m)$; $\vec{A} = (b_1, \ldots, b_m)$.

Модель объекта с одним выходом ($n > 1$, $m = 1$) в векторной форме имеет вид

$$y = b_0 + (\vec{A}, \vec{O}) \qquad (13.2)$$

где $(\vec{A}, \vec{O})$ – скалярное произведение векторов $\vec{A}$ и $\vec{O}$. Она содержит $k = n + 1$ неизвестных параметров, которые могут быть оценены на основе информации о работе объекта.

Рассмотрим сначала неадаптивный шаговый метод применительно к решению этой задачи, для чего приравняем выходы модели и объекта в каждом из N опытов:

$$b_0 + \sum_{i=1}^{n} b_i x_{ji} = y_j \qquad (j = 1, ..., N).$$

В результате получим систему из N уравнений с $n + 1$ неизвестным, которая имеет единственное решение, если ранг матрицы

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} & \dots & x_{n1} \\ x_{12} & x_{22} & \dots & x_{n2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{1N} & x_{2N} & \dots & x_{nN} \end{pmatrix}$$

равен $n+1$, т.е. существует $n + 1$ линейно независимая строка этой матрицы. Это условие может быть нарушено, если ряд факторов в некоторых опытах окажется застабилизированным по условиям технологии. Выходом из этой ситуации является увеличение количества опытов, чтобы получить недостающие комбинации, или снижение числа идентифицируемых параметров.

В качестве критерия идентификации статически детерминированных моделей чаще всего используется суммарная невязка (остаток) модели и объекта

$$Q(\hat{A}) = \sum_{j=1}^{N} q_j^2(\hat{A}) ,$$

где q_j – локальная невязка на j-м опыте,

$$q_j = b_0 + \sum_{i=1}^{n} b_i x_{ij} - J_j \ .$$

Модель считается адекватной, если относительная невязка

$$Q_0(\hat{A}) = Q(\hat{A}) \left(\sum_{j=1}^{N} y_j^2 \right)^{-1}$$

не превышает 5 %.

В случае неадекватности модели необходимо изменить регулируемые параметры, т. е. коэффициенты уравнения (13.2).

Перейдем к методам адаптивной идентификации. Для непрерывного случая процесс адаптивной идентификации сводится к решению системы дифференциальных уравнений

$$\frac{d\overline{B}}{dt} = \overline{J}\left(\overline{B}, \overline{X}(t), \overline{Y}(t)\right) .$$

Если в качестве критерия идентификации принять квадрат невязки, а в качестве алгоритма минимизации невязки – метод наискорейшего спуска, то это уравнение имеет вид

$$\frac{dB}{dt} = -\alpha \operatorname{grad} q_t^2(\overline{B}(t)).$$

Перейдем к методам идентификации *стохастических моделей*. Сначала рассмотрим задачу идентификации для статического стохастического объекта, модель которого может быть представлена в виде

$$\overline{Y} = \overline{F}_0(\overline{X}, \overline{B}, \overline{A}),$$

где $\overline{A}$ – вектор случайных факторов, порожденных либо самим объектом, либо средствами сбора и передачи информации; $\overline{X}$ – входной параметр объекта, $\overline{B}$ – вектор внутренних параметров.

Для простоты остановимся на таких моделях, у которых регулярная составляющая $\overline{F}_0(\overline{X}, \overline{B})$ и случайная $\overline{A}$ могут быть разделены:

$$\overline{Y} = \overline{F}_0(\overline{X}, \overline{B}) + \overline{A}.$$

При этом предполагается, что свойства случайной составляющей не зависят от входа Y, т.е. полностью оцениваются определенной плотностью вероятности $P[\overline{A}]$, в качестве которой часто принимают плотность нормального закона распределения.

Для объекта с одним выходом Y ($m = 1$) плотность нормального распределения случайной величины E_1 характеризуется двумя параметрами – математическим ожиданием m_ε и дисперсией σ^2:

$$m_\varepsilon = M(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} y(\varepsilon)\varphi(\varepsilon)d\varepsilon, \qquad \sigma^2 = M\left[(\varepsilon - m_\varepsilon)^2\right].$$

Для объекта, имеющего два выхода (y_1 и y_2) и две случайные составляющие (ε_1, ε_2), нормальный закон распределения характеризуется пятью параметрами:

♦ координатами центра рассеяния

$$m_1 = M(\varepsilon_1), \quad m_2 = M(\varepsilon_2);$$

♦ дисперсиями

$$\sigma_1^2 = M\left[(\varepsilon_1 - m_1)^2\right], \quad \sigma_2^2 = M\left[(\varepsilon_2 - m_2)^2\right];$$

♦ корреляционным моментом

$$K_{1,2} = M\left[(\varepsilon_1 - m_1)(\varepsilon_1 - m_2)\right].$$

Идентификация объектов с несколькими выходами значительно затрудняется при коррелированности помех, действующих на разные выходы. Преодолеть этот недостаток можно с помощью процедуры *декорреляции*.

Смысл декорреляции состоит в следующем. Пусть ε_1 и ε_2 – коррелированные случайные величины с нулевыми математическими ожиданиями,

дисперсиями σ_1^2 и σ_2^2 и корреляционным моментом K_{12}, который предполагается известным. Построим такое линейное преобразование системы случайных величин с матрицей

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix},$$

чтобы новые случайные величины

$$\eta_1 = a_{11}\varepsilon_1 + a_{12}\varepsilon_2, \qquad \eta_2 = a_{21}\varepsilon_1 + a_{22}\varepsilon_2$$

были некоррелированы. Корреляционный момент этих величин

$$R(\eta_1, \eta_2) = a_{11}a_{21}\sigma_1^2 + a_{12}a_{22}\sigma_2^2 + (a_{11}a_{21} + a_{12}a_{22})K_{12}$$

равен 0, если выполняется условие

$$\frac{a_{12}a_{22}}{a_{11}a_{21}} = -\frac{\sigma_1^2 + K_{12}}{\sigma_2^2 + K_{12}}.$$

Таким образом, с помощью указанного линейного преобразования можно избавиться от корреляции помех на выходах и рассматривать задачу идентификации для каждого выхода отдельно. При этом необходимо подчеркнуть, что оценки идентифицируемых параметров в среднем совпадают с их точными значениями, когда математическое ожидание помехи $m_\varepsilon = 0$ и она не коррелирована ни с одним из входов x_i. В реальных условиях такая ситуация часто имеет место.

Для определения параметров B после этапа структурной идентификации, на котором выбирается вид функций F, решается задача оптимизации невязки выхода модели и объекта на каждом измерении:

$$q_j(\overline{B}) = \overline{F}(\overline{X}_j, \overline{B}) - \overline{Y}_j \qquad (j = 1, ..., N).$$

Оцениваемые параметры выбираются таким образом, чтобы все эти невязки были минимальны по модулю, т.е. решается задача минимизации N функций:

$$q_j(B) \to \min \quad (j = 1, ..., N).$$

Эта задача является многокритериальной и может быть решена только при свертывании критерия, что можно сделать одним из следующих способов:

$$Q_1(B)=\sum_{j=1}^{N}\left|q_j(B)\right| \qquad \text{(модульный критерий);}$$

$$Q_2(B)=\sum_{j=1}^{N}q_j^2(B) \qquad \text{(квадратичный критерий);}$$

$$Q_3(B)=\sum_{j=1}^{N}\left|q_j(B)\right|^p \qquad \text{(показательный критерий);}$$

$$Q_4(B)=\max_{j=1,2,\ldots,N}\left|q_j(B)\right| \qquad \text{(минимальный критерий);}$$

$$Q_5(B)=\left|\sum_{j=1}^{N}\alpha_j\left|q_j(B)\right|\right|, \quad \alpha_j>0 \qquad \text{(взвешенный критерий).}$$

Последний критерий обобщает все предыдущие.

Динамические модели

Большой интерес представляет идентификация динамических моделей. С этой целью рассмотрим методы идентификации моделей, оператор которых имеет память, т.е. выход Y в момент времени t отражает не столько состояние входа X в этот момент, сколько его значение в предыдущие моменты времени, например, содержание никеля в шлаке не может мгновенно изменяться при изменении состава загружаемой шихты.

При идентификации следует различать параметрические и непараметрические модели объектов. *Параметрическая модель* определяется набором параметров (коэффициентов), которые оцениваются в процессе идентификации. *Непараметрическая модель* определяется в общем случае непрерывной функцией (чаще всего функцией времени), может быть задана также точками или в виде разложения в ряд по некоторой системе функций.

При построении моделей исходной информацией для идентификации являются состояния входов $X_i(t)$ и выхода $Y(t)$ объекта в промежутке $0 \le t \le T$. Например, при идентификации модели процесса обжига нефелинового концентрата исходная информация – количество загружаемой шихты, ее химический состав, подача топлива, воздуха в момент времени $t = 0$; выходной параметр – количество полученного глинозема в момент времени $t = T$.

Как и в предыдущих случаях, задачу идентификации можно свести к минимизации функции невязки в виде

$$Q(c)=\int_0^T\left[Y(t)-\sum_{i=0}^{l}b_iX_i(t)\right]^2dt\ .$$

Особое место среди задач идентификации занимают так называемые обратные задачи определения коэффициентов в дифференциальных моделях динамических процессов. Как правило, эти коэффициенты отражают внутренние свойства объекта моделирования и являются функциями внешних параметров. Для их идентификации обычно используется дополнительная информация, полученная экспериментальным путем.

Лекция 14. Организация вычислительного эксперимента

План лекции

1. Понятие погрешности (источники возникновения, абсолютная и относительная погрешности, распространение погрешностей при вычислениях).
2. Достоверность результатов вычислительного эксперимента.
3. Оптимальный выбор численного метода.

Понятие погрешности

Создание математических моделей и решение инженерных задач с применением ЭВМ требует выполнения большого объема работ. Нетрудно заметить аналогию с соответствующими работами, проводимыми при организации натурных экспериментов: составление программы экспериментов, создание экспериментальной установки, выполнение контрольных экспериментов, постановка серийных опытов, обработка экспериментальных данных и их интерпретация и т.д. Однако вычислительный эксперимент осуществляется не над реальным объектом, а над его математической моделью, и роль экспериментальной установки играет оснащенная специально разработанной программой ЭВМ. В связи с этим естественно рассматривать проведение больших комплексных расчетов при решении инженерных и научно-технических задач как вычислительный эксперимент.

Отметим достоинства вычислительного эксперимента по сравнению с натурным. Вычислительный эксперимент, как правило, дешевле физического. В этот эксперимент можно легко и безопасно вмешиваться. Его можно повторить еще раз (если в этом есть необходимость) и прервать в любой момент. В ходе этого эксперимента можно смоделировать условия, которые нельзя создать в лаборатории.

Заметим, что в ряде случаев проведение натурного эксперимента затруднено (а иногда и невозможно), т.к. изучаются быстропротекающие процессы, исследуются труднодоступные или вообще пока недоступные объекты. Часто постановка полномасштабного натурного эксперимента сопряжена с губительными или непредсказуемыми последствиями (ядерная война, поворот сибирских рек) либо с опасностью для жизни или здоровья людей. Нередко требуется исследование и прогнозирование результатов катастрофиче-

ских явлений (авария ядерного реактора АЭС, глобальное потепление климата, землетрясение). В этих случаях вычислительный эксперимент может стать основным средством исследования. Кроме того, с его помощью оказывается возможным прогнозировать свойства новых, еще не созданных конструкций и материалов на стадии их проектирования.

Существенным недостатком вычислительного эксперимента является то, что применимость его результатов ограничена рамками принятой математической модели.

Конечно, вычислительный эксперимент никогда не сможет полностью заменить натурный, и будущее за их разумным сочетанием. Действительно, построение математической модели основано на результатах наблюдений, опыта, а достоверность ее выводов проверяется с помощью критерия практики.

Для инженерных задач характерно наличие значительного числа параметров (конструктивных, технологических и др.). Создание нового изделия или технологического процесса предполагает выбор среди большого числа альтернативных вариантов, а также оптимизацию по ряду параметров. Поэтому в ходе вычислительного эксперимента расчеты проводятся многократно с разными значениями входных параметров. Для получения нужных результатов с требуемой точностью и в приемлемые сроки необходимо, чтобы на расчет каждого варианта тратилось минимальное время. Именно поэтому при создании программного обеспечения так важно использовать эффективные численные методы.

Источники возникновения погрешности

Для правильного понимания подходов и критериев, используемых при решении прикладной задачи с применением ЭВМ, необходимо с самого начала признать, что получить точное значение решения практически невозможно и не в этом цель вычислений. Рассчитанное на ЭВМ решение y^* почти всегда (за исключением некоторых весьма специальных случаев) содержит погрешность, т.е. является приближенным. Невозможность получения точного решения следует уже из ограниченной разрядности вычислительной машины.

Наличие погрешности решения обусловлено рядом весьма глубоких причин:

♦ Математическая модель является лишь приближенным описанием реального процесса. Характеристики процесса, вычисленные в рамках принятой модели, заведомо отличаются от истинных характеристик, причем их погрешность зависит от степени адекватности модели реальному процессу.

♦ Исходные данные, как правило, содержат погрешности, поскольку они либо получаются в результате экспериментов (измерений), либо являются результатом решения некоторых вспомогательных задач.

♦ Применяемые для решения задачи методы в большинстве случаев относятся к приближенным. Найти решение возникающей на практике зада-

чи в виде конечной формулы возможно только в отдельных, очень упрощенных ситуациях.

♦ При вводе исходных данных в ЭВМ, выполнении арифметических операций и выводе результатов на печать производятся округления.

Относительные и абсолютные ошибки

Абсолютная ошибка есть разность между истинным значением величины (считая это истинное значение известным) и ее приближенным значением. Обычно приближенное значение некоторой величины, или приближение, обозначается тем же символом, что и точное значение, только сверху этого символа ставится черта; ошибка же обозначается буквой e с символом приближаемой величины вместо индекса. Таким образом, если точное значение равно x, то мы должны написать

$$x = x + e_x \ .$$

Здесь e_x есть абсолютная ошибка, определяемая как разность между точным значением и приближенным:

$$e_x = x - \bar{x} \ .$$

Относительная ошибка рассчитывается как отношение абсолютной ошибки к приближению. Казалось бы, что более естественно определить ее как отношение абсолютной ошибки к точному значению, но обычно точное значение нам не известно. Чаще всего известны приближенное значение величины и оценка ошибки или границы максимально возможной величины ошибки. Если ошибка мала, то разница в определениях не скажется на численной величине относительной ошибки.

Для величин, близких по значению к единице, абсолютная и относительная ошибки почти одинаковы. Для очень больших или для очень малых величин относительная и абсолютная ошибки представляются совершенно разными числами. Так, если точное значение некоторой величины равно 0,00006, а приближенное значение – 0,00005, то абсолютная ошибка составляет всего 10^{-5}, в то время как относительная ошибка – 0,2, или 20 %. Однако если точное значение равно 100 500, а приближенное значение – 100 000, то абсолютная ошибка составляет 500, хотя относительная ошибка всего 0,005, или 0,5 %.

Необходимо всегда указывать, какая ошибка имеется в виду (абсолютная или относительная), если это не ясно из условной задачи или из контекста.

Ошибки, содержащиеся в исходной информации

В процессе численного решения некоторой задачи возможны три основных вида ошибок: ошибки, содержащиеся в исходной информации; ошибки, возникающие при ограничении бесконечного математического процесса конечным числом операций (ошибки ограничения); ошибки, появляющиеся в результате необходимости представлять число в виде конечной по-

следовательности цифр (ошибки округления). Каждую из этих ошибок можно представить в абсолютной и относительной форме.

Ошибки в исходной информации возникают в результате неточности измерений, грубых просмотров или из-за невозможности представить необходимую величину конечной дробью.

Всякое физическое измерение, будь то измерение расстояния, напряжения или интервала времени, не может быть выполнено абсолютно точно. Если, например, указано, что величина напряжения составляет 6,4837569 В, то можно с уверенностью сказать, что, по меньшей мере, несколько младших значащих цифр недостоверны, т.к. невозможно измерить напряжение с такой точностью. Если же экспериментальный результат содержит небольшое количество значащих цифр (например, промежуток времени в 2,3 с), то можно быть абсолютно уверенным в том, что эта величина дана с некоторой ошибкой, т.к. лишь случайная величина интервала времени может составить в точности 2,3 с. В таких случаях предполагаются некоторые границы, внутри которых эта величина должна находиться – (2,3 ± 0,1) с.

Иногда подразумевается, что если для экспериментального результата не указаны его возможные границы, то результат имеет точность половины единицы младшего разряда. Поэтому если дано, что некая длина равна 5,63 см, значит, эта длина не меньше 5,625 и не больше 5,635 см. Однако это правило не всегда соблюдается; поэтому когда границы точности результата важны, их следует указать в явном виде, например: (5,63 ± ± 0,005) см.

Независимо от количества значащих цифр в какой-либо величине, в ней может содержаться какая-нибудь грубая ошибка. Грубые ошибки могут возникнуть из-за опечаток, ошибочного отсчета показаний прибора; иногда они могут быть связаны с некорректной постановкой задачи или с неполным пониманием некоторых физических законов.

Ошибки округления

Многие числа нельзя представить точно ограниченным числом значащих цифр. Если в вычислениях используется число π, то оно может быть представлено в виде 3,14, или 3,14159265, или 3,141592653589793, в зависимости от требуемой точности. В любом случае, однако, представить π точно не получится, т.к. π является иррациональным числом и не может быть записано конечным числом знаков. Даже обыкновенные дроби очень часто нельзя представить с помощью конечного числа десятичных знаков ($^1/_3$ можно представить только в виде периодической дроби).

Часто случается также, что дроби, которые являются конечными в одной системе счисления, становятся бесконечными в другой системе счисления. Например, дробь $^1/_{10}$ явно имеет конечное десятичное представление 0,1, но, будучи переведена в двоичную систему счисления, становится бесконечной дробью 0,000110011001100… Вычисляя сумму десяти чисел, каждое из которых будет представлять собой двоичное приближение к десятичной 0,1, мы в сумме не получим точно 1. Известно, что начинающие программисты иногда приходят в замешательство, сталкиваясь впервые с такими трудно-

стями. Их легко преодолеть, как мы убедимся ниже на некоторых практических примерах.

Ошибки ограничения

Те ошибки, которые содержатся в исходной информации, определяют точность результата вычислений независимо от того, каким методом эти вычисления проводятся. Два других типа ошибок – ошибки ограничения и ошибки округления – определяются теми численными методами, которые были использованы для решения задачи.

Общеизвестный ряд Тейлора для синуса

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \ldots$$

может использоваться для нахождения синуса любого угла x, выраженного в радианах. Конечно, невозможно использовать все члены ряда для расчета, т.к. ряд бесконечен; вычисления ограничиваются конечным числом членов: например, до x^7 или x^9. Отброшенные члены ряда (а их число бесконечно) вносят некоторую ошибку в результат вычислений. Эта ошибка называется ошибкой ограничения, поскольку она возникает в результате ограничения бесконечного математического процесса.

Очень многие процессы, используемые при вычислениях, являются бесконечными, так что анализ ошибок ограничения очень важен.

Распространение ошибок

Одним из наиболее важных вопросов в численном анализе является вопрос о том, как ошибка, возникшая в определенном месте в ходе вычислений, распространяется дальше, т.е. становится ли ее влияние больше или меньше по мере того, как производятся последующие операции. Крайним случаем является вычитание двух почти равных чисел: даже при очень маленьких ошибках обоих этих чисел относительная ошибка разности может оказаться очень большой. Эта ошибка будет распространяться дальше при выполнении всех последующих арифметических операций.

В качестве первого шага при рассмотрении этого важного вопроса необходимо найти выражения для абсолютной и относительной ошибок результата каждого из четырех арифметических действий как функции величин, участвующих в операции, и их ошибок.

Сложение. Имеются два приближения $\bar{x}$ и $\bar{y}$ к двум величинам x и y, а также соответствующие абсолютные ошибки e_x и e_y. Тогда в результате сложения имеем

$$x + y = \bar{x} + e_x + \bar{y} + e_y = \left(\bar{x} + \bar{y}\right) + \left(e_x + e_y\right).$$

Ошибка суммы, которую мы обозначим через e_{x+y}, будет равна

$$e_{x+y} = e_x + e_y.$$

Вычитание. Тем же путем получаем

$$e_{x+y} = e_x - e_y.$$

Умножение. При умножении мы имеем

$$x \cdot y = \left(\overline{x} + e_x\right)\left(\overline{y} + e_y\right) = \overline{x} \cdot \overline{y} + \overline{x} \cdot e_y + \overline{y} \cdot e_x + e_x \cdot e_y \ ,$$

поскольку ошибки обычно гораздо меньше своих величин, пренебрегаем произведением ошибок:

$$x \cdot y \approx \overline{x} \cdot \overline{y} + \overline{x} \cdot e_y + \overline{y} \cdot e_x \ .$$

Ошибка произведения будет равна

$$e_{x \cdot y} \approx \overline{x} \cdot e_y + \overline{y} \cdot e_x \ .$$

Деление. Имеем

$$\frac{x}{y} = \frac{\overline{x} + e_x}{\overline{y} + e_y} \ .$$

Преобразовываем это выражение к виду

$$\frac{x}{y} = \frac{\overline{x} + e_x}{\overline{y}} \left(\frac{1}{1 + \frac{e_y}{\overline{y}}} \right).$$

Множитель, стоящий в скобках, при $\left|\frac{e_y}{\overline{y}}\right| << 1$ можно разложить в ряд

$$\frac{x}{y} = \frac{\overline{x} + e_x}{\overline{y}} \left(1 - \frac{e_y}{\overline{y}} + \left(\frac{e_y}{\overline{y}}\right)^2 - \ldots \right).$$

Перемножая и пренебрегая всеми членами, которые содержат произведения ошибок или степени ошибок выше первой, имеем

$$\frac{x}{y} \approx \frac{\overline{x}}{\overline{y}} + \frac{e_x}{\overline{y}} - \frac{\overline{x}}{\overline{y}^2} e_y \ .$$

Следовательно,

$$e_{x/y} \approx \frac{1}{\overline{y}} e_x - \frac{\overline{x}}{\overline{y}^2} e_y .$$

В качестве иллюстрации, которая может помочь наглядно представить себе смысл этих формул, рассмотрим сложение двух четырехзначных лога-

рифмов. Так как оба логарифма точны до четвертого знака, то ошибка каждого из них составляет не более 0,00005. Ошибка суммы не может быть больше 0,0001. Конечно, это не означает, что ошибка действительно столь велика, но она может достигать такой величины.

Необходимо четко представлять себе, что знак ошибки бывает известен только в очень редких случаях. Не следует думать, например, что ошибка увеличивается при сложении и уменьшается при вычитании потому, что в формуле для сложения стоит плюс, а для вычитания – минус. Если, например, ошибки двух чисел имеют противоположные знаки, то ошибка уменьшится при сложении и увеличится при вычитании этих чисел.

После того как мы вывели формулы для распространения абсолютных ошибок при четырех арифметических действиях, довольно просто вывести соответствующие формулы для относительных ошибок (для сложения и вычитания формулы были преобразованы с тем, чтобы в них входила в явном виде относительная ошибка каждого исходного числа):

♦ сложение:

$$\frac{e_{x+y}}{\bar{x}+\bar{y}} = \frac{\bar{x}}{\bar{x}+\bar{y}}\left(\frac{e_x}{\bar{x}}\right) + \frac{\bar{y}}{\bar{x}+\bar{y}}\left(\frac{e_y}{\bar{y}}\right);$$

♦ вычитание:

$$\frac{e_{x-y}}{\bar{x}-\bar{y}} = \frac{\bar{x}}{\bar{x}-\bar{y}}\left(\frac{e_x}{\bar{x}}\right) - \frac{\bar{y}}{\bar{x}-\bar{y}}\left(\frac{e_y}{\bar{y}}\right);$$

♦ умножение:

$$\frac{e_{x\cdot y}}{\bar{x}\cdot\bar{y}} = \frac{e_x}{\bar{x}} + \frac{e_y}{\bar{y}};$$

♦ деление:

$$\frac{e_{x/y}}{\bar{x}/\bar{y}} = \frac{e_x}{\bar{x}} - \frac{e_y}{\bar{y}}.$$

Очень важно четко понимать смысл этих формул распространения ошибок. Мы начинаем арифметическую операцию, имея в своем распоряжении два приближенных значения $\bar{x}$ и $\bar{y}$ с соответствующими ошибками e_x и e_y. Ошибки эти могут быть любого происхождения. Величины $\bar{x}$ и $\bar{y}$ могут быть экспериментальными результатами, содержащими ошибки; они могут быть результатами предварительного вычисления согласно какому-либо бесконечному процессу и поэтому могут содержать ошибки ограничения; они могут быть результатами предшествующих арифметических операций и могут содержать в различных комбинациях и все три вида ошибок.

Вышеприведенные формулы дают выражение ошибки результата каждого из четырех арифметических действий как функции от $\bar{x}$, $\bar{y}$, e_x, e_y, ошибка округления в данном арифметическом действии при этом не учиты-

вается. Если же в дальнейшем необходимо будет подсчитать, как распространяется в последующих арифметических операциях ошибка этого результата, то необходимо к вычисленной по одной из четырех формул ошибке результата прибавить отдельно ошибку округления.

Достоверность результатов вычислительного эксперимента

Поскольку все явления в природе взаимосвязанны, в принципе невозможно математически точно описать никакой реальный процесс. Однако анализ влияния различных факторов на погрешность решения может позволить получить описание процесса с допустимой погрешностью. Представление о требуемой окончательной точности результата определяет критерий его достоверности, который формируется на основе следующих соображений. Во-первых, при более детальном подходе к изучению задачи нередко оказывается, что слишком высокая точность не нужна в силу неустранимой погрешности исходных данных. Во-вторых, математическая модель может быть настолько грубой, что требовать высокую точность результата бессмысленно. Кроме того, заказчика может интересовать не количественный, а качественный результат, например такого типа: будет ли работать данное устройство в заданном режиме или нет.

Показателем точности вычислений является величина относительной погрешности. Общепринято считать результат численного эксперимента достоверным, если его относительная погрешность не превышает 5 %. Однако в зависимости от особенностей математической модели и методов получения информации требования к точности результатов могут быть снижены.

При моделировании случайных процессов и расчете их параметров наряду с систематическими погрешностями, описанными выше, возникают случайные ошибки. Их появление обусловлено рядом причин, действие которых неодинаково в каждом опыте и не может быть полностью учтено. Желая получить большую точность результата, нужно придерживаться следующих правил.

Если систематическая ошибка является определяющей, т. е. ее величина существенно больше величины случайной ошибки, то достаточно выполнить численный эксперимент один раз. Если определяющей будет случайная ошибка, то следует произвести несколько численных экспериментов и взять среднее арифметическое их результатов в качестве приближенного значения. Число экспериментов целесообразно выбирать таким, чтобы случайная ошибка среднего арифметического была меньше систематической ошибки и последняя определяла окончательную ошибку результата.

О надежности результата, содержащего случайную ошибку, судят по оценке среднего квадратического отклонения и доверительному интервалу для математического ожидания (точного значения).

Оптимальный выбор численного метода

Наличие большого количества методов вызвано развитием теории и практики решения прикладных задач. Многие алгоритмы возникли как варианты предшествующих методов, отличаясь от них формой записи, изменением порядка вычислений, что способствовало уменьшению влияния погрешности округлений при расчетах. Вместе с этим развитие вычислительной техники и теории численных методов приводит к непрерывному пересмотру и сокращению совокупности применяемых методов.

Некоторые методы вышли из употребления из-за увеличения разрядности чисел в современных ЭВМ. Из-за этого оказалась несущественной зависимость вычислительной погрешности от последовательности арифметических операций. В результате в практике вычислений постепенно закрепились простейшие по форме методы. Кроме того, усложнение модели задачи и необходимость уменьшения погрешности метода, как правило, требуют существенного роста числа выполняемых арифметических операций. Повышение разрядности ЭВМ для многих методов способствует появлению недопустимо большого значения вычислительной погрешности (так называемой *неустойчивости*). Поэтому при повышении требований к точности результата многие методы, теоретически применимые, становятся неэффективными с точки зрения практической реализации.

Существенную информацию о выбранном приближенном методе дают условия и оценка скорости сходимости. Прежде всего, требования, которые приходится накладывать для обеспечения сходимости на исходные данные, показывают область применимости метода. Часто условия сходимости включают в себя в явном виде требования к начальному приближению. Наконец, анализ скорости сходимости дает полезную количественную и качественную характеристику изучаемого метода оптимизации.

В то же время реальный вычислительный процесс не может быть бесконечным. Кроме того, в ряде случаев условия сходимости трудно проверяются. Поэтому при выборе подходящего метода решения реальных задач приходится руководствоваться как здравым смыслом, опытом, интуицией, так и результатами численных экспериментов. Также необходимо учитывать погрешность исходных данных.

Контрольные вопросы и задания

1. Дайте понятие идентификации в широком и узком смысле.
2. Опишите структурную схему процесса идентификации.
3. Что понимают под структурной идентификацией?
4. Перечислите методы структурной идентификации и дайте их краткое описание.
5. В чем состоит суть метода параметрической идентификации?
6. Охарактеризуйте особенности идентификации стохастических и динамических моделей.

7. Что является критерием идентичности модели и объекта?

8. Что такое адаптивная и неадаптивная идентификация?

9. Что является предметом структурной идентификации?

10. Какие задачи необходимо решить при выборе структуры объекта?

11. Какова цель параметрической идентификации?

12. Что такое функция локальной невязки?

13. Какие критерии могут быть использованы в качестве суммарной невязки?

14. При каком значении относительной невязки модель считается адекватной?

15. Перечислите источники возникновения и распространения погрешностей.

ТЕМА 6. ПРИМЕРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Лекция 15. Моделирование процесса обжига молибденового концентрата

План лекции

1. Описание процесса.
2. Математическая модель.

Описание процесса

Объектом моделирования является процесс обжига молибденового концентрата в реакционном пространстве печи.

Концентрат непрерывным потоком $Ф_к$ (рис. 15.1) подается в ванну печи. Под напором воздушного потока $Ф_в$ в ванне создается псевдосжиженный (кипящий) слой, обеспечивающий высокую степень контакта между частицами концентрата и кислородом. Экзотермическая реакция протекает интенсивно, причем горение поддерживается за счет выделяющегося тепла. Твердые и газообразные продукты обжига в виде огарка $Ф_{ог}$, пыли $Ф_п$ и сернистого ангидрида $Ф_г$ непрерывно выводятся из печи для последующей переработки.

Управление процессом может осуществляться за счет изменения расхода воздуха, состава и количества подаваемой шихты или за счет изменений условий теплоотвода.

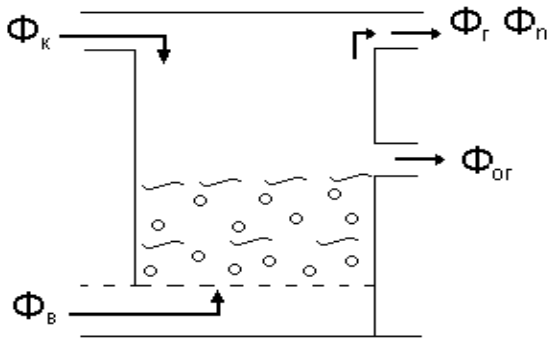

Рис. 15.1. Схема обжига в печи КС

Непрерывный процесс обжига молибденового концентрата в кипящем слое (КС) проводят автоматически; измельченный концентрат с определенным содержанием MoS_2 подают в печь с помощью питателя. Одновременно снизу поступает воздух, обеспечивающий кипение концентрата и участвующий в химической реакции обжига. Огарок выводится через порог печи. Тепло реакции используется для нагревания входных потоков шихты и воздуха до температуры процесса. Часть тепла теряется через кладку печи.

Химизм процесса описывается следующим стехиометрическим уравнением:

$$MoS_2 + 3{,}5O_2 \rightarrow MoO_3 + 2SO_2$$

$$A_1 + a_2 A_2 \xrightarrow{K} B_1 b_2 B_2,$$

где a_2, b_2 – стехиометрические коэффициенты.

При составлении модели принимаются следующие допущения. Процесс считается псевдогомогенным и характеризуется взаимодействием реагентов, находящихся в двух не смешивающихся между собой фазах (потоках). Предполагается также, что твердые продукты реакции не оказывают тормозящего влияния на скорость реакции, гидродинамические условия и объем реакционного пространства аппарата не изменяются. При этом градиенты концентраций и температуры в пределах одной фазы отсутствуют.

Скорость процесса определяется скоростью химической реакции $V_р$, пропорциональной константе скорости реакции. Уравнение скорости химической реакции имеет вид

$$V_ð = K(T)C_{11}C_{21} \quad [\text{кмоль/(м}^3\cdot\text{ч)}],$$

где $K(T)$ – константа скорости реакции,

$$K(T) = K_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right);$$

C_{11}, C_{21} – массовая концентрация MoS_2 и объемная концентрация кислорода в реакционном пространстве аппарата; K_0 – предэкспоненциальный множитель; E – энергия активации; R – универсальная газовая постоянная; T – температура в реакционном пространстве.

Математическая модель

Математическая модель процесса включает уравнения *материального баланса*:

$$\frac{d}{dt}\left[V(1-\varepsilon)C_{11}\right] = q_{10}C_{10} - q_{11}C_{11} - K(T)C_{11}C_{21}V\rho(1-\varepsilon), \qquad (15.1)$$

$$\frac{d}{dt}\left[V\varepsilon C_{21}\right] = q_{20}C_{20} - q_{21}C_{21} - a_{20} + K(T)C_{11}C_{21}V\rho(1-\varepsilon) \qquad (15.2)$$

и уравнение *теплового баланса*:

$$\frac{d}{dt}\left[V\rho(1-\varepsilon)C_рT\right] = -K(T)C_{11}C_{21}V\rho(1-\varepsilon)\Delta H +$$
$$+q_{10}C_{р_1}T_{10} + q_{20}C_2T_{20} - \left(q_{11}C_{р_1} + q_{21}C_{V_2}\right)T - hF\left(T - T_{C_0}\right), \qquad (15.3)$$

где V – объем реакционного пространства печи; ρ – насыпная масса шихты и огарка; ε – порозность слоя; a_{20} – коэффициент согласования MoS_2 и O_2, вступивших в реакцию; $C_{р_1}$ – массовая теплоемкость кипящего слоя; C_{V_2} – объемная теплоемкость воздуха и реакционного слоя; h – коэффициент теп-

лопередачи от кипящего слоя к окружающей среде; F – поверхность теплопотерь (кладка печи на уровне кипящего слоя); ΔH – тепловой эффект реакции; q_{10}, q_{20} – входные потоки шихты (массовый) и воздуха (объемный); C_{10}, C_{20} – безразмерные концентрации MoS_2 (массовая) и кислорода (объемная) во входных потоках; T_{10}, T_{20}, T_{C_0} – температура потока шихты, дутья и окружающей среды соответственно; C_{11}, C_{21} – концентрации MoS_2 и O_2 в реакционном пространстве; q_{11}, q_{21} – выходные потоки MoS_2 (массовый) и реакционных газов (объемный).

Внутренними параметрами модели являются V, ρ, ε, a_{20}, C_{p_1}, C_{V_2}, h, F, ΔH. Входные переменные модели – q_{10}, q_{20}, C_{10}, C_{20}, T_{10}, T_{20}, T_{C_0}. Выходные параметры модели – C_{11}, C_{21}, q_{11}, q_{21}.

Уравнения (15.1), (15.2) описывают материальный баланс реакционного пространства аппарата по массе MoS_2 в твердой фазе с учетом массового потока шихты; второе уравнение является уравнением материального баланса реакционного пространства аппарата, занятого газовой фазой, по объему содержащегося кислорода в объемном потоке воздуха.

В уравнении теплового баланса учитывается тепло, затрачиваемое на разогрев твердой и газовой фаз; тепло, поступающее с шихтовой массой и воздухом дутья, и теплопотери в окружающую среду. Скорость изменения температуры реакционного пространства аппарата в твердой фазе определяется разностью теплового потока реакции горения и потоков расхода тепла.

В качестве модели процесса рассматривается система нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, в которую введены дополнительные упрощающие предположения.

Если кислород воздуха дутья подается в значительном избытке по отношению к количеству кислорода, требующегося для окисления MoS_2, то процесс можно считать квазистационарным по газовой фазе с постоянной концентрацией кислорода в отходящих газах (C_{21} = 0,1483). В этом случае система (15.1)–(15.3) упрощается и в терминах удельных потоков реагентов и параметров модели имеет вид

$$\frac{dC_1}{dt} = \frac{1}{\tau_1}\left(C_1^0 - C_1\right) - K(T)C_1,$$

$$\frac{dT}{dt} = K_y K_2 K(T)C - \frac{1}{\tau_2}(T - T_{10}) - \frac{\alpha}{\tau_2}(T - T_{10}),$$

где τ_1 – постоянная времени химической части процесса; τ_2 – постоянная времени теплового процесса,

$$\tau_1 = \frac{V}{q_1^0}, \qquad \tau_2 = \frac{V_\rho C_p}{q_1^0 \rho_1 C_{p_1}};$$

q_1^0, q_2^0 – удаленные потоки реагентов,

$$q_1^0 = \frac{q_{10}}{V\rho(1-\varepsilon)}; \qquad q_2^0 = q_{20}V\varepsilon;$$

K_y – коэффициент передачи тепла,

$$K_y = -V\Delta H\left(q_1^0 - p_1 C_{p_1}\right);$$

α – безразмерный параметр теплоотвода, равный отношению водяных эквивалентов газообразного и твердого потоков реагентов,

$$\alpha = \frac{q_2^0 \rho_0 C_{p0}}{q_1^0 \rho_0 C_{p1}};$$

C_1^0 – массовая концентрация MoS_2 во входном потоке шихты, $C_1^0 = \rho C_{10}$; C_1 – массовая концентрация MoS_2 в огарке, $C_1 = \rho C_{11}$;

В качестве управляющих и возмущающих воздействий в модели рассматриваются изменения следующих входных параметров:

- ♦ $U_1 = \Delta C_1^0$ – изменение концентрации MoS_2 в шихте;
- ♦ $U_2 = \dfrac{\Delta\alpha}{\alpha}$ – удельное изменение условий теплоотвода;
- ♦ $U_3 = \Delta T_{C_0}$ – изменение температуры окружающей среды;
- ♦ $U_4 = \Delta T_{x_0}$ – изменение температуры хладагента (T_{x_0} – температура хладагента);
- ♦ $U_5 = \dfrac{\Delta q_{10}}{q_{10}}$ – удельное изменение расхода шихты.

Модель процесса с учетом управляющих воздействий принимает вид

$$\frac{dC_1}{dt} = \frac{1+U_5}{\tau_1}\left[C_1^0\left(1+U_1\right) - C_1\right] - K\left(T\right)C_1; \qquad (15.4)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{K_y}{\tau_2}K\left(T\right)C_1 - \frac{1+U_3}{\tau_2}\left(T - T_{10} - U_3\right) - \frac{\alpha\left(1+U_2\right)}{\tau_2}\left(T - T_{20} - U_4\right); \qquad (15.5)$$

$$K\left(T\right) = K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \qquad (15.6)$$

Для определения C_1 и T к этой системе уравнений необходимо добавить начальные условия:

$$C_1\left(0\right) = C_{1S}, \quad T\left(0\right) = T_S, \qquad (15.7)$$

где C_{1S}, T_S – значения параметров в стационарном режиме.

Перепишем задачу (15.4)– (15.7), вводя обозначения

$$Y_1 = C_1, \qquad Y_2 = T, \qquad \dot{Y}_1 = \frac{dC_1}{dt}, \qquad \dot{Y}_2 = \frac{dT}{dt}. \tag{15.8}$$

Получим систему уравнений

$$\dot{Y}_1 = \frac{C_1^0(1-U_S)(1+U_1)-Y_1}{\tau_1} - K(T)Y_1; \tag{15.9}$$

$$\dot{Y}_2 = \frac{K_y K(T) Y}{\tau_1} - \frac{\alpha(1+U_2)(Y_2-T_{20}-U_4)}{\tau_2} - \frac{\alpha(1+U_2)(Y_2-T_{20}-U_4)}{\tau_2}; \tag{15.10}$$

$$K(T) = K_0 \exp\left(\frac{-E}{RY_2}\right) \tag{15.11}$$

с начальными условиями

$$Y_1(0) = C_{1S}, \quad Y_2(0) = T_S. \tag{15.12}$$

Для регулирования температуры в модель включается уравнение пропорционального регулятора при выборе в качестве управляющего воздействия одного из входных параметров модели.

При включении регулятора процесс стабилизируется, т.к. увеличение температуры (под действием возмущений) будет вызывать пропорциональное уменьшение потока шихты. Идентификация модели (по конструктивным особенностям реального аппарата, составу шихты, типу холодильника) осуществляется подстройкой модели по экспериментальным данным с помощью ее параметров: коэффициентов передачи тепловой части, предэкспоненциального множителя и безразмерного параметра теплоотвода.

Лекция 16. Моделирование процесса обжига катодов алюминиевого электролизера

План лекции

1. Описание процесса.
2. Математическая модель.

Описание процесса

Процесс обжига подин – это заключительный этап при проведении капитального ремонта алюминиевых электролизеров, и качество его проведения является одним из основных факторов, влияющих на срок службы электролизеров.

Для повышения качества процесса обжига был создан тренажерный комплекс АСУ процессом обжига подин электролизеров. Обучение на тре-

нажере позволяет вести отработку практических навыков в тесной увязке с теоретическими представлениями об объекте, что дает возможность обучаемому формировать системный образ управляемого объекта и принимать более обоснованные управляющие решения.

Данная обучающая система реализована на базе вычислительной техники типа IBM PC. Ее основу составляет математическая модель пламенного процесса обжига, которая описывает тепловые процессы, протекающие при пламенном обжиге подины, и позволяет моделировать и прогнозировать процесс обжига.

Срок службы алюминиевого электролизера определяется в основном продолжительностью эксплуатации катодного устройства. Долговечность катода обусловлена технологическим режимом процесса электролиза, а его надежность, при условии постоянства конструкции катода и качества материалов катода, зависит от способа и режима обжига.

Переходный период от вновь смонтированного катода, имеющего обычную комнатную температуру, до горячей «ванны» называется *периодом обжига*. В процессе нагрева катода происходит коксование набивных участков катода, формируется монолитная угольная футеровка, происходит обжиг анода в электролизерах с самообжигающимся анодом.

Одним из основных неблагоприятных факторов, приводящих к появлению трещин в подовых блоках и межблочных швах, возникновению щелей между блоками и набивной массой швов, является неравномерное распределение температуры при нагреве подины в процессе обжига. Для создания монолитной конструкции подины без трещин и щелей необходимо в процессе обжига обеспечить постепенный нагрев и равномерное распределение температуры по объему катода, способствующие качественному коксованию набивной массы. К технологии процесса обжига подин электролизеров после капитального ремонта предъявляются следующие требования.

1. Температура поверхности подины электролизера в конце обжига в целях снижения внедрения натрия и исключения термоудара при пуске должна достигать 950–1 100 ^{o}C, под угольными блоками и в периферийном шве подины быть не ниже 450–460 ^{o}C.

2. Процесс обжига должен обеспечивать: постепенный подъем температуры, равномерное распределение температуры по объему катода, качественное коксование набивных швов.

3. Градиенты температур и возникающие термические напряжения не должны превышать допустимых значений.

4. В процессе обжига подины должны отсутствовать резкие теплосмены, приводящие к разрушению подины.

Идеальная процедура обжига повышает температуру без создания экстремальных температурных градиентов, уменьшает вероятность повреждения материалов подины, обеспечивает быстрый выход ванны на рабочий режим.

Существует несколько методов обжига ванны перед электролизом. К наиболее распространенным методам обжига (табл. 16.1) относятся:

♦ обжиг во время формировки анода (анод Содерберга);

♦ обжиг сопротивлением (коксовая постель) – с полным током серии или с шунтом;

♦ обжиг жидким металлом;

♦ обжиг жидким электролитом (холодный пуск);

♦ термонагрев – пламенем газовых горелок или мазутных форсунок, электрическими съёмными панелями.

Таблица 16.1

Преимущества и недостатки методов предварительного нагрева

Метод обжига	Преимущества	Недостатки
Обжиг жидким металлом	1. Технологичность. 2. Более равномерное распределение конечных изотерм. 3. Меньшие конечные температурные градиенты по катоду. 4. Уменьшенное окисление материала подины	1. Начальный очень быстрый подъем температуры поверхности катода и подовой массы. 2. Необходимость более тщательной подгонки контакта анод–металл. 3. Возможное внедрение алюминия в подину. 4. Неоднородное распределение тока. 5. Низкая средняя температура в конце обжига
Обжиг сопротивлением	1. Малое время обжига. 2. Легкий контроль при использовании шунтов. 3. Дешевый источник тепловой энергии	1. Быстрое и локализованное увеличение поверхностной температуры. 2. Неравномерное распределение температуры на поверхности и по всему катоду. 3. Высокие температурные градиенты во время обжига. 4. Неоднородное распределение тока
Термический обжиг (мазут или газ)	1. Более легкое программирование обжига. 2. Меньшие разницы температур по катоду и минимальные термические расширения. 3. Более однородное распределение тока. 4. Однородная и контролируемая скорость подъема температуры подины	1. Более сложный и длительный процесс (по сравнению с обжигом сопротивлением). 2. Более длительный начальный анодный эффект. 3. Более сложный технологический контроль. 4. Необходимость укрытия подины для исключения окисления

Обжиг сопротивлением с полным током серии – это достаточно удобный способ нагрева катода, однако при таком обжиге трудно обеспечить необходимый контроль за скоростью нагрева и распределением температур по подине. Метод наиболее целесообразно применять для ванн с обожженными анодами, но может быть использован и для электролизеров Содерберга.

В ваннах с обожженными анодами этот тип обжига осуществляется путем индивидуальной установки и регулировки каждого анодного блока. Тело соприкосновения может быть уложено в виде слоя либо в виде конусов

кокса под каждым анодным блоком. Аноды опускаются на постель кальцинированного кокса путем ослабления контактов. Обжиг на токе серии может занять до 24 ч, в зависимости от размера ванны и тока серии. Когда желаемая температура достигнута, кокс удаляют, расплавленный электролит заливают в ванну и аноды поднимают для начала электролиза.

В ваннах Содерберга с ограниченными возможностями в маневрировании анодом очень трудно достигнуть надлежащего распределения тока по всей площади анода. Вследствие магнитодинамических движений жидкого металла поверхность анода Содерберга бывает недостаточно ровной, и неодинаковое контактное сопротивление может привести к неравномерному распределению тока в катоде. В экстремальных случаях при неравномерном распределении тока, когда практически вся токовая нагрузка проходит через ограниченную часть катода, блюмсы расплавляются в пазах блоков, а избыточные температурные градиенты вызывают разрывы в подовых блоках. Поэтому необходимо шлифовать контактную поверхность анода и добиваться однородного распределения сопротивления кокса между анодом и катодом, используя кокс одного гранулометрического состава.

Многочисленные исследования температурного поля при нагреве электрическим током показали, что градиент температур между центральной зоной и периферией – от 400 до 800 °С, температура блоков в зоне периферийного шва – от 200 до 250 °С, в то же время скорость роста температуры отдельных участков имеет большие отклонения (от 6–30 до 120–130 °С/ч). Пример катодных изотерм после нагрева на сопротивлении ванны с обожженными анодами показан на рис. 16.1.

Обжиг сопротивлением с шунтом имеет то преимущество, что через ванну проходит ток, меньший, чем ток серии, соответственно, уменьшаются температурные градиенты в катоде во время нагрева и снижается риск разрушения подовых материалов, что особенно важно в начальный период обжига. Числом шунтов, которые подсоединяются к ванне, начиная от старта процесса обжига, определяется число ступеней обжига. С пятью шунтами ток на ванне может принимать 6 значений, и, соответственно, требуемое увеличение температуры осуществляется регулированием интервалов между удалением шунтов.

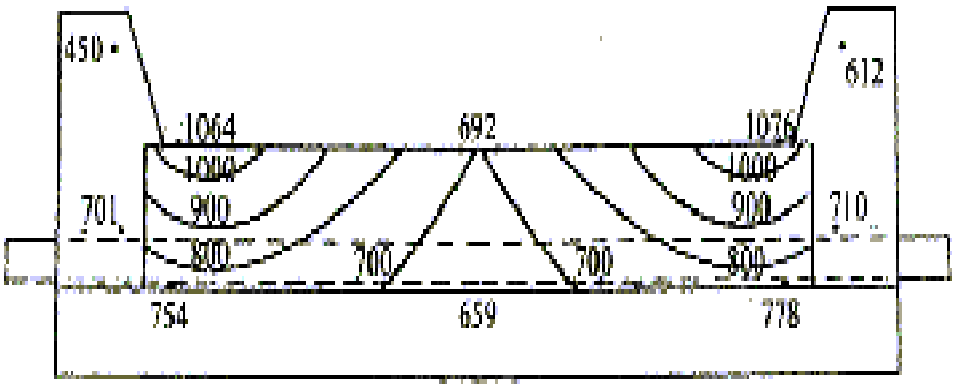

Рис. 16.1. Катодные изотермы

Обжиг на жидком металле с точки зрения выделения летучих и трудозатрат является очень удобным методом пуска ванн. Процедура достаточно легкая и несложная, анод приближают к поверхности катода и в ванну заливают несколько тонн жидкого металла. После подсоединения короткозамкнутой ванны в серию аноды поднимают в положение, где электрическое контактное сопротивление между поверхностью анода и жидким металлом становится достаточно большим, чтобы увеличивать температуру ванны. Путем регулирования этого контактного сопротивления скорость нагрева можно контролировать. Если не считать начального температурного удара и пламени, появляющегося на поверхности подовой массы, когда заливается жидкий металл, этот тип обжига дает одинаковое температурное распределение по катоду. Однако для получения однородной температуры во время обжига необходимо очень точно подогнать контакт анод–металл, обеспечивающий достаточное падение напряжения в металле. На практике малое число контактных точек приводит к неравномерному распределению тока и появлению в ряде мест катода горячих точек, тогда как в других участках металл может замерзать. Катодное распределение тока становится неоднородным, что обуславливает возможные разрушения в катоде.

При обжиге на металле возможны и другие серьезные недостатки. При использовании алюминия в качестве электропроводящего слоя между анодом и катодом в процессе обжига не удается поднять температуру выше 700–750 ^{o}C. Жидкий алюминий имеет малую вязкость и температуру плавления, равную 660 ^{o}C, и может внедряться в глубь подины перед затвердеванием. Как большие, так и малые трещины быстро заполняются расплавленным металлом благодаря гидростатическому давлению его верхних слоев. Металл может реагировать с изоляцией и разрушать ее сохранность или создавать тепловой шунт, который будет изгибать изотерму внутрь подины.

Жидкий электролит (холодный пуск). Строго говоря, пуск ванны непосредственно на жидком электролите не является процедурой предварительного обжига, поскольку электролит заливается прямо в холодную ванну с последующим немедленным включением тока. Анод, который перед заливкой покоится на катоде, поднимается, и начинается непосредственно электролиз. Пусковая анодная вспышка может иметь напряжение 30–40 В и длиться до 2 ч. Холодный пуск может осуществляться как для ванн с обожженными анодами, так и для ванн Содерберга. Модификация этого метода – установка горячих анодов, взятых из ванн, находящихся в работе, немедленно перед добавкой электролита, что приводит к некоторому увеличению температуры катодных блоков и исключает появление трещин в аноде из-за термического удара при пуске.

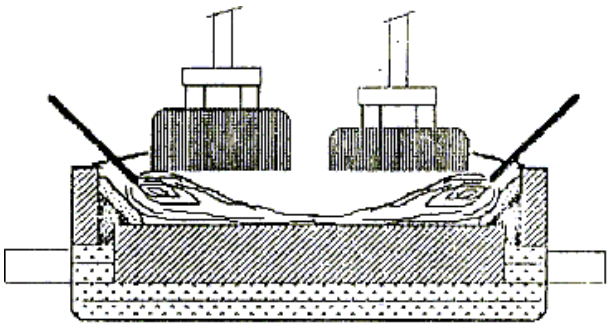

Рис. 16.2. Пламенный обжиг мазутными форсунками или газовыми горелками

Пламенный обжиг (рис. 16.2). Наиболее распространенным и перспективным является пламенный обжиг газовыми горелками или нефтяными форсунками. Обжиг ванн горелками обеспечивает более оптимальное распределение температур в катоде и лучший метод контроля. Наиболее распространённый способ состоит в том, что пламя определённого количества газовых горелок или нефтяных форсунок направляется на катодную поверхность.

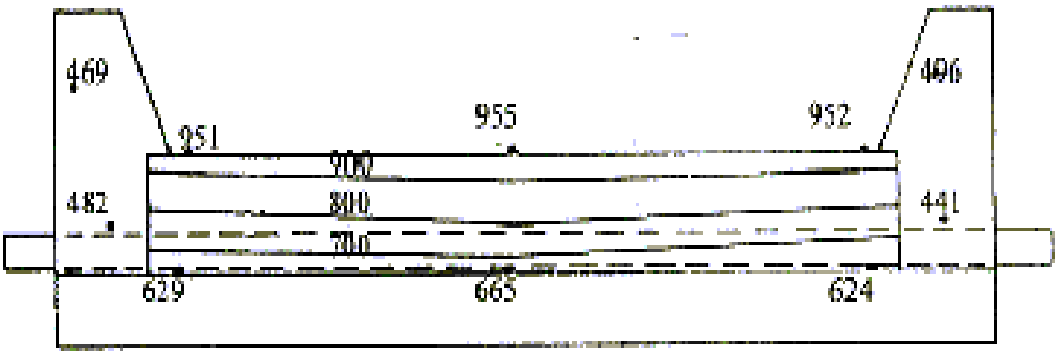

Рис. 16.3. Катодные изотермы после пламенного обжига

Метод приемлем как для ванн с самообжигающимся анодом, так и для ванн Содерберга. Для уменьшения обгорания анодов и углеродистой футеровки во время нагрева пространство между поверхностью анода и катода необходимо экранировать от воздуха и использовать восстановительное пламя. При пламенном обжиге можно достигнуть равномерного распределения температур (рис. 16.3), однако время обжига обычно больше, чем при обжиге сопротивлением.

Предварительное нагревание с использованием горелок обеспечивает однородную скорость подъема температур, улучшенное распределение температуры в катоде и вызывает минимум термических напряжений, уменьшает течи металла и электролита в катод во время пуска. Частоты разрушений для ванн зрелого возраста при использовании обжига на горелках меньше в 2 раза по сравнению с обжигом сопротивлением для ванн того же типа.

Математическая модель

Математическая модель включает систему уравнений

$$\frac{dT}{dt}=\frac{A_2}{A_1}B(t)-\frac{A_3}{A_1}\left(T(t)-T_0\right)-\frac{A_4}{A_1}T_{\text{ух}}B(t)\ , \qquad (16.1)$$

$$\frac{dT_{\text{âí óòð}}}{dt}=a\frac{\partial^2 T_{\text{âí óòð}}}{\partial x^2}, \qquad 0<x<L, \quad 0<t<+\infty, \qquad (16.2)$$

граничные условия

$$T_{\text{âí óòð}}(0,t)=T_{\text{ï î â}}(t), \quad 0\le t<+\infty, \qquad (16.3)$$

$$\lambda\frac{\partial T_{\text{âí óòð}}}{\partial x}(L,t)=\alpha\cdot\left[20-T_{\text{âí óòð}}(L,t)\right], \qquad 0\le t<+\infty, \qquad (16.4)$$

и начальные данные

$$T_{\text{âí óòð}}(x,0)=20\,, \quad 0\le x\le L, \qquad (16.5)$$

где T – среднеобъемная температура, °С; T_0 – начальная температура конструкционных элементов, °С; $T_{\text{ух}}$ – температура уходящих газов, °С; $B(t)$ – количество подаваемого топлива, кг/ч; t – время, ч; A_1, A_2, A_3, A_4, – теплофизические коэффициенты, зависящие от конструкции электролизера; a – коэффициент температуропроводности углеродистого материала, $a = \lambda/(c\rho)$; c – теплоемкость, Дж/(кг·°С); ρ – плотность, кг/м; λ – теплопроводность, Вт/(м·°С); α – коэффициент теплоотдачи от нижней поверхности подового блока Вт/(м·°С); $T_{\text{внутр}}$ – распределение температуры по толщине подового блока, °С; $T_{\text{пов}}$ – температура на поверхности подины, °С.

Уравнение (16.1) позволяет находить среднеобъемную температуру подины в зависимости от подачи топлива или расход топлива, необходимый для достижения определенной среднеобъемной температуры подины.

Уравнение (16.2) описывает перенос тепла внутри тела и устанавливает связи между временными и пространственными изменениями температуры тела $T_{\text{внутр}}(x, t)$. В постановке задачи условно принимается равномерное распределение температуры по поверхности подины, поскольку пламенный обжиг обеспечивает наиболее равномерное распределение температуры.

Граничное условие первого рода (16.3) выбрано на основании того, что существующие системы автоматизации процесса обжига обеспечивают изменение температуры на поверхности подины в соответствии с заданным (запрограммированным) температурным режимом. На конце $x = L$ задано граничное условие третьего рода (16.4), т.к. рассматривается только подовый блок без проведения анализа распределения температуры в слоях теплоизоляции. Для нахождения коэффициента теплоотдачи от нижней поверхности подового блока следует проводить идентификацию модели к реальному объ-

екту на основании эмпирических данных или определять этот коэффициент экспериментально для каждого типа электролизера.

Уравнения

$$\sigma_{\text{ï .á}\perp} = \frac{\text{Å}_{\text{ï .á}} \cdot \beta_{\text{ï .á}}}{1-\nu_{\text{ï .á}}}\left(\text{Ò}_{\text{âí óòð}}(0,t) - \text{Ò}_{\text{âí óòð}}(L,t)\right),$$

$$\sigma_{\text{ï .á}||} = \frac{\text{Å}_{\text{ï .á}} \cdot \beta_{\text{ï .á}}}{\nu_{\text{ï .á}}}\left(\text{Ò}_{\text{âí óòð}}(0,t) - \text{Ò}_{\text{âí óòð}}(L,t)\right),$$

$$\sigma_{\text{ø âà}} = \frac{\text{Å}_{\text{ø âà}} \cdot \beta_{\text{ø âà}}(\text{Ò}_{\text{ñð}})}{1-\nu_{\text{ø âà}}}\left(\text{Ò}_{\text{âí óòð}}(0,t) - \text{Ò}_{\text{âí óòð}}(L,t)\right)$$

позволяют рассчитывать термические напряжения, возникающие при нагреве в блоке в поперечном $\sigma_{\text{ï .á}\perp}(t)$, продольном $\sigma_{\text{ï .á}||}(t)$ сечении и в шве $\sigma_{\text{ø âà}}(t)$ соответственно. Здесь $\beta_{\text{п.б}}$, $\beta_{\text{шва}}(T_{\text{ср}})$ – коэффициенты линейного расширения блока и шва; $T_{\text{ср}}$ – усредненная температура катода; $E_{\text{п.б}}$, $E_{\text{шва}}$ – модуль упругости подового блока и шва, МПа; $\nu_{\text{п.б}}$, $\nu_{\text{шва}}$ – коэффициент Пуассона подового блока и шва.

Приведенная математическая модель является идеализированной и рассматривает нагрев одного многослойного бруса (подового блока).

Задача идентификации модели сводится к нахождению переменных λ, α и c, которые обеспечивают минимум критерии

$$J = \int_0^{48} \left[T^{\text{î áúåêò}}_{\text{âí óòð}}(t,L) - T_{\text{âí óòð}}(t,L)\right]^2 dt,$$

где $T^{\text{î áúåêò}}_{\text{âí óòð}}(t, L)$– функция изменения температуры под подовыми блоками, аппроксимированная на основании экспериментальных данных; $T_{\text{âí óòð}}(t, L)$ – решение задачи (16.1)–(16.5).

Задача минимизации критерия J решается методом Гаусса-Зейделя.

Лекция 17. примеры решения оптимизационных задач в металлургии

План лекции

1. Математическая модель процесса рудно-термической плавки.
2. Оптимизация содержания никеля в отвальных шлаках.
3. Оптимизация удельного расхода электроэнергии.

Математическая модель процесса рудно-термической плавки

На предприятиях никелевой промышленности в основном перерабатываются сульфидные медно-никелевые руды и концентраты, а также окисленные никелевые руды. Высокие температуры в зоне плавления шихты позволяют перерабатывать в электрических печах металлосодержащие материалы практически любого состава. Однако для получения удовлетворительных технико-экономических показателей шихта, поступающая в плавку, должна отвечать следующим требованиям: иметь определенную крупность и содержание серы, минимальную влажность, быть постоянной по составу шлакообразующих компонентов. Этим требованиям в значительной степени отвечает агломерат, поступающий на плавку.

Одним из основных процессов технологической схемы получения никеля из медно-никелевых сульфидных руд и концентратов является рудно-термическая плавка медно-никелевого сырья. Показатели процесса плавки в значительной степени определяют технико-экономические показатели всего производства в целом. Работа рудно-термических печей при плавке медно-никелевого сульфидного сырья характеризуется следующими технико-экономическими показателями:

Удельный проплав по шихте, т/м^2 ·сут	8–10
Производительность по штейну, т/ч	15–30
Удельный расход электроэнергии на 1 т шихты, кВт·ч/т	570–750
Извлечение в штейн, %:	
никеля	94–97
меди	94–96
кобальта	75–80
Содержание цветных металлов в отвальных шлаках, %:	
никеля	0,07–0,12
меди	0,08–0,15
кобальта	0,06–0,11

Плавка медно-никелевого сырья характеризуется высоким выходом шлаков, с которыми теряется большое количество цветных металлов. Так как затраты на сырье при электроплавке сульфидного медно-никелевого сырья составляют значительную часть, то проблема снижения потерь цветных металлов (Ni, Co, Cu) с отвальными шлаками является одной из главных в металлургии никеля. Основные продукты плавки – шлак (отвальный продукт) и штейн (используемый для дальнейшей технологической переработки). Разделение штейна и шлака происходит вследствие разности их плотности. Жидкие продукты плавки выпускают со стороны торцевых стенок печи. Кроме штейна и шлака при плавке образуются газы, состоящие из азота, кислорода, диоксидов серы и углерода (SO_2, CO_2) и паров воды. Газы образуются в результате термической диссоциации высших сульфидов и карбонатов и горения углеродистых материалов шихты и электродов. Теоретическое количество технологических газов электроплавки составляет не более 120 м^3/т шихты, но на практике за счет подсосов воздуха достигает 1 100–1 200 м^3/т шихты.

Основные процессы плавки

Основными процессами, протекающими при электроплавке руд и концентратов, являются: физико-химические превращения исходных материалов; преобразование электрической энергии в тепловую; движение твердых и расплавленных материалов и продуктов; теплообмен в различных зонах печи; движение газов.

Физико-химические превращения, протекающие при электроплавке руд и концентратов, имеют свои особенности, отличающие электроплавку от других процессов. Во-первых, все превращения шихтовых материалов происходят в основном в ванне печи при непосредственном весьма активном участии расплавленного шлака. Расплавленная шлаковая масса взаимодействует с твердой шихтой одновременно с нагревом и плавлением шихты.

Во-вторых, при электроплавке осуществляется энергичное восстановление оксидов шлака углеродистым восстановителем, вводимым в твердую шихту. Физической основой этого процесса является конвекционное движение шлака, обеспечивающее непрерывное прохождение массы шлака через так называемый скользящий контакт с восстановителем. Усиленное восстановление оксидов, находящихся в шлаках, совместно с интенсивным перемещением шлаков с каплями сульфидов штейна, обусловлено значительным перегревом всей массы шлака и создает условия для глубокой доработки шлаков в электропечах.

Сульфиды меди, никеля, кобальта и железа взаимно растворяются и образуют основной продукт плавки – штейн. В штейне также растворяются благородные металлы и магнетит. Основными реакциями штейнообразования являются следующие:

$$Cu_2O + FeS = Cu_2S + FeO$$

$$3NiO + 3FeS = Ni_3S_2 + 3FeO + 0{,}5S_2$$

$$CoO + FeS = CoS + FeO$$

Штейн имеет следующий химический состав, %: 13,8–15,5 Ni; 8,4–9,7 Cu; 0,43–0,49 Co; 46,6–51,0 Fe; 7–9 Fe (металлическое); 24,8–25,2 S.

Окисное железо и другие основные оксиды (CaO, MgO), вступая во взаимодействие с кремнезёмом SiO_2, образуют силикаты типа $m\ MeO{\cdot}SiO_2$, которые, смешиваясь в расплавленном состоянии, образуют другой продукт электроплавки – шлак. Основными реакциями шлакообразования являются

$$10Fe_2O_3 + FeS = 7Fe_3O_4 + SO_2$$

$$CaO + SiO_2 = CaO{\cdot}SiO_2$$

Разделение шлака и штейна в печи происходит вследствие разности их плотностей, которые составляют ≈2,9 т/м^3 для шлака и ≈5 т/м^3 для штейна.

При добавке в шихту углеродистого восстановителя (угольный штыб) шлаки обедняются более эффективно. Взаимодействие оксидов шлака с углеродистым восстановителем может быть представлено следующими взаимосвязанными реакциями:

$$(MeO)_{шл} + CO = Me + CO_2$$

$$C + CO_2 = 2CO$$

При прохождении капелек металлизированного штейна через шлаковый слой восстановление оксидов цветных металлов металлическим железом штейна протекает по реакции

$$(MeO)_{шл} + Fe_{шл} = Me_{шл} + FeO_{шл}$$

Восстановленные металлы растворяются в штейне и, реагируя с сульфидами железа, переходят в сульфидную форму по уравнению

$$Me_{шт} + FeS_{шт} = MeS_{шт} + Fe_{шт}.$$

Итак, восстановление цветных металлов из шлака осуществляется как углеродистым восстановителем, так и металлическим железом.

Шлаки рудно-термических печей содержат, %: 41–75 SiO_2; 30–36 FeO; 10–20 MgO; 3–5 CaO; 5–12 Al_2O_3.

Кроме того, в шлаке содержится незначительное количество магнетита цветных металлов в сульфидной и окисленной формах. Содержание цветных металлов в шлаке зависит от состава шлака, штейна, их температуры, условий ведения технологического процесса и обычно составляет 0,06–0,11 % Ni, 0,08–0,13 % Cu, 0,04–0,08 % Co. Температура шлака в печи поддерживается на уровне 1 255–1 265 ^{o}C.

Преобразование электрической энергии в тепловую в РТП происходит как в шлаковом слое ванны, так и в переходном контакте электрод – шлак. Доля мощности, выделяемой в переходном контакте, уменьшается с увеличением заглубления электрода. В результате тепловыделения шлаковый состав разогревается, максимальный перегрев происходит вблизи электродов. Здесь же шлак наиболее насыщен газовыми пузырьками. Следовательно, возникает разность в плотностях слоев шлака, что приводит к его циркуляции в ванне электропечи. Токопроводящей частью ванны служит околоэлектродная зона, в которой верхние слои шлака имеют наибольшую температуру (1 359–1 450 ^{o}C), а нижние – наименьшую температуру, поэтому наиболее интенсивное плавление шихты происходит на поверхности шлака и шихтовых конусов, обращенных к электроду.

Анализ влияния основных режимных параметров на технологический процесс плавки в РТП

Анализ технологического процесса электроплавки медно-никелевого агломерата в рудно-термических печах показал, что данный процесс относится к взаимосвязанному технологическому процессу и характеризуется одновременным влиянием комплекса управляющих воздействий и случайных возмущений. Рассмотрим влияние основных управляющих воздействий на такие выходные параметры процесса, как производительность, удельный расход

электроэнергии, содержание цветных металлов в отвальных шлаках, выбросы вредных веществ в атмосферу и температура шлака, измеренная на выпуске. В качестве основных управляющих воздействий используются электрические параметры и загрузка шихты по отдельным составляющим. Выбор управляющих параметров обусловлен их весовым влиянием на процесс. При выборе управляемых (выходных) параметров использовали такие, которые характеризуют процесс с различных сторон, т.е. позволяют оценить технические, энергетические и экологические аспекты плавки медно-никелевого агломерата в РТП.

Одним из основных показателей электроплавки является удельный расход электроэнергии на 1 т шихты, зависящий преимущественно от её состава. Чем больше содержание в шихте пустой породы, включающей тугоплавкие компоненты, тем больше теплопотребление шихты и тем выше расход электроэнергии. Расход электроэнергии получается тем ниже, чем выше коэффициент загрузки трансформаторов и, соответственно, выше проплав печи. Для снижения расхода электроэнергии рационально загружать в электропечь шихту в горячем состоянии.

Большое значение для работы электропечи имеют электропроводность шлака и толщина его слоя в ванне печи. При работе на глубокой ванне можно увеличить подэлектродное сопротивление и, следовательно, напряжение вторичной обмотки трансформатора. Это очень выгодно для повышения мощности, подаваемой на печь, т.к. увеличивать силу тока сверх определенного максимума нельзя, поскольку это может вызвать перегрев обмоток трансформатора. Режим работы электропечи при высоком напряжении и минимальном значении силы тока является наиболее экономичным и позволяет снизить удельный расход электроэнергии на 1 т перерабатываемой шихты. Для уменьшения удельного расхода электроэнергии необходимо повысить электропроводность шлака, что может быть достигнуто за счет снижения содержания SiO_2 в шлаке и увеличения подачи углеродистого восстановителя.

Важным параметром, характеризующим эффективность электроплавки медно-никелевых руд и концентратов, является снижение потерь никеля, меди и кобальта с отвальными шлаками. При электроплавке принято рассматривать три вида потерь цветных металлов в шлаке: химические, физические и механические. При плавке сульфидных медно-никелевых руд и концентратов химические потери связаны с неполным сульфированием оксидов металлов. Физические потери обусловлены растворением в шлаке сульфидов. Механические потери возникают вследствие запутывания в шлаке мельчайших капель жидкого штейна.

На химические потери цветных металлов со шлаком существенное влияние оказывает содержание кислорода в газовой фазе. Во всех случаях, когда процесс протекает при сравнительно невысоком парциальном давлении кислорода (в нейтральной или восстановительной атмосфере в печи), химические потери никеля, меди и кобальта уменьшаются. Повышение температуры шлака способствует уменьшению в нем содержания растворенных цветных металлов, т.е. возрастают физические потери.

На содержание растворенных цветных металлов большое влияние оказывает состав шлака. Установлено, что с повышением содержания оксидов железа в шлаке химические и физические потери металлов увеличиваются.

На механические потери цветных металлов со шлаками влияют следующие факторы: возрастание вязкости расплава, снижение градиента плотностей шлака и штейна, увеличение глубины шлаковой ванны, интенсивность конвекции шлака, крупность частиц сульфидов, содержание цветных металлов в штейне.

Определенное значение для механических потерь металлов имеет газовая флотация в растворах мелких взвешенных частиц. Если количество выделившихся из шлака газов будет достаточно большим, то это приведет к выносу пузырьками газа мелких частиц штейна в поверхностный шлаковый слой, где мелкие капли сливаются в более крупные и затем оседают в штейн. Следовательно, чем больше газов образуется в шлаке, тем меньше потери со шлаком никеля, кобальта и меди.

Существенное влияние на потери металлов со шлаком оказывает температурный режим процесса плавки. Повышение температуры шлака приводит к снижению вязкости и в большинстве случаев увеличению межфазного натяжения. Обе эти причины способствуют уменьшению механических потерь со шлаком, хотя при повышении температуры несколько возрастает растворимость цветных металлов в шлаковых расплавах. Однако суммарный эффект снижения содержания цветных металлов от повышения температуры, как правило, положительный.

Температура шлака на высоте слоя, несмотря на интенсивное конвекционное перемещение, неодинакова. В слое шлака под электродом температура медленно снижается и на границе раздела шлак–штейн из шлака могут быть выделены наиболее тугоплавкие компоненты в виде твердых кристаллов, сильно повышающих его вязкость. Вследствие этого опять начинается обогащение шлака цветными металлами за счет задержавшихся в нем капелек штейна. Таким образом, для получения шлака, обеднённого цветными металлами, важно поддерживать на определенном уровне температуру как в верхних слоя шлака, так и в нижних.

Добавка в шихту плавки медно-никелевых концентратов небольшого количества (2–3 %) углеродистого восстановителя уменьшает потери цветных металлов со шлаком, улучшает производительность и незначительно увеличивает выбросы SO_2 за счет повышения содержания сульфидов.

Как показывает анализ влияния основных технологических параметров на процесс, важное значение приобретает поддержание параметров в определенных границах. Это может быть достигнуто как применением более эффективных средств автоматизации, так и повышением автоматизации рабочих мест.

Обоснование выбора математических средств построения оптимизационной модели

Анализ моделируемого процесса показал, что он имеет случайный характер, особенностью процесса является очень медленное накопление статистических данных, что приводит к ограниченности объема статистического материала. В силу технологических особенностей статистический материал содержит существенную погрешность, связанную с различными случайными воздействиями. Так средняя относительная погрешность исходных статистических данных для концентрации никеля в отвальных шлаках составляет 13 %.

Наиболее приемлемой для описания зависимостей между входными показателями данного процесса является случайная параметрическая модель. Такой выбор объясняется следующими причинами: случайный характер процесса не позволяет использовать детерминированные модели; нейросетевые и непараметрические модели требуют больших объёмов выборки, с их помощью затруднительно построить эффективную оптимизационную модель.

Оптимизация содержания никеля в отвальных шлаках

Задача минимизации содержания никеля является частью общей многокритериальной задачи оптимизации потерь цветных металлов.

Обоснование выбора структуры оптимизационной модели

Экспериментально установлено, что концентрация никеля в отвальных шлаках зависит от температуры расплава шлака T, загрузки агломерата $G_{\text{àãë}}$, заливки конвертерного шлака $G_{\text{ê.ø ë}}$, загрузки угля G_{C}. Причем зависимости носят квадратичный характер. Температура в свою очередь является линейной функцией параметров загрузки агломерата $G_{\text{àãë}}$, загрузки песка G_{SiO_2}, заливки конвертерного шлака $G_{\text{ê.ø ë}}$, загрузки угля G_{C}, напряжения U и мощности P. Это определяет структуру модели

$$F(T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}) = c_1T^2 + c_2G_{\text{àãë}}^2 + c_3G_{\text{ê.ø ë}}^2 + c_4G_{\text{Ñ}}^2 + c_5T + \\ + c_6G_{\text{àãë}} + c_7G_{\text{ê.ø ë}} + c_8G_{\text{C}} + c_0 \rightarrow \min \qquad (17.1)$$

и ограничения

$$k_1U + k_2P + k_3G_{\text{àãë}} + k_4G_{\text{SiO}_2} + k_5G_{\text{C}} + k_6G_{\text{ê.ø ë}} + k_7 - T = 0\ , \qquad (17.2)$$

$$\begin{cases} 40 \le G_{\text{àãë}} \le 80, \\ 0 \le G_{\text{ê.ø ë}} \le 10, \\ 3 \le G_{\text{C}} \le 6, \\ 1\,265 \le T \le 1\,270, \\ 6 \le G_{\text{SiO}_2} \le 25, \\ 250 \le U \le 550, \\ 35 \le P \le 52. \end{cases}$$

Она является задачей оптимизации в условиях неопределенности, поскольку коэффициенты c_i целевой функции (17.1) и коэффициенты k_i ограничений (17.2) неизвестны. Концентрация никеля и температура расплава шлака – случайные параметры, поэтому коэффициенты можно считать случайными величинами с неизвестным законом распределения.

Целевая функция и левая часть ограничения могут быть построены с использованием соответствующих регрессионных уравнений на основе имеющейся статистки. В этом случае согласно предположениям регрессионного анализа статистические оценки коэффициентов регрессии, полученные методом наименьших квадратов, будут распределены по нормальному закону. Для неограниченных распределений, к которым, в частности, относится нормальное, для любых X всегда существует ненулевая вероятность нарушения ограничений задачи (17.2).

Вероятность строгого выполнения равенства (17.2) в условиях стохастической неопределенности (при непрерывном распределении k_i, $i = 1, 2, ..., 6$) равна нулю:

$$P(k_1U + k_2P + k_3G_{\text{àãë}} + k_4G_{\text{SiO}_2} + k_5G_{\text{C}} + k_6G_{\text{ê.ø ë}} + k_7 - T = 0) = 0\,.$$

Эти обстоятельства существенно сужают область применения моделей ограничений в среднем, т.е. M-модели, и вынуждают переходить к вероятностным моделям ограничений. Так как вероятность строгого выполнения равенства

в условиях стохастической неопределенности равна нулю, бессмысленно требовать выполнения ограничений (равенств) с заданной вероятностью. В связи с этим при использовании моделей вероятностных ограничений необходим вынужденный переход, по крайней мере, к интервальным вероятностным ограничениям вида

$$P(|\,k_1U + k_2P + k_3G_{\text{àãë}} + k_4G_{\text{SiO}_2} + k_5G_C + k_6G_{\text{ê.ø ë}} + k_7 - T\,| \le h) \ge p$$

где p – заданная вероятность, а $h > 0$ – допустимое отклонение.

При нормальном распределении условие

$$P(B(T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}, G_{\text{SiO}_2}, U, P) \ge -h) = p$$

выполняется с вероятностью p, если

$$M(B\,|\,T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}, G_{\text{SiO}_2}, U, P) -$$

$$- t_\gamma(p)\sqrt{D(B\,|\,T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}, G_{\text{SiO}_2}, U, P)} \ge -h.$$

Если нарушения этого условия одинаково неприятны в обе стороны, ограничение записывается в виде симметричных неравенств:

$$M(B|T,G_{\text{àãë}},G_{\text{ê.ø ë}},G_{\text{C}},G_{\text{SiO}_2},U,P)-$$
$$-t_\gamma(p)\sqrt{D(B|T,G_{\text{àãë}},G_{\text{ê.ø ë}},G_{\text{C}},G_{\text{SiO}_2},U,P)}\geq -h,$$
$$M(B|T,G_{\text{àãë}},G_{\text{ê.ø ë}},G_{\text{C}},G_{\text{SiO}_2},U,P)+$$
$$+t_\gamma(p)\sqrt{D(B|T,G_{\text{àãë}},G_{\text{ê.ø ë}},G_{\text{C}},G_{\text{SiO}_2},U,P)}\leq h,$$

где $M(B|T,G_{\text{àãë}},G_{\text{ê.ø ë}},G_{\text{C}},G_{\text{SiO}_2},U,P)$ – условное математическое ожидание B, а $D(B|T,G_{\text{àãë}},G_{\text{ê.ø ë}},G_{\text{C}},G_{\text{SiO}_2},U,P)$ – условная дисперсия B.

Таким образом, модель допустимого множества E задачи записывается в виде системы неравенств

$$E:\begin{cases} 40\leq G_{\text{àãë}}\leq 80,\\ 0\leq G_{\text{ê.ø ë}}\leq 10,\\ 3\leq G_{\text{C}}\leq 6,\\ 1\,265\leq T\leq 1\,270,\\ 6\leq G_{\text{SiO}_2}\leq 25,\\ 250\leq U\leq 550,\\ 35\leq P\leq 52,\\ M(B|T,G_{\text{àãë}},G_{\text{ê.ø ë}},G_{\text{C}},G_{\text{SiO}_2},U,P)-\\ -t_\gamma(p)\sqrt{D(B|T,G_{\text{àãë}},G_{\text{ê.ø ë}},G_{\text{C}},G_{\text{SiO}_2},U,P)}\geq -h,\\ M(B|T,G_{\text{àãë}},G_{\text{ê.ø ë}},G_{\text{C}},G_{\text{SiO}_2},U,P)+\\ +t_\gamma(p)\sqrt{D(B|T,G_{\text{àãë}},G_{\text{ê.ø ë}},G_{\text{C}},G_{\text{SiO}_2},U,P)}\leq h. \end{cases} \tag{17.3}$$

Для исключения неопределенности в целевой функции наиболее целесообразно использовать *MD*-модель критерия задачи стохастического программирования. Это связано с тем, что *MD*-модель в отличие от *M*-модели учитывает не только оценку значения целевой функции, но и разброс (дисперсию) её значений. Действительно, *M*-модель может стать неприемлемой в ситуациях, когда условная дисперсия выходной переменной сильно зависит от выбранного решения x.

В таких условиях в задаче на минимум не стоит считать решение x_1 лучшим, чем x_2, если решение x_1 обеспечивает меньшее среднее переменной y, но приводит к существенно большему разбросу её значений. В подобной ситуации целесообразно найти разумный компромисс между желанием максимально улучшить показатель в среднем и в то же время не допустить значительного увеличения его дисперсии.

Разрешить конфликт можно, используя *MD*-модель стохастического программирования. В данном случае она имеет вид

$$M(F|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}) + \lambda\sqrt{D(F|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}})} \to \min,$$

где $M(F|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}})$ – условное математическое ожидание F, $D(F|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}})$ – условная дисперсия F, а λ – положительный весовой коэффициент, как правило, больший единицы.

Построение регрессионного уравнения для концентрации никеля в отвальных шлаках

Экспериментально установлено, что концентрация никеля в отвальных шлаках зависит от температуры, загрузки агломерата, заливки конвертерного шлака, загрузки угля. Причем зависимости носят квадратичный характер, поэтому уравнение регрессии следует строить в виде

$$F = b_0 + b_1T^2 + b_2G_{\text{àãë}}^2 + b_3G_{\text{ê.ø ë}}^2 + b_4G_{\text{C}}^2 + b_5T + b_6G_{\text{àãë}} + b_7G_{\text{ê.ø ë}} + b_8G_{\text{C}}. \quad (17.4)$$

Фактически это уравнение является линейным относительно коэффициентов b_i. Обозначая квадраты температуры, загрузки агломерата, заливки конвертерного шлака и загрузки угля новыми переменными z_1, z_2, z_3, z_4, а $T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}$ переменными z_5, z_6, z_7, z_8, можно свести уравнение (17.4) к уравнению множественной линейной регрессии:

$$y = b_0 + b_1z_1 + b_2z_2 + b_3z_3 + b_4z_4 + b_5z_5 + b_6z_6 + b_7z_7 + b_8z_8. \quad (17.5)$$

В дальнейшем вместо уравнения (17.4) будет использоваться уравнение (17.5).

Построение регрессионного уравнения для температуры

Экспериментально установлено, что температура является линейной функцией параметров загрузки агломерата $G_{\text{àãë}}$, загрузки песка G_{SiO_2}, заливки конвертерного шлака $G_{\text{ê.ø ë}}$, загрузки угля G_{C}, напряжения U и мощности P. Для удобства обозначим через $w_1 = U$, $w_2 = P$, $w_3 = G_{\text{àãë}}$, $w_4 = G_{\text{C}}$, $w_5 = G_{\text{SiO}_2}$, $w_6 = G_{\text{ê.ø ë}}$. Поэтому уравнение следует строить в виде множественной линейной регрессии:

$$T^* = k_0 + k_1 w_1 + k_2 w_2 + k_3 w_3 + k_4 w_4 + k_5 w_5 + k_6 w_6 \ . \qquad (17.6)$$

Вычисление коэффициентов этого уравнения производится методом наименьших квадратов на основе той же выборки, что и для уравнения (17.5).

Постановка задачи оптимизации

Математическая модель (17.1), (17.3) содержит математические ожидания и дисперсии зависимых параметров F и B. В условиях статистической неопределенности точные выражения для

$$M(F|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}),$$

$$M(B|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}, G_{\text{SiO}_2}, U, P),$$

$$D(F|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}),$$

$$D(B|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}, G_{\text{SiO}_2}, U, P)$$

неизвестны. Они заменяются несмещенными оценками. Для математического ожидания $M(F|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}})$ несмещённой оценкой является само регрессионное уравнение (17.5) с найденными коэффициентами регрессии. Для дисперсии $D(F|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}})$ несмещенной является оценка

$$SC = \sum_{i=1}^{9} \sum_{j=1}^{9} K_{i,j} z_i z_j \ ,$$

где z_i, $i = 1, 2, ..., 9$; $K_{i,j}$ – элементы ковариационной матрицы K. Для математического ожидания $M(B|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}, G_{\text{SiO}_2}, U, P)$, соответственно, такой оценкой будет уравнение регрессии (17.6), а для дисперсии $D(B|T, G_{\text{àãë}}, G_{\text{ê.ø ë}}, G_{\text{C}}, G_{\text{SiO}_2}, U, P)$ – оценка

$$ST = \sum_{i=1}^{7} \sum_{j=1}^{7} H_{i,j} w_i w_j \ ,$$

где w_i, $i = 1, 2, ..., 7$; $H_{i,j}$ – элементы ковариационной матрицы.

Согласно требованиям технологии плавки допустимое отклонение h температуры не должно превышать 3 $^{\circ}$C. Теперь можно сформулировать полученную задачу оптимизации как задачу нелинейного программирования

$$\begin{aligned} f = {} & 3{,}161665 \cdot 10^{-5} \cdot T^2 - 5{,}7 \cdot 10^{-4} \cdot G_{\text{àãë}}^2 + 2{,}7 \cdot 10^{-3} \cdot G_{\text{C}}^2 - 0{,}07894T - \\ & -1{,}33873 \cdot 10^{-3} \cdot G_{\text{àãë}} + 9{,}50532 \cdot 10^{-3} \cdot G_{\text{ê.ø ë}} - 0{,}01811 G_{\text{C}} + 49{,}404 + \\ & + \lambda \sqrt{SC} \to \min \end{aligned} \qquad (17.7)$$

на допустимом множестве E', заданном ограничениями

$$1247{,}8 - 0{,}0328U + 0{,}14039P + 0{,}62477G_{\text{àãë}} + \\ +0{,}19996 \cdot G_{\text{C}} - \frac{t_{\gamma}(p)}{43}\sqrt{SÒ} \geq -2, \tag{17.8}$$

$$1247{,}8 - 0{,}0328U + 0{,}14039P + 0{,}62477G_{\text{àãë}} + \\ +0{,}19996 \cdot G_{\text{C}} + \frac{t_{\gamma}(p)}{43}\sqrt{SÒ} \leq 2, \tag{17.9}$$

$$\begin{cases} 40 \leq G_{\text{àãë}} \leq 80, \\ 0 \leq G_{\text{ê.ø ë}} \leq 10, \\ 3 \leq G_{\text{C}} \leq 6, \\ 1\,265 \leq T \leq 1\,270, \\ 6 \leq G_{\text{SiO}_2} \leq 25, \\ 250 \leq U \leq 550, \\ 35 \leq P \leq 52. \end{cases} \tag{17.10}$$

Для решения задачи был использован стандартный пакет прикладных программ Mathcad. Получено следующее решение:

$$T = 1\,270\,^{\text{î}}\text{C},$$
$$G_{\text{àãë}} = 52{,}7\ \text{ò/÷},$$
$$G_{\text{ê.ø ë}} = 0\ \text{ò/÷},$$
$$G_{\text{C}} = 3{,}27436\ \text{ò/÷},$$
$$U = 550\ \text{B},$$
$$P = 52{,}00004\ \text{Ì}\ \ \text{Âò}.$$

При этом значение функции $f_{\min} = 0{,}04951$.

Значения напряжения, мощности, загрузки агломерата и угля, заливки конвертерного шлака неслучайны, поскольку они являются входными управляющими параметрами. Температура и концентрация – случайные величины. Полученное значение температуры нужно рассматривать как статистическую оценку ее математического ожидания, так же как и значение целевой функции $f_{\min}$. Следовательно, необходимо исследовать качество этих статистических оценок.

Границы доверительного интервала при уровне значимости $\alpha = 0{,}05$ составляют ($0{,}04231 - 2{,}81508 \cdot 10^{-4}$; $0{,}04231 + 2{,}81508 \cdot 10^{-4}$), где среднеквадратическое отклонение $\sqrt{SC} = 0{,}02672$, число 0,04231 есть значение функции F при оптимальных значениях входных параметров, т.е. оценка математического ожидания концентрации никеля в отвальных шлаках.

Аналогично, среднеквадратичное отклонение $\sqrt{SÒ} = 6{,}89274$, тогда доверительный интервал для температуры – (1 270 – 0,20088; 1 270 + 0,20088), где 1 270 есть значение функции B.

Качество оценок для концентрации никеля и температуры, определяемое построенными доверительными интервалами с доверительной вероятностью 0,95 позволяет принять с вероятностью p = 0,95 полученное решение как оптимальное. При этом вероятность ошибочности этого решения совпадает с вероятностью нарушения ограничения для температуры и не превышает 0,05.

Значение параметра $G_{\text{к.шл}}$ = 0 т/ч соответствует оптимальному режиму, когда вообще не требуется загрузка конвертерного шлака. Это сокращает себестоимость производимого продукта и время процесса.

Оптимизация удельного расхода электроэнергии

Удельный расход электроэнергии является одним из важных показателей эффективности электроплавки медно-никелевых руд.

Обоснование выбора структуры оптимизационной модели

Экспериментально установлено, что удельный расход электроэнергии зависит от мощности P, напряжения U, температуры расплава шлака $T_{\text{шл}}$, загрузки агломерата $G_{\text{агл}}$, загрузки песка G_{SiO_2}, заливки конвертерного шлака $G_{\text{к.шл}}$, загрузки угля G_{C}. Причем зависимости носят линейный характер. Температура в свою очередь является линейной функцией параметров загрузки агломерата $G_{\text{агл}}$, песка G_{SiO_2}, угля G_{C}, заливки конвертерного шлака $G_{\text{к.шл}}$, напряжения U и мощности P. Это определяет структуру модели

$$F(P,U,T_{\text{øë}},G_{\text{àãë}},G_{\text{SiO}_2},G_{\text{ê.øë}},G_{\text{C}}) = c_1P + c_2U + c_3T_{\text{øë}} + c_4G_{\text{àãë}} + c_5G_{\text{SiO}_2} + \\ + c_6G_{\text{ê.øë}} + c_7G_{\text{C}} + c_0 \to \min \qquad (17.11)$$

при ограничениях (17.2). Данная модель является задачей оптимизации в условиях неопределенности, поскольку коэффициенты c_i целевой функции (17.11) и коэффициенты ограничения (17.2) неизвестны. Так же как и концентрация никеля в отвальных шлаках и температура расплава шлака, удельный расход электроэнергии является случайным параметром, поэтому коэффициенты можно считать случайными величинами с неизвестным законом распределения. Целевая функция может быть построена с использованием соответствующего регрессионного уравнения на основе имеющейся статистки. Неопределенность в целевой функции исключается снова с помощью *MD*-модели. В данном случае она имеет вид

$$M(F|P,U,T_{\text{øë}},G_{\text{àãë}},G_{\text{SiO}_2},G_{\text{ê.øë}},G_{\text{C}}) + \\ + \lambda\sqrt{D(F|P,U,T_{\text{øë}},G_{\text{àãë}},G_{\text{SiO}_2},G_{\text{ê.øë}},G_{\text{C}})} \to \min \qquad (17.12)$$

где первое слагаемое – условное математическое ожидание F; второе – условная дисперсия F; λ – положительный весовой коэффициент, как правило, больший единицы.

Математическая модель (17.2), (17.12) содержит математическое ожидание и дисперсию параметра F. В условиях статистической неопределенности их точные выражения неизвестны. Они заменяются несмещенными оценками. Для математического ожидания несмещённой оценкой является само регрессионное уравнение (17.11) с найденными коэффициентами регрессии. Для дисперсии несмещенной является оценка

$$SC = \sum_{i=0}^{7} \sum_{j=0}^{7} K_{i,j} X_i X_j, \tag{17.13}$$

где $K_{i,j}$ – элементы ковариационной матрицы; X_i – столбцы выборочных значений соответствующих параметров.

Теперь можно сформулировать полученную задачу оптимизации как задачу линейного программирования

$$\begin{gathered} f = 15{,}4539675P + 0{,}0664021U + 0{,}5860053T_{\text{øë}} - \\ -8{,}9998788G_{\text{àãë}} - 15{,}0718624G_{\text{SiO}_2} - 9{,}6744413G_{\text{ê.øë}} - \\ -10{,}8546292G_{\text{Ñ}} - 101{,}9486685 + \lambda\sqrt{SC} \to \min \end{gathered} \tag{17.14}$$

на допустимом множестве E, заданном ограничениями (17.8)–(17.10).

Оптимальное решение и его анализ

Для решения задачи был использован стандартный пакет прикладных программ Mathcad. Получено следующее решение:

$$P = 35 \text{ МВт},$$
$$U = 250 \text{ В},$$
$$T_{\text{шл}} = 1\,260\ ^{\circ}\text{C},$$
$$G_{\text{агл}} = 80 \text{ т/ч},$$
$$G_{SiO_2} = 12 \text{ т/ч},$$
$$G_{\text{к.шл}} = 10 \text{ т/ч},$$
$$G_{\text{C}} = 6 \text{ т/ч}.$$

При этом значение функции $f_{\min} = 615{,}38$.

Значения мощности, напряжения, загрузки агломерата, загрузки песка, заливки конвертерного шлака, загрузки угля неслучайны, поскольку они являются входными управляющими параметрами. Удельный расход электроэнергии – случайный параметр. Полученное значение температуры нужно рассматривать как статистическую оценку оптимального значения, так же как и значение целевой функции. Следовательно, необходимо исследовать качество этих статистических оценок.

По формуле (17.13) определяется среднеквадратическое отклонение, оно равно 17,86. Тогда границы доверительного интервала, при уровне значимости $\alpha = 0{,}05$, составляют (597,52 – 17,86; 597,52 + 17,86), где 597,52 есть оценка математического ожидания удельного расхода электроэнергии.

Доверительный интервал для температуры – (1 260 – 0,20088; 1 260 + + 0,20088) при среднем квадратическом отклонении $\sqrt{SO} = 6{,}89274$, где 1 260 есть оценка математического ожидания температуры.

Качество полученных оценок для удельного расхода электроэнергии и температуры, определяемое построенным доверительным интервалом, позволяет принять с вероятностью $p = 0{,}95$ найденное решение как оптимальное. При этом вероятность ошибочности этого решения совпадает с вероятностью нарушения ограничения для температуры и не превышает 0,05.

Контрольные вопросы и задания

1. Приведите математическую модель процесса в общем виде.
2. Кратко опишите процесс обжига сульфидных концентратов в кипящем слое.
3. Представьте химизм процесса обжига сульфидных концентратов в кипящем слое.
4. Перечислите допущения, принятые при составлении математической модели процесса обжига.
5. Опишите основные входные, выходные и внутренние параметры процесса обжига.

6. Перечислите основные управляющие воздействия процесса и пределы их изменения. Каким образом они влияют на температуру процесса?

7. Приведите уравнение материального баланса процесса обжига.

8. Напишите уравнение теплового баланса процесса обжига.

9. Какие параметры учитываются при выводе дифференциальных уравнений процесса обжига?

10. С какой целью производится обжиг катодов алюминиевых электролизеров?

11. Приведите режимы обжига катодов и дайте их сравнительный анализ.

12. На какие качественные характеристики влияет режим обжига катодов?

13. Какие режимы расчета напряжений катодов применяются на практике?

14. Поясните сущность пошагового расчета напряжений.

15. Опишите порядок работы с тренажером.

16. Какой вид имеет кривая напряжений? Какие параметры можно по ней определить?

17. Поясните сущность расчета с листа.

18. Какие первоначальные параметры влияют на качество обжига катодов?

19. Нарисуйте кривые изменения температуры для различных слоев катода.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Любанова, А. Ш. Методы оптимизации [Текст] / А. Ш. Любанова; ГАЦМиЗ. Красноярск, 2002. 80 с.

2. Сухарев, А. Г. Курс методов оптимизации [Текст] / А. Г. Сухарев, А. В. Тимохов, В. В. Федоров. М.: Наука, 1986. 328 с.

3. Реклейтис, Г. Оптимизация в технике [Текст]: в 2 кн. / Г. Реклейтис, А. Рейвиндран, К. Рэгсдел; пер. с англ. М.: Мир, 1986. Кн. 1. 352 с.; Кн. 2. 320 с.

4. Банди, Б. Методы оптимизации. Вводный курс [Текст] / Б. Банди; пер. с англ. М.: Радио и связь, 1988. 128 с.

5. Ракитин, В. И. Практическое руководство по методам вычислений с приложением программ для персональных компьютеров [Текст] / В. И. Ракитин, В. Е. Первушин. М.: Высш. шк., 1988. 383 с.

6. Кузнецов, А. В. Руководство к решению задач по математическому программированию [Текст] / А. В. Кузнецов, Н. И. Холод, Л. С. Костевич. Минск: Вышэйш. шк., 1978. 256 с.

7. Новиков, Ф. А. Дискретная математика для программистов [Текст] / Ф. А. Новиков. СПб.: Питер, 2000. 304 с.

8. Горенский, Б. М. Математическое моделирование и оптимизация технологических систем в цветной металлургии [Текст]: учеб. пособие / Б. М. Горенский; ГАЦМиЗ. Красноярск, 1994. 152 с.

9. Горенский, Б. М. Принципы построения автоматизированных систем управления [Текст] / Б. М. Горенский; ГАЦМиЗ. Красноярск, 1995. 84 с.

10. Советов, Б. Я. Моделирование систем [Текст] / Б. Я. Советов, С. А. Яковлев. М.: Высш. шк., 1998. 319 с.

11. Банди, Б. Основы линейного программирования [Текст] / Б. Банди; пер. с англ. М.: Радио и связь, 1989. 176 с.

12. Цымбал, В. П. Математическое моделирование металлургических процессов [Текст] / В. П. Цымбал. М.: Металлургия, 1986. 240 с.

13. Новые информационные технологии в управлении металлургическими процессами [Текст] / Б. М. Горенский, Ю. Н. Чурсанов, А. В. Киселев, О. Е. Халикова; ГАЦМиЗ. Красноярск, 1999. 80 с.

14. Горенский, Б. М. ЭВМ в управлении технологическими процессами [Текст] / Б. М. Горенский, А. А. Буралков, В. А. Казинникова; ГАЦМиЗ. Красноярск, 1998. 184 с.