

РЕСПУБЛИКА УЗБЕКИСТАН
МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО И СРЕДНЕ-СПЕЦИАЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ

НАВОЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ГОРНЫЙ ИНСТИТУТ

КАФЕДРА «АВТОМАТИЗАЦИЯ И УПРАВЛЕНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ И ПРОИЗВОДСТВ»

**«ОСНОВЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОПТИМИЗАЦИИ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ»**

ТЕКСТ ЛЕКЦИЙ

Лекция №1

Введение. Принципы и методы системных исследований в задачах моделирования

Бурное развитие науки и техники, выход практически всех отраслей знаний на новый, более всеобъемлющий уровень, все возрастающее взаимопроникновение фундаментальных и технических дисциплин потребовали объединения усилий специалистов разных направлений. Создание очень сложных и разветвленных народнохозяйственных механизмов, разработка сложных технических объектов и систем, проблемы управления, экономики и экологии обусловили необходимость использования нетрадиционных для конкретной области методов и методик. Настоятельно проявилась необходимость проведения исследований междисциплинарного характера. В этих условиях в пятидесятые годы и возникли так называемые системные методы исследований, особенно сильным толчком для развития которых и, по существу, определяющим их возможности явилось появление взрывной по характеру развития и всепроницающей вычислительной техники. Развитие любой отрасли науки и техники в современных условиях невозможно без ЭВМ и это особенно характерно для системных исследований. В литературе, посвященной кибернетике и системным исследованиям, можно найти достаточно много определений понятия "система". И практически все они, так или иначе, сводятся к определению, которое приведено в энциклопедии: "система - это множество элементов, находящихся в отношениях и связях друг с другом, которое образует определенную целостность и единство". В рамках этого определения под сложной системой будем понимать систему, обладающую большим количеством элементов и связей, которую можно описать каким-либо образом.

В литературе, посвященной системным исследованиям, используются в основном четыре понятия: "системный подход", "общая теория систем", "системотехника" и "системный анализ".

Наиболее неопределенным из них является термин "системный подход". Все, кто сталкивается с этим понятием, в принципе представляют, что это такое. Исследователь всегда стремился изучать явление, факт или объект в совокупности с другими явлениями, фактами или объектами. Иными словами, стремление к комплексному, системному изучению является очевидным для ученого или практика. Вместе с тем, практические рекомендации по реализации системного подхода в настоящее время трудно отыскать в литературе. Многие авторы, под предлогом рассмотрения и описания применения системного подхода в той или иной конкретной области по существу излагают методы и методики, составляющие аппарат системных исследований, а не принципы реализации системного подхода. Отсутствие таких практических рекомендаций, по-видимому, обусловлено объективной невозможностью их создания. Таким образом, системный подход - это некий общеметодологический принцип.

К сожалению, неясным является и толкование термина "общая теория систем". Основоположники этой теории (Л. Берталанфи, А.А. Богданов и другие) пытались отыскать некое общее, объединяющее начало, характерное для достаточно сложных

биологических и социальных образований. Предпринимались попытки переноса принципов общей теории систем на объекты иной, нежели биологическая или социальная, природы. Но для развития общей теории систем необходимо достаточно большая степень абстрагирования. Это и привело к тому, что общая теория систем в настоящее время является отраслью знаний, относящейся к методологии всей науки в целом.

Под системотехникой понимается научное направление, охватывающее проектирование, создание, испытание и эксплуатацию сложных систем. Из этого определения следует, что системотехника - это конкретная дисциплина, объединяющая различные методы, разработанные в разных отраслях знаний, связанные единой целью - синтезом сложных технических систем. Аппарат системотехники составляют методы исследования операций, теории автоматического управления и других дисциплин. Таким образом, системотехника связана с практической реализацией системных методов при создании конкретных технических систем.

Прежде чем перейти к синтезу сложных систем необходимо, очевидно, провести тщательное исследование существующих систем, областей их применения, тенденций развития, то есть проделать все действия, которые принято называть анализом. Но системный анализ дает не только методологию проведения анализа сложной системы. Помимо этой методологии, системный анализ представляет собой еще и методологию формирования и обоснования решений по комплексным проблемам сложных систем. В силу того, что анализу подвергается сложная система, системный анализ, очевидно, должен включать в качестве отдельных своих составных частей дисциплины, носящие несамостоятельный характер, и при этом всегда нужно помнить о междисциплинарных связях. В противном случае попытка более или менее полного описания аппарата системного анализа бесплодна. Таким образом, под системным анализом мы будем понимать совокупность методов исследования сложных систем.

Обобщая вышесказанное, можно заключить, что системные исследования основываются на общей теории систем и системном подходе, как общенаучных методологических принципах, и проходят последовательно этапы системного анализа и системотехники. При этом отметим итеративность цепочки "системный анализ - системотехника".

Процесс анализа можно разбить на три стадии:

- формулировка целей исследования, определение исходных предпосылок и границ исследования, предварительный выбор инструментов анализа;
- накопление информации, анализ системы и разработка вариантов решений;

- оценка решений и выбор наиболее эффективного решения.

Реализация системного анализа существенно затруднена противоречивостью, неясностью и многозначностью целей, несовершенством показателей и критериев оценки эффективности. Поэтому редко удается достичь хороших результатов системного анализа с первой попытки. Здесь важна итеративность в прохождении всех стадий системного анализа. При этом, итерации повторяются до тех пор, пока не будет получен удовлетворительный результат, либо до тех пор, пока не иссякнут ресурсы (материальные, временные или какие-либо иные).

В принципе, системный анализ не включает в себя ничего действительно нового, за исключением именно системного рассмотрения объекта анализа, применения количественных методов и, главное, исследования последствий принимаемых решений. К сожалению, все это не гарантирует высокого качества рекомендаций, вырабатываемых при системном анализе. Но неудовлетворительные результаты связаны не с качеством методов системного анализа, а чаще всего - с неверными формулировками целей и плохими критериями. Вместе с тем есть ряд принципов, способствующих повышению качества анализа.

1. Наибольшие усилия в системном анализе должны быть направлены на правильную постановку задачи. Для этого необходимо осмыслить проблему, очертить ее границы, определить цели и найти приемлемые критерии оценки результатов.

2. Все проводимые исследования должны иметь четко выраженную системную направленность. Необходимо исследовать систему как единое целое, устанавливая и изучая связи между элементами системы, исследуя отдельные элементы, уделять особое внимание взаимосвязям между элементами и окружающей средой. При этом существенно возрастает роль специалистов, имеющих знания и квалификацию в различных отраслях.

3. Необходимо всегда помнить, что решение наиболее важных проблем объективно сопряжено с наличием самых разнообразных неопределенностей. Об этих неопределенностях не следует забывать и их необходимо всегда принимать в расчет. Важна оценка влияния неопределенности на конечный результат, которую можно реализовать, анализируя чувствительность исследуемой системы, то есть, анализируя как изменяются решения в зависимости от изменений исходных данных.

4. В системном анализе синтез новых решений и улучшение имеющихся всегда более ценны, нежели всеобъемлющее сравнение известных альтернатив.

5. В процессе анализа всегда необходимо придерживаться определенных научных стандартов: проверка получаемых решений посредством экспериментов или вообще

возможность проверки и воспроизведения результатов другими исследователями, ясность и объективность результатов.

Системный анализ является точной наукой, поэтому для него характерны методы точных наук. Исключительно важную роль в системном анализе играют самые разнообразные математические методы. Это математический аппарат теории автоматического управления, теории графов, теории вероятностей и математической статистики и многих других научных дисциплин.

Наряду с этим, в системном анализе широко используется эксперимент. Опыт встречается в различных формах и как наблюдение, и как моделирование. Результаты экспериментов подвергаются статистическому и логическому анализу. Логический анализ предназначен для вскрытия логических закономерностей в исследуемых системах. Статистический анализ предназначен для отыскания формализованных закономерностей в системах.

Крайне велика в системном анализе роль моделирования. Принципиально моделирование состоит в замене исследуемой системы некоторой подобной системой, называемой моделью, и в наблюдении и экспериментировании с этой моделью. При этом, подобие модели исследуемой системе состоит в подобии интересующих пользователя свойств, а не в полном повторении всей системы.

При проведении системного анализа моделирование является мощным связующим фактором между теорией и опытом, служит инструментом проверки создаваемых теорий и открывает новые возможности синтеза научных знаний и их интеграции.

Лекция №2

КЛАССИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ И МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

Математические модели и методы моделирования

Модель - объект (например: явление, процесс, система, установка и др.), находящийся в отношении подобия к моделируемому объекту. Под *подобием* понимается - взаимно однозначное соответствие между двумя объектами.

Разнообразие моделей и форм моделирования отражает их классификация, при которой методы моделирования подразделяются на группы:

1. *Натурное моделирование* - эксперимент на самом исследуемом объекте, который при специально подобранных условиях опыта служит моделью самого себя.

2. *Физическое моделирование* - эксперимент на специальных установках, сохраняющих природу явлений, но воспроизводящих их в количественно измененном масштабированном виде.

3. *Математическое моделирование* - использование моделей, по физической природе отличающихся от моделируемых объектов, но имеющих сходное математическое описание.

В группе математических моделей в свою очередь выделяются подгруппы:

а) *Модели прямой аналогии*, в которых каждой физической величине оригинала сопоставляется в модели величина другого рода, изменяющаяся в пространстве и во времени сходным образом.

б) *Структурные или операционные модели*, в которых математическое описание оригинала воспроизводят в виде совокупности отдельных операций, выполняемых соответствующими блоками.

в) *Цифровые модели*, в которых те же операции выполняются в цифровом виде, обычно последовательно одна за другой в общем процессоре.

г) *Функциональные модели*, в которых воспроизводится только поведение, функция оригинала, но не его устройство, так, что по описанию модель может быть не подобна натуре.

Натурное и физическое моделирование основываются непосредственно на теории подобия, так как в обоих случаях модель и оригинал подобны по физической природе. Это дает основание объединить их в класс *моделей физического подобия*.

Модели прямой аналогии обычно используются для исследования физических полей, а структурные модели применяются при исследовании динамических систем. В обоих случаях модель принадлежит тому же типу объектов, что и оригинал: поле моделируется полем, система - системой. Поэтому они объединяются в класс *моделей-аналогов*.

Цифровые модели выделяются в класс *имитационных моделей*, в которых воспроизводят не функционирование моделируемого объекта, а некоторые характерные для него зависимости одних параметров от других.

Также модели выделяются по своему назначению, а значит и по выполняемым функциям, структуре и т.д.:

1. *Информационные (описательные)*, используемые в качестве обучающих или советующих систем, для изучения взаимного влияния факторов на выходные параметры, установления границ, в пределах которых достигается рациональный режим работы системы и т.д.

2. *Оптимизационные*, используемые для поиска оптимальных условий протекания процесса в системе. В качестве оптимизационных могут применяться информационные модели, дополненные блоком оценки результата на основании целевой функции, с учетом налагаемых ограничений на изменение входных и выходных переменных.

3. *Управления (регулирования)* процессом, используемые для воздействия на систему в реальном масштабе времени с целью компенсации нежелательных случайных возмущений и смещения системы в направлении экстремального значения целевой функции. Модель является компонентом системы автоматического управления.

4. *Эвристические*, используемые для получения новых знаний и изучения механизма процессов на основе сопоставления результатов моделирования и натуральных измерений, выдвижения и проверки новых гипотез о структуре взаимосвязей между факторами, введения дополнительных факторов в модель и т.д.

Лекция №3

Моделирование детерминированных и стохастических процессов

Математические модели связывают входные (независимые) переменные процесса $X(x_1, x_2, \dots, x_n)$, называемые воздействиями, с выходными (зависимыми) характеристиками $Y(y_1, y_2, \dots, y_m)$ (рис. 3.1), которые обычно именуют откликами, в виде уравнения связи

$$Y=f(X) \quad (3.1)$$

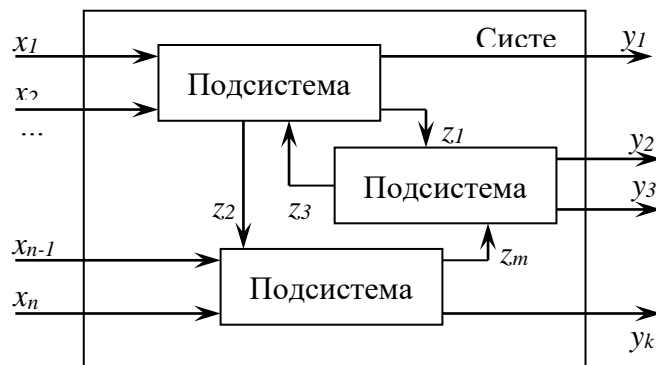


Рис. 3.1. Модель системы детерминированных процессов.

Любому реальному процессу свойственны случайные колебания, вызываемые физической изменчивостью каких-либо факторов $x_i \pm \Delta x_i(\tau)$ или внешними случайными воздействиями. В силу этого при равном среднем значении входных характеристик $X(\tau)$ в моменты τ_1 и τ_2 выходные параметры $Y(\tau)$, будут неодинаковыми (рис.3.2). Поэтому для вероятностных процессов, где по сравнению с $x_i(\tau)$ нельзя пренебречь случайными колебаниями $\Delta x_i(\tau)$ и

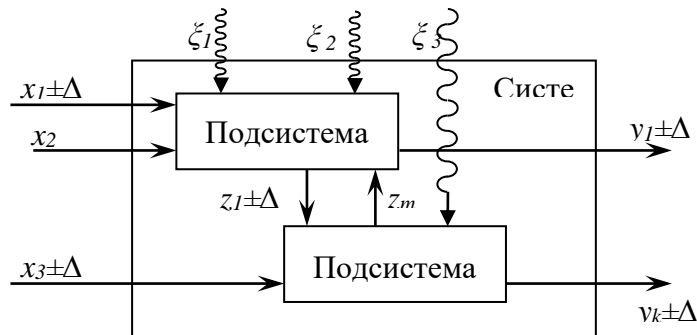


Рис.3.2. Модель системы стохастических процессов

случайными внешними воздействиями $\xi_i(\tau)$, необходимо характеризовать

систему с учетом статистического закона распределения мгновенных значений $Y(\tau)$ относительно средней величины $Y_{cp}(\tau)$ уравнением

$$Y(\tau) = Y_{cp}(\tau) \pm \Delta Y(\tau) = f(X_{cp}) + \zeta(\Delta X, \xi) \quad (3.2)$$

Модели, отображающие случайный (стохастический) характер параметров и факторов системы, называются *статистическими* или *стохастическими* в отличие от *детерминированных*, не учитывающих вероятностных характеристик процессов.

По мере уменьшения величины параметров ΔX и ξ уравнение (3.2) приближается по структуре к уравнению (1.1), описывающему детерминированные системы.

Обычно детерминированные модели (3.1), представляющие собой систему уравнений, удается составить только в тех случаях, когда о процессах в описываемой системе имеются ясные физические представления и эти представления можно формализовать. В таких случаях говорят, что система представляет собой «белый ящик» - объект с известной структурой и функциями.

Однако получаемая таким образом модель может оказаться громоздкой, а ее информационное обеспечение весьма трудоемким. Поэтому часто используют статистические модели для описания детерминированных систем. В таких случаях рассматривают систему как «черный ящик» с неизвестной структурой, в котором доступны для изучения только контролируемые входные параметры X и измеримые выходные характеристики Y . Получив таблицу соответствий $\{x_1, y_1; x_2, y_2; \dots; x_n, y_n\}$, принимают их за случайную выборку из генеральной статистической совокупности $\{X, Y\}$ и описывают соотношением (3.2). Полученная статистическая модель при соответствующей интерпретации результатов позволяет раскрыть механизм, сделать «белыми» некоторые части устройства и функционирования «черного ящика».

Детерминированные модели (3.1), могут также использоваться для описания стохастических систем, если объектом изучения являются их усредненные характеристики. Таким образом, статистические модели являются более широким классом моделей и включают детерминированные модели как предельный частный случай, в котором выходные параметры Y однозначно определяются входными переменными X .

Соотношения (3.1) и (3.2) являются математическими моделями процессов, приближенно описывающими происходящие в системе изменения.

Если доказано подобие натуральных и моделирующих процессов, то можно говорить об *адекватности моделей*.

В зависимости от характера и пространственной структуры описываемых систем различаются модели с *распределенными* и *сосредоточенными параметрами*. В связи с различной интенсивностью моделируемых процессов во времени различают: *статические модели*, описывающие установившиеся процессы вблизи состояния равновесия; *стационарные модели*, характеризующие постоянством основных параметров во времени; *динамические модели* систем, в которых входной переменной процесса является время.

В зависимости от конкретного вида применяемого математического аппарата, различают модели матричные, сетевые, дифференциальные, интегральные, алгоритмические, программные и др.

Лекция №4

ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Технологический процесс как система

Система - совокупность определенным образом упорядоченных элементов. Взаимосвязанные и взаимодействующие между собой и внешней средой элементы объединяются в единое целое по некоторым общим признакам. Сущность системы и ее функций невозможно понять, рассматривая только свойства ее отдельных элементов и не учитывая их внутренних связей и взаимодействия с окружающей средой.

Технологические процессы, включающие совокупность разнообразных термомеханических, физико-химических, ионно-лучевых превращений, приводящих к получению материалов, заготовок, деталей машин с заданными свойствами, относятся к числу наиболее сложных систем. В качестве элементов они включают как детали, инструменты, средства оснащения и другие объекты так и реакции, явления, эффекты и другие элементарные процессы.

Системный подход к исследованию и описанию технологических процессов основан на декомпозиции системы на более простые подсистемы, взаимодействующие между собой, в отдельном изучении их структуры и функций, с последующим синтезом полученных сведений. При синтезе учитывается выявленная иерархия процессов по масштабам области действия, их пространственное расположение и временная последовательность, а также *синергетические эффекты*, общее действие которых превышает кажущуюся сумму отдельно взятых воздействий.

Составляющие сложный процесс элементарные явления протекают в областях, масштабы, которых различаются от низшего (уровень атомов и молекул) до высшего (уровень технологической системы, участка или производства). Эта особенность находит отражение в иерархической структуре

модели, которую целесообразно строить путем последовательного перехода в описании процесса с одного уровня на другой.

Атомный или *молекулярный* уровень описывает физико-химические процессы микрокинетики, протекающие в областях, имеющих масштаб расстояний между атомами. *Уровень частиц малого объема* описывает процессы в масштабе отдельных включений, фаз, структур и т.п. для неоднородной (негомогенной) технологической среды. Эти два уровня должны дополняться явлениями макрокинетики: тепло- и массопереноса, упругости и пластичности в однородной (гомогенной) среде с изотропными и анизотропными свойствами.

Уровень рабочей зоны технологической системы описывает процессы в областях, размеры которых соответствуют крупным агрегатам частиц: зонам термического влияния, деформации, диффузии, оплавления и т.п. Этот уровень учитывает характер движения потоков вещества и энергии. *Уровень технологической системы* (процесса и установки) учитывает взаимное расположение и размеры рабочих зон и элементов системы, последовательность технологических воздействий.

Кроме того, различные виды воздействий имеют свой структурный уровень эффектов и явлений. Так, для деформационных процессов используются структурные уровни, описывающие иерархию от молекулярного масштаба до размеров малых частиц разрушения (лек.5, табл.5.1).

Модель каждого уровня содержит в свернутом виде модели более низких уровней и соотношения, описывающие переход с одного уровня на другой.

Системный подход позволяет анализировать и моделировать технологический процесс, представленный в виде отдельных блоков, что существенно упрощает описание сложных явлений, не упуская из вида пространственно-временную структуру моделируемой системы, характер связи между отдельными уровнями и подсистемами.

Лекция №5

Построение детерминированной модели

Детерминированные модели технологических процессов разрабатывают на основе теоретических представлений о структуре описываемой системы и закономерностей функционирования ее отдельных подсистем. Объем этих знаний, их адекватность реальному процессу определяют результирующее качество разрабатываемой модели.

Для построения детерминированной модели необходима формализация существующих знаний, т.е. их представлений в виде замкнутой системы математических зависимостей, отображающих с той или иной закономерностью механизм исследуемых процессов.

Несмотря на существенные различия в содержании конкретных задач моделирования разнообразных технологических процессов, построение модели включает определенную последовательность взаимосвязанных этапов (рис.5.1).

Таблица 5.1

Структурные уровни деформации, их классификация и масштаб

№ п/п	Структурные уровни	Масштаб
1	<i>Макроуровень</i> Вакансия, атом	0,2 – 0,3 нм
2	Перегиб, порог	0,5 – 5 нм
3	Дислокация, уступ на границе зерна	10 нм
4	Группа дислокаций, сплетение, полоса скольжения, зона сдвига, дислокационная стенка, образования дисклинационного типа. Граница зерна. Доменные границы. Вакансионные, атомные кластеры и сегрегации.	10 – 100 нм
5	<i>Мезоуровень</i> Ячейка, дисклинационная петля, полоса в полосовой субструктуре, микродвойники, группы дисклинаций. Пластины и рейки мартенсита. Блок мозаики, фрагмент, субзерно.	0,1 – 1 мкм
6	Дислокационный ансамбль. Участок зерна или монокристалла. Пакет реек мартенсита. Зона сдвига, система скольжения	1 – 20 мкм
77	<i>Уровень зерна</i> Зерно. Дендрит. Зона сдвига, система скольжения.	10 – 200 мкм
8	<i>Макроуровень</i> Группа зерен. Волокно композита	0,2 – 0,5 мм
9	Участок образца	1 мм
10	Образец в целом	1 – 10 мм

Первым этапом работы является постановка задачи (1), включающая формулировку задания на основе анализа исходных данных о системе и прогнозирования научно-технического и социально-экономического эффекта.

Постановка задачи завершается установлением класса разрабатываемой модели и соответствующих требований к ее точности, быстродействию, условиям эксплуатации и последующей корректировки, т.е. тех характеристик, которые составляют технические условия на новую разработку.

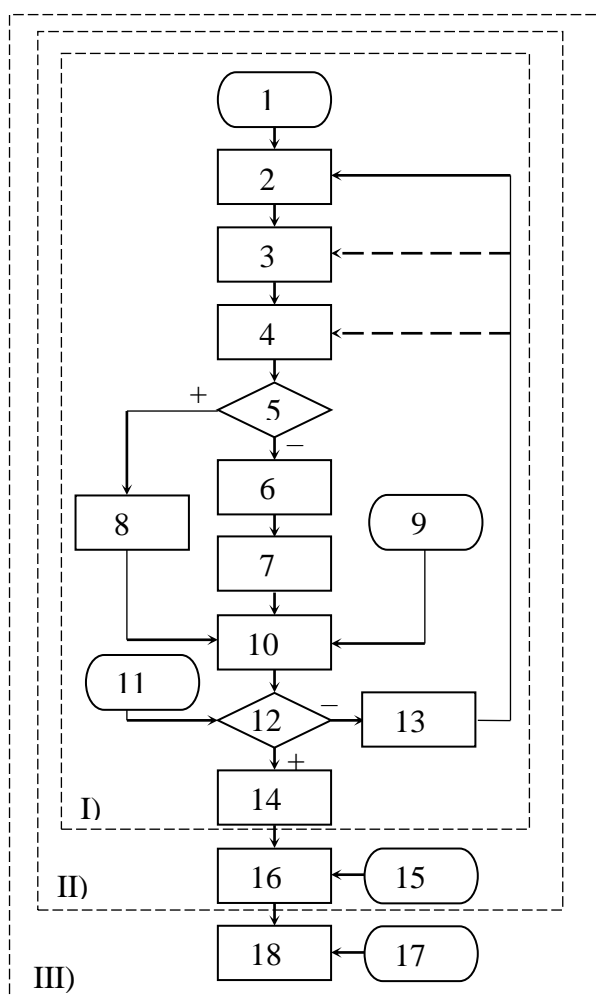


Рис.5.1. Этапы разработки детерминированной модели:

1 - постановка задачи; 2 - построение физической модели; 3 - формулировка математической модели; 4 - разработка метода и алгоритма решения задачи; 5 - выбор метода или алгоритма; 6 - программирование и отладка программы; 7 - выбор параметров вычислительного процесса; 8 - аналитическое решение задачи; 9 - экспериментальное определение констант модели; 10 - решение контрольных задач; 11 - контрольные эксперименты на натурном объекте; 12 - проверка адекватности модели; 13 - корректировка модели; 14 - исследование процесса с помощью модели; 15 - определение целевой функции и ограничений; 16 - оптимизация процесса с помощью модели; 17 - экспериментальная информация средств автоматизации; 18 - управление процессом с помощью модели; I - информационная модель; II - оптимизационная модель; III - модель управления

Следующим этапом (2) является формулировка физической модели на основе понимания сущности описываемого процесса, разделяемого в интересах его формализации на элементарные составляющие явления (тепло- и массообмен, гидродинамику, химические реакции, фазовые превращения и т.д.) и согласно принятой степени детализации - на агрегаты, зоны и ячейки (макро-, мезо- и микроуровень). При этом выясняется какими явлениями необходимо или целесообразно пренебречь, и в какой мере учесть взаимосвязь рассматриваемых явлений.

Каждому из выделенных явлений ставится в соответствие определенный физический закон (уравнение баланса) и устанавливаются начальные и граничные условия его протекания. Математическое описание этих соотношений - следующий этап (3), ведущий к формулировке математической модели.

В связи с неявным характером зависимости выходных параметров Y от входных переменных X в полученной модели необходимо выбрать удобный метод расчета (5) или разработать алгоритм решения задачи (4). В последнем случае необходимо составить и отладить программу (6), выбрать параметры вычислительного процесса (7). После чего осуществить контрольный счет (10). Для решения контрольных задач необходимы справочные или дополнительно экспериментально определенные константы, содержащиеся в математической модели (9).

Аналитическое решение (8) или алгоритм (6) и (7) в виде программы представляют новую форму модели, которая может быть использована для описания процесса, если будет установлена адекватность модели натурному объекту (12). Для проверки адекватности необходимо собрать экспериментальные данные (11) о значении тех факторов и параметров, которые входят в состав модели. Отрицательный результат проверки адекватности модели свидетельствует о ее недостаточной точности и может быть следствием различных причин. В частности может потребоваться переделка программы с целью реализации нового алгоритма или другого решения, не дающих столь большой погрешности. Возможна также корректировка математической модели или внесение изменений в физическую модель, если будет установлено, что пренебрежение рядом факторов является причиной неудачи. Любая корректировка модели (13) потребует повторного осуществления последующих этапов.

Положительный результат проверки адекватности модели позволяет изучать процесс путем проведения серии расчетов на модели (14), т.е. эксплуатации полученной информационной модели (I). Установление целевой функции и ограничений (15) с помощью теоретического анализа или экспериментов и включение в модель оптимизирующего математического аппарата (16) для обеспечения целенаправленной эволюции системы дает возможность построить оптимизационную модель (II). Адаптация полученной модели для управления производственным процессом в реальном масштабе времени (18) при включении в систему средств автоматического регулирования (17) завершает работу по созданию модели управления (III).

Последовательная корректировка информационной модели с целью повышения ее точности путем учета взаимного влияния факторов и параметров, введения дополнительных факторов и уточнения различных констант позволяет получить эвристическую модель, которая может быть инструментом для более глубокого изучения механизма явлений.

Лекция №6 Построение стохастической модели

Построение стохастической модели включает разработку, оценку качества и исследование поведения системы с помощью уравнений, описывающих изучаемый процесс.

Для этого путем проведения специального эксперимента с реальной системой добывается исходная информация. При этом используются методы планирования эксперимента, обработки результатов, а также критерии оценки полученных моделей, базирующиеся на таких разделах математической статистики как дисперсионный, корреляционный, регрессионный анализ и др.

В основе методов построения статистической модели, описывающей технологический процесс (рис.6.1) лежит концепция «черного ящика». Для него возможны многократные измерения входных факторов: x_1, x_2, \dots, x_k и выходных параметров: y_1, y_2, \dots, y_p , по результатам которых устанавливают зависимости:

$$y_n = f(x_1, x_2, \dots, x_k); \quad n = 1, 2, \dots, p \quad (6.1)$$

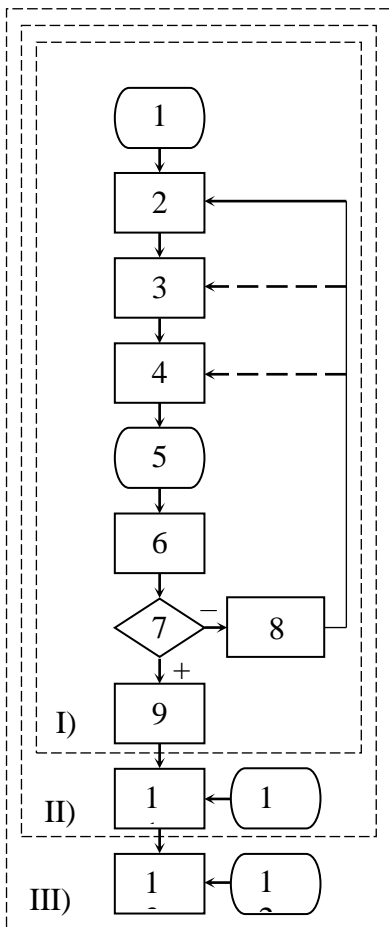


Рис.6.1 Этапы разработки стохастической модели:
 1 - постановка задачи; 2 - выбор факторов и параметров; 3 - выбор вида модели; 4 - планирование эксперимента; 5 - реализация экспериментов по плану; 6 - построение статистической модели; 7 - проверка адекватности модели; 8 - корректировка модели; 9 - исследование процесса с помощью модели; 10 - определение параметров оптимизации и ограничений; 11 - оптимизация процесса с помощью модели; 12 - управление процессом

При статистическом моделировании вслед за постановкой задачи (1) производится отсеивание наименее важных факторов из большого числа входных переменных, влияющих на ход процесса (2). Выбранные для дальнейшего исследования входные переменные составляют список факторов x_1, x_2, \dots, x_k в (6.1), управляя которыми можно регулировать выходные параметры y_n . Количество выходных параметров модели также следует по возможности уменьшить, чтобы сократить затраты на эксперименты и обработку данных.

При разработке статистической модели обычно ее структура (3) задается произвольно, в виде удобных для использования функций, аппроксимирующих опытные данные, а затем уточняется на основе оценки адекватности модели.

Наиболее часто используется полиномиальная форма модели. Так, для квадратичной функции:

$$y_n = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i,j=1, i \neq j}^k b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2 \quad (6.2)$$

где b_0, b_i, b_{ij}, b_{ii} – коэффициенты регрессии.

Обычно сначала ограничиваются наиболее простой линейной моделью, для которой в (6.2) $b_{ii}=0, b_{ij}=0$. В случае ее неадекватности усложняют модель введением членов, учитывающих взаимодействие факторов x_i, x_j и (или) квадратичных членов x_i^2 .

С целью максимального извлечения информации из проводимых экспериментов и уменьшения их числа проводится планирование экспериментов (4) т.е. выбор количества и условий проведения опытов необходимых и достаточных для решения с заданной точностью поставленной задачи.

Для построения статистических моделей применяют два вида экспериментов: пассивный и активный. *Пассивный эксперимент* проводится в форме длительного наблюдения за ходом неуправляемого процесса, что позволяет собрать обширный ряд данных для статистического анализа. В *активном эксперименте* имеется возможность регулирования условий проведения опытов. При его проведении наиболее эффективно одновременное варьирование величины всех факторов по определенному плану, что позволяет выявить взаимодействие факторов и сократить число опытов.

На основе результатов проведенных экспериментов (5) вычисляют коэффициенты регрессии (6.2) и оценивают их статистическую значимость, чем завершается построение модели (6). Мерой адекватности модели (7) является дисперсия, т.е. среднеквадратичное отклонение вычисляемых значений от экспериментальных. Полученная дисперсия сопоставляется с допустимой при достигнутой точности экспериментов.

В случае неадекватности модели, ее корректировка (8) может потребовать включения дополнительных факторов, учета нелинейных эффектов, их взаимного влияния или изменения плана экспериментов. После этого повторно выполняются последующие этапы.

Использование модели, выдержавшей проверку адекватности для изучения (I), оптимизации (II), управления (III) процессом (9)-(13), аналогично соответствующим этапам (14)-(18) применения детерминированной модели (рис.5.1).

Лекция №7

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОСНОВНЫХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Движение потоков вещества и энергии. Тепло- и массоперенос

Движение потоков вещества и энергии

При анализе протекающих в рабочей зоне технологических процессов, обычно выделяют типовые блоки. Вначале описывают *структуру потоков вещества и энергии* и исследуют гидро- и газодинамику процесса. Затем изучают *теплообмен и перенос вещества* с учетом выявленных потоков, *рассматривают кинетику химических реакций и физических превращений*. В завершение составляют *соотношения баланса*, отражающие законы сохранения (массы, импульса, энергии, заряда и т.д.) в исследуемой технологической системе.

В основе детерминированных математических моделей технологических процессов лежат физические законы гидродинамики, термодинамики, электродинамики и магнетизма, тепло- и массопереноса, химических и фазовых превращений.

На основе общих законов механики движение обрабатываемого материала (жидкости и газа) описывается рядом соотношений.

Уравнение сплошности, связывающее плотность движущейся среды ρ с ее скоростью \vec{v} :

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = J, \quad (7.1)$$

где J – объемный источник изменения массы вследствие химических и фазовых превращений; τ - время.

Уравнение Навье-Стокса для движения вязких сред под действием объемной силы \vec{F} :

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\vec{v}}{d\tau} &= \rho \left(\frac{d\vec{v}}{d\tau} + \operatorname{grad} \frac{\vec{v}^2}{2} - \vec{v} \times \operatorname{rot} \vec{v} \right) = \\ &= \vec{F} - \operatorname{grad} \bar{p} - \eta \operatorname{rot}(\operatorname{rot} \vec{v}) + \left(\zeta + \frac{4}{3} \eta \right) \operatorname{grad}(\operatorname{div} \vec{v}) \end{aligned}, \quad (7.2)$$

где $\vec{F} = \text{div} \vec{T}$, \vec{T} - тензор напряжений, \bar{p} - давление, $\eta = \rho\nu$, η - динамическая вязкость, ν - кинематическая вязкость, ζ - объемная вязкость.

Левая часть уравнения (3.2) содержит алгебраическую сумму локального и конвективного ускорения, в правой части слагаемые описывающие объемную силу, давление и силы сопротивления, вызванные вязкостью.

Система уравнений (3.1) и (3.2) позволяет определить неизвестные функции скоростей $\vec{v}(x, y, z, \tau)$ и давления $\bar{p}(x, y, z, \tau)$ при заданных значениях $\vec{F}(x, y, z, \tau)$, $J(x, y, z, \tau)$, ρ , η и ζ .

Тепло- и массоперенос

В технологии машиностроения традиционно широко используются процессы механической и термической обработки. В настоящее время все чаще механическую обработку интенсифицируют тепловыми воздействиями (рис.7.1), а термическую обработку совмещают с деформированием (рис.7.2).

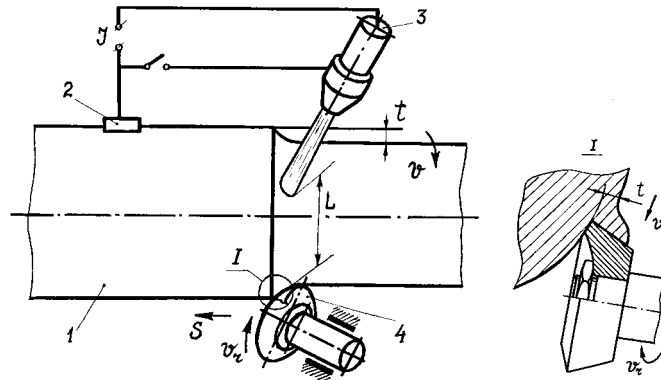
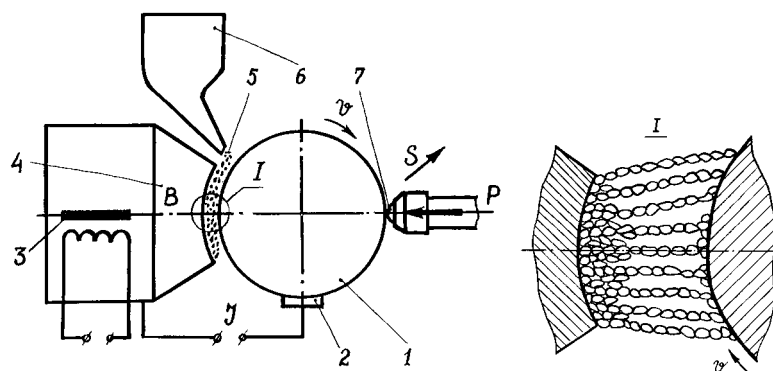


Рис.7.1. Ротационная обработка с предварительным нагревом:

1 – обрабатываемая деталь; 2 – скользящий контакт; 3 – плазмотрон; 4 – ротационный резец; v – скорость главного движения; v_r – скорость дополнительного движения; S – скорость подачи; t – глубина резания; L – расстояние от пятна нагрева до инструмента, I – сила тока плазменной дуги



В этой связи особую актуальность приобретают расчеты процессов тепло- и массопереноса в технологической зоне обрабатываемой системы.

Уравнение непрерывности потока для теплоты:

$$\frac{\partial \rho_q}{\partial \tau} + \operatorname{div} \vec{F}_q = 0,$$

где \vec{F}_q - плотность теплового потока, ρ_q - плотность количества теплоты:

$$\rho_q(r) = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta Q(r)}{\Delta V} \right),$$

здесь $\Delta Q(r)$ - количество теплоты в малом объеме ΔV вокруг точки r .

В предположении, что плотность ρ и удельная теплоемкость c не зависят от температуры, с учетом закона Фурье:

$$F_q = -\lambda \cdot \operatorname{grad} \theta$$

где λ - коэффициент теплопроводности, θ - температура.

Получим уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = -\operatorname{div} \left(-\frac{\lambda}{c\rho} \operatorname{grad} \theta \right) = \omega \cdot \operatorname{div}(\operatorname{grad} \theta) \quad (7.4)$$

здесь ω - коэффициент температуропроводности, $\omega = \lambda/(c\rho)$

При изучении диффузии закон Фурье для теплопроводности заменяют уравнением Фика для концентрации вещества, а коэффициент теплопроводности ω - коэффициентом диффузии D .

Уравнения (7.3) и (7.4) дают решения для температуры $\theta(x, y, z, \tau)$ и теплоты $Q(x, y, z, \tau)$ при заданных и начальных и граничных условиях конкретных значениях ρ, c и λ .

Лекция №8

Химические реакции и физические превращения

Воздействие на обрабатываемую деталь концентрированными потоками энергии приводит к структурным превращениям в ее поверхностном слое (рис.8.1) и химическим реакциям в ванне расплава (рис.8.2).

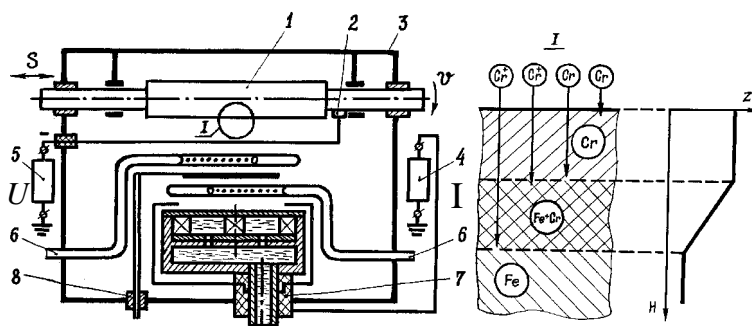


Рис.8.1. Ионная имплантация с осаждением покрытия:

1 – обрабатываемая деталь; 2 – скользящий контакт; 3 – вакуумная камера; 4 – источник питания магнетрона; 5 – источник питания постоянного напряжения; 6 – подача газа; 7 – магнетрон; 8 – заслонка; v – скорость главного движения; S – скорость подачи; U –

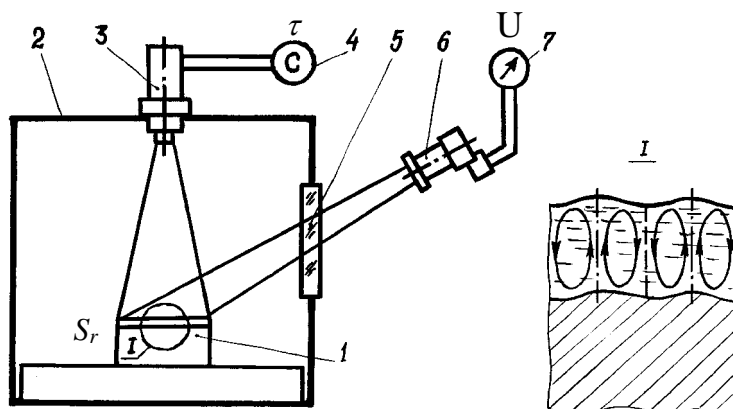


Рис.8.2. Электроннолучевой нагрев поверхности:

1 – обрабатываемая деталь; 2 – вакуумная камера; 3 – электронная пушка с системами фокусировки и развертки; 4 – секундомер; 5 – иллюминатор; 6 – пирометр; 7 – милливольтметр; S_r – площадь пятна нагрева; τ – время обработки; U – ускоряющее напряжение; I – сила тока электронного пучка

Изучение физико-химических превращений складывается из анализа стехиометрических соотношений уравнения равновесия и описания кинетических закономерностей.

Стехиометрическое уравнение является кратким выражением материального баланса реакции:

$$\sum_{i=1}^m \nu_i A_i = \nu_1 A_1 + \nu_2 A_2 + \dots + \nu_m A_m = 0, \quad (8.1)$$

где ν_i - стехиометрические коэффициенты, для исходных веществ $\nu_i < 0$, для продуктов реакции $\nu_i > 0$, A_i – символы веществ участвующих в реакции.

Расчет физико-химического равновесия позволяет выявить возможность получения тех или иных веществ в требуемых количествах, а также оценить содержание в них примесей и побочных веществ. Существует несколько методов термодинамического анализа сложных систем. Простейшие основаны на решении системы уравнений, образованных выражениями для констант равновесия, совместно с уравнениями стехиометрического баланса (8.1). Для многокомпонентных гетерогенных систем, к которым в первую очередь относятся технологические системы, применяются методы основанные на использовании принципов максимума энтропии и минимума свободной энергии Гиббса.

Кинетика реакций и превращений описывается скоростью ω_r изменения массы реагентов M в единице объема V для гомогенных реакций

$$\omega_r = \frac{1}{V} \frac{dM}{d\tau}$$

или на единицу поверхности S_r для гетерогенных процессов

$$\omega_r = \frac{1}{S_r} \frac{dM}{d\tau}.$$

Зависимость скорости реакции от концентрации реагирующих веществ

$$\omega_r = k[A_1]^{n_1}[A_2]^{n_2} \dots [A_m]^{n_m},$$

где n_i – порядок реакции по веществу A_i , ($i=1, 2, \dots, m$), k – константа скорости процесса, выражаемая через энергию активации E уравнением Аррениуса:

$$k = k_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right)$$

здесь k_0 – предэкспоненциальный множитель, R – универсальная газовая постоянная, T – абсолютная температура.

Лекция №9

Уравнения баланса вещества и энергии

Для исследования структурных изменений и фазовых переходов в процессах физико-технической обработки на основании анализа движения потоков вещества и энергии, тепло- и массопереноса, электромагнитных, ионно-лучевых процессов, химических реакций и физических превращений, используются уравнения баланса.

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0; \quad (9.1)$$

$$\frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho \vec{v} \vec{v}) + \operatorname{div} \vec{P} = \rho \sum_{i=1}^K \vec{F}_{m_i}; \quad (9.2)$$

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho e \vec{v}) + \operatorname{div} \vec{F}_q = \sum_{i=1}^K \vec{F}_{m_i} \vec{F}_{\alpha_i} - \vec{P} \cdot \operatorname{grad} \vec{v}; \quad (9.3)$$

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho s \vec{v}) + \operatorname{div} \vec{F}_s = \sigma \quad (9.4)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} + \operatorname{div}(C_i \vec{v}) + \operatorname{div} \vec{F}_{\alpha_i} = \sum_{r=1}^{R_0} v_{ir} \omega_r; \quad (9.5)$$

где

$$\rho = \sum_{i=1}^K M_i C_i; \quad (9.6)$$

$$\vec{F}_s = \frac{\left(\vec{F}_q - \sum_{i=1}^K \vec{F}_{\alpha_i} W_i \right)}{T}; \quad (9.7)$$

$$\begin{aligned} \sigma = & \vec{F}_q \left(\operatorname{grad} \frac{1}{T} \right) - \sum_{i=1}^K \vec{F}_{\alpha_i} \left(\operatorname{grad} W_i / T - \frac{\vec{F}_{m_i}}{T} \right) - \\ & - \left(\frac{1}{T} \right) \vec{P} \cdot \operatorname{grad} \vec{v} + \left(\frac{1}{T} \right) \sum_{i=1}^K W_i \sum_{r=1}^{R_0} v_{ir} \omega_r; \end{aligned} \quad (9.8)$$

здесь ρ - плотность обрабатываемого материала, $\rho \vec{v}$ - плотность импульса, ρe - плотность внутренней энергии, ρs - плотность энтропии, C_i - концентрация i -го компонента, τ - текущее время, \vec{P} - тензор давления, K - число компонентов, \vec{F}_{m_i} - массовая сила действующих на i -тый компонент, \vec{F}_q - плотность теплового потока, \vec{F}_{α_i} - плотность диффузионного потока i -го компонента, \vec{F}_s - плотность

потока энтропии, σ - производство энтропии, R_0 - число протекающих реакций, ν_{ir} - стехиометрический коэффициент i -го компонента в r -ой реакции, ω_r - скорость r -ой реакции, M_i - молекулярная масса i -го компонента, W_i - химический потенциал i -го компонента, T - абсолютная температура, \bar{P}_q - диссипативная часть тензора давления, описывающего вязкие силы.

Уравнения баланса, характеризующие сплошность материала $\partial\rho$ (9.1), законы сохранения вещества ∂C_i (9.5), импульса $\partial(\rho\vec{v})$ (9.2) и энергии $\partial(\rho e)$ (9.3), а также второе начало термодинамики $\partial(\rho s)$ (9.4) в процессе интенсивной обработки, описывающие состояние материала с плотностью ρ (9.6), энтропией S (9.7) и ее производством σ (9.8) определяют кинетику технологических процессов и устанавливают последовательность образования структур и фаз при увеличении мощности воздействий.

Сложность уравнений баланса и состояния, необходимость дополнительных начальных и граничных условий приводит к необходимости использования упрощенных моделей структуры технологических потоков.

Лекция №10

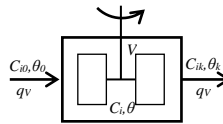
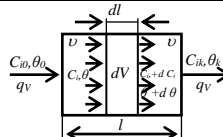
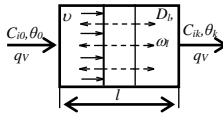
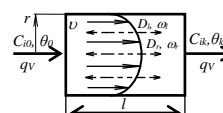
СТРУКТУРНЫЕ И ПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПОТОКОВ

Модели структуры идеальных технологических потоков

Технологически процессы сопровождаются движением потоков вещества и энергии (табл.10.1). Так как это движение часто сложно описать, а создаваемые при этом модели слишком громоздки, то в таких случаях применяют упрощенные *модели идеальных потоков* (табл.10.1, лек.2). В случаях неудовлетворительной точности моделей, в них вводят ряд параметров, дополнительно описывающих структуру потока, создавая *модели неидеальных потоков* (табл.10.1, лек.9).

Таблица 10.1

Модели структуры технологических потоков

№ п/п	Наименование модели	Схема модели	Обозначения параметров
1	Модель идеального смешения		q_v – объемный расход потока; V – объем рабочей зоны; C_{i0}, θ_0 – входные параметры, C_{ik}, θ_k – выходные параметры потока
2	Модель идеального вытеснения		v – скорость потока; l – координата
3	Диффузионная однопараметрическая модель		D_l и ω_l – коэффициенты диффузии и температуропроводности в продольном направлении
4	Диффузионная двухпараметрическая модель		r – координата, D_r и ω_r – коэффициенты диффузии и температуропроводности в поперечном направлении

Модель идеального смешения (табл.10.1, п.1) основывается на том, что поступающий в рабочую зону поток с расходом q_v мгновенно распределяется по всему объему перемешиваясь с массой, уже находящейся в рабочей зоне. В

этом случае концентрации всех веществ C_{i0} и температура θ_0 равномерно распределены по всему объему V рабочей зоны, причем на выходе из нее значения C_i и θ точно такие же, что и в объеме. На входе C_i и θ претерпевают скачок, так как значения параметров входящего потока, мгновенно смешивающегося с содержимым рабочей зоны, изменяются до значений, отвечающих средним по объему зоны. Отношение q_v/V характеризует среднее время нахождения частиц потока в рабочей зоне при идеальном смешении.

Количество i -го вещества поступившего в зону за время $d\tau$, равно $C_{i0}q_v d\tau$, а покинувшего ее - $C_i q_v d\tau$. В установившемся режиме, когда $C_{i0} = const$, выполняется равенство $C_{i0}q_v d\tau = C_i q_v d\tau$, т.е. накопление i -го вещества в рабочей зоне не происходит. При изменении в некоторый момент времени τ величины C_{i0} установившийся режим нарушается, в результате чего концентрация в зоне за время $d\tau$ уменьшится на dC_i . Тогда изменение количества i -го компонента в объеме зоны составит VdC_i , причем оно равно разности между приходом и расходом i -го вещества

$$VdC_i = C_{i0}q_v d\tau - C_i q_v d\tau,$$

или

$$dC_i/d\tau = \left(q_v/V\right)(C_{i0} - C_i), \quad (10.1)$$

Аналогично при рассмотрении температуры получаем уравнение:

$$d\theta/d\tau = \left(q_v/V\right)(\theta_0 - \theta), \quad (10.2)$$

При протекании в рабочей зоне химической реакции со скоростью ω_i ($\omega_i > < 0$), сопровождающейся объемным тепловым эффектом Q ($Q > < 0$) в уравнениях (10.1) и (10.2) появляются дополнительные слагаемые с коэффициентами ω_i и $Q/c\rho$ соответственно.

Модель идеального вытеснения (табл.10.1, п. 2) основывается на том, что поток движется равномерно со скоростью v без перемешивания в продольном направлении, при однородном распределении параметров в поперечном направлении.

В установившемся режиме ($C_{i0} = C_{ik} = const$) накопление вещества в объеме dV не происходит. При изменении состава потока на входе C_{i0} концентрация i -го компонента при прохождении потоком некоторого сечения с бесконечно малой толщиной dl изменится на величину dC_i и на выходе из него составит

величину $C_i + dC_i$. Изменение C_i на входе в сечение происходит вследствие того, что надвигающийся со скоростью ν на выбранное сечение поток характеризуется иной текущей величиной C_i . При полном вытеснении потока изменение количества компонента i в объеме dV за время $d\tau$ составит $dVdC_i$, что равно разности между приходом и расходом компонента за это же время:

$$dVdC_i = C_i q_v d\tau - (C_i + dC_i) q_v d\tau;$$

или

$$\frac{dC_i}{d\tau} = -\frac{q_v dC_i}{dV} = -\frac{\nu dC_i}{dl} \quad (10.3)$$

Аналогично (10.3) выводится уравнение, описывающее изменение температуры в потоке со структурой, близкой к идеальному вытеснению:

$$\frac{d\theta}{d\tau} = -\frac{q_v d\theta}{dV} = -\frac{\nu d\theta}{dl}. \quad (10.4)$$

Лекция №11

Модели структуры неидеальных технологических потоков

Оценка реальных технологических потоков рабочей зоны, в которой происходит продольное и радиальное перемешивание в результате конвекции и молекулярной диффузии, проводится на основе диффузионной модели (табл.10.1, лек.8). Основой диффузионной модели служит модель идеального вытеснения (10.3) и (10.4), осложненная обратным продольным и поперечным перемешиванием.

Если при построении модели учитывают только продольное перемешивание, а в поперечном направлении технологические факторы полагают постоянными, то такая модель называется *однопараметрической* (табл.10.1, п.3).

$$\frac{dC_i}{d\tau} = -\frac{\nu dC_i}{dl} + \frac{D_l d^2 C_i}{dl^2}; \quad (11.1)$$

$$\frac{d\theta}{d\tau} = -\frac{\nu d\theta}{dl} + \frac{\omega_l d^2 \theta}{dl^2}; \quad (11.2)$$

где D_l и ω_l коэффициенты диффузии и температуропроводности в продольном направлении.

Если задача требует, чтобы математическое описание учитывало еще и поперечное перемешивание, то в (11.1) и (11.2) дополнительно вводят по второму параметру, описывающему перемешивание в поперечном направлении. Модель становится *двухпараметрической* (табл.10.1, п.4) и записывается в частных производных. Так в цилиндрических координатах

$$\frac{dC_i}{d\tau} = -\frac{\nu dC_i}{dl} + \frac{D_l \partial^2 C_i}{\partial l^2} + \frac{D_r}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_i}{\partial r} \right); \quad (11.3)$$

$$\frac{d\theta}{d\tau} = -\frac{\nu d\theta}{dl} + \frac{\omega_l \partial^2 \theta}{\partial l^2} + \frac{\omega_r}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right); \quad (11.4)$$

где D_r и ω_r - коэффициент диффузии и температуропроводности в поперечном направлении.

В тех случаях когда описанные модели (10.1)-(11.4) не отражают с требуемой точностью реального характера технологических процессов, используют *комбинированные модели*, содержащие их параллельное и последовательное включение с учетом образования застойных зон, обратной и шунтирующей циркуляции.

Кроме рассмотренных концентрации C_i и температуры θ математические модели потоков вещества и энергии могут содержать уравнения для других технологических факторов, а также учитывать анизотропность свойств обрабатываемого материала с течением времени и по различным направлениям.

Лекция №12

Модели системы с сосредоточенными параметрами

При возникновении трудностей в использовании аналитической модели, для получения которой требуется принимать допущения о постоянстве параметров дифференциальных уравнений (7.1)-(9.8) и (10.1)-(11.4), во многих случаях целесообразно решать задачи с произвольным законом изменения параметров, применяя численные решения.

Обычно для решения дифференциальных уравнений используют разностные методы. Исходное дифференциальное уравнение, общий вид которого может быть представлен выражением

$$y' = \frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad (12.1)$$

для численного решения преобразуется к разностному виду введением дискретных переменных $(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n)$ и $(y_0, y_1, y_2, \dots, y_n)$. Обычно дают равномерное приращение независимой переменной Δx , откуда $x_i = x_0 + i\Delta x$, где $i=0, 1, 2, \dots, n$. Тогда (12.1) в разностной форме

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x} = f_i(x, y)$$

откуда

$$y_{i+1} = y_i + \Delta x f_i(x, y) \quad (12.2)$$

В результате (12.2) позволяет по известному значению y_i и $f_i(x, y)$ на предыдущем i -том шаге по x найти y на последующем $(i+1)$ -ом шаге.

Чтобы осуществить этот процесс вычислений вплоть до n -го шага надо задать начальное $y(x_0) = y_0$. Вид функции $f_i(x, y)$ зависит от принятого метода вычисления производной (табл.12.1).

В простейшем случае, реализующем метод Эйлера, задают $f_i(x, y) = f(x_i, y_i)$, т.е. экстраполируют производную на целый шаг Δx вперед, вычислив ее значение в предыдущей точке. При использовании методов повышенной точности Эйлера-Коши, Рунге-Кутта и др., погрешность решения может быть существенно снижена при сокращении времени расчетов.

Для проверки расчетов при численном интегрировании уравнения (12.1), необходимо задать величину шага Δx , от которого зависят погрешность вычислений δy и затраты времени на расчеты. Для оценки погрешности, вносимой численным методом решения задачи, используют два приема.

Таблица 12.1

Методы численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений

№ п/п	Наименование метода	Расчетная формула	Обозначения	Порядок погрешности, S
1	Метод Эйлера	$y_{i+1} = y_i + \Delta x f(x_i, y_i)$		2
2	Усовершенствованный метод Эйлера	$y_{i+1} = y_i + \Delta x/2 \times [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^*)]$	$x_{i+1} = x_i + \Delta x;$ $y_{i+1}^* = y_i + \Delta x f(x_i, y_i)$	2
3	Метод Эйлера – Коши	$y_{i+1} = y_i + \Delta x f(x_{i+0.5}, y_{i+0.5})$	$x_{i+0.5} = x_i + \Delta x/2;$ $y_{i+0.5} = y_i + \Delta x/2 \times f(x_i, y_i)$	3
4	Метод Рунге - Кутты	$y_{i+1} = y_i + \Delta x/6(k_1 + 4k_2 + k_3)$	$k_1 = \Delta x f(x_i, y_i);$ $k_2 = \Delta x \times f(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{k_1}{2});$ $k_3 = \Delta x f(x_i + \Delta x, y_i + 2k_2 - k_1)$	4

При первом, сопоставляют численные данные с результатами известного аналитического решения, являющегося при постоянных параметрах модели ее частным случаем.

При втором, сопоставляют результаты повторного решения задачи с последовательно уменьшаемой величиной шага Δx . Если произвести вычисления, изменив Δx , в два раза, то для оценки δy можно воспользоваться приближенной формулой Рунге:

$$\delta y_{\Delta x} = \frac{[y(2\Delta x) - y(\Delta x)]2^S}{(2^S - 1)},$$

где $y(2\Delta x)$ и $y(\Delta x)$ - расчетные значения полученные соответственно с шагом $2\Delta x$ и Δx , S - порядок погрешности, присущий выбранному методу (табл.12.1).

При уменьшении шага Δx , расчетные зависимости $y(x)$ сходятся к точному решению. Во многих случаях желательно предусмотреть автоматический выбор шага Δx , по оценке погрешности получаемого результата. В этих случаях сравнивают погрешность с заданной предельной ошибкой δy_{max} и если $\delta y > \delta y_{max}$ повторяют вычисления с уменьшенным шагом $\Delta x^* = \alpha(\Delta x)$, в котором обычно $\alpha = 0,8 \dots 0,9$.

После устранения вычислительной погрешности, можно приступить к оценке адекватности модели, так как остаточная погрешность связана только с погрешностями физической модели и ее математической реализации.

Лекция №13

Модели системы с распределенными параметрами

Рассмотрим более общие случаи, в которых параметры каждой точки тела или среды зависят от параметров соседних точек. Описываются такие процессы нестационарными дифференциальными уравнениями в частных производных с краевыми условиями.

Численное решение таких задач целесообразно осуществить методом конечных разностей, вводя дискретные переменные τ, x, y, \dots, t , т.е. описывая время процесса: $\tau = k\Delta\tau$, а координаты пространственной сетки $\Delta x \times \Delta y \times \dots$: $x = i\Delta x$, $y = j\Delta y, \dots$

Откуда после замены производных конечными разностями для параметров t

$$\begin{aligned}\frac{dt}{d\tau} &\Rightarrow \frac{\Delta t}{\Delta\tau} = \frac{t_{i,j}^{k+1} - t_{i,j}^k}{\Delta\tau}; \\ \frac{\partial t}{\partial x} &\Rightarrow \frac{2\Delta t}{2\Delta x} = \frac{t_{i+1,j}^k - t_{i-1,j}^k}{2\Delta x}; \\ \frac{\partial^2 t}{\partial x^2} &\Rightarrow \frac{\Delta(\Delta t)}{\Delta x^2} = \frac{t_{i+1,j}^k - 2t_{i,j}^k + t_{i-1,j}^k}{\Delta x^2}; \dots\end{aligned}$$

В результате подстановки в дифференциальное уравнение получим выражение для расчета параметра t в i, j -м узле сетки в $(k+1)$ -й момент времени по известным для k -го момента параметрам окружающих узлов сетки:

$$\begin{aligned}\frac{t_{i,j}^{k+1} - t_{i,j}^k}{\Delta\tau} &= f[C_{i,j}^k(t); \frac{t_{i+1,j}^k - t_{i-1,j}^k}{2\Delta x}; \frac{t_{i+1,j}^k - 2t_{i,j}^k + t_{i-1,j}^k}{\Delta x^2}; \\ &\frac{t_{i,j+1}^k - t_{i,j-1}^k}{2\Delta y}; \frac{t_{i,j+1}^k - 2t_{i,j}^k + t_{i,j-1}^k}{\Delta y^2}; \dots]\end{aligned}\tag{13.1}$$

где значения переменных $C_{i,j}^k(t)$ принимаются в соответствии с параметрами центрального узла сетки $t_{i,j}^k$ в k -й момент времени.

Уравнение типа (13.1) решается в явном виде относительно $t_{i,j}^{k+1}$, что позволяет последовательно обходя все узлы сетки по столбцам и строкам

сеточного поля, определить распределение параметра t через время $\Delta\tau$, $2\Delta\tau, \dots, k\Delta\tau$ от заданного в начальный момент $\tau=0$.

На границах тела, где уравнение (13.1) не может быть использовано, так как граничные точки не окружены со всех сторон узлами сетки, используется разностная форма граничных условий

$$\begin{aligned} \frac{t_{z+1}^k - t_z^k}{\Delta x} &= \varphi[C_{z_1}^k(t_z^k)(t_n - t_z^k)], \\ \frac{t_{z+1}^k - t_z^k}{\Delta y} &= \varphi[C_{z_2}^k(t_z^k)(t_n - t_z^k)], \dots, \end{aligned} \quad (13.2)$$

где t_{z+1}^k - параметр соседней с граничной внутренней точки тела, t_z^k - параметр граничной точки, t_n - значения параметра окружающей среды, $C_{z_1}^k, C_{z_2}^k, \dots$ - значения переменных, принимающиеся в зависимости от параметра t_z^k в k -й момент времени

Описанное в (13.1) и (13.2) приближение модели к реальному процессу по геометрии изделия, по действительной зависимости свойств от изменяющихся параметров с течением времени, позволяют вплотную подойти к построению *имитационной модели*. При необходимости в подобного рода моделях могут быть приняты в расчет особенности конкретных технологических процессов воспроизводящие ход реального процесса во времени в различных точках рабочей зоны.

Лекция №14

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ

Основные понятия корреляционного, регрессионного и дисперсионного анализа

Для технологических экспериментов, характерны статистические объекты исследований, в которых имеют место стохастические или корреляционные взаимосвязи между параметрами и факторами. Получить математическую модель технологического процесса - значит найти математическое описание этих взаимосвязей.

В задачу корреляционного, регрессионного и дисперсионного анализа входит получение на основании экспериментальных данных математической модели процесса и ее анализ. Методы корреляционного и регрессионного анализа применимы только для таких параметров, которые при изучении физической природы объекта являются взаимосвязанными.

На первом этапе обычно оценивают степень тесноты взаимосвязи значений функции отклика с одной или несколькими независимыми переменными. В первом случае используется *коэффициент парной корреляции* r_{yx} , во втором - *коэффициент множественной корреляции* $R_{yx_1x_2\dots x_m}$.

Коэффициент парной корреляции:

$$r_{yx} = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{nS_y S_x} \quad (14.1)$$

где n - объем выборки, \bar{y} и \bar{x} - средние арифметические значения y_i и x_i в рассматриваемой выборке, S_y и S_x их средние квадратические отклонения.

Коэффициент множественной корреляции с использованием метода определителей находится по формуле

$$R_{1,2,3,\dots,m} = \sqrt{1 - D/D_{11}} \quad (14.2)$$

где m - число независимых переменных, D - определитель, составленный из всех коэффициентов парной корреляции, D_{11} - определитель, получающийся из D исключением левого столбца и верхней строки.

$$D = \begin{vmatrix} 1 & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1m} \\ r_{21} & 1 & r_{23} & \dots & r_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{m1} & r_{m2} & r_{m3} & \dots & 1 \end{vmatrix}; \quad D_{11} = \begin{vmatrix} 1 & r_{23} & \dots & r_{2m} \\ r_{32} & 1 & \dots & r_{3m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{m2} & r_{m3} & \dots & 1 \end{vmatrix}$$

Значения r_{yx} (14.1) и $R_{yx_1x_2\dots x_m}$ (14.2) находятся в пределах от -1 до +1.

Если они достоверны, т.е. существенно отличаются от 0, значит между исследуемыми факторами имеется линейная корреляционная зависимость. В противном случае эта зависимость отсутствует, либо является существенно нелинейной. В результате корреляционным анализом подтверждается наличие взаимосвязей между исследуемыми факторами.

На следующем этапе обработки экспериментальных данных с помощью регрессионного анализа выбирают модель, в наилучшей степени описывающую указанные взаимосвязи. Уравнение, по которому могут быть найдены числовые значения выборочных средних функций отклика при соответствующих значениях независимых переменных называется *уравнением регрессии*. В общем случае оно может быть записано в виде

$$\bar{y} = f(x_1, x_2, \dots, x_m) \quad (14.3)$$

При аппроксимации неизвестных функций отклика (14.3) в математической статистике часто используют полиномиальные модели, а наиболее часто - простейшие из них - квадратичные.

$$\bar{y} = b_0 + \sum_{i=1}^m b_i x_i + \sum_{i,j=1, i \neq j}^m b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^m b_{ii} x_i^2 \quad (14.4)$$

где b_0, b_i, b_{ij}, b_{ii} – коэффициенты регрессии.

С позиций статистики полиномиальная модель (14.4) удобна тем, что позволяет увеличить степень точности аппроксимации за счет повышения порядка полинома.

При определении параметров уравнения регрессии все переменные и соотношения между ними выгодно выражать в стандартизированном масштабе. Значения переменных в стандартизированном масштабе определяются по формуле:

$$t_{x_i} = \frac{(x_i - \bar{x})}{S_x},$$

где x_i - значения переменных в натуральном масштабе, S_x - их среднеквадратичные отклонения от среднеарифметического значения \bar{x} .

Лекция №15

Условия применимости статистического анализа

Статистическое уравнение адекватно описывает результаты опытов, если квадратическое отклонение от экспериментальных данных y_i значений зависимой переменной y_{pi} , рассчитанной по уравнению регрессии, обусловлено только ошибкой воспроизведения (т.е. случайным характером этого параметра).

Применение корреляционного и регрессионного анализа правомерно и эффективно при соблюдении ряда условий.

1. Параметр оптимизации y - случайная величина с нормальным законом распределения.

2. Дисперсия S_y^2 не зависит от абсолютных значений величины y и остается постоянной и однородной при различных наблюдениях y .

3. Значения независимых переменных x_1, x_2, \dots, x_m изменяются с пренебрежимо малыми ошибками по сравнению с ошибкой в определении y .

4. Переменные x_1, x_2, \dots, x_m линейно независимы.

5. Процесс изменения зависимой переменной y является стационарным и случайным.

6. Экспериментальные данные получены из ряда независимых испытаний и образуют случайную выборку из данной генеральной совокупности.

Рассмотрим проверку выполнения этих условий.

1. Соответствие y нормальному закону распределения устанавливается либо по большим выборкам с помощью критериев Пирсона или Колмогорова, либо на основании анализа природы величины y .

2. Для оценки однородности дисперсии S_y^2 проводят параллельные опыты в различных точках матрицы плана (т.е. при различных значениях x_1, x_2, \dots, x_m)

Если сравниваются два значения $S_{y_1}^2$ и $S_{y_2}^2$ при различных числах степеней их свободы f ($f=N-1$, N - число параллельных опытов или объем выборки) то используется критерий Фишера, рассчитываемый как отношение большей дисперсии к меньшей

$$F_p = \frac{S_{y_1}^2}{S_{y_2}^2}, \text{ где } S_{y_1}^2 > S_{y_2}^2, \quad (15.1)$$

Если наблюдаемое значение F_p (15.1) меньше критического $F_{кр}$ для соответствующих чисел степеней свободы и принятого уровня значимости, то опыты считаются воспроизводимыми, а дисперсии однородными.

Однородность ряда дисперсий при одинаковом числе опытов (для определения каждой из них) оценивают с помощью критерия Кохрена - отношения максимальной дисперсии к сумме всех дисперсий ряда:

$$G_p = \frac{S_{y_{\max}}^2}{(S_{y_1}^2 + S_{y_2}^2 + \dots + S_{y_N}^2)} = \frac{S_{y_{\max}}^2}{\sum_{j=1}^N S_{y_j}^2}, \quad (15.2)$$

где N -число параллельных опытов или различных выборок. Дисперсии однородны, если расчетное значение G_p (15.2), не превышает критического $G_{кр}$.

При неравном числе степеней свободы для каждой из дисперсий ряда их однородность проверяют с помощью критерия Бартлета. Вначале определяют средневзвешенную дисперсию

$$S_y^2 = \frac{\sum_{j=1}^N f_j S_{y_j}^2}{\sum_{j=1}^N f_j}, \quad (15.3)$$

а затем вычисляют

$$B = 2,303 \left[\lg S_y^2 \sum_{j=1}^N f_j - \sum_{j=1}^N (f_j \lg S_{y_j}^2) \right];$$

$$C = 1 + \frac{\left[\sum_{j=1}^N \frac{1}{f_j} - \frac{1}{\sum_{j=1}^N f_j} \right]}{3(N-1)};$$

где $f_j = n_j - 1$, n_j - объем j -й выборки. В случае, когда все $S_{y_j}^2$ соответствуют одной генеральной дисперсии, отношение B/C распределено аналогично критерию Пирсона χ^2 с $N-1$ степенями свободы. Это значит, что при $B/C \leq \chi_{1-p}^2$, данном числе степеней свободы $N-1$ и заданном уровне значимости p дисперсии однородны.

3. Воспроизводимость опытов и однородность дисперсий достигается, когда выявлены и устранены источники нестабильности эксперимента, а также с помощью более точных средств и методов измерений.

Проверку достаточной точности измерения значений независимых переменных можно произвести, сопоставив ее с диапазоном изменения последних. Считается, что ошибки определения независимых переменных не должны превышать 5...7% интервала их варьирования. Ошибки в определении значений зависимой переменной не влияют столь значительно на точность регрессионного анализа и могут составить до 30% интервала варьирования.

4. Отсутствие коррелированности независимых переменных проверяется расчетом парных коэффициентов корреляции между ними.

5. Случайные процессы называют стационарными в том случае, когда основные характеристики процесса (математическое ожидание, дисперсия и др.) постоянны или однородны во времени. Поскольку при пассивном эксперименте свойства процесса определяются по одной представительной

выборке, распространять полученные результаты на весь процесс можно лишь при условии его стационарности.

Проверка стационарности процесса производится в следующем порядке.

По результатам измерения параметра строится случайная последовательность его значений, соответствующая порядку проведения измерений. Полученную реализацию разбивают на несколько (5...10) равных отрезков, для каждого отрезка устанавливают дисперсию $S_{y_j}^2$ и с помощью критерия Кохрена (15.2) определяют являются ли значения $S_{y_j}^2$ на каждом из отрезков оценками одной и той же генеральной дисперсии σ^2 .

Затем на каждом отрезке проводится сравнение среднеарифметических $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N$, соответствующих выборочным дисперсиям $S_1^2, S_2^2, \dots, S_N^2$, числам степеней свободы f_1, f_2, \dots, f_N ($f_j = n_j - 1$, где n_j - объем соответствующей выборки). Всем выборкам соответствует генеральная дисперсия σ^2 , в качестве оценки которой, можно взять средневзвешенную дисперсию S_y^2 (15.3).

Чтобы гипотеза о равенстве всех генеральных средних была справедлива, должно соблюдаться условие:

$$\frac{\bar{S}_y^2}{S_y^2} \leq F_{1-p(N-1, f)}, \text{ в котором } \bar{S}_y^2 = \frac{\sum_{j=1}^N n_j (\bar{y}_j - \bar{y})^2}{N-1},$$

где $F_{1-p(N-1, f)}$ - табличное значение критерия Фишера, \bar{y} - общее среднее всех элементов, отрезков, при объединении их в одну выборку

6. Проверку гипотезы о случайности выборки, необходимую при пассивном эксперименте, можно произвести методом последовательных разностей.

По значениям x_i выборки, расположенным в последовательности их наблюдения (x_1, x_2, \dots, x_n), образуется $n-1$ разностей между соседними членами: $a_1 = x_2 - x_1, a_2 = x_3 - x_2, \dots, a_{n-1} = x_n - x_{n-1}$.

Для оценки случайности выборки используется критерий $\tau = c^2/s^2$, в котором:

$$c^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} a_i^2}{2(n-1)}; \quad s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} (x_i - \bar{x})^2}{n-1}$$

Если $\tau < \tau_q$, где τ_q - критическое значение при уровне значимости q , то гипотеза о случайности выборки верна.

Лекция №16

Оценка достоверности результатов анализа

Поскольку результаты корреляционно-регрессионного анализа, полученные на базе ограниченного числа экспериментальных данных, являются случайными величинами, необходимо оценить их достоверность, определить доверительные интервалы, в которых находятся их истинные значения.

Для этого производится комплекс операций.

1. Оценка достоверности коэффициентов корреляции.
2. Оценка значимости коэффициентов регрессии.
3. Оценка адекватности уравнения регрессии.

Рассмотрим последовательность проведения операций.

1. При любом объеме выборки и многомерном нормальном распределении рассматриваемых факторов вычисляется статистика имеющая распределение Стьюдента с $f=n-2$ степенями свободы.

$$t = r \sqrt{\frac{n-2}{1-r^2}}, \quad (16.1)$$

где r - коэффициент корреляции.

Для проверки нулевой гипотезы H_0 (согласно которой коэффициент корреляции генеральной совокупности равен нулю) находят по таблицам, при фиксированном уровне значимости α и числе степеней свободы $f=n-2$, критическое значение $t_{\alpha/2, n-2}$, удовлетворяющее условию

$$P(|t| \geq t_{\alpha/2, n-2}) = \alpha$$

Если наблюдаемое значение $t_H \geq t_{\alpha/2, n-2}$, то нулевую гипотезу об отсутствии линейной зависимости между переменными x и y следует отвергнуть. Такой метод часто применяют при малом объеме выборок.

При числе наблюдений $n > 50$ надежность коэффициента корреляции можно оценить по его среднему квадратическому отклонению

$$S_r = \frac{1-r^2}{\sqrt{n}} \quad (16.2)$$

и нормированному отклонению

$$t_r = \frac{|r|}{S_r} \quad (16.3)$$

Достоверность коэффициента корреляции считается доказанной с вероятностью 0,997, если $t_r \geq 3$, с вероятностью 0,990 при $t_r \geq 2,58$; с вероятностью

0,95 при $t_r \geq 1,96$. Если n достаточно велико, а r близко к 0,5, то границы доверительного интервала для коэффициента корреляции генеральной совокупности ρ

$$r - t_{кр} S_r \leq \rho \leq r + t_{кр} S_r \quad (16.4)$$

Значение $t_{кр}$ устанавливается по таблице функции Лапласа для выбранной вероятности. Если левая и правая части неравенства имеют одинаковый знак, то r имеет достоверный знак и является значимым.

Соотношения (16.1)-(16.4) справедливы и при оценке достоверности коэффициента множественной корреляции и корреляционных отношений.

2. Проверку значимости коэффициентов регрессии можно производить двумя способами: сравнением абсолютного значения коэффициента с доверительным интервалом и с помощью t -критерия Стьюдента.

В первом случае доверительный интервал для коэффициента b_i вычисляют по формуле

$$\Delta b_i = \pm t_T S_{b_i}$$

где t_T - табличное значение критерия Стьюдента при уровне значимости и числе степеней свободы, для которых определялось S_{b_i} , S_{b_i} - среднеквадратичное отклонение b_i . Коэффициент значим, если его абсолютное значение больше доверительно интервала.

При проверке значимости коэффициентов вторым способом вычисляют

$$t_p = \frac{|b_i|}{S_{b_i}},$$

и сравнивают его с критическим значением этого критерия $t_{кр}$. Коэффициент значим, если $t_p > t_{кр}$ для принятого уровня значимости и числа степеней свободы, при которых определялось S_{b_i} .

Методика определения S_{b_i} зависит от способа получения уравнения регрессии. В случае применения планирования эксперимента:

$$S_{b_i}^2 = \frac{S^2(y)}{nN},$$

где $S^2(y)$ - дисперсия воспроизводимости эксперимента, n - число параллельных опытов в каждой точке матрицы при равномерном дублировании опытов (при отсутствии дублирования $n=1$), N - общее число опытов в матрице плана.

При равномерном дублировании опытов во всех строках матрицы плана число параллельных опытов одинаково. Для каждой строки этой матрицы вычисляют дисперсию S_j результатов по данным n параллельных опытов

$$S_j^2 = \frac{\sum_{u=1}^n (y_{ju} - \bar{y}_j)^2}{n-1},$$

где y_{ju} - значение функции отклика в j -й строке для u -ого опыта.

Если S_j^2 результатов опытов однородны, то дисперсия $S^2(y)$ воспроизводимости эксперимента

$$S^2(y) = \frac{\sum_{j=1}^N S_j^2}{N}, \quad (16.5)$$

где N - число опытов или число строк матрицы плана.

При отсутствии дублирования опытов для определения дисперсии воспроизводимости эксперимента выполняют n_0 параллельных опытов при средних уровнях всех независимых факторов. По результатам этих опытов вычисляют

$$S^2(y) = \frac{\sum_{u=1}^{n_0} (y_u - \bar{y})^2}{n_0 - 1}, \quad (16.6)$$

где y_u – значение функции отклика в u -ом параллельном опыте.

При равномерном дублировании опытов число степеней свободы для расчета $S^2(y)$ и, следовательно S_{b_i} находится как $f=N(n-1)$, при отсутствии дублирования опытов $f=n_0-1$.

3. В зависимости о наличии сведений о дисперсии воспроизводимости эксперимента $S^2(y)$ проверку адекватности уравнения регрессии можно производить по двум схемам.

Схема I, состоящая из трех этапов применяется при отсутствии оценки дисперсии воспроизводимости, что характерно для пассивного эксперимента.

А) Вычисляется дисперсия относительно среднего значения параметра оптимизации:

$$S_{y_0}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{N-1}.$$

Б) Рассчитывается дисперсия, характеризующая отклонение экспериментальных значений величин от найденных по уравнению регрессии. Если порядок уравнения заранее неизвестен, то в случае многофакторного пространства имеет смысл начинать с уравнения первого порядка.

$$S_{y_1}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{f}, \quad (16.7)$$

где \hat{y}_i - значение параметра оптимизации, вычисленное по уравнению регрессии для условий i -го опыта; $f=N-g$ - число степеней свободы, g - число коэффициентов регрессии.

В) Вычисляется опытное значение отношения дисперсий

$$F_0 = S_{y_0}^2 / S_{y_1}^2,$$

которое затем сравнивают с критическим $F_{кр}(f_1, f_2)$. Если $F_0 \leq F_{кр}$, пользоваться уравнением регрессии первого порядка не имеет смысла, так как в изученном интервале изменения уровней факторов оно описывает исследуемую систему не лучше, чем уравнение нулевого порядка. Затем составляют уравнение второго порядка, рассчитывают $S_{y_2}^2$ и $F_1 = S_{y_2}^2 / S_{y_1}^2$. Далее проверяют значимость этого отношения по критерию Фишера. Процедуру повторяют до тех пор, пока не будет выполнено условие $F_r \geq F_{кр}(f_r, f_{r+1})$.

Схема II применяется, если известна дисперсия воспроизводимости $S^2(y)$ эксперимента.

Для оценки адекватности модели, вначале рассчитывают дисперсию адекватности $S_{ад}^2$ по формуле (16.7), а затем вычисляют опытное значение критерия Фишера.

$$F_p = S_{ад}^2 / S^2(y).$$

Если $F_p < F_{кр}(f_r, f_{r+1})$, модель считают адекватной. Значение $S^2(y)$ определяют в зависимости от характера дублирования опытов по формулам (16.5) и (16.6).

Лекция №17

Выбор факторов статистической модели

При отборе факторов предназначенных для включения в статистическую модель, принимается во внимание, что они должны быть управляемыми по величине и измеримыми с необходимой точностью. Факторы должны быть взаимно не коррелированы и однозначно связаны с выходными параметрами.

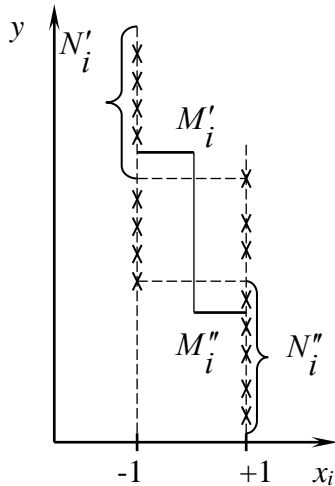


Рис.17.1 Построение диаграммы рассеяния значений y для ранжирования факторов x с помощью медиан M_i

Отбор некоторого числа (3...7) наиболее существенных факторов производится путем построения диаграммы ранжирования, т.е. расположения всех изучаемых факторов в порядке убывания силы их влияния на выходной параметр. Для построения такой диаграммы используются методы априорного ранжирования и случайного баланса.

Априорное или *доопытное*
ранжирование выполняется в форме опроса

группы экспертов, которым предлагается расположить рассматриваемые факторы по степени их значимости. При этом каждому порядковому месту в ряду значимости приписывают ранг, например, равный номеру этого места.

Диаграмма ранжирования может быть построена по сумме рангов, если согласие между экспертами подтверждается статистически значимым по χ^2 - критерию коэффициентом конкордации

$$W = \frac{\left(\sum_{j=1}^l R_j \right)_{cp} \sum_{i=1}^k \Delta_j^2}{l^2 (k^3 - 1)}, \quad (17.1)$$

где $\left(\sum_{j=1}^l R_j \right)_{cp}$ - средняя сумма рангов R_j для всех факторов, Δ_j - отклонение суммы рангов для j -ого эксперта от средней суммы рангов, l - число экспертов,

k - число ранжируемых факторов. Чем выше значение W (17.1), тем сильнее согласованность мнений экспертов и выше достоверность полученной ранжировки.

Метод случайного баланса используется для экспериментального отсеивания факторов по данным небольшой серии опытов со случайным выбором наибольшего или наименьшего значения исследуемых факторов в каждом опыте. Для удобства записи плана эксперимента вводят нормированное обозначение величины фактора (-1;0;+1).

Результаты опытов используют для построения диаграммы рассеяния (рис.17.1) откладывая для каждого фактора отдельно по ординате значения y в тех опытах, когда фактор x был на нижнем уровне (-1) и на верхнем уровне (+1) при любых значениях остальных факторов.

Произведение разности медиан $\Delta M = M_i'' - M_i'$ полученных двух групп точек на количество выделяющихся точек $\Delta N = N_i'' + N_i'$, расположенных ниже нижней и выше верхней точек другого уровня, является мерой влияния фактора x_i на y . Величина ранга $R = \Delta N \Delta M$ служит для ранжирования факторов.

Лекция №18

Выбор параметров статистической модели

Параметром у статистической модели может быть только такая выходная переменная, которая поддается измерению с достаточной точностью и однозначно зависит от исследуемых факторов, являясь чувствительной к их изменениям. Важно, чтобы число параметров было минимальным, а в случае построения оптимизационной модели надо свести задачу к однопараметрической. Однако в большинстве случаев исследуемый процесс характеризуется целым набором разноплановых выходных параметров.

Для отбора наиболее важных параметров может быть использовано априорное ранжирование, а также анализ взаимной корреляции между параметрами с целью выявления сильно коррелированных параметров, не являющихся независимыми и не дающих дополнительной информации.

Обобщенным параметром оптимизации Y называют параметр сформированный на основе группы частных параметров y_1, y_2, \dots, y_m . Для его получения используют неравноценные по трудоемкости и эффективности приемы.

Линейная «свертка» параметров проводится с помощью весовых коэффициентов μ_i , величина которых задается с учетом значимости вклада каждого частного параметра

$$Y = \mu_1 y_1 + \mu_2 y_2 + \dots + \mu_m y_m. \quad (18.1)$$

Если значения y_1, y_2, \dots, y_m приведены к относительным единицам измерения, тогда $\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_m = 1$. Если по каждому из частных параметров ввести норматив y^* , тогда коэффициенты μ_i целесообразно задать с таким учетом, чтобы они давали наибольший вес параметру, для которого экспериментально достигнуто наилучшее приближение к нормативу. В этом случае оптимизация процесса по формуле (18.1) будет происходить преимущественно в направлении улучшения параметров, наиболее далеких от заданного норматива.

Ранжирование частных параметров осуществляется по номеру занимаемого места с введением обобщенного рангового параметра

$$Y' = \sum_{i=1}^m R_i, \quad (18.2)$$

или

$$Y'' = \sqrt[m]{R_1 \cdot R_2 \cdot \dots \cdot R_m}. \quad (18.3)$$

В случае одинаковой величины параметрам присваиваются дробные значения рангов, при которых сохраняется их общая сумма.

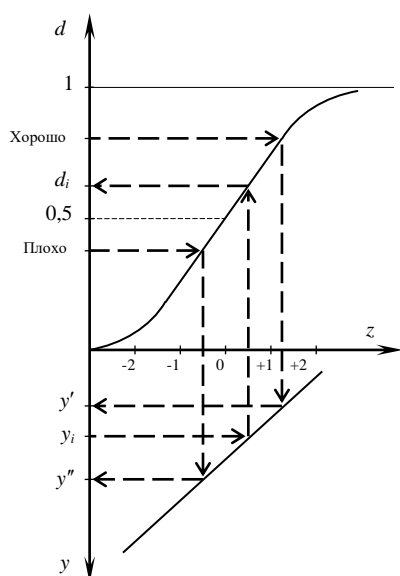


Рис.18.1. Нормирование параметра y_i с помощью функции желательности d_i

Функция желательности d позволяет нормировать частные значения параметров y_i и пересчитать их в значения желательности d_i , из которых формируется обобщенная функция желательности

$$D = \sqrt[m]{d_1 \cdot d_2 \cdot \dots \cdot d_m}, \quad (18.4)$$

выступающая в качестве параметра оптимизации.

Шкала желательности задается в

пределах от 0 до 1 оценками «Очень хорошо» (1,00-0,80), «Хорошо» (0,80-0,63), «Удовлетворительно» (0,63-0,37), «Плохо»

(0,37-0,20) и «Очень плохо» (0,20-0) (рис.18.1).

Определив, что такое «Хорошо» (y') и что такое «Плохо» (y'') для частного параметра, графически преобразуют значения y_i в d_i (рис.18.1) с использованием нормирующей функции

$$d = \exp(-\exp(-z)), \quad (18.5)$$

где z - кодированная шкала, пропорциональная натуральным значениям параметров.

Значения d_i (18.5) используют для расчета и поиска максимума D (18.4), аналогично рангам R_i при оптимизации параметра Y' (18.2) или Y'' (18.3).

Лекция №19

Проверка адекватности моделей

Адекватностью называют соответствие математической модели процесса экспериментальным данным. Проверка адекватности аналитической модели состоит в поиске ответа на вопрос о том, соответствует ли натурным данным полученные теоретические зависимости.

Для однозначного ответа на вопрос об адекватности детерминированной модели применительно к стохастическим переменным системы целесообразно воспользоваться процедурой корреляционного анализа, вычислив значения коэффициента линейной корреляции между переменными y и x :

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (19.1)$$

где x_i и y_i - пара соответствующих значений x и y в каждой i -той опытной точке, \bar{x} и \bar{y} - средние значения x и y .

Адекватность модели обеспечивает статистически значимая линейная корреляция с уровнем значимости α (обычно берут $\alpha \geq 0,95$). Если $r > r_{кр}(\alpha, n)$, в котором критическое значение $r_{кр}$ зависит от принятого уровня значимости α и числа опытных точек n , то модель адекватна.

Для программных моделей проверка адекватности является этапом более сложным, чем для теоретических моделей, так как коэффициент корреляции (19.1) может быть использован ограниченно лишь для тех стадий процесса, которые приближенно описываются полученными для упрощенных условий аналитическими моделями.

В общем случае проверка адекватности для программных моделей состоит в сопоставлении расчетных y_p и экспериментальных $y_э$ значений, и оценке величины коэффициентов парной корреляции $r_{y_p y_э}$ по формуле (19.1) и коэффициента линейной регрессии:

$$b = r_{y_P y_{\mathcal{E}}} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_P - \bar{y}_P)^2}{\sum_{i=1}^n (y_{\mathcal{E}} - \bar{y}_{\mathcal{E}})^2}} \quad (19.2)$$

где y_P и $y_{\mathcal{E}}$ - пары соответственных значений расчетных и экспериментальных данных; \bar{y}_P и $\bar{y}_{\mathcal{E}}$ - средние значения y_P и $y_{\mathcal{E}}$ по совокупности всех n сопоставляемых величин.

Когда $r < r_{кр}$, модель неадекватна, в связи с чем следует пересмотреть начальные этапы построения модели и внести в них необходимые корректировки.

Если $r > r_{кр}$, а $b \approx 1$ (19.2), то можно сделать вывод об адекватности модели. Если при $r > r_{кр}$, $b < 1$ можно говорить о принципиальной адекватности полученной модели на основе тесной зависимости между расчетными и экспериментальными данными, а также заключить о необходимости корректировки параметров модели, количественной мерой которой является отличие коэффициента регрессии b от 1.

Корректировка параметров модели является частным случаем более общей процедуры *параметризации модели*, т.е. подбора таких значений коэффициентов уравнений, входящих в математическую модель, при которых достигается наилучшее согласование модели и природы.

Обычно используют наиболее доступные возможности оценки параметров модели, т.е. обращение к табличным данным или теоретическому расчету, а также их независимое экспериментальное определение по другим методикам. Если это невозможно, тогда для установления величины какого-либо неопределенного параметра k полученной программной модели проводят серию вычислений, каждый раз варьируя значение этого параметра в пределах предполагаемого интервала его изменения. При этом рассчитывают значения одного или нескольких *индикаторов*, т.е. таких выходных характеристик процесса y^* , которые наиболее чувствительны к параметру k и поддаются

экспериментальному определению (y_3^*), получив расчетную зависимость $y^*(k)$, нетрудно установить искомое значение параметра k_0 , при котором $y_3^* = y^*(k_0)$.

Таким образом, модели основных физико-технических процессов в рабочей зоне технологической системы базирующиеся на системах уравнений баланса и краевых условиях или использующие структурные представления для идеальных и неидеальных технологических потоков, а также их комбинации позволяют создавать адекватные математические модели детерминированных систем как с сосредоточенными, так и с распределенными параметрами и находить методы и алгоритмы решения технологических задач.

Лекция №20

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ В ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ Выбор вида статистической модели

Приступая к построению статистической модели, экспериментатор обычно имеет начальные представления о том, как влияют изучаемые факторы на выходные параметры.

При выборе вида модели обычно отвечают на вопрос, допустимо ли представлять функцию отклика линейной или заведомо известно, что зависимости являются немонотонными или сильно нелинейными. В области, где функция отклика имеет экстремум, предположение о линейном характере модели скорее всего не будет подтверждено. Если в дальнейшем потребуется, могут быть проведены дополнительные опыты по уточнению вида модели. При этом результаты первой серии опытов не пропадают и используются в полной мере для построения нелинейной модели.

При планировании экспериментов исходный этап включает определение основного уровня факторов ($X=0$) и выбор интервалов варьирования ΔX с учетом области действия разрабатываемой модели, предполагаемого характера поверхности отклика и вероятной погрешности определения параметров Y , а также точности фиксирования принятых уровней факторов. Чем больше погрешность опытов и ниже точность поддержания факторов, тем шире должны быть приняты их интервалы варьирования.

Рассмотрим основные виды линейных и нелинейных статических моделей.

1. При разработке линейной модели ограничиваются обычно варьированием факторов на двух уровнях. Для проведения *полного факторного эксперимента* (ПФЭ) при k факторах необходимо осуществить $N=2^k$ опытов со всевозможными сочетаниями двух ($x=-1$ и $x=+1$) уровней факторов (табл.20.1)

Таблица 20.1

Матрица планирования ПФЭ 2^2

№ опыта	Факторы x_i	
	x_1	x_2
1	+	+
2	+	—
3	—	+
4	—	—

Матрица планирования ПФЭ 2^3 получается повторением матрицы ПФЭ 2^2 для факторов x_1 и x_2 при $x_3 = -1$ и $x_3 = +1$ (табл.20.2).

Таблица 20.2

Матрица планирования ПФЭ 2^3

№ опыта	Факторы x_i		
	x_1	x_2	x_3
1	+	+	+
2	+	—	+
3	—	+	+
4	—	—	+
5	+	+	—
6	+	—	—
7	—	+	—
8	—	—	—

Аналогичным образом могут быть построены матрицы планирования с большим числом факторов, однако при этом число опытов быстро растет и при $k \geq 5$ становится весьма значительным. При этом количество опытов (2^k) намного превышает число неизвестных коэффициентов регрессии ($k+1$) линейной модели.

Для построения трех факторной модели необходимо определить четыре коэффициента (b_0, b_1, b_2, b_3), поэтому достаточно всего четырех опытов и можно воспользоваться *дробным факторным экспериментом* (ДФЭ) - половиной ПФЭ 2^3 , называемой *полурепликой* 2^{3-1} . Для этого надо выбрать из опытов, матрицы ПФЭ 2^3 (табл.20.2), такие, в которых бы факторы x_1, x_2, x_3 , равномерно принимали все возможные значения. Если воспользоваться

генерирующим соотношением, $x_3 = +x_1x_2$ (или $x_3 = -x_1x_2$), то можно получить две антисимметричные экономные матрицы ДФЭ, одинаково пригодные для построения модели 2^{3-1} (табл.20.3)

Таблица 20.3

Матрица планирования ДФЭ 2^{3-1} ($x_3 = -x_1x_2$)

№ опыта	Факторы x_i		
	x_1	x_2	x_3
1	+	+	—
2	+	—	+
3	—	+	+
4	—	—	—

Аналогичным образом могут быть построены полуреплики, четверть реплики, и реплики более высокой дробности ПФЭ 2^k , что дает существенную экономию количества опытов.

Например для $k=6$ ПФЭ требует проведения $2^6=64$ опытов. Однако для определения 7 коэффициентов линейного уравнения регрессии задачу можно решать, проведя всего 8 опытов, т.е. осуществив ДФЭ 2^{6-3} в котором реплика дробности 1/8. Рекомендуемыми генерирующими соотношениями при этом могут быть $x_4 = x_1x_2x_3$, $x_5 = x_1x_2$, $x_6 = x_1x_3$ или др.

2. При построении нелинейной модели, учитывающей кроме линейных членов также некоторые взаимодействия ($x_i x_j$), в матрицу вводят дополнительные столбцы, содержащие соответствующие произведения факторов (табл.20.4) и увеличивают число опытов.

Таблица 20.4

Матрица планирования ДФЭ 2^{4-1} ($x_4 = x_1x_2x_3$)

№ опыта	Факторы x_i					Взаимодействующие факторы $x_i x_j$		
	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	$x_1 x_2$	$x_2 x_4$	$x_2 x_3$
1	+	+	+	+	+	+	+	+
2	+	—	+	+	—	—	—	+
3	+	+	—	+	—	—	+	—
4	+	—	—	+	+	+	—	—
5	+	+	+	—	—	+	—	—
6	+	—	+	—	+	—	+	—
7	+	+	—	—	+	—	—	+
8	+	—	—	—	—	+	+	+
9	+	0	0	0	0	0	0	0
10	+	0	0	0	0	0	0	0
11	+	0	0	0	0	0	0	0

Так, планируя выявить эффекты взаимодействия факторов x_1x_2 , x_2x_4 , и x_2x_3 при $k=4$ можно воспользоваться восемью опытами, если для построения матрицы экспериментов воспользоваться генерирующим соотношением, например $x_4 = x_1x_2x_3$ (табл.20.4). Это позволяет найти четыре коэффициента для линейных членов (b_1, b_2, b_3, b_4), свободный член (b_0) и три эффекта взаимодействия (b_{12}, b_{24}, b_{23}).

Условия проведения опытов задают значения факторов в столбцах x_1, x_2, x_3, x_4 . Столбец x_0 заполнен знаками «+», а столбцы x_1x_2, x_2x_4, x_2x_3 , , образованы как произведения соответствующих столбцов и применяются при последующем вычислении коэффициентов регрессии.

Матрицы планирования экспериментов (табл.20.1-20.4) формируются таким образом, чтобы выполнить обеспечивающие простоту вычисления и оптимальные оценки коэффициентов модели требования:

1. *Нормировки* - сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу элементов N :

$$\sum_{u=1}^N (x_n^2)_u = N.$$

2. *Симметрии* - сумма элементов каждого столбца равна нулю:

$$\sum_{u=1}^N (x_n)_u = 0.$$

3. *Ортогональности* - сумма произведений элементов каждой пары столбцов равна нулю.

$$\sum_{u=1}^N (x_n x_m)_u = 0; \quad (n, m = 1, 2, \dots, k; n \neq m).$$

При выполнении этих требований все коэффициенты регрессии определяются независимо друг от друга с одинаковой погрешностью по результатам всех N опытов.

Лекция №21

Ортогональное планирование экспериментов

Если поверхность отклика является существенно нелинейной, тогда в уравнение модели необходимо ввести квадратичные члены второго порядка. Для этого достраивают матрицу в соответствии с планами эксперимента второго порядка.

Расширенная матрица содержит:

- N_1 опытов в точках ДФЭ - ядро плана, из которого определяются линейные члены и их взаимодействия;
- n_0 опытов в центре плана, для оценки ошибки опытов;
- $2k$ дополнительных опытов в «звездных» точках, расположенных по координатным осям на расстоянии $\pm\alpha$.

Отсюда общее число опытов:

$$N = N_1 + n_0 + 2k$$

Число уровней варьирования каждого фактора $(-\alpha; -1; 0; +1; +\alpha)$ равно 5. Для облегчения вычислений и для того, чтобы параметры модели определялись независимо, план должен быть ортогональным. Это достигается введением вместо x_i^2 нового нормализованного фактора.

$$x'_i = x_i^2 - \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = x_i^2 - \bar{x}_i^2,$$

где u - номер опыта, \bar{x}_i^2 - среднее значение x_i^2 .

x'_i при числе факторов $k=2,3,4,5$ соответственно равняется 0,667; 0,73; 0,80; 0,776. (при $k=5$ применяется полуреплика). Кроме того выбирается «звездное» плечо α по формуле.

$$\alpha = \sqrt{0,5 \sqrt{N_1(N_1 + n_0 + 2k)} - N_1}.$$

В силу ортогональности планирования все параметры нормализованной модели второго порядка определяются независимо друг от друга:

$$b_i = \frac{\sum_{u=1}^N x_{iu} y_u}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2}; \quad b_{ij} = \frac{\sum_{u=1}^N (x_i x_j)_u y_u}{\sum_{u=1}^N (x_i x_j)_u^2}, \quad (i \neq j);$$

$$b_{ii} = \frac{\sum_{u=1}^N (x'_i)_u y_u}{\sum_{u=1}^N (x'_i)_u^2}; \quad b_0 = \frac{\sum_{u=1}^N y_u}{N} - \sum_{i=1}^k b_{ii} \bar{x}_i^2.$$

В числителях данных формул находятся суммы произведений значений отклика y_u и значений нормализованного фактора в соответствующем столбце x_{iu} , а в знаменателе - сумма квадратов значений нормализованных факторов из соответствующих столбцов.

Дисперсия оценок параметров модели находится по формулам:

$$S^2(b_i) = \frac{S_b^2}{\sum_{u=1}^N (x_i)_u^2}; \quad S^2(b_{ij}) = \frac{S_b^2}{\sum_{u=1}^N (x_i x_j)_u^2};$$

$$S^2(b_{ii}) = \frac{S_b^2}{\sum_{u=1}^N (x'_i)_u^2}; \quad S^2(b_0) = \frac{S_b^2}{N} + \sum_{i=1}^k (\bar{x}_i^2) S^2(b_{ii}).$$

Недостатком центрального композиционного ортогонального планирования (ЦКОП) второго порядка является то, что параметры модели определяются с различной точностью, так как у них различны дисперсии. Поэтому информация о поверхности отклика, содержащаяся в модели, полученной после реализации ЦКОП второго порядка, различна в разных направлениях факторного пространства.

Лекция №22

Рототабельное планирование экспериментов

Существует другой способ центрального композиционного планирования второго порядка, позволяющий при помощи полученной модели описывать поверхность отклики с одинаковой точностью по всем направлениям, при этом остаточные дисперсии на одинаковых расстояниях от центра плана являются равными и наименьшими из возможных. Такое планирование получило название *рототабельного*. При центральном композиционном рототабельном планировании (ЦКРП) значение звездного плеча определяется о формуле:

$$\alpha = \sqrt[4]{N_1},$$

где N_1 - число опытов ядра плана

В зависимости от выбора числа опытов в центре плана обеспечивается либо так называемая *униформность*, либо *ортогональность* плана. В первом случае дисперсия предсказания сравнительно мало изменяется или совсем не изменяется в радиусе $x_n = \pm 1$ от центра плана. Для обеспечения униформности плана должно соблюдаться равенство

$$n_0 = \lambda(N_1 + 4\sqrt{N_1} + 4) - N_1 - 2k,$$

в котором λ для числа факторов $k=2,3,4,5,6,7$ равно соответственно 0,7844; 0,8385; 0,8705; 0,8918; 0,9070; 0,9185.

Чтобы рототабельный план был ортогональным, число опытов в центре плана должно соответствовать равенству

$$n_0 = 4\sqrt{N_1} - 2k + 4,$$

полученному из предыдущего при $\lambda=1$. Расчет по нему в некоторых случаях дает дробные значения n_0 , поэтому их приходится округлять до ближайшего целого числа, нарушая при этом условия униформности. Однако эти отклонения оказываются настолько незначительными, что ими можно пренебречь.

Для построения матриц центрального композиционного рототабельного равномерного планирования (ЦКРУП) рассчитывается и используется ряд характеристик (табл.22.1)

Таблица 22.1

Характеристики ЦКРУП второго порядка

Число факторов, k	Число опытов ядра, N_I	Число «звездных» точек, $2k$	Число нулевых точек, n_0	«Звездное» плечо, α	Общее число опытов, N
2	4	4	5	1,414	13
3	8	6	6	1,682	20
4	16	8	7	2	31
5	16	10	6	2	32

Матрицы рототабельного равномерного планирования не ортогональны, поэтому параметры модели рассчитываются более сложным способом, чем при ортогональном планировании:

$$b_0 = d_1 \sum_{u=1}^N y_u - d_2 \sum_{i=1}^k \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 y_u ;$$

$$b_i = d_3 \sum_{u=1}^N x_{iu} y_u ;$$

$$b_{ij} = d_4 \sum_{u=1}^N (x_i x_j)_u y_u , \quad (i \neq j);$$

$$b_{ii} = d_5 \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 y_u + d_6 \sum_{i=1}^k \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 y_u - d_2 \sum_{u=1}^N y_u$$

Дисперсии параметров модели

$$S^2(b_0) = d_1 S_b^2; \quad S^2(b_i) = d_3 S_b^2;$$

$$S^2(b_{ij}) = d_4 S_b^2; \quad S^2(b_{ii}) = d_7 S_b^2.$$

Соответствующие условиям опытов значения d_i выбираются для конкретных случаев планирования эксперимента (табл.22.2)

Таблица 22.2

Значения d_i для вычисления параметров модели

k	N	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6	d_7
2	13	0,2	0,1	0,1250	0,2500	0,1251	0,0187	0,1438
3	20	0,1663	0,0568	0,0732	0,1250	0,0625	0,0069	0,0695
4	31	0,1428	0,0357	0,0417	0,0625	0,0312	0,0037	0,0350
5	32	0,1591	0,0341	0,0417	0,0625	0,0312	0,0028	0,0341

Так как при планировании экспериментов несколько опытов проводятся параллельно при основном уровне факторов, то их результаты позволяют оценить дисперсию воспроизводимости

$$S_b^2 = \frac{\sum_{u=1}^{n_0} (y_{ou} - \bar{y}_o)^2}{n_0 - 1} .$$

Проверка адекватности модели производится при помощи критерия Фишера. Дисперсия адекватности в данном случае определяется по формуле:

$$S_{ad}^2 = \frac{\sum_{u=1}^N (y_{up} - y_{uz})^2 - \sum_{u=1}^{n_0} (y_{ou} - \bar{y}_o)^2}{N - k' - (n_0 - 1)} ,$$

где y_{up} и y_{uz} – расчетные и экспериментальные значения; k' - число статистически значимых параметров модели.

При использовании рототабельных планов исключать из модели без пересчета остальных можно только незначимые оценки b_i и b_{ij} . Исключение любого из незначимых параметров b_0 и b_{ii} требует пересчета остальных в данной группе.

При реализации намеченных планированием экспериментов важно учитывать требования *рандомизации* опытов, т.е. проведения опытов в однородных условиях, с одинаковой погрешностью в случайном порядке. Рандомизация проводится для того, чтобы изменения свойств материалов, характеристик оборудования, средств оснащения, установок и измерительных приборов вследствие их износа и разрушения, смены персонала и т.д. не вызывали, искажающего влияния изучаемых факторов и временного «дрейфа» параметров. Поэтому рандомизируют опыты, проводя их в случайном порядке, в отличие от нумерации в матрице планирования.

Лекция №23

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Имитация как инструмент исследования сложных систем

Развитие вычислительной техники привело к возникновению чисто машинных методов решения задач исследования реальных объектов. Одним из таких методов является моделирование процессов на персональных компьютерах. При моделировании в компьютере вырабатывается информация, описывающая элементарные явления исследуемых процессов с учетом их связей и взаимовлияний. Получаемая таким образом информация о состоянии процесса используется для определения тех характеристик процессов, которые требуется получить в результате моделирования. С точки зрения перерабатываемой в компьютерах информации моделирование является имитацией элементарных явлений, составляющих исследуемый процесс, с сохранением структуры взаимодействия между ними.

Здесь прослеживается прямая аналогия между исследованием реальных процессов с помощью имитационного моделирования и экспериментальным их исследованием в натуре. При таком моделировании нет необходимости создавать для каждого процесса экспериментальные установки; этот метод обеспечивает простоту, оперативность и небольшую стоимость исследования. Имитация – прекрасный способ обучения.

При построении имитационных моделей и проведении экспериментов с ними особое значение имеет соответствие имитируемых процессов их физической сущности и эффективность хранения статистической информации. От того, каким образом накапливается и хранится статистическая информация, существенно зависит машинное время, затрачиваемое на экспериментирование.

Обратимся теперь к основным методологическим вопросам построения и использования моделей, в некоторой мере повторив уже изложенный выше материал.

Моделирование применяется в основном для решения двух групп задач: исследования и обучения. К первой относятся вопросы использования моделей для изучения физических законов, подготовки и рассмотрения действия новых разработок.

Задачи исследования, решаемые с помощью моделирования, можно разделить на четыре вида:

- *прямые задачи анализа*, при решении которых исследуемая система задается параметрами своих элементов и параметрами исходного режима, структурой или уравнениями и требуется определить реакцию системы на действующие силы;

- *обратные задачи анализа*, которые по известной реакции системы требуют найти возмущения, заставившие рассматриваемую систему прийти к данному состоянию и данной реакции;

- *задачи синтеза*, требующие нахождения таких параметров, при которых процессы в системе будут иметь желательный по каким-либо соображениям характер;

- *индуктивные задачи*, решение которых имеет целью проверку гипотез, уточнение уравнений, описывающих процессы, происходящие в системе, выяснение свойств этих элементов, отладка программ (алгоритмов) для расчетов на компьютере.

Необходимость исследования системы, как совокупности множества элементов, позволяет разделить процесс моделирования на две части:

- составление математических или физических моделей элементов;
- разработка схемы связей или схемы сопряжения элементов.

Необходимость схемы сопряжения очевидна, так как только такая схема позволяет конструировать сложную систему и все возможные (на взгляд исследователя) ситуации. Такая модель позволяет передавать входные воздействия или реакции элементов от одной модели элемента к другой вне зависимости от класса и структуры математических моделей элементов. Если представить математические модели отдельных элементов в виде реализованных на доступном вычислительной машине языке программных модулей, то схеме сопряжения (в тех же терминах) будет соответствовать некоторый управляющий модуль, в набор функций которого входит ввод данных, передача информации от одних программных модулей другим (причем, иногда, в зависимости от смысла этой информации, могут подключаться различные модули), представление результатов экспериментов в удобной для исследователя форме.

Очевидно, что, воспроизводя на такой модели различные общесистемные ситуации, мы как бы воспроизводим, подражаем, имитируем процессы, имеющие место в системе, на моделях элементов при определенных условиях, налагаемых на связи между ними. Исследования такого рода, то есть

исследования свойств всей системы на основе моделей ее элементов, и называют имитационным моделированием.

Можно привести примеры использования имитации как единственно возможного способа исследования из различных областей, в которых происходит теоретическая проработка того или иного процесса, затем эта теоретическая проработка подвергается проверке с использованием как реально существующих, так и предполагаемых данных и потом - эксплуатации. Для некоторых объектов (в частности, автоматизированных систем управления), у которых велика стоимость и продолжительность разработки, а также большое значение имеет то, насколько верно выбраны элементы таких объектов, несомненно огромное значение имеет возможность исследования количественных, качественных и структурных свойств на стадии проектирования.

Основное назначение имитационного моделирования проектируемой системы состоит в воспроизведении и исследовании общесистемных ситуаций, иными словами - в изучении поведения объекта под воздействием управляющих команд или различного рода возмущений. Если мы знаем, как поведет себя объект управления под воздействием той или иной команды, какова будет его реакция на то или иное решение системы управления, то практически уже будем знать, как нужно управлять этим объектом и какова будет эффективность знания о структуре и свойствах элементов системы. Получение этих знаний таким способом, а не на натурных испытаниях, дает возможность значительно упростить, удешевить и ускорить разработку и внедрение системы жизнеобеспечения человека, так и автоматизированной системы управления ею.

Использование имитационного моделирования при проектировании систем является приложением к традиционным сферам практического использования этого способа моделирования.

Вторым направлением является использование имитации в функционирующих автоматизированных системах обработки информации и управления как составной части математического обеспечения. Целью этих систем управления является подготовка информации, необходимой для принятия тех или иных решений, формирование вариантов таких решений и, в некоторых случаях, реализация этих решений. Учитывая вероятностный характер процессов в автоматизированных системах обработки информации и

управления, несовершенство имеющихся методов подготовки решений, а во многих случаях и недостаточное качество исходных данных, представляется весьма целесообразным предварительная проверка сформированных вариантов решений (иными словами, предварительная оценка показателей эффективности автоматизированных систем и поведения объектов управления под воздействием управляющих команд, вытекающих из принятых решений). Здесь, очевидно, могут быть использованы те же имитационные модели, что и на стадии проектирования, но имеющие большую адекватность, чем в процессе разработки системы управления, так как имитационная модель в этом случае будет по возможности максимально адекватна функционирующей системе управления.

Успех любого исследования во многом определяется правильностью выбора методики его проведения. Для подавляющего большинства исследуемых систем методика построения имитационной модели сводится к следующим двум группам этапов:

- 1) *методология имитации* - постановка задачи, подготовка данных, построение модели, оценка адекватности.
- 2) *организация имитационного эксперимента* - планирование эксперимента, экспериментирование, обработка результатов, документирование.

Лекция №24

Методология построения имитационных моделей и организация имитационных экспериментов

Успех любого исследования во многом определяется правильностью выдвигаемых предположений, что исследуемая проблема может быть решена наилучшим образом с помощью имитационного моделирования.

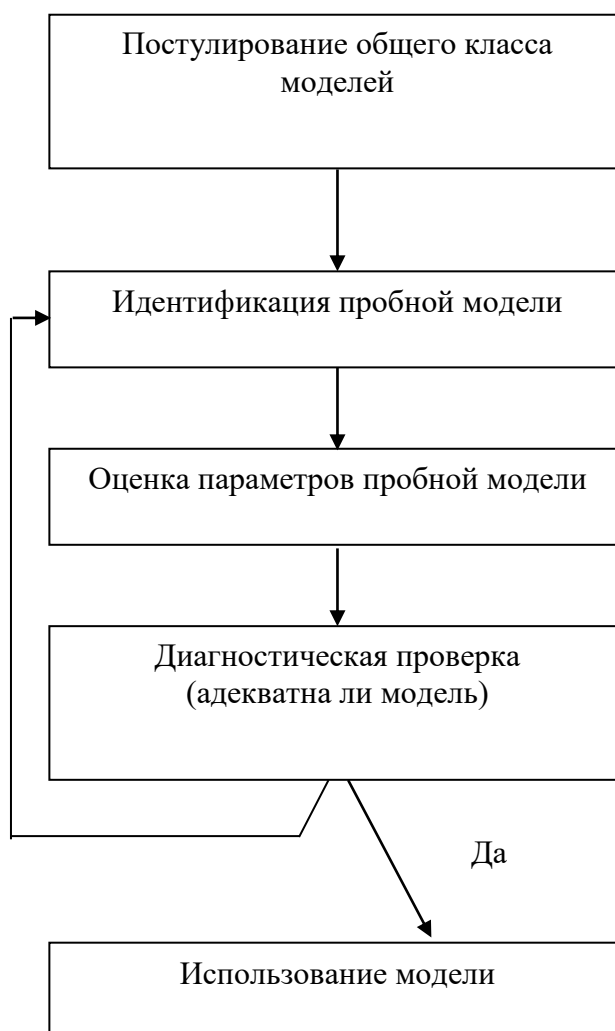
Постановка задачи состоит в определении возможных стратегий и задании этим набора управляемых параметров; определении характеристик внешней среды, задавая набор внешних возмущений; определении набора элементов и их взаимосвязей в исследуемой системе и задании структуры системы; определении критерия выбора стратегии, задав тем самым цели и определяя их относительную значимость.

Подготовка данных

1. Составление описания модели.

Постановка задачи и выбор класса модели (см. рис.24.1) представляют именно те начальные этапы моделирования, которые базируются на изложенной в первой главе методологии системных исследований. В соответствии с этой методологией до решения задачи синтеза составляется описание объекта.

Операции сбора информации и предварительной обработки состоят в организации получения данных на исследуемом объекте посредством тривиального наблюдения и фиксации его результатов в таблицах, графиках и на компьютерных носителях информации. В настоящее время эти операции выполняются с применением современных средств измерения процессов, их фиксации, как с использованием вычислительной техники, так и с помощью других технических средств. Отметим, что в настоящее время подавляющее большинство технических средств, предназначенных для сбора данных обеспечивают их непосредственный ввод в персональный компьютер.



2. Методика анализа временных рядов.

Целью операции анализа данных является получение стационарной составляющей реализации случайного процесса с выделением из отдельной реализации всех нестационарностей и периодичностей, с фиксацией порядка выделения и описаний нестационарностей и периодичностей, нахождение оценок и подбор теоретического закона распределения вероятностей, наиболее точно в статистическом смысле описывающего распределение реализации. Исследование начинается с анализа отдельных реализаций (рис.24.2).



Рис. 24.2. Анализ отдельной реализации.

Визуальный просмотр реализаций призван выяснить, имеют ли место в реализации нестационарность и периодичность. Если просмотр показал, что процесс содержит подобные изменения, то необходимо провести их анализ. При этом конечной целью является выделение временных изменений из реализаций.

После обнаружения временных изменений, оставшаяся реализация передается вновь на начало схемы, и так повторяется до тех пор, пока при визуальном просмотре не будет принято решение о том, что реализация может принадлежать стационарному процессу. Если это решение принято, то далее применяют точные количественные методы для оценивания основных свойств. При этом вычисляют оценки статистических характеристик - математического ожидания, дисперсии, автокорреляционной функции и других. Находится также гистограмма частот. Все эти оценки используются для проведения тестов стационарности, периодичности и нормальности.

Следующим этапом исследования реализации является анализ совокупности реализаций (рис.24.3).

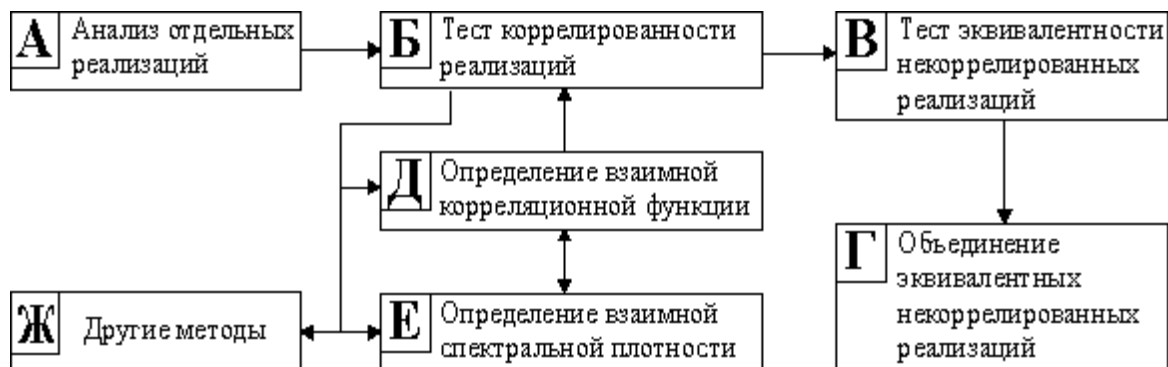


Рис. 24.3. Анализ совокупности реализаций.

Этот анализ начинается с проведения теста коррелированности реализаций. Суть его состоит в том, чтобы по оценкам взаимных корреляционных функций (или взаимных спектральных плотностей) с помощью статистических критериев о значимости коэффициентов корреляции [20], решить в количественной форме с указанием точности, являются ли реализации статистически связанными.

Если реализации коррелированы, то этап анализа совокупности реализаций на этом заканчивается. В противном случае необходимо попытаться установить их эквивалентность. Для этого реализуется тест эквивалентности. Основной его смысл состоит в выявлении эквивалентных по вероятностным свойствам реализаций случайного процесса. При проведении этого теста используются статистические критерии об эквивалентности реализаций (выборок) [20]. В случае обнаружения таких реализаций и в случае, если для моделирования безразлично, какие из процессов, порождающих эти реализации, необходимо использовать, эквивалентные реализации объединяются. При этом основным критерием объединения является представительность реализации в смысле полноты описываемых свойств процесса и длины реализации.

Методы воспроизведения входных воздействий

Исследование объектов и систем управления ими с помощью имитационного моделирования и стремление достичь определенного уровня адекватности модели реальному объекту заставляют непрерывно совершенствовать и развивать методы и устройства моделирования случайных процессов с разнообразными вероятностными свойствами. При этом исследователь может обладать либо общими представлениями о свойствах моделируемого процесса, которые получены в результате анализа реализаций и которые требуется воспроизвести, либо имеет реализации процессов, которые необходимо увеличить в объеме с сохранением вероятностно-статистических свойств исходных реализаций. В первом случае речь идет о генерировании случайных процессов, во втором - об их имитации.

Практические задачи, использующие статистическую информацию и решаемые подобным образом, могут быть разделены на три класса:

- 1) реализующие только знания о законах распределения вероятностей;
- 2) использующие только сведения о динамических (корреляционных, спектральных и других) свойствах информации;
- 3) использующие данные одновременно о законах распределения вероятностей и динамических свойствах.

Задачи первого класса могут быть решены простым и известным путем [37]: исходная информация помещается в некоторый бункер (урну) и затем каждое из значений наугад вынимается и после фиксации вновь возвращается в урну. Это классический пример снятия каких-либо динамических связей.

С целью сохранения динамических свойств (нарушая при этом полностью или частично одномерный закон распределения вероятностей) может быть использована процедура, связанная с многократным повторением исходной реализации. При этом, если исходная реализация повторяется полностью, то имеет место сохранение одномерного закона распределения вероятностей.

С целью более полного использования вероятностно-статистических свойств случайных процессов по выборкам малой длины (третий класс задач) может быть применена одна из процедур генерирования случайных процессов с заданным законом распределения вероятностей и корреляционными свойствами. Для этого, пользуясь выше рассмотренными методами, получают максимально возможные сведения о вероятностных свойствах случайного процесса (отдельно - о законе распределения вероятностей и отдельно - о корреляционных свойствах). Затем, используя соответствующие процедуры генерирования, воспроизводят реализации с требуемыми динамическими и статическими свойствами.

Вместе с тем, использование методов генерирования, а не имитации случайных процессов, предпочтительнее, так как эти методы более технологичны в использовании из-за возможностей управления параметрами законов распределения вероятностей и корреляцией.

Лекция №25

Методики построения имитационных моделей. Агрегативный подход

Существующие математические схемы описания сложных систем обладают одним существенным недостатком. Он состоит в том, что единым образом можно описать лишь те системы, элементы которых описываются одной и той же математической схемой.

Наиболее существенным с теоретической и практической точки зрения является случай, когда элементы системы описываются разнородными математическими схемами. Из-за отсутствия единого формального описания элементов трудно рассчитывать на создание общих методов исследования систем в целом, а также единого подхода к классификации сложных систем, изучению общих свойств важнейших классов систем их анализу и синтезу. Даже такой, казалось бы, универсальный метод, как статистическое моделирование, для достаточно сложных систем с разнородными параметрами описания элементов оказывается весьма громоздким.

Таким образом, введение унифицированной абстрактной схемы, позволяющей единообразно описывать все элементы системы, имеет существенное значение.

Унифицированной абстрактной схеме придается достаточно общий вид, с тем, чтобы она охватывала разнообразие тем реальных систем. Для этого унифицированная схема должна иметь динамический характер, быть способной описывать обмен сигналами с внешней средой и учитывать действия случайных факторов. Была предложена унифицированная схема, названная агрегатом. Она образована из стохастической системы общего вида конкретизацией операторов переходов и выходов.

Агрегат оказывается удобной схемой для описания широкого класса реальных объектов. Кроме того, представление реальных систем в виде агрегатов позволяет изучить некоторые их общие свойства, связанные со структурой и функционированием. Реализация на ЭВМ алгоритмических (по сути, имитационных) моделей агрегата дает возможность решать многие задачи количественного и качественного анализа сложных систем.

Понятие агрегата.

Пусть T - фиксированное подмножество рассматриваемых моментов времени; X, G, Y, Z - множества любой природы. Элементы указанных множеств будем называть так:

$t \in T$ - моментом времени,

$x \in X$ - входным сигналом,
 $g \in \Gamma$ - управляющим сигналом,
 $y \in Y$ - выходным сигналом,
 $z \in Z$ - состоянием.

Состояния, входные, выходные и управляющие сигналы рассматриваются как функции времени; их значения в момент t будут обозначаться $z(t)$, $x(t)$, $y(t)$ соответственно.

Под агрегатом понимается объект, определяемый множествами T, X, Γ, Y, Z и операторами H и G . Операторы H и G называют операторами переходов и выходов. Они являются, вообще говоря, случайными и предназначены для реализации функций $z(t)$ и $y(t)$. Структура операторов переходов и выходов выделяет агрегаты среди прочих систем.

Дополнительно вводится пространство параметров B . Пусть элемент этого пространства B имеет вид $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_n) \in B$. Значение β фиксировано в рамках каждой конкретной задачи. Это конструктивный параметр. В этой связи управляющий сигнал $u(t)$ является параметром управления.

Рассмотрим сначала реализацию оператора выходов G . Представим его в виде двух операторов G' и G'' . Оператор G' вырабатывает очередные моменты выдачи непустых выходных сигналов, а оператор G'' - содержание сигналов. Операторы эти строятся следующим образом.

В пространстве состояний агрегата Z для каждого $\beta \in B$ и $g \in \Gamma$ определим некоторое множество $Z^Y(g_0, \beta) \subset Z$, вид которого зависит от (g, β) . То есть множество $Z^Y(g_0, \beta)$ в общем случае изменяется при изменении параметров агрегата, когда осуществляется переход к условиям другой задачи. В рамках данной задачи - в моменты поступления новых управляющих сигналов $g(t)$. В интервалах времени между моментами поступления управляющих сигналов множество $Z^Y(g_0, \beta)$ не изменяется и остается таким, каким оно оказалось в момент поступления последнего управляющего сигнала.

Множество $Z^Y(g_0, \beta)$ определяет моменты выдачи выходных сигналов.

Оператор G'' определяет содержание сигналов $y = G'' \{t, z(t), g(t), \beta\}$.

В общем случае оператор G'' является случайным оператором. Это значит, что данным t , $z(t)$, $g(t)$ и β ставится в соответствие не один определенный y , а некоторое множество значений управляющего параметра u с соответствующим распределением вероятностей, задаваемых оператором G'' .

Обратимся теперь к оператору переходов H .

Наряду с состоянием агрегата $z(t)$ рассматриваются также состояние $z(t+0)$, в которое агрегат переходит за "малый" интервал времени. Вид оператора H

зависит от того, поступают или не поступают в течение рассматриваемого интервала времени входные и управляющие сигналы. Поэтому его представляют в виде совокупности случайных операторов.

Пусть t'_n - момент поступления в агрегат входного сигнала x'_n , тогда

$$z(t'_n+0)=V'\{t'_n, z(t'_n), g(t'_n), x'_n, \beta\}, \quad (25.1)$$

где под $g(t'_n)$ понимается последний управляющий сигнал, поступивший в момент времени $t < t'_n$.

Если t''_n - момент поступления в агрегат управляющего сигнала g''_n , то

$$z(t''_n+0)=V''\{t''_n, z(t''_n), g''_n, \beta\}, \quad (25.2)$$

Далее, если t'_n - момент одновременного поступления в агрегат и входного x_n , и управляющего g_n сигналов, то

$$z(t_n+0)=V'\{t_n, V''(t_n, z(t_n), g_n, x'_n, \beta), g_n, x_n, \beta\}. \quad (25.3)$$

В этом выражении под $V''\{\bullet\}$ понимается не оператор, а результат его действия на аргументы $t_n, z(t_n), g_n, \beta$, являющийся элементом множества Z . Другими словами, вместо (25.3) можно записать

$$z(t_n+0)=V'\{t_n, z'(t_n+0), g_n, x_n, \beta\},$$

где $z'(t_n+0)$ определяется соотношением (25.2) для $t_n, z(t_n), g_n, \beta$.

Наконец, если полуинтервал $(t_n, t_{n+1}]$ не содержит моментов поступления сигналов, за исключением t_{n+1} , а t_n - момент поступления входного или управляющего сигнала, то для $t \in (t_n, t_{n+1}]$

$$z(t)=U\{t, t_n, z(t_n+0), g(t_n), \beta\}.$$

Здесь, подобно (25.1), под $g(t_n)$ понимается последний управляющий сигнал, поступивший в момент $t \leq t_n$.

Перейдем теперь к описанию типичного процесса функционирования агрегата в терминах рассматриваемой выше реализации операторов H и G .

Пусть в некоторый начальный момент времени t_0 агрегат находится в состоянии z_0 и пусть в моменты t'_1 и t'_2 поступают входные сигналы x'_1 и x'_2 , а в момент t''_1 - управляющий сигнал g''_1 и для определенности $t'_1 < t''_1 < t'_2$.

Рассмотрим сначала полуинтервал $(t_0, t'_n]$. Состояния агрегата $z(t)$ изменяется с течением времени по закону

$$z(t) = U\{t, t_0, z(t_0), g(t_0), \beta\}. \quad (25.4)$$

Предположим, что в момент t^*_1 такой, что $t_0 < t^*_1 < t'_1$, состояние $z(t^*_1)$ достигает множества $Z^Y(g_0, \beta)$. Тогда в момент t^*_1 выдается выходной сигнал

$$y^{(1)}=G''\{t^*_1, z(t^*_1), g_0, \beta\}.$$

Если состояние $z(t)$ опять достигает множества $Z^Y(g_0, \beta)$ в момент t^*_2 такой, что $t^*_1 < t^*_2 < t'_1$, то в момент t^*_2 выдается выходной сигнал

$$y^{(2)}=G''\{t^*_2, z(t^*_2), g_0, \beta\}. \quad (25.5)$$

и т.д. Здесь $z(t^*_1)$ и $z(t^*_2)$ определяется из (25.4).

В момент t'_1 в агрегат поступает входной сигнал x'_1 . Состояние агрегата

$$z(t'_1+0) = V'\{t'_1, z(t'_1), g_0, x'_1, \beta\}.$$

Здесь также $z(t'_1)$ определяется из (25.4).

В полуинтервале $(t'_1, t''_1]$ функционирование агрегата можно описать по аналогии с полуинтервалом $(t_0, t'_1]$. Состояние $z(t)$ определяется как

$$z(t) = U\{t, t'_1, z(t'_1+0), g_0, \beta\}. \quad (25.6)$$

Если в моменты t^*_k , такие, что $t'_1 < t^*_k < t''_1$, состояния $z(t^*_k)$ достигают множества $Z^Y(g_0, \beta)$, в каждый из моментов t^*_k выдается выходной сигнал

$$y^{(k)}=G''\{t^*_k, z(t^*_k), g_0, \beta\},$$

где $z(t^*_k)$ определяется из (25.6).

В момент t''_1 в агрегат поступает управляющий сигнал g''_1 и тогда состояния агрегата описывается оператором V'' :

$$z(t''_1+0)=V''\{t''_1, z(t''_1), g''_1, \beta\}. \quad (25.7)$$

Здесь $z(t''_1)$ также определяется из (25.6).

Далее, в полуинтервале $(t''_1, t'_2]$ состояние агрегата изменяется по закону

$$z(t) = U\{t, t''_1, z(t''_1+0), g''_1, \beta\}. \quad (25.8)$$

Если в моменты t^*_{k+r} , такие, что $t''_1 < t^*_{k+r} < t'_2$, $r \geq 1$, состояние $z(t^*_{k+r})$ достигает множества $Z^Y(g''_1, \beta)$, в каждый из моментов t^*_{k+r} выдается выходной сигнал

$$y^{(k+r)}=G''\{t^*_{k+r}, z(t^*_{k+r}), g''_1, \beta\}.$$

Когда в момент t'_2 в агрегат поступает входной сигнал x'_2 , то состояние агрегата принимает значение

$$z(t'_2+0)=V'\{t'_2, z(t'_2), g''_1, x'_2, \beta\},$$

где $z(t'_2)$ определяется из (25.8).

Затем состояние агрегата в полуинтервале $(t'_2, t^{**}]$ где t^{**} - очередной момент поступления входного или управляющего сигнала, изменяется по закону

$$z(t) = U\{t, t'_2, z(t'_2+0), g''_1, \beta\}$$

и так далее.

Лекция №26

Динамическое моделирование

Динамическое моделирование предприятия (ДМП) представляет собой изучение деятельности предприятия как информационной системы с обратной связью. Он показывает, каким образом взаимодействует организационная структура предприятия; показывает влияние авторитета в руководстве и время запаздывания в решениях и действиях в обеспечении успеха предприятия. ДМП описывает также взаимодействие потоков информации, денежных средств, заказов, товаров, рабочей силы и оборудования на предприятии, в отрасли промышленности и в экономике региона или государства.

С помощью ДМП создается единая структурная схема, в которой интегрируются функциональные отрасли управления, а именно – производство, сбыт, бухгалтерский учет, исследования и технические усовершенствования, капиталовложения. Оно воплощает экспериментальный подход к решению задачи приведения организационной структуры и методов руководства предприятием в соответствие с требованиями промышленного развития.

Динамические модели базируются на понятиях уровней, связанных между собой управляемыми потоками (рис.26.1). На рис.26.1 представлены четыре существенных элемента, которые ниже будут рассмотрены подробнее:

- несколько уровней;
- потоки, перемещающие содержимое одного уровня к другому;
- функции решений (изображенные в виде вентилей), которые регулируют темпы потока между уровнями;
- информационные связи, соединяющие функции решений с уровнями.

Уровни характеризуют возникающие накопления внутри системы. Это товары, имеющиеся на складе, товары в пути, банковская наличность, производственные площади и численность работающих.

Уровни представляют собой те значения переменных в данный момент, которые они имеют в результате накопления из-за разности между входящими и исходящими потоками.

Уровни существуют не только в сетях физических величин, но и в информационной сети.

Темп потока определяет существенные мгновенные потоки между уровнями в системе. Темп отражает активность, в то время как уровень

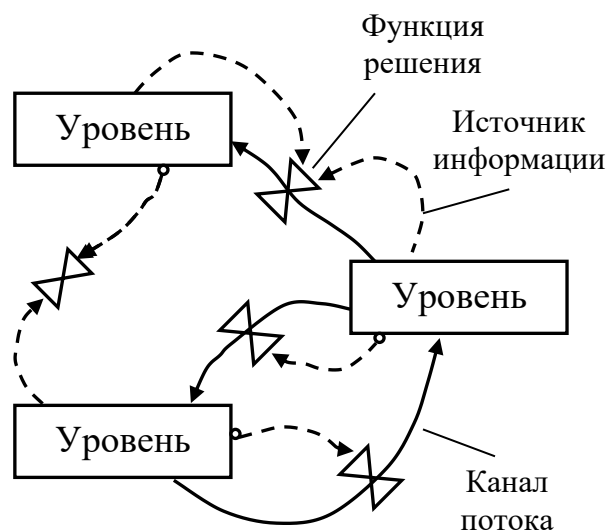


Рис.26.1. Главные элементы динамической модели.

измеряет состояние, которое является результатом активности в системе. Темпы точно так же, как и уровни, существуют во всех шести сетях, которые могут составлять систему – материалов, заказов, денежных средств, рабочей силы, оборудования и информации.

Темпы потока устанавливаются на основе уровней в соответствии с законами, которые определяют вид функций решений. В свою очередь темпы определяют уровни. В состав уровней, которыми определяется темп потока, обычно входит и тот уровень, из которого исходит данный поток.

Функции решений представляют собой формулировку линии поведения, определяющей, каким образом имеющаяся информация об уровнях приводит к выбору решений, связанных с величинами текущих темпов. Все решения касаются предстоящих действий и выражаются в форме темпов потока (выдачи заказов, приобретения оборудования, найма рабочей силы).

На рис.16.1 показано, что функции решений, на основе которых устанавливаются темпы, связаны только с информацией об уровнях. Выбирая весьма короткий интервал времени, мы можем установить в принципе, что данное решение не может зависеть от некоторых других принимаемых в данный момент времени решений (или множеств темпов) в другой части системы. Принцип независимости решений применим на практике: он служит краеугольным камнем построения модели. Из этого принципа не вытекает необходимость чрезмерного сокращения интервалов, для которых производятся расчеты в модели. Он делает возможным построение моделей, не требующих трудоемких вычислений.

Для отражения деятельности промышленного предприятия, необходимы несколько взаимосвязанных сетей:

- *сеть материалов* – темпы потоков и запасов реальных предметов, будь то сырье, незавершенное производство или готовая продукция;
- *сеть заказов* – заказы на товары, требования на трудовые ресурсы, на строительство новых площадей, это результат решений, которые не нашли своего отражения в потоках одной из других сетей;
- *сеть денежных средств* – это кассовая наличность, то есть фактическое движение платежей между денежными уровнями;
- *сеть рабочей силы* – определенное количество людей как индивидуумов, а не количество человеко-часов труда;
- *сеть оборудования* – производственная площадь, инструмент и оборудование, необходимые для производства товаров и показывающие как функционируют заводы и машины, каково имеющееся оборудование, какая часть этого оборудования находится в данный момент в эксплуатации, а также каков темп выхода орудий производства из строя;
- *связующая сеть информации* – последовательность переменных темпов и уровней.

Информационная сеть занимает особое положение в связи с тем, что она служит связующим материалом. В общем случае информационная сеть

начинается от уровней и темпов в пяти других сетях и заканчивается у функций решений, определяющих темпы в этих сетях. Основная часть модели будет находиться внутри информационной сети, так как информация – основа для принятия решений.

Для описания общей структуры динамической модели предприятия необходима *система уравнений*. Она должна соответствовать обстановке и взаимодействиям всех элементов моделируемой системы и процессам выработки решений. Модель должна достаточно полно отражать наши представления о реальной системе. Уравнения, которые мы будем рассматривать, образуют основную систему, разработанную в соответствии с уже описанной структурой модели. Будем рассматривать основные классы уравнений, а не особые формы, которые могут принимать отдельные уравнения.

В основном система уравнений состоит из уравнений двух типов – уравнений уровней и уравнений темпов. Для более полного понимания сути уравнений следует рассмотреть вопрос о последовательности вычислений.

Система уравнений записывается вместе с определенными условиями, устанавливающими способ ее решения. В динамическом моделировании рассматриваются системы уравнений, которые регулируют изменяющиеся во времени взаимодействия переменных. Эта изменчивость предопределяет необходимость периодически решать уравнения для нахождения новых состояний системы.

Для каждого момента времени может существовать специфическая последовательность вычислений, определяемая характером системы уравнений. На рис.26.2 представлена последовательность, используемая в данном случае.

Интервалы времени должны быть достаточно короткими, чтобы можно было принять допущение о постоянстве темпа потока на протяжении интервала, получив при этом удовлетворительное приближение к непрерывно изменяющимся темпам реальной системы. Это означает, что на решения, принятые в начальной точке интервала, не будут влиять изменения, происходящие в течение этого же интервала. Новые значения уровней рассчитываются на конец интервала. По ним определяются новые темпы (решения) для следующего интервала. Ясно, что можно выбрать столь небольшие интервалы времени, что отрезки прямых, проведенных в пределах каждого интервала, будут сколь угодно близко приближаться к любой кривой. Практически возможно выбирать интервал столь короткий, сколь это необходимо. Однако он должен быть таким, чтобы объем вычислений не превышал возможностей современных персональных компьютеров.

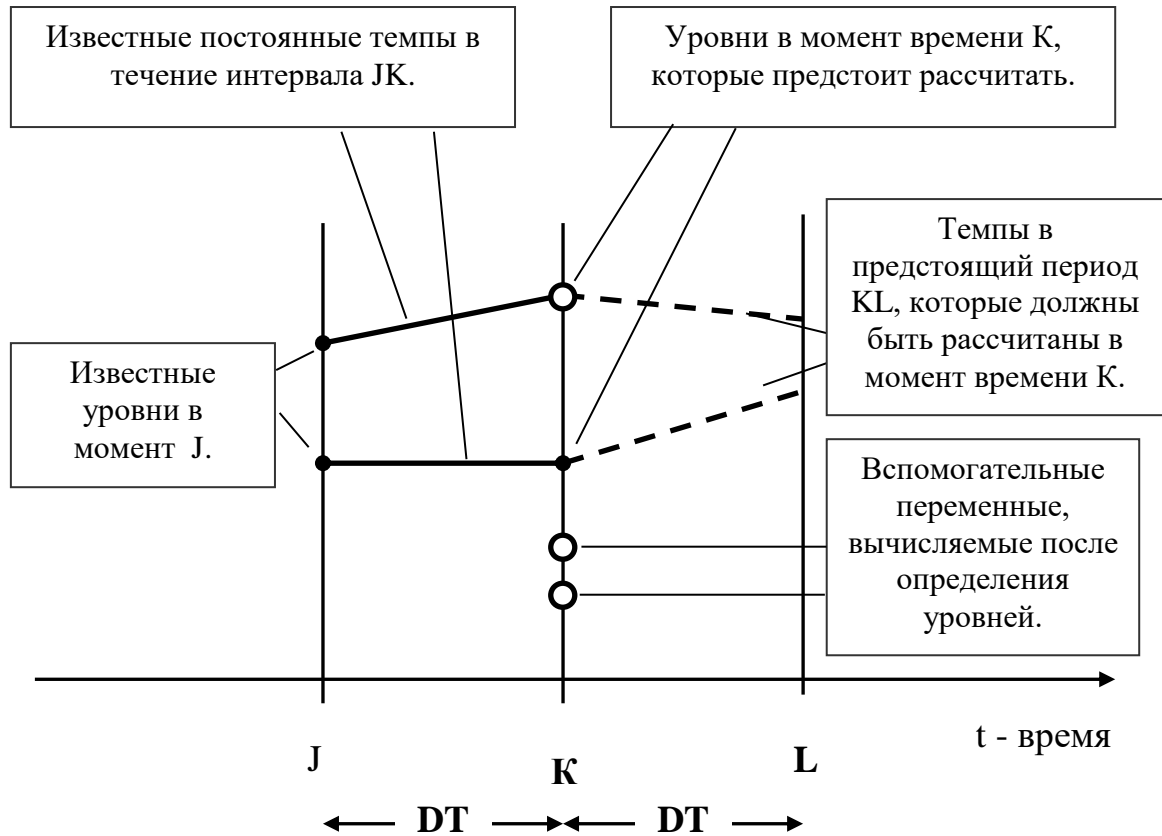


Рис. 26.2. Последовательность вычислений.
(DT – интервалы времени равной длины).

В большинстве динамических моделей допустимый интервал между вычислениями определяется запаздываниями. Запаздывания имеют вид показательной функции. Существует эмпирическое правило выбора интервала. Он должен быть обязательно меньше продолжительности любого запаздывания. Желательно, чтобы он был меньше его половины.

Наилучший способ проверки правильности выбора интервала решений состоит в варьировании его величины и наблюдении за влиянием ее на результаты вычислений.

Особым критерием, определяющим максимальную величину интервала решений, является взаимосвязь между значениями уровней и темпами потоков, входящими в эти уровни и исходящими из них. Интервал решений должен быть достаточно коротким, чтобы суммарный входящий или исходящий поток не вызывал больших изменений в содержании уровня за один интервал решений.

Лекция №27 Индивидуальное моделирование

В отличие от ранее рассмотренных методик построения имитационных моделей будем понимать под индивидуальным моделированием такие разработки имитационных моделей, которые носят сугубо индивидуальный, уникальный характер. Это имитационные модели, разработанные для исследования конкретных систем.

Рассмотрим пример такой имитационной модели, позволяющий исследовать функционирование простейшего склада. Пусть на нем обеспечивается поступление, хранение и выдача потребителю некоторой детали. Для полноты картины будем считать, что все процессы, описывающие поведение склада, носят вероятностный характер. Ясно, что детерминизация какого-либо процесса приведет лишь к упрощению модели.

Введем следующие обозначения (рис.27.1):

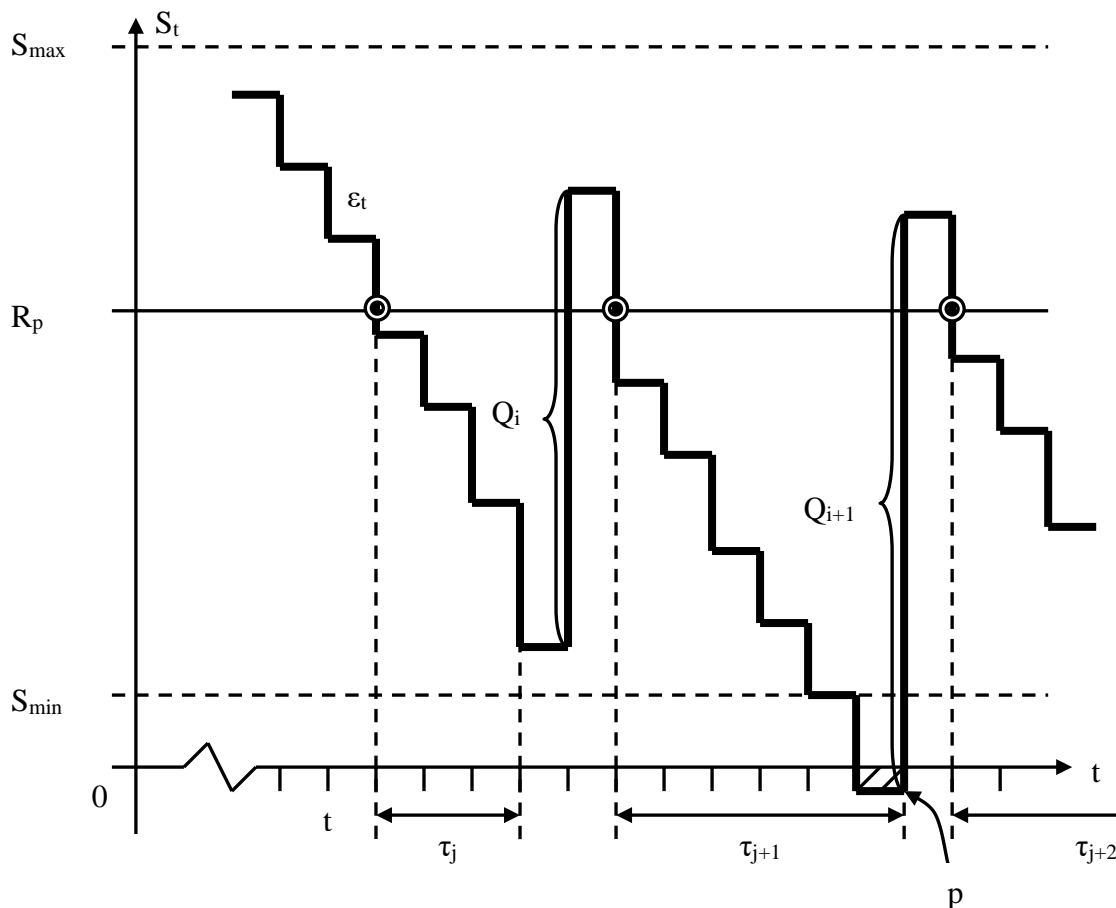


Рис.27.1. Простейший склад.

- t - текущее время, $t=1,2,\dots$,
- S_t - состояние склада в момент времени t ,
- S_{\min} - минимально допустимое состояние склада,
- S_{\max} - максимально допустимое состояние склада,
- R_p - сигнальный уровень ($R_p \geq 0$),

- ε_t - спрос на деталь в момент времени t ($\varepsilon_t \geq 0$),
- Q_i - размер поставки деталей от поставщика ($Q_i \geq 0$),
- τ_j - время выполнения заказа на поставку ($\tau > 0$),
- p - вероятность дефицита детали.

При поступлении спроса ε_t в момент времени t состояние склада S_t уменьшается на величину этого спроса. При достижении состоянием склада некоторого сигнального уровня R_p вырабатывается запрос потребителю на поставку партии деталей. Через случайное время τ эта партия размером Q_i поступит на склад и увеличит его состояние. Сигнальный уровень предназначен для управления процессом пополнения содержимого склада. В процессе функционирования склада возможна ситуация дефицита, когда состояние склада S_t может стать отрицательным (в математическом смысле). Это возможно в том случае, если в процессе потребления содержимое склада будет исчерпано, а поставка партии деталей не произошла. Для управления состоянием склада будем использовать параметр p – вероятность дефицита.

Ясно, что система должна быть построена и должна работать так, чтобы, по возможности, избежать дефицита. Очевидно, что при нулевой вероятности дефицита p сигнальный уровень R_p должна равняться бесконечности. Таким образом, ясно, что сигнальный уровень обратно пропорционален вероятности дефицита. С практической точки зрения ограничим сигнальный уровень интервалом

$$S_{\min} \leq R_p \leq S_{\max}.$$

Обратимся к экономической сущности задачи. С этой точки зрения интервал $[S_{\min}, S_{\max}]$ должен быть как можно меньше. Это объясняется тем, что уровни S_{\min} и S_{\max} должны быть как можно меньше, так как они определяют объемы материальных ценностей, не задействованные в процессе производства, то есть характеризуют уровень пролеживающих оборотных средств. Исходя из этого уровни S_{\min} и S_{\max} должны быть устремлены к нулю.

Одновременно, для того, чтобы обеспечить бездефицитное функционирование склада необходимо устремить S_{\min} и S_{\max} к бесконечности.

Таким образом, сигнальный уровень R_p как средняя величина интервала $[S_{\min}, S_{\max}]$ с одной стороны должен быть как можно больше, с другой, - равен нулю.

Сигнальный уровень R_p как параметр, зависящий от случайных явлений (τ_j , Q_i , ε_t), носит также случайный характер. Поэтому для него справедливо понятие доверительного интервала с границами

$$R_p \pm k \cdot \sigma(S_t),$$

где коэффициент k определяет размер доверительного интервала.

Исходя из того, что для интервала $[S_{\min}, S_{\max}]$ известно одно значение - $S_{\min}=0$, можно заключить, что

$$R_p = k \cdot \sigma(S_t). \quad (27.1)$$

Для определения среднеквадратического отклонения состояния склада S_t воспользуемся очевидной формулой

$$S_t = \sum_{i=1}^{i=n_Q} Q_i - \sum_{j=1}^{j=n_\varepsilon} \varepsilon_j,$$

где n_Q – количество поставок за время от 0 до t ,

n_ε – количество спросов за время от 0 до t .

В этом выражении все, входящие в него величины, являются случайными и каждое слагаемое есть сумма случайного числа случайных величин.

Видно, что для суммы (Y) случайного числа (n_x) случайных величин (X_j)

$$Y = \sum_{j=1}^{j=n_x} X_j$$

математическое ожидание определяется выражением

$$M[Y] = M[n_x] \cdot M[X],$$

а среднеквадратическое отклонение

$$\sigma[Y] = \sqrt{D[n_x] \cdot M^2[X] + M[n_x] \cdot D[X]}.$$

Подставив последнее выражение в (4.27)

$$R_p = k \cdot \left(\sqrt{D[n_Q] \cdot M^2[Q] + M[n_Q] \cdot D[Q]} + \sqrt{D[n_\varepsilon] \cdot M^2[\varepsilon] + M[n_\varepsilon] \cdot D[\varepsilon]} \right).$$

А так как мы выяснили, что сигнальный уровень R_p и вероятность дефицита p обратно пропорциональны, то можно полагать $k = 1/p$.

Таким образом,

$$R_p = k \cdot \left(\sqrt{D[n_Q] \cdot M^2[Q] + M[n_Q] \cdot D[Q]} + \sqrt{D[n_\varepsilon] \cdot M^2[\varepsilon] + M[n_\varepsilon] \cdot D[\varepsilon]} \right) \quad (4.28)$$

Отметим, что приведенные выше рассуждения являются единичным и совершенно не характерным способом определения сигнального уровня и параметров работы склада. Более подробные сведения по этому вопросу можно найти в специальной литературе, посвященной системам управления запасами (ресурсами, материально-техническим снабжением, оперативного планирования и управления производства).

Для полноты описания исследуемой системы следует провести сбор и обработку статистической информации, описывающей поведение случайных процессов спроса (ε_t) и поставок (Q_i и τ_j) в реальной системе. Выявленные вероятностные свойства необходимы для воспроизведения случайных чисел ε_t ,

Q_i и τ_j в процессе имитационного эксперимента. С точки зрения системных исследований рассматриваемого объекта сбор реальных данных может и не производиться. Мы можем воспользоваться описанными выше методами воспроизведения случайных чисел с задаваемыми нами, необходимыми для исследования вероятностными свойствами.

Оценка адекватности имитационной модели реальной системе является чрезвычайно важным этапом. Обусловлено это тем впечатлением реальности, которым обладают описываемые модели, и проверка, выполненная без должной тщательности, может привести к тяжелым последствиям.

Проверка соответствия модели и объекта заключается в сравнении интересных для исследователя свойств оригинала и модели.

Для этого необходимо исследовать функциональную или проектируемую систему, что естественно, не всегда возможно. Таким образом, не всегда возможна прямая экспериментальная проверка адекватности свойств модели и объекта.

Вместе с тем, адекватность не следует непосредственно из процесса построения модели. Упрощенная модель не может быть подобна объекту в смысле, обычном для теории подобия: требование пропорциональности сходных параметров и процессов в модели и объекте заведомо не соблюдается из-за различия в числе параметров.

Тем не менее, в литературе рассматриваются различные способы оценки адекватности имитационной модели реальной системы. В частности, предлагается использовать проверки на качество результатов при задании предельных значений исходных данных, на верность исходных предположений и на правильность преобразования информации в модели.

Лекция №28

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Оптимизация технологических задач

Инженеру – проектировщику приходится решать оптимизационные задачи, так как его работа прежде всего направлена на разработку новых более эффективных производственных систем: технологических процессов и средств их оснащения, прогрессивного оборудования и машин.

Под *математической оптимизацией* обычно понимают совокупность различных математических методов, алгоритмов и программ, направленных на нахождение оптимума функции, наиболее полно характеризующей потребительские свойства рассматриваемого объекта. Такую функцию в теории оптимизации называют *целевой функцией*, а ее аргументы, за счет рационального выбора которых достигают или приближаются к оптимуму называют *проектными параметрами*.

Число проектных параметров может быть различно. Если такой параметр один, тогда оптимизируют функцию одной переменной, – решают задачу одномерной оптимизации. Если проектных параметров несколько, – решается задача многомерной оптимизации. Так как проектные параметры в технологических задачах принимают главным образом вещественные значения, то каждому набору этих значений, можно поставить в соответствие вектор n -мерного евклидова пространства R^n .

Исходя из физического смысла, технико-экономических возможностей в технологических процессах, исследуемые параметры не могут принимать любые численные значения и на них должны быть наложены ограничения.

В результате этого, можно предложить обобщенную математическую формулировку задач оптимизации – найти оптимум функции:

$$Y = F(X), \quad (28.1)$$

в которой $X=(x_1, x_2, \dots, x_n)$ – n -мерный вектор проектных параметров x_i . При условии существования следующих ограничений:

$$\varphi_p(X) = 0, \quad p = 1, 2, \dots, k; \quad (28.2)$$

$$\psi_r(X) \geq 0, \quad r = 1, 2, \dots, l; \quad (28.3)$$

$$a_i \leq x_i \leq b_i, \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad (28.4)$$

где k – число ограничений – равенств, l – число ограничений – неравенств, a_i и b_i – границы варьирования проектных параметров x_i , зависящие от конкретных условий задачи.

Если ограничения (28.2) – (28.4) не наложены ($k=0$, $l=0$, $a_i=-\infty$, $b_i=+\infty$), то имеют дело с задачей безусловной оптимизации функции (28.1). В противном случае рассматривают задачу условной оптимизации.

Лекция №29

Безусловная оптимизация одной переменной

Нахождение оптимума функции одной переменной $f(x)$ при наложении ограничений типа (28.4) не вызывает затруднений и сводится к нахождению значений $f(x)$ в точках a и b , корней уравнения $f'(x)=0$ (т. е. точек подозрительных на экстремум), а также анализу поведения $f'(x)$ в окрестностях этих точек, либо исследованию в них знаков старших производных.

Для многих конкретных задач одномерной оптимизации рационально использовать численные методы нахождения экстремумов. В ряде случаев, когда исходя из физической сущности рассматриваемой задачи известно, что функция $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ имеет единственный экстремум целесообразно применять методы исключения интервалов. Основное достоинство методов исключения интервалов – отсутствие необходимости в информации о гладкости исследуемой целевой функции. Недостатком является отсутствие учета величин разностей между вычисляемыми значениями целевой функции, так как это позволило бы ускорить поиск оптимума функции.

В теории математической оптимизации разработан ряд методов позволяющих учитывать эту информацию, однако они требуют от целевой функции определенной степени гладкости.

Наиболее просты в применении методы оптимизации, основанные на *полиномиальной аппроксимации* целевой функции. Идея этих методов состоит в вычислении значений целевой функции в ряде точек исследуемого отрезка и построении на основе результатов таких вычислений аппроксимирующего полинома, чаще всего для этого используется квадратичная экстраполяция. Далее разыскивают оптимум построенного полинома и отождествляют полученное значение с искомым оптимумом целевой функции.

Лекция №30

Многомерная безусловная оптимизация

Задачи многомерной безусловной оптимизации формулируются аналогично общей задаче оптимизации при отсутствии ограничений (28.2)-(28.4). Необходимым условием существования экстремума целевой функции $F(\vec{X})$ в точке $\vec{X} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in R^n$ n -мерного пространства проектных параметров является обращение в нуль компонент вектора-градиента функции в этой точке:

$$\text{grad}F(\vec{X})^T = \left(\frac{\partial F(\vec{X})}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial F(\vec{X})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial F(\vec{X})}{\partial x_n} \right) = (0, \dots, 0, \dots, 0) \quad (30.1)$$

В общем случае условие стационарности (30.1) точки, пространства R^n обозначаемой \vec{X}^* определяется путем решения нелинейной системы уравнений:

$$\frac{\partial F(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_i} = 0; \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (30.2)$$

что представляется весьма трудоемкой задачей.

Достаточное условие существования экстремума целевой функции в точке \vec{X}^* задается результатами исследования матрицы Гессе:

$$H_F(\vec{X}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 F}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 F}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 F}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \quad (30.3)$$

Для максимума целевой функции достаточным условием является то, что матрица Гессе (30.3) в стационарной точке \vec{X}^* , при любом векторе $\Delta \vec{X} = \vec{X} - \vec{X}^*$ будет отрицательно определенной, т.е. скалярное произведение $\Delta \vec{X}$ и $H_F(\vec{X})\Delta \vec{X}$ – отрицательно, а для минимума – положительно определенной т.е. произведение $\Delta \vec{X}$ и $H_F(\vec{X})\Delta \vec{X}$ – положительно. В противном случае экстремум в \vec{X}^* не достигается, а сама стационарная точка – седловая.

Нахождение точек оптимума $F(X)$ путем анализа выше условия (30.2) и исследование матрицы (30.3) даже в двумерном случае ($\vec{X}^* \in R^2$) вызывает существенные затруднения. Поэтому разработаны математические методы и алгоритмы, позволяющие достаточно простыми способами приближаться к оптимуму.

Один из наиболее наглядных, широко применяемый на практике метод

безусловной оптимизации – *симплексный поиск*.

Регулярным симплексом в пространстве R^n называют правильный многогранник, образованный $n+1$ равноотстоящими друг от друга вершинами. Так, например, на координатной плоскости, в пространстве (R^2) симплекс – правильный треугольник, в трехмерном пространстве (R^3) – тетраэдр.

Координаты (n штук) вершин ($n+1$ штука) регулярного симплекса задаются матрицей размером $(n+1) \times n$

$$\begin{bmatrix} x_1^0 & x_2^0 & \dots & x_n^0 \\ x_1^0 + P_n & x_2^0 + q_n & \dots & x_n^0 + q_n \\ x_1^0 + q_n & x_2^0 + P_n & \dots & x_n^0 + q_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_1^0 + q_n & x_2^0 + q_n & \dots & x_n^0 + P_n \end{bmatrix},$$

где X^0 – так называемая базовая вершина симплекса, выбор которой осуществляют на основании априорной информации о поведении целевой функции. Постоянные P_n и q_n находят по следующим формулам:

$$P_n = \frac{\sqrt{n+1} + n - 1}{n\sqrt{2}} \alpha; \quad q_n = \left(P_n - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \alpha.$$

Масштабный множитель α равный длине стороны симплекса также выбирается исходя из предварительной информации о поведении целевой функции.

После построения начального симплекса – определения координат его вершин (рис.30.1,а), находят такую вершину (x_1, x_2, \dots, x_n) , в которой целевая функция имеет наибольшее значение (при отыскании минимума), и отображают ее симметрично центру тяжести остальных вершин симплекса.

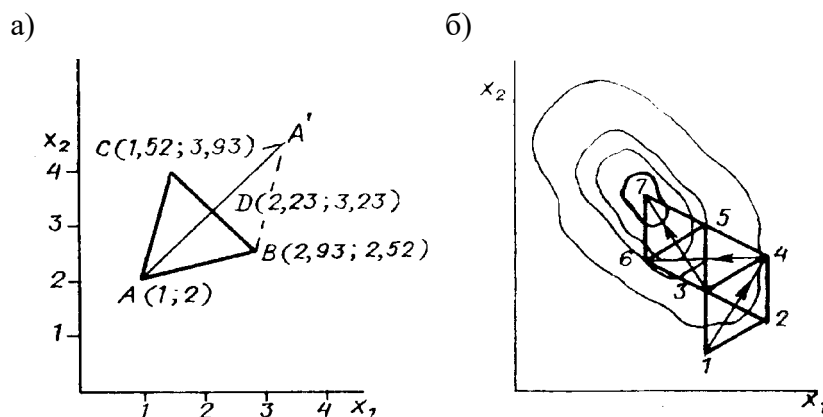


Рис. 30.1. Двухмерный регулярный симплекс на плоскости с базовой точкой $X^0(1;2)$ и масштабным коэффициентом $\alpha=2$ (а), схема движения к оптимуму (б)

Координаты центра тяжести X^{CT} вершин симплекса вычисляют по формуле

$$x_k^{um} = \frac{1}{n} \sum_{i=1, i \neq j}^{n+1} x_k^i,$$

где j – номер отображаемой вершины; $k=1,2,\dots,n$.

Координаты новой вершины симплекса $(x_1^u, x_2^u, \dots, x_n^u)$ определяют по формуле

$$x_i^u = 2x_i^{um} - x_i, \quad i=1,2,\dots,n$$

Затем вычисляют значение целевой функции во вновь полученной вершине $f(x_1^u, x_2^u, \dots, x_n^u)$ и сопоставляют со значениями в остальных вершинах симплекса за исключением отраженной вершины. Вновь разыскивается худшая вершина, отображается относительно центра тяжести остальных и т. д. (рис.30.1, б).

Если после очередного отражения вершины не достигается приближение к экстремуму целевой функции при достаточно малой длине ребра симплекса, то поиск можно прекратить. За искомое экстремальное значение в этом случае принимают наименьшее (в случае поиска максимума-наибольшее) значение целевой функции в вершинах последнего из построенных симплексов. Если заданная точность шага длина ребра не удовлетворяет, то выбрав нужную вершину в качестве базовой, уменьшают в требуемой степени масштабный коэффициент α и продолжают симплексный поиск.

Известна модификация симплексного поиска, позволяющая последовательно растягивать и сжимать длину ребра симплекса именуемая процедурой Нелдера-Мида.

Симплексный поиск может быть использован и как метод планирования эксперимента. В этом случае информацию о значениях целевой функции находят экспериментально при величинах проектных параметров, соответствующих координатам вершин симплекса.

К числу достоинств симплексного поиска следует отнести простоту алгоритма и расчетных формул, отсутствие сильной чувствительности к характеру изменения целевой функции.

В то же время метод оптимизации на симплексе имеет ряд недостатков. Алгоритм работает относительно медленно, так как количественная информация о значениях целевой функции в вершинах симплекса не используется. При необходимости изменить длину ребра симплекса требуется заново рассчитать значения целевой функции во всех вершинах вновь построенного симплекса с новой длиной ребра.

От первого из указанных недостатков свободны *градиентные методы поиска*. В отличие от симплексного поиска при использовании этой группы

методов требуется предварительная информация о дифференцируемости целевой функции. Для нахождения точки оптимума в пространстве проектных параметров R^n используют итеративную процедуру:

$$\vec{X}^{(k+1)} = \vec{X}^{(k)} + \alpha^{(k)} \vec{S}(\vec{X}^{(k)}),$$

где $\vec{X}^{(k+1)} = (x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_n^{(k+1)})$ – вычисленное на данном шаге приближение к оптимуму вектора проектных параметров; $\vec{X}^{(k)}$ – текущее значение вектора проектных параметров; $\alpha^{(k)}$ – текущее значение параметра, характеризующего длину шага; $\vec{S}(\vec{X}^{(k)})$ – направление поиска на текущем шаге.

Выбор векторов $\vec{S}(\vec{X}^{(k)})$ осуществляют на основании информации о частных производных целевой функции по проектным параметрам. Выбор числового параметра $\alpha^{(k)}$ на каждом шаге ведут обычно, решая задачу оптимизации целевой функции в направлении $\vec{S}(\vec{X}^{(k)})$.

Из всего многообразия методов многомерной оптимизации рассмотрим относительно простые методы поиска минимума целевой функции $F(\vec{X})$.

Метод координатного спуска заключается в поочередном поиске минимума по координате x_1 , затем x_2 и т.д. Поиск ведется с одинаковым шагом, который уменьшается после нахождения всех значений $x_{1m}, x_{2m}, \dots, x_{nm}$.

Метод координатного спуска с квадратичной интерполяцией – экстраполяцией основан на последовательном поиске минимума каждой переменной с применением для этого метода квадратичной интерполяции – экстраполяции.

Метод спирального координатного спуска отличается тем, что шаг меняется каждый раз при переходе от поиска минимума по одной переменной к поиску по другой. Обычно это дает некоторое сокращение времени поиска и в трехмерном пространстве напоминает спуск во впадину по спирали.

Лекция №32

Условная оптимизация нелинейных моделей

Существует класс задач в которых целевая функция нелинейно зависит от компонент вектора проектных параметров, либо нелинейны ограничения целевой функции.

Эти задачи изучают в специальном разделе математики — *нелинейном программировании* (НП).

При решении задач условной оптимизации НП находят применение *способы статистического разыгрывания*. Эти методы основаны на случайном выборе точек в пространстве векторов проектных параметров R^n , и, как правило, не имеют строгого математического обоснования. Однако они логически просты, и позволяют достаточно быстро приблизиться к оптимуму.

В качестве одного из таких методов оптимизации часто используется *комплекс-метод*. Этот способ оптимизации может с успехом применяться как для задач безусловной, так и условной оптимизации. В последнем случае на область проектных параметров накладывается дополнительное требование выпуклости.

Метод комплексов напоминает симплексный поиск, однако в отличие от регулярных симплексов вершины комплексов строятся статистическим разыгрыванием.

Первоначальный комплекс имеет число вершин $N > n + 1$, при $n < 5$ рекомендуется брать $N = 2n$. Его вершины строят статистическим разыгрыванием, сущность которого состоит в следующем. Пусть a_i и b_i — соответственно границы изменения i -го компонента x_i вектора проектных параметров ($a_i \leq x_i \leq b_i$). Тогда i -й компонент j -й вершины определяют по формуле

$$x_i^j = a_i + r_{ij}(b_i - a_i),$$

в которой случайное число $r_{ij} \in [0, 1]$ может быть получено с помощью специальных программ — датчиков псевдослучайных чисел.

При формировании компонент вектора каждой вершины проверяют

соответствие координат вершин заданным ограничениям. Если полученный набор проектных параметров в какой-нибудь вершине не удовлетворяет ограничениям — вершина вышла за пределы допустимой области решений, то он отбрасывается и заменяется новым.

После завершения расчетов компонент векторов всех вершин комплекса в них рассчитывают значения целевой функции. Сопоставляя между собой полученные N значений, выбирают вершину с наихудшим значением целевой функции (при разыскании минимума вершину комплекса с наибольшим значением целевой функции, при разыскании максимума — с наименьшим).

Затем вычисляют координаты центра тяжести полученных вершин комплекса без худшей вершины по формуле

$$x_i^{um} = \frac{1}{N-1} \left(\sum_{j=1}^N x_i^j - x_k \right); \quad \vec{X}^{um} = (x_1^{um}, \dots, x_n^{um}), \quad (32.1)$$

где k — номер худшей вершины комплекса. Требование выпуклости области задания векторов проектных параметров, накладываемое на ограничения, обеспечивает попадание центра тяжести в заданную область.

Следующий шаг алгоритма комплекс-метода — отражение худшей вершины относительно центра тяжести остальных (32.1). Отражение осуществляют по формуле

$$\vec{X}^{нов} = \vec{X}^{um} + \alpha (\vec{X}^{um} - \vec{X}_{\max}),$$

где α — масштабный коэффициент. Первоначально полагают $\alpha=1$; если вновь полученная вершина не попадает в область задания, то эту точку приближают к \vec{X}^{um} , положив $\alpha = 1/2$.

После этого рассчитывают среднее значение целевой функции и координаты вектора центра тяжести всех N вершин комплекса:

$$\bar{F} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N F(\vec{X}_j);$$

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \vec{X}_j = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n)$$

Затем проверяют выполнение условий окончания работы алгоритма комплекс-

метода:

$$\sum_{j=1}^N (F(\bar{X}_j) - \bar{F})^2 \leq \varepsilon; \quad (32.2)$$

$$\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^n (x_i^j - \bar{x}_j)^2 \leq \delta, \quad (32.3)$$

где ε и δ – заранее заданные точности вычисления целевой функции и координат соответственно. Если условия (32.2) и (32.3) выполнены, то лучшая из вершин последнего комплекса принимается за оптимальное решение. Если условия на данном шаге не выполняются, то пока они не будут выполнены продолжают последовательно отражать худшие вершины.

Достаточно просты и удобны в практическом использовании методы условной оптимизации задач НП, основанные на преобразовании задачи условной оптимизации в задачу безусловной оптимизации за счет введения вспомогательных — штрафных функций.

Идея *метода штрафных функций* состоит в следующем. Пусть требуется минимизировать функцию $f(X)$ при ограничениях (28.2)-(28.4). В наиболее общем виде штрафная функция задается выражением

$$\Phi(x_1, \dots, x_n, r_1, \dots, r_m) = f(x_1, \dots, x_n) + \Omega(r_1, \dots, r_m, \varphi_1, \dots, \varphi_k, \psi_1, \dots, \psi_l), \quad (32.4)$$

где $\bar{R} = (r_1, r_2, \dots, r_m)$ – вектор штрафных параметров; Ω – штраф, являющийся функцией штрафных параметров, а также функцией ограничений (28.3), (28.4). Штраф Ω должен быть сконструирован таким образом, чтобы при приближении точки к границе допустимой области, задаваемой ограничениями, штрафная функция при разыскании минимума) резко возрастала. Используя методы безусловной оптимизации, находят такие значения проектных и штрафных параметров, при которых Φ (32.4) достигает минимума. При этом, как правило, приходится строить последовательность векторов проектных и штрафных параметров, сходящуюся к точке оптимума.

В настоящее время наиболее разработан аппарат ЛП, поэтому представляется рациональным в ряде случаев использовать его для

оптимизации нелинейных функций.

Наиболее просто это осуществить линейризацией целевой функции (28.1) и функций – ограничений (28.2), (28.3), т. е. заменой нелинейных функций линейными приближениями. С этой целью рационально использовать разложение целевой функции и функций-ограничений в ряд Тейлора, ограничиваясь линейными членами. В результате линейной аппроксимацией целевой функции принимается:

$$\tilde{f}(\bar{X}, \bar{X}^{(0)}) = f(\bar{X}^{(0)}) + \text{grad}f(\bar{X}^{(0)}) \cdot (\bar{X} - \bar{X}^{(0)}) \quad (32.5)$$

в которой $\bar{X}^{(0)} = (x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ называется точкой линейризации. Аналогично строятся линейные аппроксимации ограничений:

$$\varphi_p(\bar{X}^{(0)}) + \text{grad}\varphi_p \cdot (\bar{X} - \bar{X}^{(0)}) = 0, \quad p = 1, 2, \dots, k; \quad (32.6)$$

$$\psi_r(\bar{X}^{(0)}) + \text{grad}\psi_r \cdot (\bar{X} - \bar{X}^{(0)}) \geq 0, \quad r = 1, 2, \dots, l. \quad (32.7)$$

Решая оптимизационную задачу ЛП (32.5)-(32.7), например, симплекс-методом, получают точку $\bar{X}^{(1)}$ пространства проектных параметров, которая является первым приближением к оптимуму. Далее, заменив $\bar{X}^{(0)}$ на $\bar{X}^{(1)}$, получают аналогично новое приближение и т. д.

Существует ряд алгоритмов, совершенствующих описанную выше итерационную процедуру. Они позволяют построить последовательность векторов проектных параметров, приближающихся к точке оптимума для различных конкретных задач НП.

Лекция №33

Методы дихотомии и золотого сечения

Метод дихотомии

Метод дихотомии применяется для унимодальных функций. Метод дихотомии заключается в том, что исходный интервал $[a,b]$ делится средней точкой на два подинтервала $[a,c]$ и $[c,b]$ в одном из которых лежит точка минимума x^* .

Для выбора подинтервала, для хорошо дифференцируемой функции вычисляют в точке c производную $f'_0(c)$ и анализируют ее знак. Если $f'_0(c) > 0$, то x^* лежит слева от точки c , т.е. В отрезке $[a,c]$; если $f'_0(c) < 0$, то x^* лежит справа от точки c , т.е. В отрезке $[c,b]$, а при найдена точка минимума $x^* = c$.

Если $f_0(x)$ не дифференцируемая, то выясняется направление убывания унимодальной функции. С этой целью задается точка $c+h$ (где $h > 0$ – малая величина, соизмеримая с ε и вычисляется ордината $f_0(c+h)$.

Если приращение функции $\Delta f_0(c) = f_0(c) - f_0(c+h) < 0$, то точка x^* лежит справа от точки c , т.е. x^* принадлежит отрезку $[c,b]$.

Если $\Delta f_0(c) = f_0(c) - f_0(c+h) > 0$, то точка x^* лежит слева от точки c , т.е. x^* принадлежит отрезку $[a,c]$.

При $\Delta f_0(c) \approx 0$ имеем точку минимума $x^* \approx c$.

После выбора подинтервала, в котором находится x^* , например $[c,b]$, переопределяем левую границу $a=c$ (при выборе $[a,c]$ следует поменять правую границу $b=c$).

Проверяем $|b-a| \leq \varepsilon$, если нет, то вновь делим отрезок $[b-a]$ пополам и опять определяем, в каком подинтервале находится точка минимума.

Алгоритм поиска минимума:

1. Вводим границы $[a,b]$ и ε . $h = 100 \cdot \varepsilon$.
2. Делим отрезок пополам $c = (b+a)/2$.
3. Вычисляем приращение функции $\Delta f_0(c) = f_0(c) - f_0(c+h)$. Если $\Delta f_0(c) < 0$, то $a=c$, иначе если $\Delta f_0(c) \geq 0$, то $b=c$.
4. Проверяем условие $(b-a) \leq \varepsilon$? Если нет, то переходим на п.2, да – переход на п.5.
5. Печать: "точка минимума $x^* =$ ", c , $f_0(c)$, $f'_0(c)$. Конец.

Для контроля правильности полученного решения можно вывести на печать значение $f'_0(x^*)$, которое должно быть близко к нулю. Если $f'_0(x^*) = 0$ не выполняется, то следует искать ошибку в программе.

Если интервал, содержащий точку минимума функции определяется на основе вычисления производной $f'_0(c)$, то такая реализации метода дихотомии будет относиться к итерационным процедурам 1 порядка.

Метод золотого сечения

Метод "золотого" сечения требует только унимодальности функции $f_0(x)$.

"Золотое" сечение, открытое Евклидом, состоит в разбиении интервала $[a,b]$ точкой x_1 на две части таким образом, чтобы отношение большей части к длине всего интервала было равно отношению меньшей части к большей.

$$\frac{b-x_1}{b-a} = \frac{x_1-a}{b-x_1} = \tau. \quad (33.1)$$

Представим интервал $[a,b]$ как совокупность двух отрезков:

$$b-a = x_1-a + b-x_1. \quad (7.2)$$

Разделив уравнение (33.2) на $(b-a)$, получим:

$$\frac{x_1-a}{b-a} + \frac{b-x_1}{b-a} = 1.$$

Так как $(b-x_1)/(b-a) = \tau$ и $\frac{x_1-a}{b-a} \cdot \frac{b-x_1}{b-x_1} = \tau^2$, имеем $\tau^2 + \tau = 1$, корни которого

определяются по формуле:

$$\tau_{1,2} = \frac{-1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + 1} \text{ т.е. } \tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \approx 0,618.$$

Из уравнения (33.1) следует

$$x_1 = b - \tau(b-a). \quad (33.3)$$

Проведем "золотое" сечение относительно точки a , получим

$$\frac{x_2-a}{b-a} = \frac{b-x_2}{x_2-a} = \tau. \quad (33.4)$$

Из уравнения (33.4) получим формулу для определения точки x_2 :

$$x_2 = a + \tau(b-a). \quad (33.5)$$

Заметим, что точка x_1 производит "золотое" сечение интервала $[a, x_2]$, а точка x_2 – интервала $[x_1, b]$.

Для унимодальной функции, зная значения функции в точках золотого сечения $f_0(x_1)$ и $f_0(x_2)$, можно определить интервал неопределенности, в котором находится x^* . После выбора на оставшемся интервале нужно определить только одну точку, производящую "золотое" сечение. Для

выбранного интервала $[a, x_2]$ следует положить $b=x_2$, $x_2=x_1$ и пересчитать точку x_1 по формуле (33.3), а для $[x_1, b]$ – $a=x_1$, $x_1=x_2$ и пересчитать точку x_2 по формуле (33.5). На каждом шаге итерации длина интервала неопределенности уменьшается и составляет примерно 0,62 длины предыдущего интервала неопределенности. Итерационную процедуру следует закончить, когда длина интервала неопределенности станет меньше или равна заданной точности.

Алгоритм метода "золотого" сечения:

1. Ввод a, b, ε . Вычисляем значения x_1 и x_2 по формулам (33.3), (33.5).
2. Вычисляем $f_1 = f_0(x_1)$ и $f_2 = f_0(x_2)$.
3. Если $f_0(x_1) < f_0(x_2)$, то x^* находится в интервале $[a, x_2]$ (рис.33.1б), т.е. $b=x_2$. Переопределяем точки $x_2=x_1$ и $f_2=f_1$, пересчитываем точку x_1 по формуле (33.3) и вычисляем f_1 . Переходим на п.4.
- Если $f_0(x_1) \geq f_0(x_2)$, то x^* находится в интервале $[x_1, b]$ (рис.33.1а), т.е. $a=x_1$, $x_1=x_2$, $f_1=f_2$. Пересчитываем точку x_2 по формуле (33.5) и вычисляем f_2 .
4. Проверка $(b-a) < \varepsilon$, если нет, то переходим на п.3, да – на п.5.
5. Печать $x^* = (b+a)/2$, оптимального значения критерия $f_0(x^*), f'_0(x^*)$, для контроля правильности полученных данных.

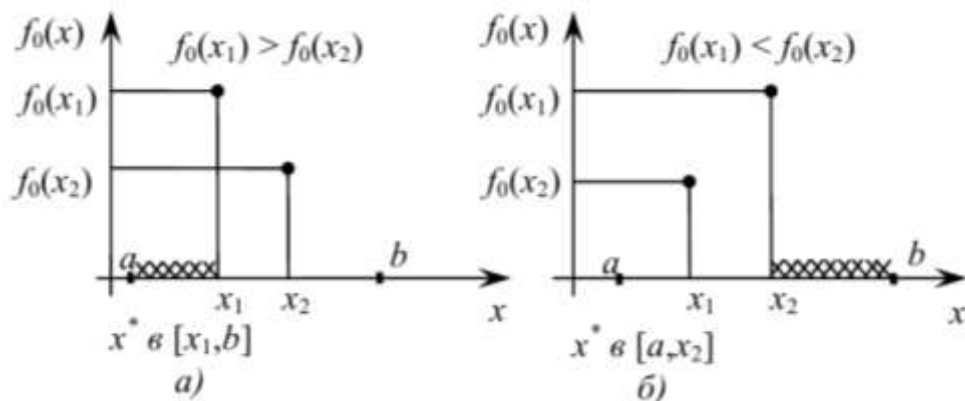


Рис.33.1

Лекция №34

Методы квадратичной интерполяции и полиномиальной аппроксимации

Методы квадратичной интерполяции

Метод квадратичной интерполяции используют для поиска точки минимума x^* непрерывной функции $f(x)$, определенной на множестве $D = \{x : a \leq x \leq b\}$. Из области допустимых значений D выделяется подмножество D_1 , в котором расположена точка экстремума x^* , и аппроксимируется функция $f(x)$ (x принадлежит подмножеству D_1) некоторой сильно выпуклой функцией вида:

$$\varphi(x) = a_1 \cdot x^2 + a_2 \cdot x + a_3.$$

Далее аналитическим методом находится точка минимума x_4 функции $\varphi(x)$ из необходимого условия существования экстремума

$$\varphi'(x) = 2 \cdot a_1 \cdot x_4 + a_2 = 0.$$

Отсюда

$$x_4 = -a_2 / (2a_1), \quad (34.1)$$

которая тем ближе к точке x^* , чем ближе функция $\varphi(x)$ к $f_0(x)$ на подмножестве D_1 .

Для нахождения множества D и коэффициентов a , b , c функции $\varphi(x)$ необходимо подобрать вблизи предполагаемого минимума x_4 точки x_1 , x_2 , x_3 , такие, что крайние ординаты больше средней ординаты, т.е. при $x_1 < x_2 < x_3$ было справедливо неравенство:

$$f(x_1) > f(x_2) < f(x_3).$$

По условию интерполяции значения аппроксимирующей параболы $\varphi(x_i)$ должны совпадать со значениями целевой функции $\varphi(x_i)$, $\varphi(x_i) = f(x_i)$, $i = 1, 2, 3$. В результате получается система линейных уравнений, относительно неизвестных коэффициентов $a_i (i = \overline{1, 3})$:

$$\begin{cases} a_1 \cdot x_1^2 + a_2 \cdot x_1 + a_3 = f(x_1) = f_1 \\ a_1 \cdot x_2^2 + a_2 \cdot x_2 + a_3 = f(x_2) = f_2 \\ a_1 \cdot x_3^2 + a_2 \cdot x_3 + a_3 = f(x_3) = f_3 \end{cases}$$

Далее находятся неизвестные коэффициенты по методу Крамера:

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} f_1 & x_1 & 1 \\ f_2 & x_2 & 1 \\ f_3 & x_3 & 1 \end{vmatrix}}{\Delta c}; \quad a_2 = \frac{\begin{vmatrix} x_1^2 & f_1 & 1 \\ x_2^2 & f_2 & 1 \\ x_3^2 & f_3 & 1 \end{vmatrix}}{\Delta c}; \quad a_3 = \frac{\begin{vmatrix} x_1^2 & x_1 & f_1 \\ x_2^2 & x_2 & f_2 \\ x_3^2 & x_3 & f_3 \end{vmatrix}}{\Delta c}, \quad (34.2)$$

где

$$\Delta c = \begin{vmatrix} x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^2 & x_2 & 1 \\ x_3^2 & x_3 & 1 \end{vmatrix}.$$

С учетом соотношений (34.1) и (34.2) получается выражение для определения точки x_4 непосредственно через $x_i, f_i, (i=1,2,3)$:

$$x_4 = \frac{x_5}{x_6} = \frac{(x_3^2 - x_2^2) \cdot f_1 + (x_1^2 - x_3^2) \cdot f_2 + (x_2^2 - x_1^2) \cdot f_3}{2 \cdot [(x_3 - x_2) \cdot f_1 + (x_1 - x_3) \cdot f_2 + (x_2 - x_1) \cdot f_3]}. \quad (34.3)$$

Следует заметить, что в (34.3) знаменатель x_6 должен быть отличен от нуля. Если точки x_1, x_2, x_3 , близки друг к другу, то это условие нарушается.

Метод кубической аппроксимации

По своей эффективности метод кубической аппроксимации является одним из самых лучших среди всех методов одномерной оптимизации. Недостатком является необходимость вычисления первой производной.

Предположим, что функция $f(x)$ выпукла и непрерывно дифференцируема на отрезке $[a, b]$, $f(a) < 0$, $f(b) > 0$. Аппроксимируем функцию многочлена 3-й степени:

$$\varphi(x) = c_0(x-a)^3 + c_1(x-a)^2 + c_2(x-a) + c_3,$$

где коэффициенты c_0, c_1, c_2, c_3 определяются из условий:

$$\varphi(a) = f(a) \Rightarrow c_3 = f(a),$$

$$\varphi'(a) = f'(a) \Rightarrow c_2 = f'(a),$$

$$\varphi(b) = f(b) \Rightarrow c_0(b-a)^3 + c_1(b-a)^2 + c_2(b-a) + c_3 = f(b),$$

$$\varphi'(b) = f'(b) \Rightarrow 3c_0(b-a)^2 + 2c_1(b-a) + c_2 = f'(b).$$

Найдем точку

$$\bar{x} = \arg \min_{[a,b]} \varphi(x)$$

Легко проверить, что

$$\bar{x} = a + \gamma(b-a),$$

где

$$\gamma = \frac{z + \omega - f'(a)}{f'(b) - f'(a) + 2\omega};$$

$$z = 3 \frac{f(a) - f(b)}{b-a} + f'(a) + f'(b),$$

$$\omega = \sqrt{z^2 + f'(a) \cdot f'(b)}.$$

Точка \bar{x} используется для сжатия отрезка локализации так же, как и в методе деления отрезка пополам с вычислением производной: если $f'(\bar{x}) < 0$, то новым отрезком локализации является отрезок $[\bar{x}, b]$, если $f'(\bar{x}) > 0$, то отрезок $[a, \bar{x}]$.

Лекция №35

Метод тяжелого шарика

Для поиска глобального минимума невыпуклой функции, которая имеет "неглубокие" локальные минимумы, находят применение многошаговые методы, использующие на k -й итерации значения $f_0(x)$.

Идея использования метода "тяжелого шарика" и его названия основаны на физической интерпретации процесса качения шарика по наклонной поверхности. Если шарик тяжелый, то он будет проскакивать мелкие впадины по инерции. Чем больше масса шарика, тем глубже будет впадина, в которой он остановится.

Двухшаговая итерационная процедура поиска глобального минимума $f_0(x)$ методом "тяжелого шарика" имеет следующий вид

$$x_{k+1} = x_k - h \cdot f'_0(x_k) + \beta \cdot (x_k - x_{k-1}), \quad h > 0, \quad 0 \leq \beta < 1, \quad (35.1)$$

где k – номер итерации ($k=1,2,\dots$). h, β параметры, которые подбираются в процессе решения задачи.

Скорость приближения $\{x_k\}$ к x^* зависит не только от "крутизны" функции в точке x_k , характеризуемой величиной $f'_0(x_k)$, но и от "инерции" последовательности $\{x_k\}$, которая пропорциональна слагаемому. При попадании точки \hat{x} в локальный минимум производная $f'_0(\hat{x})=0$, ($x_k = \hat{x}$), но инерционная составляющая при этом должна отличаться от нуля, поэтому

$$x_{k+1} = x_k + \beta \cdot (x_k - x_{k-1})$$

и последовательность $\{x_k\}$ продолжит движение к x^* . Подобная особенность итерационного метода "тяжелого шарика" позволяет "проскакивать" по инерции мелкие, неглубокие локальные минимумы и останавливаться в точках глобального экстремума. Окончание процесса итерации

$$|x_{k+1} - x_k| \leq \varepsilon.$$

Алгоритм поиска минимума методом тяжелого шарика:

1. Вводим два приближения x_0 и x_1 , вычисляем значения критерия

$$f_0 = f(x_0) \text{ и } f_1 = f(x_1).$$

2. Вычисляем значение производной $R = f'(x_1)$.

3. Вычисляем предполагаемую точку минимума x по формуле

$$x = x_1 - h \cdot R + \beta \cdot (x_1 - x_0).$$

4. Вычисляем $f = f(x)$. Проверяем условие улучшения $f < f_1$?

"Да" – проверяем условие $|x - x_1| \leq \varepsilon$, если выполняется, то переходим на п.6, иначе – на п.5; нет – за точку минимума принимаем точку x_1 , то есть $x = x_1$ и переходим на п.6, либо можно изменить параметры h или β и продолжить поиск минимума в окрестности точки x_1 .

5. Переопределяем точки $x_0 = x_1$; $x_1 = x$ и переходим на п.2.

6. Печать " $x^* =$ ", x , оптимального значения критерия $f_0(x)$, для контроля правильности полученных данных – $f'_0(x)$.

Блок-схема рассмотренного метода приведена на рис.35.1(а,б). В алгоритме предусмотрен выбор параметров в процессе решения задачи на ЭВМ. При величине шага меньшей заданной точности выполняется переход на п.6. Критерий цели и $f'(x)$ заданы функциями пользователя f и pr соответственно.

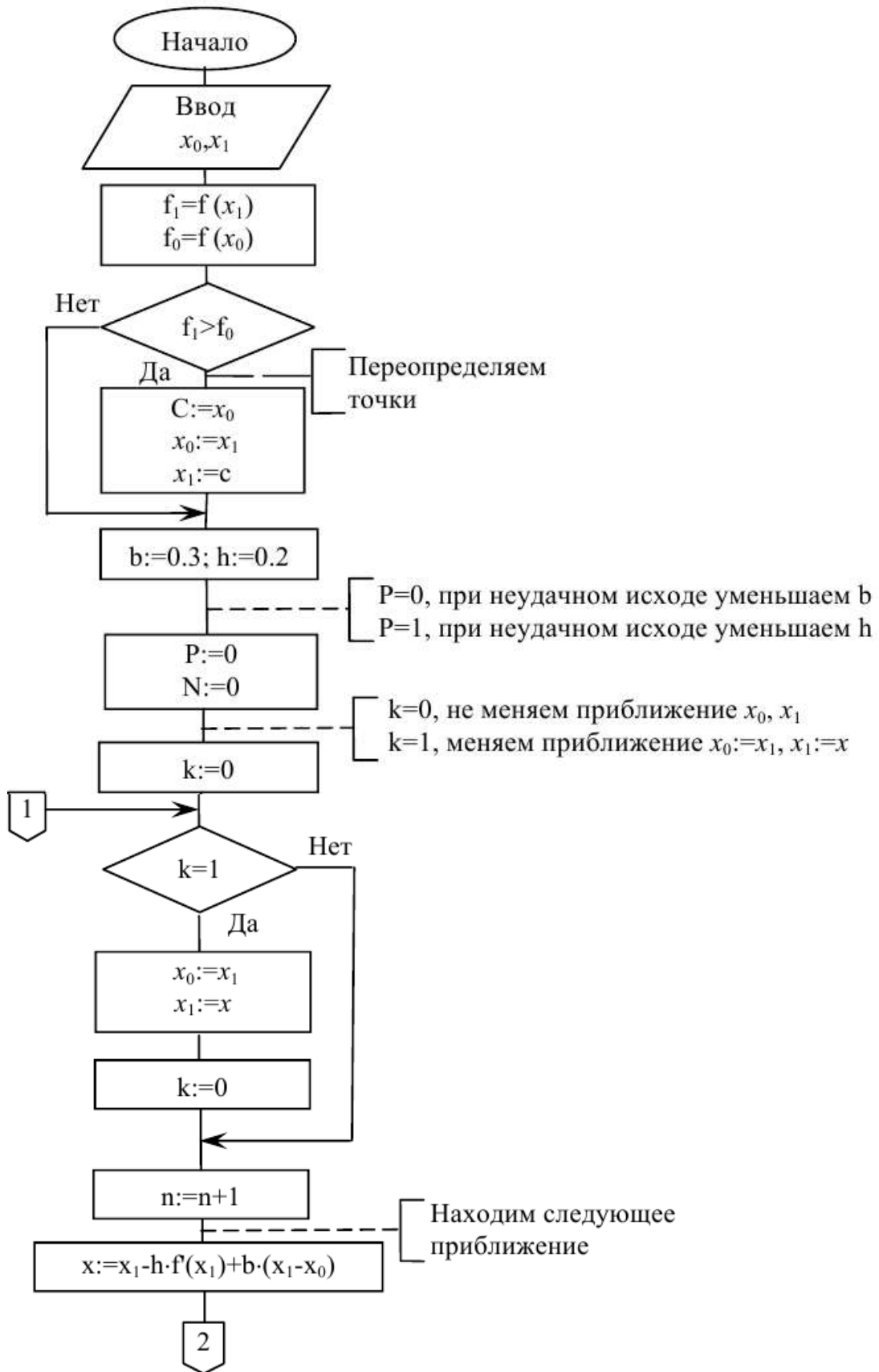


Рис.35.1а. Блок-схема поиска минимума методом тяжелого шарика

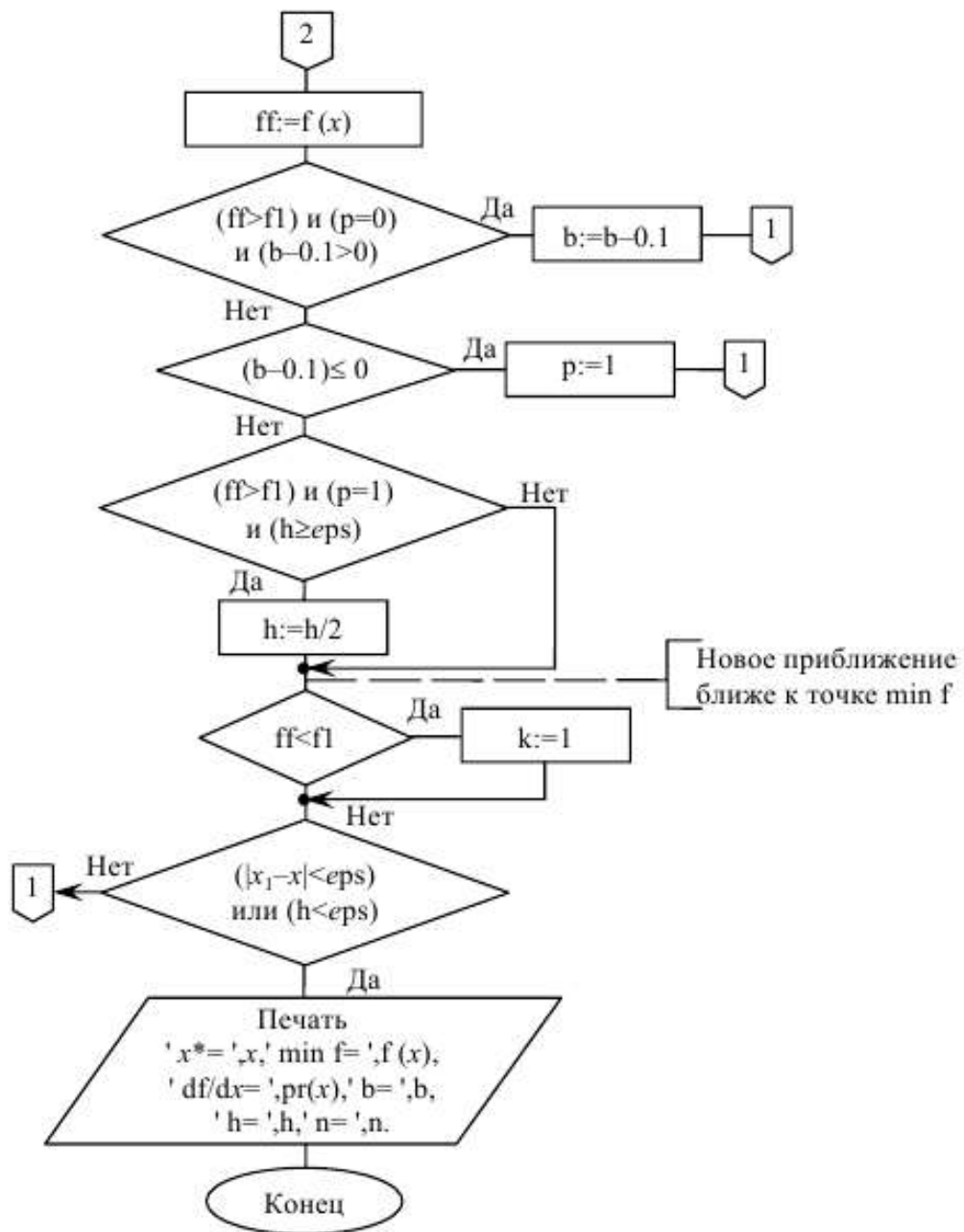


Рис.35.16. Продолжение блок-схемы поиска минимума
методом тяжелого шарика

Лекция №36

Выпуклые задачи оптимизации

Постановка задачи

Выпуклой задачей (или задачей выпуклого программирования) называется следующая задача оптимизации:

$$f(x) \rightarrow \min; \quad g_i(x) \leq 0, \quad i=1,2,\dots,m; \quad (36.1)$$
$$x \in G \subseteq R^n,$$

где f, g_1, g_2, \dots, g_m – выпуклые функции, заданные на выпуклом и замкнутом множестве G .

Точка x , принадлежащая множеству G и удовлетворяющая неравенствам $g_i(x) \leq 0, i=1,2,\dots,m$; называется допустимой в задаче (36.1).

Если функция f определена и выпукла на выпуклом множестве $G \subseteq R^n$, то в выпуклой задаче локальный минимум является и глобальным.

Пусть x – точка локального минимума функции f , т.е. $\exists \varepsilon_0 > 0$ такое, что

$$f(\hat{\lambda}) \leq f(x) \quad \forall x \in G \cap U(\hat{\lambda}, \varepsilon_0).$$

Возьмем произвольную фиксированную точку $x' \in G$. Из условия выпуклости множества G следует, что точка

$$x = \hat{\lambda} + (1-\lambda)x' \quad \forall \lambda \in (0,1)$$

принадлежит множеству G .

При

$$\lambda \geq 1 - \frac{\varepsilon}{\|x' - \hat{\lambda}\|}$$

где

$$\varepsilon < \min \{ \varepsilon_0, \|x' - \hat{\lambda}\| \},$$

получаем

$$\begin{aligned} \|x' - \hat{\lambda}\| &= \|\lambda x + (1-\lambda)x' - \hat{\lambda}\| = \|(1-\lambda)(x' - \hat{\lambda})\| \leq (1-\lambda)\|x' - \hat{\lambda}\| \\ &\leq \left[1 - \left(1 - \frac{\varepsilon}{\|x' - \hat{\lambda}\|} \right) \right] \|x' - \hat{\lambda}\| = \frac{\varepsilon}{\|x' - \hat{\lambda}\|} \cdot \|x' - \hat{\lambda}\| = \varepsilon < \varepsilon_0, \end{aligned}$$

что означает

$$x \in U(\hat{\lambda}, \varepsilon_0)$$

и, следовательно,

$$f(\hat{\lambda}) \leq f(x) \quad f(\hat{\lambda}) \leq f(\hat{\lambda} + (1-\lambda)x').$$

По условию функция f выпукла. Поэтому последнее неравенство примет вид

$$f(\hat{\lambda}) \leq \lambda f(\hat{\lambda}) + (1-\lambda)f(x').$$

В частности, при

$$\lambda = 1 - \frac{\varepsilon}{\|x' - \hat{\lambda}\|}$$

имеем

$$f(\hat{\lambda}) \leq \left(1 - \frac{\varepsilon}{\|x' - \hat{\lambda}\|}\right) f(\hat{\lambda}) + \left[1 - \left(1 - \frac{\varepsilon}{\|x' - \hat{\lambda}\|}\right)\right] f(x'),$$

Отсюда

$$\frac{\varepsilon}{\|x' - \hat{\lambda}\|} f(\hat{\lambda}) \leq \frac{\varepsilon}{\|x' - \hat{\lambda}\|} f(x')$$

или

$$f(\hat{\lambda}) \leq f(x')$$

Так как x' – произвольная точка множества G , то из последнего неравенства следует, что x' – точка глобального минимума функции f на G .

В дальнейшем в выпуклых задачах оптимизации, говоря "минимум", будем, подразумевать глобальный минимум.

Условия оптимальности в выпуклых задачах

В выпуклых задачах оптимизации важное место занимает функция Лагранжа и понятие так называемой седловой точки функции Лагранжа.

Пусть $\Pi = G \times R_+^m$ – декартово произведение множества G (области определения функций $f(x)$ и $g(x)$, $i = 1, 2, \dots, m$, в задаче (36.1)) и множества m -мерных векторов с неотрицательными координатами

$$R_+^m = \{\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) \in R^m \mid \lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, m\}.$$

Функция

$$L(x, \lambda) = f(x) + (\lambda, g(x)), \quad (x, \lambda) \in \Pi, \quad (36.2)$$

где

$$(\lambda, g(x)) = \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x)$$

– скалярное произведение векторов λ и $g(x)$, называется функцией Лагранжа для выпуклой задачи оптимизации (36.1).

Точка $(x^*, \lambda^*) \in \Pi$, называется седловой точкой функции Лагранжа $L(x, \lambda)$, $(x^*, \lambda^*) \in \Pi$, если выполняются неравенства

$$L(x^*, \lambda) \leq L(x^*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*), \quad x \in G, \quad \lambda \in R_+^m \quad (36.3)$$

Условие (36.3) может быть записано также следующим образом

$$L(x^*, \lambda^*) = \min_{x \in G} \max_{\lambda \in R_+^m} L(x, \lambda) = \max_{\lambda \in R_+^m} \min_{x \in G} L(x, \lambda).$$

В задачах с ограничениями типа равенств, как это отмечалось выше, решение следовало искать среди стационарных точек функции $L(x, \lambda)$. Что же касается выпуклой задачи оптимизации, то ее решение сводится к отысканию седловой точки функции Лагранжа.

Если пара (x^*, λ^*) – седловая точка функции Лагранжа (36.2), то x^* – точка глобального минимума в задаче (36.1), т.е.

$$f(x^*) = \min_{x \in G} f(x).$$

Пусть (x^*, λ^*) – некоторая седловая точка функции Лагранжа. Из (36.2) и (36.3) получаем

$$f(x^*) + (\lambda, g(x^*)) \leq f(x^*) + (\lambda^*, g(x^*)) \leq f(x) + (\lambda^*, g(x)). \quad (36.4)$$

Из левой части неравенства (36.4) следует, что

$$(\lambda, g(x^*)) \leq (\lambda^*, g(x^*)). \quad (36.5)$$

Отсюда

$$(\lambda - \lambda^*, g(x^*)) \leq 0,$$

или в развернутом виде

$$\sum_{i=1}^m (\lambda_i - \lambda_i^*) g_i(x^*) \leq 0. \quad (36.6)$$

Поскольку $\lambda_i^* \geq 0, i = 1, 2, \dots, m$, неравенство (36.6) имеет место, если

$$g_i(x^*) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m,$$

Итак, $g_i(x^*) \leq 0$, и, кроме того, $\lambda_i^* \geq 0$, поэтому

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i^* g_i(x^*) \leq 0. \quad (36.7)$$

Равенство (36.6) справедливо, в частности, и для $\lambda = \lambda^*, i = 1, 2, \dots, m$, т.е.

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i^* g_i(x^*) \geq 0. \quad (36.8)$$

Сравнивая неравенства (36.7) и (36.8), будем иметь

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i^* g_i(x^*) = 0.$$

т.е.

$$(\lambda^*, g(x^*)) = 0. \quad (36.9)$$

Так как

$$\forall x \in G \quad g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad \text{и} \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m,$$

то

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i^* g_i(x) \leq 0.$$

или

$$(\lambda^*, g(x)) \leq 0. \quad (36.10)$$

Неравенство (36.4) имеет место $\forall x \in G$, поэтому из его правой части и из (36.9)-(36.10) получим

$$f(x^*) \leq f(x) + (\lambda^*, g(x)) \leq f(x) \quad \forall x \in G.$$

Следовательно, x^* – точка глобального минимума.

Для того чтобы пара (x^*, λ^*) являлась седловой точкой функции Лагранжа (36.2), необходимо и достаточно выполнение условий

$$L(x^*, \lambda^*) = \min_{x \in G} L(x, \lambda^*), \quad (36.11)$$

$$g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (36.12)$$

$$\lambda_i^* \cdot g_i(x^*) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (36.13)$$

Необходимость. Пусть (x^*, λ^*) – седловая точка функции (36.2). Тогда по определению

$$L(x^*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*) \quad \forall x \in G,$$

что означает справедливость равенства (36.11).

Выполнение условий (36.12) и (36.13) было показано при доказательстве теоремы (36.2).

Достаточность. Пусть выполнены условия (36.11)-(36.13). Равенство (36.11) влечет справедливость правой части неравенства (36.3) $\forall x \in G$. Докажем выполнение левой части неравенства (36.3) для всех $\lambda \in R_+^m$. Для этого рассмотрим произвольные неотрицательные числа $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$.

Очевидно,

$$\lambda_i g_i(x^*) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Поэтому, используя неравенства (36.12) и (36.13), можно записать:

$$\lambda_i g_i(x^*) \leq \lambda_i^* g_i(x^*) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Следовательно,

$$f(x^*) + (\lambda_i(x^*)) \leq f(x^*) + (\lambda^*(x^*))$$

что означает справедливость левой части неравенства (36.3).

Условия, при выполнении которых хотя бы одна седловая точка функции Лагранжа всегда существует, сформулированы в следующем утверждении.

Пусть функции $f, g_i, i = 1, 2, \dots, m$, выпуклы на выпуклом множестве $G \subset R^n$, имеет место условие (условие Слейтера):

$$\exists \hat{\lambda} \in G, \text{ что } g_i(\hat{\lambda}) < 0, \quad i = 1, 2, \dots, m,$$

и x^* – точка глобального минимума в задаче (36.1). Тогда найдется такой вектор $\lambda^* \in R_+^m$, что пара (x^*, λ^*) – седловая точка функции Лагранжа (36.2).

Отсюда вытекает следующее необходимое условие оптимальности: для того чтобы x^* была точкой глобального минимума в выпуклой задаче оптимизации (36.1), необходимо, чтобы нашелся такой вектор λ^* , что пара (x^*, λ^*) образует седловую точку функции Лагранжа.

Таким образом, исходную задачу (36.1) можно заменить задачей отыскания седловой точки функции Лагранжа.