

# **Моделирование и оптимизация свойств материалов и процессов**

*Конспект лекций*

**Ростов-на-Дону 2021**

## Модели и моделирование.

В научной и инженерной практике возникают задачи исследования различных явлений, свойств, оптимизации процессов и другие. Эти задачи можно решать как с помощью моделирования, так и экспериментально. Но экспериментальный метод не всегда разумен, по причине

- 1) высокой стоимости;
- 2) уникальности;
- 3) недоступности объекта исследования.

Например, исследование недр звёзд и планет невозможно, а при конструировании самолёта требуется проведение обширных экспериментальных исследований, выполнение которых с помощью настоящего самолёта потребует огромных материальных затрат.

Во всех этих случаях реальное явление, объект (его ещё называют оригиналом) заменяется моделью.

Исследование явлений и объектов с помощью их моделей называется **моделированием**.

Таким образом, с помощью моделирования исследуются процессы и явления, которые невозможно или неудобно исследовать экспериментальным методом.

Существует множество видов моделей. Если модель и моделируемый объект имеют одну и ту же физическую природу, то говорят о физической модели. При конструировании физической модели необходимо выделять существенные черты и свойства оригинала, а второстепенные черты и свойства моделируемого объекта наоборот можно не учитывать.

Простейшей физической моделью является материальная точка (частица). Единственным существенным свойством частицы является её масса. Всеми остальными свойствами частицы (формой, составом, цветом, температурой и т.д.) можно пренебречь.

При использовании модели, необходимо чётко представлять в каких условиях и для исследования, каких явлений применение данной модели корректно.

Физическая модель “частица” может применяться для исследования механического движения тел, размеры которых мал в сравнении с характерным для данной задачи масштабом.

Модель “частица” важна, так как любое тело (жидкое, твёрдое, газообразное) можно представить как совокупность частиц. Для того чтобы представить тело как совокупность частиц нужно мысленно разбить его на несколько частей, размеры которых малы в соответствии с масштабом задачи.

Движение частицы описывается законами Ньютона, а свойства тела определяется движением частицы. С помощью законов Ньютона можно описать движение тела и изменение его свойств с течением времени.

Таким образом, то, что происходит в данный момент времени, определяет состояние тела в будущем, то есть существует некая определённости, **детерминизм**. Идея детерминизма была сформулирована Лапласом в 18 в. и частично отражала религиозные веяния того времени. Она предполагала наличие некоего первотолчка (под которым подразумевался Бог), определившего всё случившееся в последствии.

Но в 20в. исследование микрочастиц показало, что к ним законы Ньютона неприменимы.

Движение микрочастиц подчиняется законам квантовой физики, а эти законы показывают вероятность нахождения частицы. Таким образом, движение микрочастиц носит недетерминированный, вероятностный характер.

Более сложными моделями являются модель абсолютно твёрдого тела и модель сплошной среды.

В качестве физических моделей могут использоваться некоторые материальные конструкции. Необходимым условием физической модели в этом случае является геометрическое и физическое подобие модели и оригинала.

**Геометрическое подобие** отражает одинаковое уменьшение всех частей объекта, то есть соотношение между величиной частей оригинала и модели должно быть постоянным.

**Физическое подобие** означает, что в сходственные моменты времени и в подобных точках пространства значение величин характеризующих явление для модели и оригинала должны быть пропорциональны друг другу. Это позволяет производить пересчет результатов полученных с помощью модели для оригинала.

Для этого необходимо из величин характеризующих явление сконструировать безразмерные комбинации, которые называют **критериями подобия**.

Физически подобными модель и оригинал будут в том случае, если критерии подобия для них имеют одинаковые значения.

Например, исследуется течение жидкости по трубам различного диаметра. Очевидно, что характер течения зависит от диаметра трубы ( $d$ ), от скорости течения жидкости ( $v$ ), от вязкости жидкости ( $\mu$ ) и ее плотности ( $\rho$ ). Все эти

величины являются размерными, но из них можно сконструировать безразмерную величину.

$$Re = \frac{\rho v d}{\mu} \quad \text{число Рейнольдса}$$

Пусть диаметр трубы оригинала равен 10 метров, тогда исследовать течение жидкости через трубу экспериментальным методом будет достаточно проблематично. Поэтому логичней будет воспользоваться моделированием.

Возьмём трубу с меньшим диаметром, но так, чтобы число Рейнольдса оставалось постоянным. Тогда полученные результаты можно пересчитать с помощью критерия подобия, так как течения при одинаковом значении числа Рейнольдса будут физически подобными.

Характер течения зависит от значения числа Рейнольдса, если;

$Re < 1$ , то течение будет ламинарным;

$Re > 1$ , то течение будет турбулентным;

$Re = 1$ , то течение будет переходным.

Например, при исследовании конструкции самолёта, его уменьшенную модель помещают в гидродинамическую трубу, где её обдувает воздух. То есть, чтобы число Рейнольдса оставалось постоянным нужно увеличить скорость или плотность. За диаметр берётся размер самолёта.

Некоторые явления можно исследовать путём изучения какого-либо явления иной физической природы, но описываемого теми же математическими соотношениями, что и моделируемое явление.

Например, электрические и механические колебания описываются одними и теми же дифференциальными уравнениями, поэтому с помощью механических колебаний можно моделировать электрические колебания и наоборот. Такое моделирование называют **аналоговым**.

Например, при постройке моста важно рассчитать частоту его колебаний, чтобы предотвратить его разрушение. Но создавать модель моста для проведения расчетов невыгодно, поэтому для облегчения можно решить дифференциальное уравнение, собрав электронную цепь и измерить нужные значения с помощью вольтметра и амперметра.

Физическую модель можно исследовать экспериментально, однако есть другой весьма эффективный способ исследования модели и решения с её помощью поставленных задач. Для этого на основе физических законов и других соображений, например, предположений имеющих характер гипотез, строится система математических соотношений (равенств, неравенств, уравнений и других логических конструкций). Эти соотношения отображают с помощью математической символики содержательную постановку задач. Совокупность этих соотношений называется математической моделью поставленной задачи, а решение этих соотношений называется **математическим моделированием**. Процесс математического моделирования подразделяется на три этапа:

**1 этап** Постановка задачи, определение объекта и цели исследования, определение факторов изучения. Формирование законов, связывающих объекты и факторы модели. Первый этап завершается записью математических

терминов, соотношений между объектами моделей, тем самым физическая или техническая задача сводится к математической.

Построение математической модели является одним из наиболее сложных и ответственных этапов работы. Трудность первого этапа связана с необходимостью соединения математических и специальных знаний и с возможной неопределённостью и неоднозначностью задачи. Неопределённость связана с тем, что не до конца ясна сама цель решаемой задачи. А при формулировке она выясняется и формируется четко и ясно. Для формирования математической модели поставленной задачи необходимо соединение самых разнородных знаний. Человек, занимающийся математическим моделированием должен быть первоклассным физиком, он должен знать какие законы используются и какие из этих законов нужно выделить, а какие следует опустить. Также он должен быть отличным техником, а при формулировке математической модели он должен быть отличным математиком и хорошо знать численные методы.

Правильно выбранная математическая модель решает поставленную задачу на 50%. Математическая модель не определяется однозначно исследуемым объектом. Для её разработки необходимо сформулировать упрощающие предположения, лежащие в основе модели. Установить какие факторы необходимо учитывать и степень точности этих факторов. Неоднородность модели связана с выбором факторов, одни из этих факторов важны, другие мы можем не учитывать. Хотя если мы неверно определим степень

важности факторов, то построенная нами модель будет не верна.

**2 этап** На этом этапе производится исследование математической задачи, её решение. Иногда, полученную математическую задачу, возможно, решить аналитически, однако, в большинстве случаев это невозможно, и тогда для решения задачи используют численные методы.

**3 этап** На этом этапе выясняется вопрос о достоверности полученных результатов, о согласии теоретических следствий модели с реально наблюдаемыми результатами. При этом делается вывод о правильности или неправильности положений лежащих в основе математической модели и при необходимости рассматриваемая модель уточняется или отвергается. Основным критерием истинности модели является эксперимент, практика в широком смысле слова.

Как уже говорилось ранее, модель неоднозначно определяется исследуемым объектом. Решение начинается с построения и анализа простейшей и наиболее грубой модели изучаемого объекта. А в затем решается вопрос о дальнейшем уточнении модели. Чтобы уточнить модель нужно вернуться в начало и исправить начальные условия.

Рассмотрим пример построения математической модели.

Пусть поставлена следующая задача: Камень с помощью катапульты брошен со скоростью ( $v_0$ ), под углом ( $\beta$ ) к поверхности земли. Требуется найти расстояние до точки падения камня.



Для получения математической модели используем следующие *упрощающие предположения*.

- 1) камень мы рассмотрим как материальную точку, частицу;
- 2) земля является инерциальной системой отсчета;
- 3) кривизной земли можно пренебречь и считать её плоской;
- 4) действие воздуха на движение камня можно пренебречь;
- 5) ускорение свободного падения есть величина постоянная.

При выборе упрощающих предположений необходимо учитывать конкретные особенности решаемой задачи. При других условиях той же задачи некоторые из упрощающих предположений использовать нельзя.

Перейдём к построению математической модели с учетом сделанных предположений.

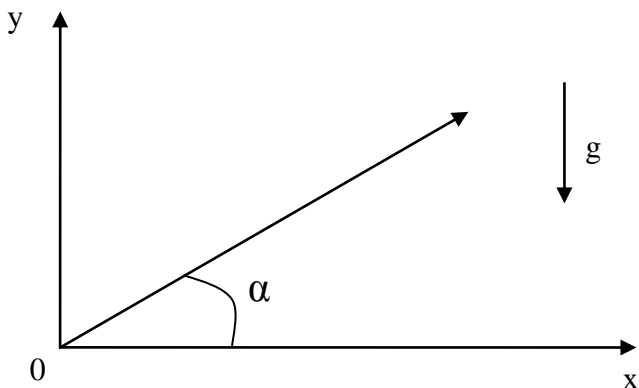
Введем систему координат, её начало совместим с катапультой. Ох направим горизонтально, в сторону движения камня, а Оу вертикально вверх. Момент броска камня примем за начальный момент времени.

При сделанных предположениях движение камня определяется вторым законом Ньютона, который в данном случае принимает вид:

$$\vec{F} = m\vec{a}$$

$$m\vec{g} = m\vec{a}$$

$$\vec{g} = \vec{a}$$



Второй закон Ньютона дополняется начальными условиями:

$$\vec{v}(0) = \vec{v}_0$$

$$r(0) = 0$$

$$\begin{cases} m\vec{g} = m\vec{a} = \frac{dv}{dt} m \\ v(0) = v_0 \\ r(0) = 0 \end{cases}$$

Эти три уравнения составляют

математическую модель решённой задачи.

Нужно записать соотношения покомпонентно:

$$X: \frac{dv_x}{dt} = 0 \quad v_x = v_0 \cos \beta \quad r_x(0) = 0$$

$$Y: \frac{dv_y}{dt} = -g \quad v_y = v_0 \sin \beta \quad r_y(0) = 0$$

$$v_x(t) = v_0 \cos \beta = \frac{dx}{dt}$$

$$v_y = v_0 \sin \beta - gt = \frac{dy}{dt} \Rightarrow \begin{aligned} x(t) &= v_0 \cos \beta t; \\ y(t) &= v_0 \sin \beta t - \frac{gt^2}{2} \end{aligned}$$

$$x(0) = 0$$

$$y(0) = 0$$

$$t = \frac{x}{v_0 \cos \beta}$$

$$y = x \cdot \operatorname{tg} \beta - \frac{g}{2v_0^2 \cos^2 \beta} x^2$$

Используя,  $y(t)$  найдём момент времени  $t_0$ ,

$t_0$  - это время полета камня

Из условия,

$$y(t_0) = v_0 \sin \beta t_0 - \frac{gt_0^2}{2} = 0$$

$$t_0 = 0 \quad t_0 = \sqrt{\frac{2v_0 \sin \beta}{g}}$$

Подставляя найденное время в формулу  $x(t)$

$$x_0 = \frac{v_0^2}{g} \sin 2\beta$$

Предположим, результаты третьего этапа моделирования неудовлетворительны и мы приходим к выводу о необходимости уточнения модели. При этом может оказаться, что уточнение модели приведёт к возникновению ряда проблем, в результате чего реального улучшения модели может и не произойти.

Предположим для уточнения модели необходимо учесть силу сопротивления воздуха. Для этого мы выдвигаем

предположение о том, что  $F$  сопротивления пропорциональна скорости  $v$  и направлена в сторону противоположную движению.

$$F_c = -\kappa \vec{V} \quad (1)$$

В результате по Второму закону Ньютона:

$$m\vec{a} = m\vec{g} + \vec{F}_c$$

$$\frac{mdv}{dt} = mg - \kappa V$$

Полученное уравнение является более сложным, чем в предыдущей модели. Решаемую задачу и в этом случае можно получить аналитически, но максимальное расстояние для этой задачи аналитически найти будет невозможно.

К тому же может оказаться, что мы неверно записали формулу силы сопротивления, так как многие специалисты считают, что

$$F_c = -\kappa V^2$$

Но влияние на полученный результат, может оказать и то, что значение  $\kappa$  мы знаем весьма приближенно, и погрешность, вызванная этим обстоятельством может свести на нет всю нашу работу по построению модели.

## Погрешности численных методов.

При использовании любого численного метода возникают погрешности, которые могут быть очень велики.

С помощью математической модели научная или инженерная задача сводится к математической, а для решения математической задачи в большинстве случаев приходится использовать численные методы, которые математическую

задачу сводят к выполнению конечного, но весьма большого числа простейших арифметических действий(+,-,\*,/).

Численные методы требуют большого объёма вычислений, поэтому, вручную эти методы применяются очень редко. Поэтому численное решение производится с помощью средств вычислительной техники.

При численном решении всегда возникают **погрешности**. Возможны грубые ошибки, промахи они **могут быть связаны**:

- 1) с неправильной постановкой задачи;
- 2) с неверно построенной моделью;
- 3) с ошибками в составлении программы;
- 4) с аппаратными сбоями ПК, но последние бывают крайне редко.

Грубые ошибки могут быть устранены при отладке программы. Даже если грубые ошибки устранены, сохраняются следующие **типы погрешностей**:

- 1) ошибки математической модели;
- 2) ошибки в исходных данных;
- 3) ошибки численного метода;
- 4) ошибки округления.

Теперь рассмотрим виды погрешностей более подробно.

**1)** Погрешности обусловленные ошибкой математической модели связаны с неадекватностью используемой модели оригиналу.

**2)** Ошибки в исходных данных также приводят к погрешности в результатах.

Первые два типа ошибок относятся к **неустранимым погрешностям**, так как они не могут быть уменьшены в процессе решения математической задачи.

Неустраняемые ошибки можно уменьшить только за счет уточнения математической модели и более точного задания его параметров.

**3)** Большинство численных методов сводит математическую операцию к конечному числу арифметических действий – это ведет к появлению ошибки численных методов.

Например, вычисление интеграла сводится к вычислению интегральной суммы.

Как правило, **ошибки численного метода регулируемые**. К примеру, при численном вычислении интеграла точность можно повысить, увеличив число слагаемых интегральной суммы. А в общем случае путем изменения некоторого параметра. Значение погрешности численного метода и пути её уменьшения рассматривается при анализе конкретных численных методов.

**4)** Ошибки округления связаны с ограниченным числом разрядов в числах, с которыми оперирует ЭВМ. Хотя удельная точность выполнения каждой операции в большинстве случаев достаточно высока, малые погрешности имеют тенденцию к накоплению и если общее число операций достаточно высоко, итоговая погрешность может быть недопустимо большой.

Самый простой путь снижения ошибок этого типа состоит в повышении точности представления чисел на ЭВМ. Например, в замене типа Real на **Double** или Extended. Однако, такой путь повышения точности не самый лучший.

Кроме того, **использование чисел большой разрядности приводит к нерациональному использованию ресурсов ЭВМ.**

Например, вычислим  $\sin(x)$ , разложив его с помощью ряда Тейлора.

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots + \frac{x^n}{n!}$$

Погрешность будет равна величине последнего отбрасываемого слагаемого.

Если мы точность обозначим за  $E$ , то компьютер будет считать пока  $\frac{x^n}{n!} < E$ .

И получим  $\sin(x) = 20, \dots$ . Но этот результат абсолютно неверен! Так в чем же состоит наша ошибка? Почему Верный с логической точки зрения ход вычисления дал неправильный результат?

Для нахождения ответа на этот вопрос рассмотрим возникновение ошибок связанных с округлением.

Рассмотрим возникновение ошибок округления на нескольких конкретных примерах. Предположим, что ЭВМ оперирует с 4-мя разрядами цифр, то есть результат представляется 4-мя значащими цифрами, это значит, что относительная ошибка составляет  $0.5 \cdot 10^{-3}$

**Ошибки округления возникают при всех арифметических операциях.** Например, при суммировании:

$$\begin{array}{r} 1234 \\ + 9870 \\ \hline 11104 \end{array}$$

округляем и получаем

$$\begin{array}{r} 11100 \\ \hline \end{array}$$

4 – погрешность.

Относительная **ошибка** значительно **возрастает при вычитании двух близких по величине чисел:**

0,00005 – абсолютная погрешность.

0,00005 – относительная погрешность.

$$\begin{array}{r} 0,1234 \\ - 0,1233 \\ \hline 0,0001 \pm 0,0001 \end{array}$$

$\Delta(x \pm y) = \Delta x + \Delta y$  - погрешность суммы

Таким образом, в результате вычисления двух близких по величине цифр погрешность = 100%. Поэтому при программировании нужно создавать программу таким образом, чтобы избежать вычитания двух близких по величине цифр.

Для ошибок округления не выполняются обычные правила арифметики.

Например, *ошибка суммы* нескольких чисел *зависит от порядка суммирования*.

Предположим нам нужно сложить 4 числа:

$$1234 \quad 0,2 \quad 0,3 \quad 0,4$$

$$1234 + 0.2 \rightarrow 1234.2 \approx 1234$$

$$1234 + 0.3 \rightarrow 1234.3 \approx 1234$$

$$1234 + 0.4 \rightarrow 1234.4 \approx 1234$$

Таким образом,  $1234 + 0,2 + 0,3 + 0,4 = 1234$ , но на самом деле эта сумма = 1234,9, то есть погрешность = 0,9.

Но если мы изменим порядок суммирования

$$0.2 + 0.3 \rightarrow 0.5$$

$$0.5 + 0.4 \rightarrow 0.9$$

$$0.9 + 1234 \rightarrow 1234.9 \approx 1235 \text{ то ,}$$

$0,2 + 0,3 + 0,4 + 1234 = 1235$  и тогда погрешность вычисления будет = 0,1.

Погрешность зависит от последовательности, в которой производится вычисление. Ошибка будет меньше, когда



вычисление начинается с меньших по абсолютной величине цифр.

Для уменьшения ошибок округления **необходимо придерживаться следующих правил:**

1) По возможности избегать вычитания двух близких по величине чисел;

2) Сложение и вычитание длинной последовательности чисел начинать с наименьших чисел;

3) Использовать выражения  $a/(b-c)$  или  $a(b-c)$  вместо  $a/b - a/c$  и  $ab - ac$ ;

4) В любых случаях сводить к минимуму число арифметических операций.

Еще один тип ошибок связан с ограничением представления чисел на ЭВМ. Все числа в ПК по абсолютной величине находятся в интервале  $(m_0, M)$  где  $m_0$  - **машинный ноль**, а  $M$  - **машинная бесконечность**.

$$m_0 \approx 10^{-248}$$

$$M \approx 10^{356}$$

И если  $|x| < m_0$ , то компьютер посчитает что  $x = 0$ , а если  $|x| > M$ , то компьютер примет  $x = \infty$ , произойдет переполнение памяти и компьютер перестанет работать. Пусть

$$a = 2m_0$$

$$x = \frac{a}{10} \cdot 56$$

$$x = \frac{56}{10} \cdot a$$

Нужно помнить о машинном нуле, потому что он намного более опасен из-за трудности обнаружения.

## Свойства численного решения.

Ошибки в исходных данных приводят к ошибке результата, можно ожидать, что небольшие ошибки в исходных данных приводят к возникновению небольшой ошибки результата.

Пусть  $x$  - исходная величина

$y$  - результат вычисления

$\Delta x$  - ошибка исходных данных

$\Delta y$  - Ошибка результата

Если результат вычисления  $y$  непрерывно зависит от исходной величины  $x$ , то есть небольшие погрешности в исходных данных приводят к небольшим погрешностям результата, то **задача называется устойчивой**.

Если при любых значениях параметров решение задачи существует, единственно и устойчиво, то **задача называется корректной**. В дальнейшем мы будем рассматривать только корректные задачи.

Существует ряд прикладных некорректных задач, для решения которых разработаны специальные методы – методы решения некорректных задач.

Важнейшим свойством численного метода является его **сходимость**. Она означает, приближение численного решения к истинному, при изменении некоторого параметра численного метода (например, приближение результата численного вычисления результата интеграла к истинному значению при увеличении числа слагаемых в интегральной сумме).

В численных методах широко используется **итерационный метод**. Это метод последовательного

приближения, когда сначала находится первое приближение решения задачи  $x_1$ , потом с помощью  $x_1$  находится второе приближение  $x_2$  и так далее.

Если последовательность  $x_1, x_2, \dots, x_n$  стремится к точному решению, то говорят о *сходимости итерационного процесса*.

## Регрессия

Следует научиться выражать стохастическую связь между случайными величинами через функцию соотношения.

Пусть наблюдаются две случайные величины  $X$  и  $Y$ . При сопоставлении этих величин, все ошибки можно отнести к одной из них (например, к  $Y$ , а величину  $X$  при этом можно считать не случайной). В этом случае ошибка для  $Y$  ( $\Delta Y$ ) будет складываться из двух частей: *собственные ошибки и ошибки сопоставления*.

Рассмотрим случайную величину  $Y$  от не случайного параметра  $X$  при каждом значении  $X$  величина  $Y$  будет обладать каким то законом распределения:  $F(y)=F(y,x)$ .

Если найдем закон распределения  $F(x,y)$ , то тем самым полностью определена стохастическая зависимость  $Y(X)$ . Пусть при каждом значении  $X$  величина  $Y$  имеет нормальное распределение. А нормальное распределение полностью определяется генеральным средним  $a$  и генеральной дисперсией  $\sigma^2$ . Таким образом, связь между величинами  $X$  и  $Y$  будет полностью определена, если известны зависимости  $\sigma_y^2=\sigma^2(x)$ ,  $a_y=a(x)$ , где  $\sigma_y^2$  – скедастическая зависимость. Она

используется редко, на практике чаще используют свободную дисперсию, характеризующую рассеивание  $Y$  при всех значениях  $X$ . Зависимость  $a(x)$  называется регрессией. Регрессия дает истинную зависимость случайной величины  $Y(X)$ . На практике находится приближенная регрессия. Задача ставится таким образом: по выборке, образованной из пар  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$  необходимо найти уравнение приближенной регрессии и оценить допускаемую при этом ошибку.

Уравнение приближенной регрессии существенно зависит от выбираемого принципа приближенности зависимости. Т. к.  $y_i$  не совпадают с точными значениями:  $y_i \neq a(x_i)$ , то уравнение регрессии не обязано давать на всех парах чисел  $(x_i, y_i)$  точное равенство. График уравнения регрессии не обязан проходить через все экспериментальные точки.

В начале принципа приближения, обычно используется принцип наименьших квадратов. Для этого принципа мерой рассеивания всех  $y_i$  вокруг уравнения приближенной регрессии имеет величина:

$$D = \frac{1}{n-l} \sum_i (y_i - f(x_i))^2,$$

где  $n$  – число пар  $(x_i, y_i)$ , а  $l$  – число связей, накладываемых на выборку уравнением регрессии.

Предположим, что мы получим два уравнения регрессии:  $y=f_1(x)$  и  $y=f_2(x)$ , для которых вычислены значения  $D_1$  и  $D_2$ . Из этих уравнений выбирают то, у которого  $D$  имеет меньшее значение.

Пусть задан некоторый класс функций, среди которых находится уравнение регрессии. Все эти функции накладывают на выборку одинаковое число связей. Тогда для

этого класса функций число  $l$  будет иметь фиксированное значение, и для выбора уравнения регрессии и определения меры рассеивания можно вычислять:

$$S = \sum_i (y_i - f(x_i))^2$$

Класс функций, используемых для нахождения уравнений регрессии, имеет несколько произвольных коэффициентов. Эти коэффициенты вычисляются по заданной выборке. Поэтому каждая из них представляет собой связь, накладываемую на выборку. Например, уравнение регрессии можно выбирать из полинома в степени  $n$ :

$$y = a_0 + a_1 x^1 + \dots + a_n x^n.$$

Для нахождения уравнения приближенной регрессии необходимо найти все неопределенные коэффициенты  $a_i$ , которые минимизируют величину  $S$ , как условие минимума. В результате получается система уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial S}{\partial a_0} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_1} = 0 \\ \dots \\ \frac{\partial S}{\partial a_n} = 0 \end{array} \right.$$

Число уравнений равно числу неизвестных параметров. Решая эту систему, мы находим неопределенные коэффициенты. Пусть уравнение регрессии получают из класса квадратичных функций:  $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ ,

$$S = \sum_i (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)^2.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial S}{\partial a_0} = -\sum_i 2(y_i - a_0 - a_{1_i}x_i - a_2x_i^2) \\ \frac{\partial S}{\partial a_1} = -\sum_i 2x_i(y_i - a_0 - a_{1_i}x_i - a_2x_i^2) \\ \frac{\partial S}{\partial a_2} = -\sum_i 2x_i^2(y_i - a_0 - a_{1_i}x_i - a_2x_i^2) \end{array} \right.$$

В результате система уравнений для нахождения коэффициентов  $a_0, a_1, a_2$ , принимает вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_i (a_0 + a_{1_i}x_i + a_2x_i^2) = \sum_i y_i \\ \sum_i x_i(a_0 + a_{1_i}x_i + a_2x_i^2) = \sum_i y_ix_i \\ \sum_i x_i^2(a_0 + a_{1_i}x_i + a_2x_i^2) = \sum_i x_i^2y_i \end{array} \right.$$

Получили систему 3-х уравнений с 3-мя неизвестными  $a_0, a_1, a_2$ .

Чтобы оценить степень приближенности найденного уравнения необходимо найти оценки для всех коэффициентов  $a_0, a_1, a_2$ .

Уравнение регрессии можно получать путем последовательного уточнения. Допустим, получено уравнение регрессии  $y=f(x)$  и предполагается заменить его на уточненное уравнение  $y=f(x)+\varphi(x)$ . Поправка  $\varphi(x)$  может отвергаться по двум причинам: 1) у нее может быть большое число связей, что может привести к увеличению дисперсии  $D$ ; 2) она может оказаться мала в сравнении с ошибкой наблюдения.

Сначала проверяется такая возможность, нуждается ли уравнение регрессии  $f(x)$  в уточнении. Допустим, для уравнения регрессии  $y=f(x)$ , величина дисперсии  $D$ , а случайная ошибка определяется выборочной дисперсией  $s^2$ .

Проверяется выполнение такого соотношения:  $\frac{D}{S^2} > F_{1-p}$ , в этом случае уравнение регрессии нуждается в уточнении, если  $\frac{D}{S^2} < F_{1-p}$  - не нужно уточнять. Допустим, выполняется первое условие, значит уравнение регрессии нуждается в уточнении. Берется соотношение  $\frac{D_1}{D_2} > F_{1-p}(n-l_1, n-l_2)$ .

Если это соотношение выполняется, то мы достигли улучшения, и лучше использовать уравнение

$$y=f(x)+\varphi(x),$$

если нет, то уравнение ничем не лучше

$$y=f(x).$$

## Линейная регрессия

Линейная регрессия наиболее часто используется на практике. Нелинейная регрессия во многих случаях получается путем ее приведения к линейной регрессии. Линейная регрессия в виде  $y=a+bx$ .

Система для нахождения коэффициентов  $a$  и  $b$  принимает вид:

$$\begin{cases} \sum (a + bx_i) = \sum y_i \\ \sum (a + bx_i)x_i = \sum y_i x_i \end{cases}$$

$$\begin{cases} b = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \\ a = \frac{\sum y_i - b \sum x_i}{n} \end{cases}$$

Можно убедиться, что  $(x, y)$  – пара линейной приближенной регрессии проходит через среднюю точку. Поэтому, для нахождения уравнения регрессии, достаточно определить коэффициент  $b$ . Т. к. коэффициент  $b$  находится по результатам выборки, то при этом допускается погрешность.

Истинное значение параметра  $b$  в пределах:

$$b - t_{1-\frac{p}{2}} \frac{S_y \sqrt{1-r}}{S_x \sqrt{n-r}} < b_0 < b + t_{1-\frac{p}{2}} \frac{S_y \sqrt{1-r}}{S_x \sqrt{n-r}}$$

## Нелинейная регрессия

Уравнение нелинейной регрессии также можно получить с помощью метода наименьших квадратов. При этом возможны два подхода: либо тип уравнения фиксируется сразу, уравнение подвергается уточнению.

Уравнение регрессии можно считать окончательным, если соответствующие ему дисперсии незначимо отличаются от дисперсии случайных наблюдений.

Часто теоретические предпосылки позволяют определить тип уравнения регрессии. Например: зависимость проводимости полупроводника от температуры экспоненциальная. Другие зависимости могут быть логарифмическими, степенными, гиперболическими и т. д. Вычисление уравнения нелинейной регрессии можно значительно упростить, если путем замены переменных нелинейную зависимость преобразовать к линейной, параметры которой находят с помощью метода наименьших квадратов. После чего путем обратного преобразования получить параметры исходной нелинейной зависимости.



Пусть  $x_i$  и  $y_i$  – исходные данные, для которых необходимо получить уравнение нелинейной регрессии, а  $X_i$  и  $Y_i$  – это преобразованные данные, для которых находится линейная зависимость.

$Y=AX+B$  – линейное уравнение регрессии

$y=f(x, a, b)$  – уравнение нелинейной регрессии,  $(a, b)$  – параметры нелинейной зависимости

Для некоторых типов нелинейной регрессии составим таблицу 1:

Уравнение регрессии	X	Y	a	b
$y=1/(ax+b)$	$x$	$1/y$	$A$	$B$
$y=x/(ax+b)$	$x$	$x/y$	$A$	$B$
$y=ae^{bx}$	$x$	$\ln y$	$e^B$	$A$
$y=ae^{b/x}$	$1/x$	$\ln y$	$e^B$	$A$

Таблица 1

Уравнение нелинейной регрессии можно получить в виде полинома некоторой степени. Если степень полинома заранее неопределенна, то для определения степени полинома находят начальное уравнение регрессии и вычисляют для него дисперсию, после чего степень полинома увеличивают на единицу и получают новое уравнение регрессии, для которого также вычисляют дисперсию. Если после увеличения степени полинома произошло значительное уменьшение дисперсии (устанавливается по критерию Фишера), то степень полинома снова увеличивают на единицу, и так далее до тех пор, пока значимого уменьшения дисперсии не будет происходить.

## Активный эксперимент и его виды.

Представим, что исследуемая величина зависит от нескольких факторов и требуется изучить влияние этих факторов на исследуемую величину. Традиционный способ решения такой задачи представляет подстановку обычных пассивных экспериментов. При этом сначала фиксируются все факторы кроме одного первого и производят несколько опытов, во время которых варьируется только этот первый фактор. Затем ставится вторая серия опытов, во время которых варьируется только второй фактор и т.д. По завершению всех опытов результаты обрабатываются на ЭВМ, и строится уравнение множественной регрессии. В пассивном эксперименте многие факторы могут быть не обнаружены, например, может быть не обнаружено взаимодействие фактора, это связано с тем, что сложно провести опыты при всех возможных сочетаниях действующего фактора т.к. это может потребовать большое число измерений.

Полное число опытов равно  $n = m^k = 5^5 > 3000$

Более эффективным является активный эксперимент, в котором в каждом опыте варьируется сразу все действующие факторы по специальному плану. Методы начали разрабатываться в 30-ых годах прошлого века, первые работы были выполнены Фишером. Первый дисперсионный анализ можно понимать двояко, с одной стороны это анализ влияния фактора на основе сопоставления их дисперсий, с другой стороны это один из методов планирования и обработки эксперимента. Планирование эксперимента подразделяется на отсеивающие, предназначенные для нормирования, описания поверхности отклика, т.е. для нахождения математической модели уравнения регрессии. Эксперимент для оценки

влияния факторов каждый фактор имеет область ограничения, т.е. совокупность всех решений, который может принимать фактор, область определения может быть непрерывной или дискретной, на практике для факторов с непрерывной областью определения (температура) выбирают дискретное множество уравнений. Действительные факторы должны быть:

1. управляемыми
2. операциональные
3. однозначность
4. совместимость

При проведении много факторного эксперимента возникает следующая задача

1. Выбор оптимальной стратегии эксперимента в условиях неопределенности
2. Проверка гипотезы и принятия решения
3. Обработка результатов измерения

Важным этапом планирования эксперимента является выбор математической модели объекта. Чаще используются полиномиальную модель, простым случаем является линейная модель. Достоинством является их универсальность линейность относительно параметров модели.

Например, если число факторов 2, то модель 2-го порядка может быть записана в виде

$$Y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2$$

Это модель линейного отклика параметров, учитывая взаимодействие фактора  $x_1$  и  $x_2$ .

До планирования эксперимента необходимо выбрать нормальную область факторного пространства, для этого

необходимо оценить границы определения факторов, при этом учитывают ограничения некоторых типов.

1. Принцип ограничения (абсолютный 0 или температура плавления)
2. Техника экономического характера
3. Ограничено обусловлено

Конкретными условиями на основе априорных информации в области определения формулируется локальная под область планирования эксперимента.

Для этого необходимо: установить основной уровень и интервал варьирования, основной или нулевой уровень должен соответствовать наилучшим условиям, определенным из условия априорной информации этого исходная точка для построения планирования эксперимента, они находятся где-то в середине области определения. Построение плана эксперимента сводится к выбору постоянных экспериментальных точек относительно нулевому уровню. Затем выбирают два предела верхний и нижний. В пределах этих уравнений будет варьироваться факты во время эксперимента.

Интервалом варьирования называют число прибавление, которого к основному уравнению верхний уровень фактора, а вычитание нижний. Для упрощения записи эксперимента и обработки, данных масштабы факторов изменяют таким образом, чтобы верхнему уровню соответствует +1, а нижнему -1, основному 0. Для факторов с непрерывной областью определения это можно сделать с помощью преобразования:

$$x_i \sim - x_{i0} / I_i = x_i$$

$x_i \sim$  - натуральное значение фактора

$x_{i0} \sim$  - натуральное значение основного уравнения

$I_i$ - интервал варьирования

$x_i$ - кодированное значение  $x$  с фактором  $i$

Процесс преобразований с помощью этих формул называется кодированием данных. На интервале варьирования находятся ограничения, он не должен быть меньше погрешности измерения фактора. Верхний и нижний уровни должны быть в области определения.

## Планирование полного факторного эксперимента.

Рассмотрим планирование факторного эксперимента на примере простой и часто используемой модели. В этом случае достаточно использовать только два уравнения фактора.

Если число факторов для проведения эксперимента требуется  $2^k$  опытов  $k \rightarrow 2^k$  условие эксперимента записываем в виде таблицы, где строка соответствует различным опытам, а столбец значениям факторов, также таблица называется матрицей планирования.

Построим матрицу планирования для 2-х факторов.

№	$x_1$	$x_2$	$Y$
1	1	1	$Y_1$
2	-1	1	$Y_2$
3	1	-1	$Y_3$
4	-1	-1	$Y_4$

Матрица планирования состоит из векторов-столбцов и вектор строк. С ростом числа факторов возникает необходимость в разработке правил построения матриц, на практике используются три способа, основанные на переходе

от матриц меньшей размерностью к матрицам с большей размерностью.

В этом случаи записывается исходный план для значений  $+1$  нового фактора, а затем повторяется план для другого заполнения  $-1$ .

Получим план для трех факторов.

№	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$Y$
1	1	1	1	$Y_1$
2	1	-1	-1	$Y_2$
3	-1	1	-1	$Y_3$
4	-1	-1	1	$Y_4$
5	1	1	-1	$Y_5$
6	1	-1	1	$Y_6$
7	-1	1	1	$Y_7$
8	-1	-1	-1	$Y_8$

Возможны другие способы построения планов эксперимента.

2 Правило перемножение столбцов матрицы

3 способ правило чередования знаков. В первом столбце знаки меняются поочередно, во втором через 2, в 3-через 4 и т.д.

№	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$Y$
1	1	1	1	$Y_1$
2	-1	1	1	$Y_2$
3	1	-1	1	$Y_3$
4	-1	-1	1	$Y_4$
5	1	1	-1	$Y_5$
6	-1	1	-1	$Y_6$
7	1	-1	-1	$Y_7$
8	-1	-1	-1	$Y_8$

Матрица планирования обладает следующими свойствами

1. Симметрия относительно центра эксперимента, это значит, что для каждого фактора с номерами  $i$ , алгебраическая сумма эксперимента номер всего столбца равна 0

$$\sum x_{in}=0$$

2. Условие нормировки, означает, что сумма всех экспериментов каждого столбца равна числу опытов

$$\sum x_{in}^2=N$$

3. Ортогональность матриц сумма произведение любых двух различных вектор столбцов равно 0.
4. Ротабельность - это свойство означает, что точность выходных параметров, одинакова на равных расстояниях от центра эксперимента и не зависит от центра направления.

Правила составления матрицы планирования эксперимента должна обладать всеми 4-мя свойствами.

Для нахождения коэффициентов линейной модели.

$$Y=a_0+a_1x_1+a_2x_2+a_3x_3$$

используется формула

$$a_i=\sum y_ix_{ij}/N$$

Чтобы все коэффициенты вычислялись по одной формуле в матрицу планирования удобно ввести фактическую переменную  $x_0$ , которые во всех опытах принимают значения + 1.

$$x_{0i}=+1$$

В случаи трех факторов,

$$a_0 = 1/8(Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4 + Y_5 + Y_6 + Y_7 + Y_8)$$

$$a_1 = 1/8(Y_1 - Y_2 + Y_3 - Y_4 + Y_5 - Y_6 + Y_7 - Y_8)$$

$$a_2 = 1/8(Y_1 + Y_2 - Y_3 - Y_4 + Y_5 + Y_6 - Y_7 - Y_8)$$

$$a_3 = 1/8(Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4 - Y_5 - Y_6 - Y_7 - Y_8)$$

Значение коэффициентов  $a_i$  соответствует вкладу фактора в силу его влияния, чем больше значение  $a_i$ , тем больше влияние фактора  $i$ . При планировании эксперимента на первом этапе стремимся получить линейную модель, если результат окажется неудовлетворительным, то необходимо применить нелинейные эффекты. Полный факторный эксперимент типа  $2^k$  позволяет оценить эффект взаимодействия факторов, для этого пользуются правилом перемножения столбцов получают столбец произведения двух факторов при вычислении коэффициентов с этим столбцом обращаются как с вектор столбцом любого фактора.

### Пример ПЭФ $2^2$

№	$x_1$	$x_2$	$x_1x_2$	$Y$
1	1	1	1	$Y_1$
2	-1	1	-1	$Y_2$
3	1	-1	-1	$Y_3$
4	-1	-1	1	$Y_4$

$$Y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2$$

$$a_{12} = 1/4(Y_1 - Y_2 - Y_3 + Y_4)$$

$$Y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3 + a_{23}x_2x_3$$



# ПЭФ 2<sup>3</sup>

№	$x_0$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_1x_2$	$x_1x_3$	$x_2x_3$	$x_1x_2x_3$	Y
1	1	1	1	1	1	1	1	1	$Y_1$
2	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	$Y_2$
3	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	$Y_3$
4	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	$Y_4$
5	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	$Y_5$
6	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	$Y_6$
7	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	$Y_7$
8	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	$Y_8$

$$a_0 = 1/8(Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4 + Y_5 + Y_6 + Y_7 + Y_8)$$

$$a_1 = 1/8(Y_1 - Y_2 + Y_3 - Y_4 + Y_5 - Y_6 + Y_7 - Y_8)$$

$$a_2 = 1/8(Y_1 + Y_2 - Y_3 - Y_4 + Y_5 + Y_6 - Y_7 - Y_8)$$

$$a_3 = 1/8(Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4 - Y_5 - Y_6 - Y_7 - Y_8)$$

$$a_{12} = 1/8(Y_1 - Y_2 - Y_3 + Y_4 + Y_5 - Y_6 - Y_7 + Y_8)$$

$$a_{13} = 1/8(Y_1 - Y_2 + Y_3 - Y_4 - Y_5 + Y_6 - Y_7 + Y_8)$$

$$a_{23} = 1/8(Y_1 + Y_2 - Y_3 - Y_4 - Y_5 - Y_6 + Y_7 + Y_8)$$

$$a_{123} = 1/8(Y_1 - Y_2 - Y_3 + Y_4 - Y_5 + Y_6 + Y_7 - Y_8)$$

Эффекты  $x_1x_2$  и  $x_1x_3$  и  $x_2x_3$  называются эффектами первых взаимодействий или взаимодействиями первого порядка.

Эффект  $x_1x_2x_3$  это эффект взаимодействия 2-го порядка, что эффект максимального порядка равен  $(k-1)$ . Полное число коэффициентов  $a_i$  равно числу опыта полного факторного эксперимента.

Ортогональные позволяют получить исправленные оценки для всех коэффициентов, это справедливо только для линейных моделей, если же модель квадратичная, то в этом

случаи столбец для  $x_0$  будет совпадать со столбцом  $x_1^2$  и  $x_2^2$  и т.д.

В результате мы не можем сказать, за счет чего получается значение для  $a_0$ . Оценка для  $a_0$  оказалась смешанной и кроме  $a_0$  включает в себя вклады всех квадратичных оценок, это смешанные записывается в виде  $a_0 \rightarrow \beta + \sum \beta_{ii}$ ,  $i$ - номер опыта

Для квадратичной модели оценки всех коэффициентов кроме  $a_0$  не смешанных. Таким образом, полный факторный эксперимент типа  $2^k$  позволяет учесть линейные эффекты и эффекты взаимодействия.

### Задачи оптимизации.

Эти задачи являются одними из важнейших задач прикладной математики. *Под оптимизацией понимают* выбор наилучшего варианта из всех возможных решений данной задачи. Для этого необходимо сформулировать решаемую задачу как математическую, придав количественный смысл понятиям лучше или хуже. Обычно в процессе решения необходимо найти оптимизируемые значения параметров. Эти параметры называют *проектными*. А число проектных параметров определяет *размерность задачи*.

Количественная оценка решения производится с помощью некоторой функции зависящей от проектных параметров. Эта функция называется *целевой*. Она строится таким образом, чтобы наиболее оптимальное значение соответствовало максимуму(минимуму).

$f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  - целевая функция.

Наиболее просты случаи, когда целевая функция зависит от одного параметра и задаётся явной формулой. Целевых функций может быть несколько.

Например, при проектировании самолёта требуется одновременно обеспечить максимальную надёжность, минимальные вес и стоимость и т.д. В таких случаях вводится *система приоритетов*. Каждой целевой функции ставится в соответствие некоторый целевой множитель в результате получается обобщенная целевая функция (функция компромиссов).

Обычно оптимальное решение ограничено рядом условий связанных с физической функцией задачи. Эти условия могут иметь вид равенств или неравенств

$$\left\{ \begin{array}{l} g_1(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ \dots\dots\dots \\ g_k(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ a_1 < \varphi_1(x_1, \dots, x_n) < b_1 \\ \dots\dots\dots \\ a_m < \varphi_m(x_1, \dots, x_n) < b_m \end{array} \right.$$

Теория и методы решения задач оптимизации при наличии ограничений составляют предмет исследований одного из разделов прикладной математики – *математического программирования*.

Если целевая функция линейна относительно проектных параметров и ограничения, накладываемые на параметры также линейны, то возникает *задача линейного программирования*. Рассмотрим методы решения одномерной задачи оптимизации.

Требуется найти значения  $x$  на  $[a,b]$  при которых целевая функция имеет максимальное значение. Если целевая функция задана аналитически и может быть найдено выражение для её производных, то оптимальное решение будет достигаться либо на концах отрезка, либо в точках в которых производная обращается в ноль. Это критические точки  $a, b$  и  $x=0$ . Необходимо найти значения целевой функции во всех критических точках и выбрать максимальное.

В общем случае для нахождения решения применяют различные методы поиска. В результате происходит сужение отрезка содержащего оптимальное решение.

Рассмотрим некоторые из методов поиска. Предположим, что целевая функция на промежутке  $[a,b]$  имеет один максимум. В этом случае, разбив  $[a,b]$  узловыми точками  $\{x_i\}$ , число которых  $N$ , вычисляют целевую функцию в этих узловых точках. Предположим, что максимальное значение целевой функции будет в узле  $x_k$ , тогда можно считать, что оптимальное решение находится на интервале  $[x_{k-1}, x_{k+1}]$ . В результате произведено сужение отрезка, содержащего оптимальное решение. Полученный новый отрезок вновь разбивают на  $N$  частей и т.д. При каждом разбиении отрезок, содержащий оптимальное решение уменьшаются в  $\frac{2}{N-1}$  раз.

Предположим, что произведено  $m$  шагов сужения. Тогда исходный отрезок  $[a,b]$  уменьшается в  $\left(\frac{2}{N-1}\right)^m$  раз.

То есть, делаем пока выполняется  $\frac{b-a}{\left(\frac{2}{N-1}\right)^m} < \varepsilon$  (\*)

При этом производится  $mN$  вычислений целевой функции.

Требуется найти такое значение,  $N$  чтобы выражение (\*) было получено при наименьшем числе вычислений  $mN$ .

## Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий.

Эффективность некоторого процесса, например, производственной деятельности может характеризоваться с помощью некоторой функции, называемой целевой функцией или функцией отклика, зависящей от ряда параметров.

$$Y = (X_1, X_2, \dots, X_k);$$

Задачей оптимизации является нахождение значений параметров **Ошибка! Закладка не определена.**, обеспечивающих максимум (минимум) целевой функции. Возможно при выполнении дополнительных условий.

$$g_i(X_1, X_2, \dots, X_k) \geq 0;$$

После чего производится поиск экстремума этой функции. Однако в этом случае требуется построить поверхности отклика в широком интервале варьирования. При этом функция отклика становится существенно нелинейной и требуется построение сложной математической модели, что требует большой объем экспериментов и трудоемкие вычисления.

В этом случае используют методы последовательно-пошагового изучения поверхности отклика.

Выбирается исходная точка проведения эксперимента и ставится небольшая серия опытов с целью изучения ограниченного участка поверхности отклика.

Так как рассматриваемый участок небольшой, то для поверхности отклика можно использовать линейную модель. А для построения линейной модели достаточно проведения факторного эксперимента на двух условиях.

После нахождения параметров линейной модели определяют направление движения к оптимальному решению. Оно совпадает с направлением градиента целевой (или имеет противоположное направление).

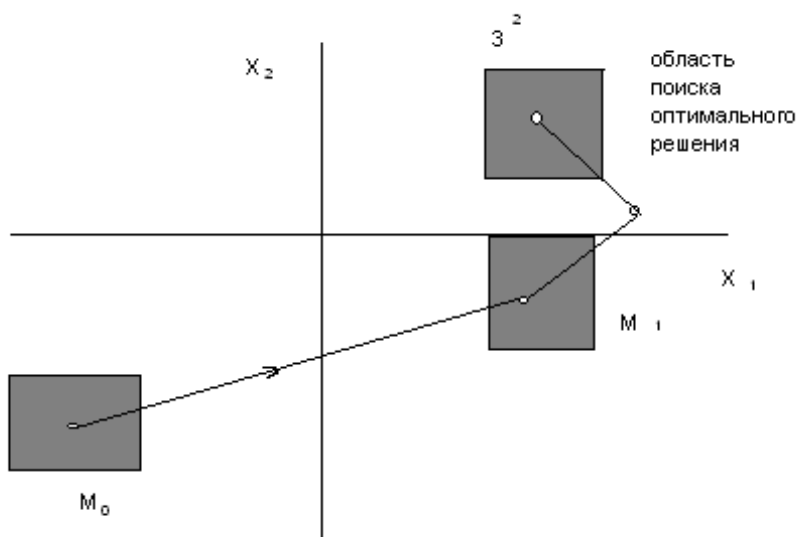
Для линейной модели компоненты градиента совпадают с коэффициентами линейной модели.

$$Y = a_0 + a_1 * X_1 + a_2 * X_2 + \dots + a_n * X_n.$$

$$\text{grad}Y = \left\{ \frac{\partial y}{\partial x_1}, \frac{\partial y}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial y}{\partial x_n} \right\} = \{a_1, a_2, \dots, a_n\} ;$$

После нахождения коэффициентов линейной модели производится шаг в направлении градиента. В результате, мы попадаем в новую точку, в которой процесс повторяется. Определяют новую небольшую область и находят новое направление. Процесс движения повторяется до тех пор, пока мы не попадаем в почти стационарную область, вблизи точки оптимального решения. Здесь ставится большая серия опытов с целью более точного описания поверхности отклика. Для повышения эффективности поиска оптимального решения используется метод крутого восхождения (метод Бокса-Уилсона). В этом методе вычисления градиента после каждого

шага не производится, а производится движение до тех пор, пока происходит рост целевой функции.



рисунок

Почти стационарная область содержит точку оптимума и поэтому не может быть описана линейной моделью. Для ее описания обычно используется полином второго порядка. В этом случае составляемый план принимал бы по-крайней мере три различных значения. Т.е. строится план  $Z^k$ . Такое планирование может быть получено путем добавления некоторых точек, специальным образом подобранных к ядру, образующего планирование линейной модели. Такие планы называются композиционными или последовательными. Число экспериментов для композиционных планов меньше,

чем число экспериментов для полного факторного эксперимента  $3^k$ .

## Метод покоординатного подъёма (спуска).

Перейдём к рассмотрению задачи оптимизации в случае, когда целевая функция зависит от нескольких значений параметров. Простейшим методом поиска является метод покоординатного подъёма (спуска).

Задаётся исходная точка  $M_0(x_1^0, \dots, x_n^0)$ . Затем фиксируются все координаты, кроме первой, в результате получаем целевую функцию, зависящую от одного проектного параметра

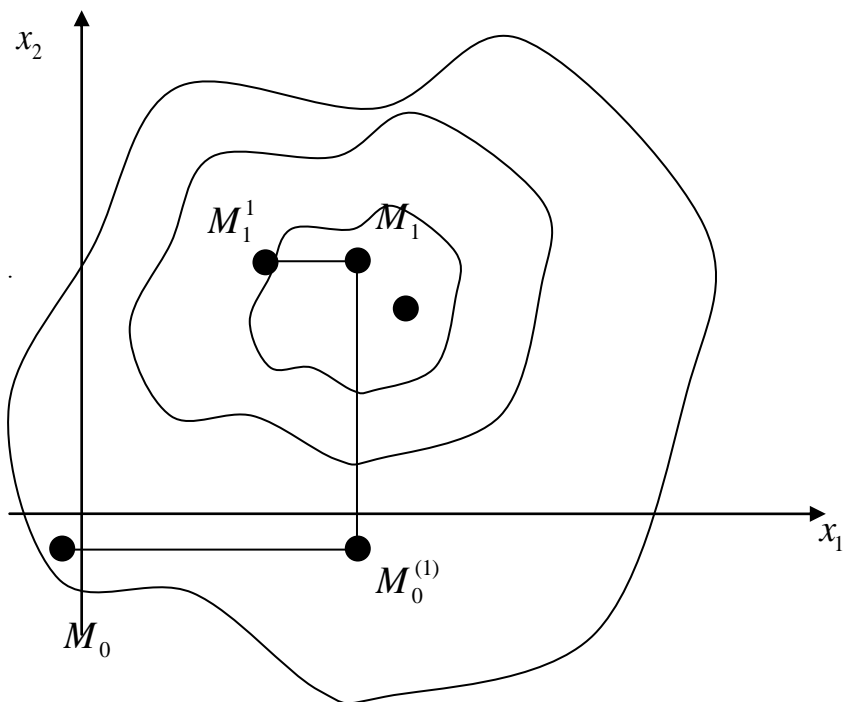
$$F(x_1) = f(x_1, x_2^0, x_3^0, \dots, x_n^0).$$

Для этой функции находится максимальное значение и точка, в которой этот максимум достигается.

$$M_1^1(x_1^1, x_2^0, \dots, x_n^0)$$

Затем фиксируем все координаты, кроме  $x_2$ , и получаем целевую функцию, зависящую также только от одного параметра.  $F_2(x_2) = f(x_1^1, x_2, x_3^0, \dots, x_n^0)$ . Затем находим таким же способом остальные значения, пока не найдём  $x_n^1$ . Это будет означать окончание первого итерационного шага и получение точки  $M_1$ . Затем мы повторяем процедуру, пока не достигнем заданной точности.



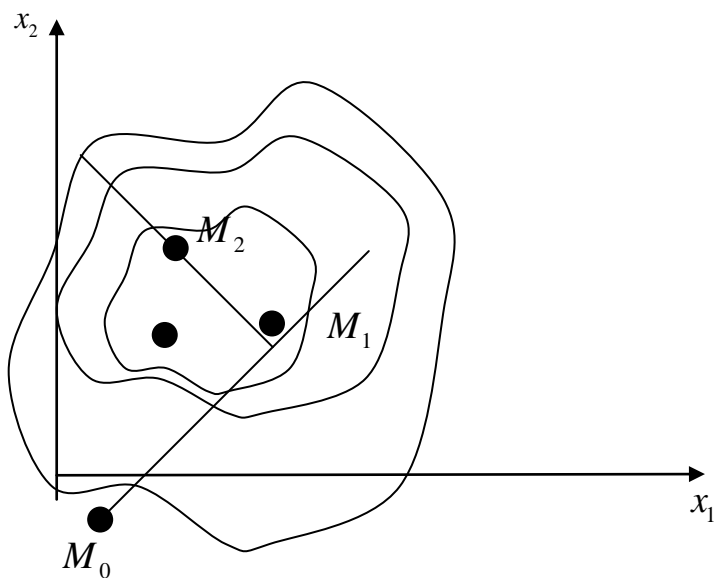


### Метод градиентного подъёма (спуска).

Более эффективен метод градиентного подъёма (спуска). Нужно выбрать начальную точку  $M_0$  и вычисляют значение градиента целевой функции в этой точке. Градиент определяет направление набыстрейшего возрастания целевой функции из точки  $M_0$ . Затем делают небольшой шаг в этом направлении и приходят в точку  $M_1$ . В этой точке процедуру повторяют и т.д.

## Метод наискорейшего подъёма.

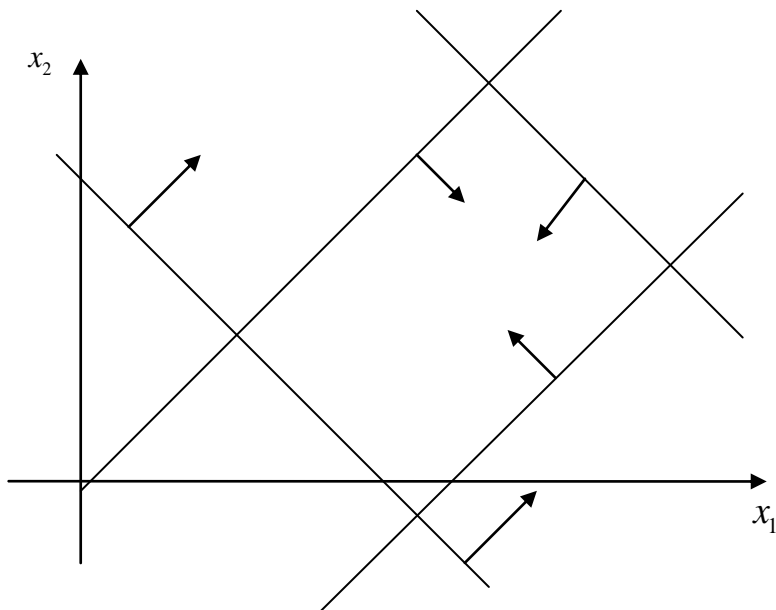
Модификацией метода градиентного подъёма является метод наискорейшего подъёма. В этом методе после вычисления градиента в точке  $M_0$  движутся в направлении градиента, пока целевая функция продолжает возрастать до точки  $M_1$ . В точке  $M_1$  процедура повторяется.



Решение задач математического программирования, то есть задач с ограничением обычно более трудоёмко.

## Рассмотрим простейшие задачи линейного программирования.

В этом случае целевая функция и условия ограничения – линейны. Линейные ограничения на проектные параметры образуют в пространстве проектных параметров многогранник. Оптимальным решением будет соответствовать одна из вершин этого многогранника. Могут быть случаи, когда оптимальному решению соответствуют все точки на ребре или на целой грани многоугольника



Типичными задачами линейного программирования являются транспортная задача и задача об использовании ресурсов.

## Транспортная задача.

Автобаза обслуживает три магазина, доставляя в них товары из двух торговых баз. Известно, что ежедневно вывозится с первой базы 12т. товара, а со второй базы 15т. При этом в магазины ежедневно завозится в первый – 8т., во второй 9т., в третий 10т. Стоимость перевозки одной тонны определяется таблицей.

База	Магазин		
	1	2	3
1	0,80	1,1	0,90
2	1,00	0,70	1,20

Требуется спланировать перевозки так, чтобы их *стоимость была минимальной*.

Введём переменные величины,  $x_1, x_2, x_3$  соответствующие количеству товара доставляемого в первый, второй и третий магазины соответственно;  $x_4, x_5, x_6$  - количество товара поставляемого со второй базы. Стоимость перевозок запишем в виде:

$f(x_1, x_2, \dots, x_6) = 0.8x_1 + 1.1x_2 + 0.9x_3 + x_4 + 0.7x_5 + 1.2x_6$  - это и есть целевая функция.

$x_1, x_2, \dots, x_6$  - проектные параметры. На проектные параметры накладываются ограничения. Во-первых, это ограничение равенства, оно следует из условия задачи и описывает количество товаров, которые вывозят с баз и доставляют в магазины.

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 12 \\ x_4 + x_5 + x_6 = 15 \\ x_1 + x_4 = 8 \\ x_2 + x_5 = 9 \\ x_3 + x_6 = 10 \end{cases}$$

К данной системе необходимо добавить систему неравенств

$$x_i \geq 0, i = \overline{1, 6}.$$

В этой системе равенств независимыми являются только четыре уравнения, поэтому из шести независимых  $x_1, x_2, \dots, x_6$  фактически независимыми являются только две переменные  $x_1, x_2$ . Тогда ограничения, налагаемые на переменные можно записать как

$$\begin{cases} x_3 = 12 - x_1 - x_2 \\ x_4 = 8 - x_1 \\ x_5 = 9 - x_2 \\ x_6 = 10 - x_3 = 10 - 12 + x_1 + x_2 = x_1 + x_2 - 2 \end{cases}$$

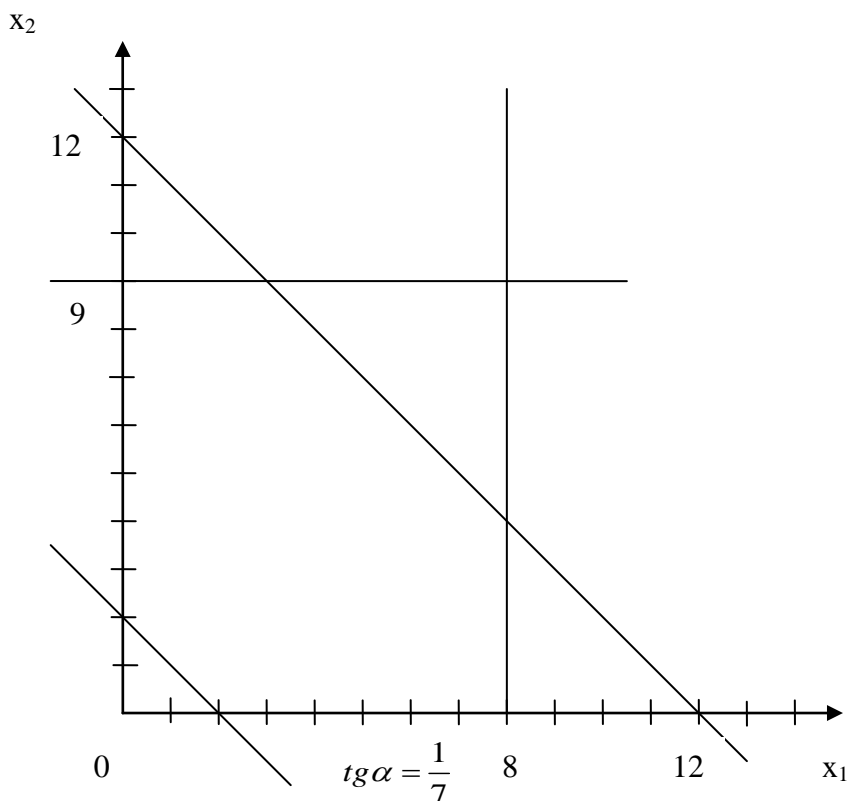
А целевая функция  $f(x_1, x_2)$  принимает вид  $f(x_1, x_2) = 22.7 + 0.1x_1 + 0.7x_2$ .

Теперь условия неравенства принимают вид.

$$\begin{cases} x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \\ 12 - x_1 - x_2 \geq 0 \\ 8 - x_1 \geq 0 \\ 9 - x_2 \geq 0 \\ x_1 + x_2 \geq 12 \end{cases}$$

Система этих неравенств определяет область допустимых значений переменных  $x_1, x_2$  - область  $D$ . запишем систему неравенств в виде

$$\begin{cases} 0 \leq x_1 \leq 8 \\ 0 \leq x_2 \leq 9 \\ 2 \leq x_1 + x_2 \leq 12 \end{cases}$$



Теперь мы должны найти в этой области точки, обеспечивающие минимум целевой функции. Возьмём

$0.1x_1 + 0.7x_2 = C$  и  $x_1 = 2$   $x_2 = 0$  - это точки, которые являются узлами области  $D$ .

Минимальное значение целевой функции достигается в вершине области допустимых значений  $D$ .

В общем случае при решении произвольной задачи линейного программирования, *область допустимых значений образуется при пересечении конечного числа плоскостей*. Эта область может быть как ограниченной, так и неограниченной и даже пустой, если система ограничений противоречива, в последнем случае задача решения не имеет. *Обычно область решений представляет собой выпуклый многоугольник*. Целевой функции соответствует гиперплоскость. Изменение значения целевой функции соответствует параллельной пересечения гиперплоскости (на единицу меньше). Минимальному значению целевой функции будет соответствовать точка касания гиперплоскости с одной точкой области  $D$ , то есть с одной из вершин многогранника. При минимальном значении целевой функции гиперплоскость может совпадать не с одной точкой, а с одной из граней. В этом случае все точки целевой функции являются решением задачи.

### Задача о ресурсах.

В распоряжении бригады имеются следующие ресурсы: 300 кг металла, 100 м<sup>2</sup> стекла, 160 чел.-ч. (человеко-часов) рабочего времени. Бригаде поручено изготавливать два наименования изделий: А и Б. Цена одного изделия А 1 тыс. р., для его изготовления необходимо 4 кг металла, 2 м<sup>2</sup> стекла и 2 чел.-ч. рабочего времени. Цена одного изделия Б 1.2 тыс. р., для его изготовления необходимо 5 кг металла, 1 м<sup>2</sup> стекла и 3

чел.-ч. рабочего времени. Требуется так спланировать объем выпуска продукции, чтобы ее стоимость была максимальной.

*Сначала сформулируем задачу математически.*

Обозначим через  $x_1, x_2$  количество изделий А и Б, которое необходимо запланировать (т. е. это искомые величины). Имеющиеся ресурсы сырья и рабочего времени зададим в виде ограничений-неравенств:

$$4x_1 + 5x_2 \leq 300,$$

$$2x_1 + x_2 \leq 100,$$

$$2x_1 + 3x_2 \leq 160.$$

*Полная стоимость* запланированной к производству продукции выражается формулой

$$f = x_1 + 1.2x_2.$$

Таким образом, мы имеем задачу линейного программирования, которая состоит в определении оптимальных значений проектных параметров  $x_1, x_2$  являющихся целыми неотрицательными числами, удовлетворяющих линейным неравенствам и дающих максимальное значение линейной целевой функции.

*Введём дополнительные* переменные  $x_3, x_4, x_5$ , такие, чтобы при их прибавлении к левым частям соотношений неравенства превращались в равенства. Тогда ограничения примут вид

$$4x_1 + 5x_2 + x_3 = 300,$$

$$2x_1 + x_2 + x_4 = 100,$$

$$2x_1 + 3x_2 + x_5 = 160.$$



При этом очевидно, что  $x_3 \geq 0, x_4 \geq 0, x_5 \geq 0$ . Заметим, что введение дополнительных неизвестных не повлияло на вид целевой функции, которая зависит только от параметров  $x_1, x_2$ . Фактически  $x_3, x_4, x_5$  будут указывать остатки ресурсов, не использованные в производстве.

Выразим  $x_3, x_4, x_5$  через свободные переменные  $x_1, x_2$ . Получим:

$$x_3 = 300 - 4x_1 - 5x_2,$$

$$x_4 = 100 - 2x_1 - x_2,$$

$$x_5 = 160 - 2x_1 - 3x_2.$$

В качестве опорного решения возьмем такое, которое соответствует нулевым значениям свободных параметров:

$$x_1^{(0)} = 0, \quad x_2^{(0)} = 0, \quad x_3^{(0)} = 300, \quad x_4^{(0)} = 100, \quad x_5^{(0)} = 160.$$

Этому решению соответствует нулевое значение целевой функции

$$F^{(0)} = 0.$$

Положим  $x_2 = 0$ , и будем увеличивать переменную  $x_1$  до тех пор, пока переменные  $x_3, x_4, x_5$  остаются положительными. Отсюда следует, что  $x_1$  можно увеличить до значения  $x_1 = 50$ , поскольку при большем его значении переменная  $x_4$  станет отрицательной.

Таким образом, полагая  $x_1 = 50, x_2 = 0$ , получаем новое решение

$$x_1^{(1)} = 50, \quad x_2^{(1)} = 0, \quad x_3^{(1)} = 100, \quad x_4^{(1)} = 0, \quad x_5^{(1)} = 60.$$

Значение целевой функции при этом будет равно

$$F^{(1)} = -50.$$

Новое решение лучше, поскольку значение целевой функции уменьшилось по сравнению с предыдущим.

Следующий шаг начнем с выбора нового базиса. Примем ненулевые переменные  $x_1, x_3, x_5$  в качестве базисных, а нулевые переменные  $x_2, x_4$  в качестве свободных.

Получим

$$x_1 = 50 - 0.5x_2 - 0.5x_4,$$

$$x_3 = 100 - 3x_2 + 2x_4,$$

$$F = -71 + 0.15x_4 + 0.35x_5.$$

Выражение для целевой функций запишем через свободные параметры. Получим

$$F = -50 - 0.7x_2 + 0.5x_4.$$

Отсюда следует, что **значение целевой функции** по сравнению с предыдущей **можно уменьшить за счет увеличения  $x_2$**  поскольку коэффициент при этой переменной в отрицательный. При этом увеличение  $x_4$  недопустимо, поскольку это привело бы к возрастанию целевой функции; поэтому пусть  $x_4=0$ .

Быстрее всех нулевого значения достигнет переменная  $x_5$  при  $x_2 = 30$ . Дальнейшее увеличение  $x_2$  поэтому невозможно. Следовательно, получаем новое опорное решение, соответствующее значениям  $x_2 = 30$ ,  $x_4 = 0$  и тогда

$$x_1^{(2)} = 35, \quad x_2^{(2)} = 30, \quad x_3^{(2)} = 10, \quad x_4^{(2)} = 0, \quad x_5^{(2)} = 0.$$

При этом значение целевой функции равно

$$F^{(2)} = -71.$$

**Покажем, что полученное решение является оптимальным.** Для проведения следующего шага ненулевые переменные  $x_1, x_2, x_3$ , нужно принять в качестве базисных, а нулевые переменные  $x_4, x_5$  — в качестве свободных переменных. В этом случае целевую функцию можно записать в виде

$$F = -71 + 0.15x_4 + 0.35x_5.$$

Поскольку коэффициенты при  $x_4, x_5$  положительные, то при увеличении этих параметров целевая функция возрастает. Следовательно,  $F = 71$  является оптимальным.

Таким образом, ответ на поставленную задачу об использовании ресурсов следующий: для получения максимальной суммарной стоимости продукции при заданных ресурсах необходимо запланировать изготовление изделий А в количестве 35 штук и изделий Б в количестве 30 штук. Суммарная стоимость продукции равна 71 тыс. р. При этом все ресурсы стекла и рабочего времени будут использованы, а металла останется 10 кг.