МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬГОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧЕРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ ДОНСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ (ДГТУ)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

(курс лекций)

Ростов-на-Дону 2020

ВВЕДЕНИЕ

Любой творческий процесс – будь то изучение законов природы или разработка новой технологии, разведка месторождений или создание нового оборудования – сопровождается построением моделей. В широком смысле модель – это мысленно представляемая или материально реализованная система, которая отображая или воспроизводя объект исследования, способна замещать его так, чтобы ее изучение дало новую информацию об этом объекте. Таким образом, моделирование является методом изучения процессов или объектов, при котором исследования проводят на моделях, а результат распространяется на оригинал.

Современное химическое производство представляет собой сложную химико-технологическую систему, состоящую из большого количества аппаратов и технологических связей между ними. Следовательно, разработка и эксплуатация производства требует знания как общего подхода к проблеме, так и большого количества вопросов, непосредственно связанных с рассматриваемой технологией.

Процессы, связанные с химической технологией, очень сложны. Это прежде всего химические превращения в аппаратах различных конструкций, обусловленных особенностями протекания химических реакций, многокомпонентностью и многостадийностью многих из них. Не менее сложны и массообменные процессы, в частности процессы ректификации многокомпонентных смесей. В электрохимической технологии актуальны задачи оптимизации технологий электроосаждения. Прогресс гальванотехники требует детального изучения сцепления осадков в зависимости от подготовки поверхности покрываемого металла. В частности, необходимо изучить тончайшие слои сплавов, образующиеся в контакте чистой основы с покрытием, и исследовать влияние их состава и структуры на первоначальные стадии электрокристаллизации.

Для решения этих сложных научных и технологических задач химических производств используются методы математического моделирования. Современные специалисты должны уметь разрабатывать математические модели технологических процессов и оборудования.

В данном курсе лекций рассмотрены некоторые аспекты моделирования функциональных зависимостей, а также линейные корреляционные модели (статистические и корреляционные зависимости). Предложен раздел математического программирования. В нем показаны возможности применения методов оптимизации при решении различных химико-технологических задач.

1 МОДЕЛИРОВАНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ

При моделировании функциональных зависимостей обычно используется метод наименьших квадратов. Этот метод является одним из методов теории ошибок для оценки неизвестных величин по результатам измерений, содержащим случайные ошибки, применяется также для приближённого представления заданной функции другими (более простыми) функциями и часто оказывается полезным при обработке наблюдений.

1.1 Основные типы эмпирических формул Метод наименьших квадратов

В практических применениях математики очень часто встречается такая задача. Зависимость между переменными величинами выражается в виде таблицы, полученной опытным путем. Это могут быть результаты эксперимента, данные наблюдений или измерений, статистической обработки материала. Например, зависимости пути, пройденного телом, от времени; данные о цене на нефть и индексы акций нефтеперерабатывающих компаний; прибыли предприятия по годам от деятельности предприятия и т.п.

Пусть дана эмпирическая зависимость.

Таблица 1

X	x_1	x_2	…	x_i	…	x_n
У	y_1	y_2	…	y_i	…	y_n

Требуется выразить зависимость между переменными аналитически, т. е. дать формулу, связывающую между собой соответствующие значения переменных. Такая формула очень облегчает анализ изучаемой зависимости. Формулы, служащие для аналитического представления опытных данных, принято называть *эмпирическими формулами.*

Задача нахождения эмпирических формул заключается в следующем:

1) устанавливается вид зависимости $y = f(x)$, т.е устанавливется, является ли она линейной, квадратичной, логарифмической или какой-либо другой, которая содержит ряд числовых параметров a, b, c, …;

2) определяются неизвестные параметры функции, так чтобы кривая

y = f(x) наилучшим образом изображала зависимость, полученную в опыте.

Пусть результаты экспериментальных исследований нанесены на плоскость, паре чисел (x_i, y_i) соответствует точка с такими же координатами. Разумеется, существует множество кривых, проходящих через эти точки (см. рисунок 1).

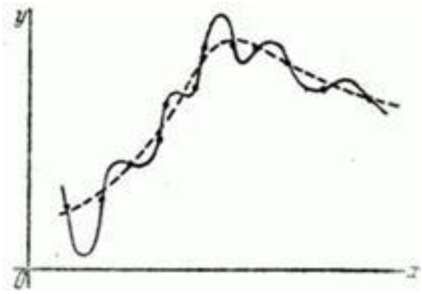

Рисунок 1.

Предполагают, что кривая истиной зависимости – наиболее гладкая кривая (пунктир), согласованная с эмпирическими данными, поэтому именно ее предпочтет исследователь. Однако, для проверки правильности вывода проводится еще ряд одновременных измерений величин x и y. Дополнительные точки наносятся на плоскость. Если они оказываются достаточно близкими к выбранной кривой, то можно считать, что вид кривой установлен.

Кроме того, во многих случаях характер зависимости между переменными величинами определяется из каких-либо теоретических соображений не математического характера (например, используя опыт предшествующих исследований). Например, известно, что при свободном падении тела в пустоте зависимость пути от времени дается формулой: $s=\frac{gt^2}{2}$, где g - коэффициент пропорциональности, являющийся ускорением силы тяжести; его значение находится из опыта.

Измеряя фактически пройденный телом путь в разные моменты времени, мы получаем таблицу соответствующих значений переменных t и s. Задача состоит теперь в том, чтобы, исходя из наблюдаемых значений, подобрать подходящее значение g. Если бы данные наблюдения были точными, то для нахождения величины g достаточно было иметь одно значение t и соответствующее значение s. Но полученные значения s содержат ошибки измерений и из каждого наблюдения будет получаться другое значение s; нужно подобрать значение s таким, чтобы оно наилучшим образом удовлетворяло всем наблюдениям.

Еще чаще приходится встречаться с более общей и более сложной задачей: в результате наблюдений получен ряд значений переменных *x* и *y,* однако истинный характер функциональной зависимости между ними остается неизвестным. Здесь мы можем ставить перед собой цель подобрать какую-либо формулу, наилучшим образом отображающую полученные результаты. Применяются два различных метода построения таких формул. Один из них состоит в том, что строится многочлен, принимающий в заданных точках заданные значения, а именно: по двум известным точкам строится линейная функция (прямая), по трем - квадратичная (парабола) и т. п. Достоинство этого метода в том, что полученная формула в точности воспроизводит заданные значения. Такого рода формулы носят название *интерполяционных формул.*

Другой метод подбора эмпирических формул состоит в том, что по данным результатам наблюдений подбирается наиболее простая формула того или иного типа, дающая наилучшее приближение к имеющимся данным. При этом формула не воспроизводит в точности данных наблюдения, но этого и нет смысла требовать, учитывая, что полученные результаты могут содержать ошибки измерений.

Прежде чем переходить к вопросу о выборе типа подходящей формулы и подборе параметров, нужно уточнить, что следует понимать под словами «наилучшее совпадение с имеющимися данными». Этим словам можно придавать различный смысл, и тогда мы будем получать различные формулы для одних и тех же результатов наблюдений. Каждая из них будет в своем смысле «наилучшей».

Чаще всего при подборе эмпирических формул пользуются так называемым методом (*принципом) наименьших квадратов.* Он основан на том, что *из данного множества формул вида y=f(x) наилучшим образом изображающей данные значения считается та, для которой сумма квадратов отклонений наблюдаемых значений от вычисленных является наименьшей.*

Подбор параметров функции f*(x),* основанный на этом методе, называют *способом наименьших квадратов.*

Необходимо помнить, что способ наименьших квадратов применяется для подбора параметров после того, как вид функции $y = f(x)$ определен. Если из теоретических соображений нельзя сделать никаких выводов о том, какой должна быть эмпирическая формула, то приходится руководствоваться наглядными представлениями, прежде всего графическим изображением наблюденных данных. Вид функции $y = f(x)$ выбирается таким образом, чтобы график этой функции по возможности близко напоминал расположение на графике данных наблюдения.

Покажем, как практически подбираются по способу наименьших квадратов коэффициенты для функций простейших видов. Ограничимся следующими видами функций: линейная функция ($y = ax + b$), квадратичная функция ($y = ax^2 + bx+c$), гипербола ($y = a+ \frac{b}{x}$) и показательная функция ($y= a \cdot b^x$).

1.2 Линейная функция

Линейная функция имеет вид: $y = ax + b$

Пусть задана таблица значений переменных и соответствующие точки располагаются вблизи прямой линии (рис. 2). В этом случае нужно подбирать коэффициенты линейной функции $y = ax + b$

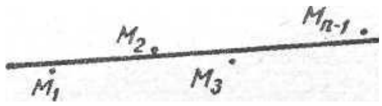

Рисунок 2.

так, чтобы сумма квадратов отклонений вычисленных значений $ax_i + b$ от наблюдаемых значений y_i т. е. величина

$U = (ax_1 + b - y_1)^2 + (ax_2 + b - y_2)^2 + \ldots + (ax_n + b - y_n)^2$, принимала наименьшее значение. Сумма $U = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2$ является функцией двух переменных a и b, а поэтому она принимает минимальное значение при тех значениях a и b, при которых обращаются в нуль частные производные этой функции по каждой переменной, т. е. когда:

$$\frac{\partial U}{\partial a} = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial U}{\partial b} = 0$$

Находим частные производные:

[illegible];

[illegible].

Приравнивая каждую частную производную нулю, получаем систему двух линейных уравнений относительно a и b

$$\begin{cases} a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i + bn = \sum_{i=1}^{n} y_i \end{cases},$$

1.3 Квадратичная функция

Квадратичная функция имеет вид: $y = ax^2 + bx + c$.
В случае квадратичной функции следует рассматривать сумму:

$$U = \sum_{i=1}^{n} (ax_i^2 + bx_i + c - y_i)^2,$$

которая является функцией трех переменных a, b и c, а поэтому принимает минимальное значение при тех значениях a, b и c, при которых обращаются в нуль частные производные этой функции по каждой переменной, т.е когда

$\frac{\partial U}{\partial a} = 0$, $\frac{\partial U}{\partial b} = 0$ и $\frac{\partial U}{\partial c} = 0$

Находим частные производные

$$\frac{\partial U}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{n}(ax_i^2 + bx_i + c - y_i)x_i^2 = 2\left(a\sum_{i=1}^{n} x_i^4 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^3 + c\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i\right);$$

$$\frac{\partial U}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{n}(ax_i^2 + bx_i + c - y_i)x_i = 2\left(a\sum_{i=1}^{n} x_i^3 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + c\sum_{i=1}^{n} x_i - \sum_{i=1}^{n} x_i y_i\right).$$

$$\frac{\partial U}{\partial c} = 2\sum_{i=1}^{n}(ax_i^2 + bx_i + c - y_i) = 2\left(a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i + cn - \sum_{i=1}^{n} y_i\right).$$

Приравниваем каждую частную производную нулю, получаем нормальную систему:

$$\begin{cases} a\sum_{i=1}^{n} x_i^4 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^3 + c\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i, \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i^3 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + c\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i + cn = \sum_{i=1}^{n} y_i. \end{cases}$$

1.4 Функция - гипербола

Гипербола имеет следующий вид: $y = a + b/x$.

Применение метода наименьших квадратов приводит к рассмотрению суммы вида

$$U = \sum_{i=1}^{n}\left(a + \frac{b}{x_i} - y_i\right)^2$$

Являющейся функцией двух переменных параметров a и b.
Отыскание частных производных дает

$$\frac{\partial U}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{n}\left(a + b\frac{1}{x_i} - y_i\right)$$

$$\frac{\partial U}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{n}\left(a + b\frac{1}{x_i} - y_i\right)\frac{1}{x_i} = 2\sum_{i=1}^{n}\left(a\frac{1}{x_i} + b\frac{1}{x_i^2} - y_i\frac{1}{x_i}\right)$$

Вводя условия экстремума $\frac{\partial U}{\partial a} = 0$ и $\frac{\partial U}{\partial b} = 0$, получаем

$$a\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i} + b\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i^2} - \sum_{i=1}^{n} y_i\frac{1}{x_i} = 0$$ или

$$a\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i} + b\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i^2} = \sum_{i=1}^{n} y_i\frac{1}{x_i}$$ и

$$\sum_{i=1}^{n}\left(a + b\frac{1}{x_i} - y_i\right) = 0,$$

или

$$na + b\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i} = \sum_{i=1}^{n} y_i .$$

Отсюда можно записать нормальную систему для определения параметров a и b.

$$\begin{cases} na + b\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i} = \sum_{i=1}^{n} y_i, \\ a\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i} + b\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i^2} = \sum_{i=1}^{n}\frac{y_i}{x_i}. \end{cases}$$

1.5 Показательная функция

Показательная функция имеет вид: $y = a \cdot b^x$.

Используется логарифмическое преобразование функции $y = ab^x$ к виду $\ln y = \ln(ab^x) = x\ln b + \ln a$,
выражающему $\ln y$ как линейную функцию от x при параметрах $\ln a$ и $\ln b$.
Определение этих параметров связывается здесь с отысканием по способу наименьших квадратов минимума суммы вида:

$$U = \sum_{i=1}^{n} (x_i \ln b + \ln a - \ln y_i)^2$$

Из условий

$$\frac{\partial U}{\partial \ln a} = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial U}{\partial \ln b} = 0.$$

Эти условия приводят к нормальной системе, которая по структуре своей аналогична системе, полученной в первом случае для линейной функции:

$$\begin{cases} \ln b \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + \ln a \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i \ln y_i, \\ \ln b \sum_{i=1}^{n} x_i + n \ln a = \sum_{i=1}^{n} \ln y_i. \end{cases}$$

Найденные из этой системы значения lnα и lnb позволяют легко с помощью таблиц логарифмов или калькулятора определить значения α и b.

1.6 Примеры решения типовых задач

Пример1.

Данные о цене на нефть **x** (усл.ед) и индексе акций нефтяных компаний **y** (усл.ед) приведены в таблице 2.

Таблица 2

x_i	17,3	17,0	18,3	18,8	19,2	18,5
y_i	537	534	550	555	560	552

Предполагая, что между переменными x и y существует линейная зависимость, найти эмпирическую формулу y=αx + b методом наименьших квадратов.

Решение.

Перепишем таблицу в виде столбцов и проведем необходимые вычисления.

Таблица 3

n	x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	17,3	537	299,29	9290,1
2	17,0	534	289,00	9078,0
3	18,3	550	334,89	10065,0
4	18,8	555	353,44	10434,0
5	19,2	560	368,64	10752,0
6	18,5	552	342,25	10212,0
$\sum$	109,1	3288	1987,51	59831,1

Составим систему уравнений :

$$\begin{cases} 1987{,}51a + 109{,}1\, b = 59\,831{,}1 \\ 109{,}1\, a + 6\, b = 3288 \end{cases}$$

Откуда $a=11{,}946$, $b=330{,}78$, т.е
$y = 11{,}94\, x + 330{,}78$.

2 ЛИНЕЙНЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ МОДЕЛИ

2.1 Статистическая и корреляционная зависимости

Многие задачи химических производств требуют установить и оценить зависимость изучаемой случайной величины Y от одной или нескольких других величин.

Две случайные величины могут быть связаны либо функциональной зависимостью, либо статистической зависимостью, либо могут быть независимыми.

Строгие функциональные зависимости изучаются в курсе математического анализа. В математической статистике рассматриваются «размытые» статистические зависимости.

Зависимость между величинами X и Y, состоящая в том, что каждому значению одной величины (X) соответствует не одно значение, а распределение значений другой величины, называется *статистической зависимостью*.

Корреляционной зависимостью называется *функциональная* зависимость между значениями одной случайной величины и условными средними значениями другой случайной величины.

Пример. Пусть Y – урожай зерна, X –количество удобрений. С одинаковых по площади участков земли при равных количествах внесённых удобрений снимают разный урожай, т.е. Y не является однозначной функцией от X. Это объясняется влиянием случайных факторов влияющих на урожай(осадки, температура воздуха и др.). Однако *средний урожай* является функцией от количества удобрений, т.е. Y связан с X корреляционной зависимостью.

2.2 Корреляционная таблица

Пусть имеются два ряда выборочных значений зависимых между собой случайных величин X и Y.

При небольшом числе выборочных значений случайных величин X и Y их записывают в виде таблицы наблюдений.

Таблица 23

X	x_1	x_2	x_3	…	x_n
Y	y_1	y_2	y_3	…	y_n

При большом числе выборочных значений одно и то же значение X, может встретиться n_x раз, а значение Y – n_y раз, пара чисел (X,Y) может наблюдаться n_{xy} раз. Таблица, в которой результаты наблюдений записаны в порядке возрастания с указанием частоты, называется корреляционной. Поясним устройство корреляционной таблицы.

Пример. Для исследования зависимости объёма производства Y от основных фондов (X, млн.р.), получены выборочные статистические данные по предприятиям за год.

Таблица 24

Y	X					n_y
	12	17	22	32	37	
200	3	-	1	-	-	4
220	-	5	8	1	-	14
250	2	1	-	2	1	6
n_x	5	6	9	3	1	n=24

В первой строке таблицы указаны наблюдаемые значения (12; 17; 22; 32; 37) признака (случайной величины) X, в первом столбце указаны наблюдаемые значения (200; 220; 250) признака Y. На пересечении строк и столбцов находятся частоты n_{xy} наблюдаемых пар значений признаков. Например, частота 8 указывает, что пара чисел (22; 220) наблюдалась 8 раз. Прочерк означает, что соответствующая пара чисел, например, (17; 200), не наблюдалась. Все частоты помещены в прямоугольник, стороны которого проведены жирными отрезками.

В последнем столбце записаны суммы частот строк. Например, сумма частот первой строки «жирного» прямоугольника равна n_y=3+1=4; это число указывает, что значение признака Y, равное 200 наблюдалось 4 раза. В последней строке записаны суммы частот столбцов. Например, число 5 указывает, что значение признака X, равное 12, наблюдалось 5 раз. В клетке, расположенной в нижнем правом углу таблицы 13, помещена сумма всех частот (общее число всех наблюдений).

Очевидно, $\sum n_x = \sum n_y = n$. В нашем примере $\sum n_x = 5+6+9+3+1=24$ и $\sum n_y = 4+14+6=24$.

2.3 Выборочные уравнения регрессии

Условным средним $\bar{y}_x$ называется среднее арифметическое наблюдавшихся значений Y, соответствующих X=x.

Пример. На каждый из 3-х одинаковых участков земли внесены по 2-е единицы удобрения и сняли соответственно 5; 7; 12 единиц зерна. Изучается зависимость между случайными величинами X и Y. Каждому значению X соответствует несколько значений Y: $x_1=2$; $y_1=5$; $y_2=7$; $y_3=12$. Среднее арифметическое этих чисел (средний урожай): $\bar{y}_{x_1} = \bar{y}_2 = \frac{5+7+12}{3} = 8$. Число $\bar{y}_{x_1}$ является условным средним.

Аналогично определяется условное среднее $\bar{x}_y$. *Условным средним* $\bar{x}_y$ называется среднее арифметическое наблюдавшихся значений X, соответствующих Y=y.

Корреляционной зависимостью y от x является функциональная зависимость: $\bar{y}_x = f(x)$. Функцию $f(x)$ называют выборочной регрессией Y на X, а её график – выборочной линией регрессии Y на X. А уравнение $\bar{y}_x = f(x)$ называется выборочным уравнением регрессии Y на X.

Корреляционной зависимостью x от y называется функциональная зависимость: $\bar{x}_y = \varphi(x)$. Функцию $\varphi(x)$ называется выборочной регрессией X по Y, уравнение называется выборочным уравнением регрессии X на Y, а её график называется выборочной линией регрессии.

Основные задачи теории корреляции

1. Установить зависимость между случайными величинами в виде формулы.
2. Оценить тесноту (силу) корреляционной связи.

Поясним последнюю задачу. Теснота корреляционной зависимости, например, Y от X оценивается по величине рассеяния значений Y вокруг условного среднего $\bar{y}_x$. Большое рассеяние свидетельствует о слабой зависимости Y от X, либо об отсутствии зависимости. Малое рассеяние указывает на наличие сильной зависимости.

2.5 Отыскание параметров выборочного уравнения прямой линии регрессии по несгруппированным данным

Пусть изучается система количественных признаков (X,Y). В результате n независимых опытов получены n пар чисел (x_1, y_1), (x_2, y_2),… (x_n, y_n), записанных в виде таблицы 12(несгруппированные выборочные данные). Найдём выборочное уравнение прямой линии регрессии Y на X $\bar{y}_x = kx + b$. Угловой коэффициент прямой линии регрессии Y на X называют выборочным *коэффициентом регрессии* Y на X и обозначают ρ_{yx}. Выборочное уравнение прямой линии регрессии Y на X принимает вид:

$$\bar{y}_x = \rho_{yx} x + b. \qquad (14)$$

Разности $Y_i - y_i$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$, называются отклонениями выборочных значений от теоретических значений признака Y. Y_i – вычисленная по уравнению (14) ордината, соответствующая наблюдаемому значению x_i; y_i – наблюдаемая выборочная ордината, соответствующая значению x_i.

Подберём параметры ρ_{yx} и b так, чтобы сумма квадратов отклонений была минимальной (в этом состоит сущность метода наименьших квадратов). Каждое отклонение зависит от отыскиваемых параметров, поэтому сумма квадратов отклонений есть функция F этих параметров (временно вместо ρ_{yx} будем писать ρ).

$$F(\rho, b) = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - y_i)^2 \quad \text{или} \quad F(\rho, b) = \sum_{i=1}^{n} (\rho x_i + b - y_i)^2.$$

Для отыскания минимума этой функции найдем и приравниваем к нулю соответствующие частные производные:

$$\frac{\partial F}{\partial \rho} = 2\sum_{i=1}^{n} (\rho x_i + b - y_i) x_i = 0;$$

$$\frac{\partial F}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{n} (\rho x_i + b - y_i) = 0.$$

Выполнив преобразования, получим систему уравнений:

$$\begin{cases} \left(\sum x^2\right)\rho_{yx} + \left(\sum x\right) b = \sum xy, \\ \left(\sum x\right)\rho_{yx} + n b = \sum y. \end{cases}$$

Решив эту систему, найдём оптимальные значения параметров:

$$\rho_{yx} = \frac{n\sum xy - \sum x \sum y}{n\sum x^2 - \left(\sum x\right)^2};$$

$$b = \frac{\sum x^2 \sum y - \sum x \sum xy}{n\sum x^2 - \left(\sum x\right)^2}.$$

Аналогично можно найти параметры выборочного уравнения прямой линии регрессии X на Y $\bar{x}_y = \rho_{xy} + c$:

$$\rho_{xy} = \frac{n\sum xy - \sum x \sum y}{n\sum y^2 - \left(\sum y\right)^2}; \qquad c = \frac{n\sum y^2 \sum x - \sum y \sum xy}{n\sum y^2 - \left(\sum y\right)^2}.$$

Пример. Найти выборочное уравнение прямой линии регрессии Y на X по данным пяти наблюдений (n=5):

Таблица 25

x	1,00	1,50	3,00	4,50	5,00
y	1,25	1,40	1,50	1,75	2,25

Составим расчётную таблицу:

Таблица 26

x_i	y_i	x_i^2	x_iy_i
1,00	1,25	1,00	1,250
1,50	1,40	2,25	2,100
3,00	1,50	9,00	4,500
4,50	1,75	20,25	7,875
5,00	2,25	25,00	11,250
$\sum x_i = 15$	$\sum y_i = 8{,}15$	$\sum x_i^2 = 57{,}5$ [illegible]	$\sum x_i y_i =$ [illegible]

Вычислим значения параметров по приведенным выше формулам.

[illegible]

[illegible] Уравнение регрессии имеет вид: [illegible]

Для того, что бы получить представление, насколько хорошо вычисленные по этому уравнению значения Y_i согласуются с наблюдаемыми значениями y_i, найдём отклонения Y_i-y_i. Результаты вычислений приведены в таблице 27.

Таблица 27

x_i	Y_i	y_i	Y_i-y_i
1,00	1,226	1,25	0,024
1,50	1,327	1,40	0,073
3,00	1,630	1,50	0,130
4,50	1,933	1,75	0,183
5,00	2,034	2,25	0,216

Видно, что все отклонения достаточно малы. Это объясняется малым числом наблюдений.

2. Отыскание параметров выборочного уравнения прямой линии регрессии по сгруппированным данным

Выше была получена система уравнений для определения параметров уравнения прямой линии регрессии Y на X.

$$\begin{cases} \rho_{yx}(\sum x^2) + b(\sum x) = \sum xy & (1) \\ \rho_{yx}(\sum x) + nb = \sum y \end{cases}$$

Предполагалось, что значения x_i и соответствующие им значения y_i наблюдались по одному разу.

Пусть получено большое число данных, среди которых есть повторяющиеся и пусть они сгруппированы в корреляционной таблице. Запишем систему так, чтобы она отражала данные корреляционной таблицы. Воспользуемся тождествами: $\sum x = n\bar{x}$ (следствие из $\bar{x} = \frac{\sum x}{n}$); $\sum y = n\bar{y}$ (следствие из $\bar{y} = \frac{\sum y}{n}$);

$\sum x^2 = n\overline{x^2}$ (следствие из $\overline{x^2} = \frac{\sum x^2}{n}$); $\sum xy = \sum n_{xy} xy$ (учтено, что пара чисел (x,y) наблюдались n_{xy} раз).

Подставив правые части тождеств в (1), сократив на n, получим:

$$\begin{cases} \rho_{yx}\left(n\overline{x^2}\right) + b\left(n\bar{x}\right) = \sum n_{xy} xy; \\ \rho_{yx}\left(\bar{x}\right) + b = \bar{y}. \end{cases}$$

Решив эту систему, найдём коэффициент регрессии Y на X: ρ_{yx}

$$\rho_{yx} = \frac{\sum n_{xy} xy - n\bar{x}\bar{y}}{n\left(\overline{x^2} - \left(\bar{x}\right)^2\right)}.$$

Параметр «b» найдём из второго уравнения системы (1):

$$b = \bar{y} - \rho_{yx}\bar{x}.$$

Подставив правую часть последнего равенства в уравнение $\bar{y}_x = \rho_{yx} x + b$, получим:

$\bar{y}_x - \bar{y} = \rho_{yx}\left(x - \bar{x}\right)$ - уравнение прямой линии регрессии Y на X.

Аналогично можно найти коэффициент регрессии X на Y:

$$\rho_{xy} = \frac{\sum n_{xy} xy - n\bar{x}\bar{y}}{n\left(\overline{y^2} - \left(\bar{y}\right)^2\right)}.$$

Учитывая что $\bar{x}_y = \rho_{xy} y + C$, где $C = \bar{x} - \rho_{xy}\bar{y}$, получим уравнение прямой линии регрессии X на Y: $\bar{x}_y - \bar{x} = \rho_{xy}\left(y - \bar{y}\right)$.

2.6 Выборочный коэффициент корреляции

В случае положительных коэффициентов регрессии ρ_{yx}, корреляцию называют положительной, в этом случае прямые регрессии образуют острые углы с соответствующими осями координат (рис.1). Прямая регрессии Y на X имеет коэффициент регрессии $\rho_{yx} = tg\alpha$, где α – острый угол, образованный прямой (1) с осью Ох. Прямая регрессии X на Y имеет коэффициент регрессии $\rho_{xy} = tg\beta$, где β – острый угол, образованный прямой (2) с осью Оу.

При отрицательных коэффициентах регрессии корреляцию называют отрицательной, а прямые регрессии образуют с соответствующими осями тупые углы.

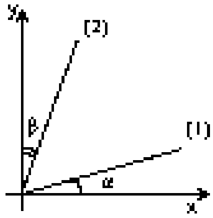

Рисунок 3 - Прямые регрессии: Y на X (1), X на Y (2)

О тесноте связи между признаками X и Y можно судить по величине угла, образованного прямыми регрессии. Чем меньше этот угол, тем теснее корреляционная зависимость между X и Y. При слиянии этих двух прямых в одну между X и Y имеет место не статистическая зависимость, а линейная *функциональная* зависимость.

В качестве меры тесноты линейной корреляционной зависимости принимается выборочный *коэффициент корреляции* :

$$r_B = \pm\sqrt{\rho_{yx}\rho_{xy}} = \pm\sqrt{tg\alpha \cdot tg\beta}$$

Свойства выборочного коэффициента корреляции:

1. Значения коэффициента корреляции изменяются на множестве $[-1;1] = \{r_B : -1 \le r_B \le 1\}$.
2. Чем больше $|r_B|$, тем теснее связь между изучаемыми количественными признаками.
3. Если $|r_B| = 1$, то корреляционная зависимость является функциональной.
4. Если $r_B = 0$, то между изучаемыми признаками нет линейной корреляционной зависимости, что не исключает существование какого-либо другого вида корреляционной зависимости (параболической, показательной и др.).

Если $|r_B|\sqrt{n-1} \ge 3$, то связь между случайными величинами *достаточно вероятна*. В случае если связь между случайными величинами маловероятна, нахождение уравнений линий регрессии не имеет смысла.

Рассмотрим некоторые формулы, используемые для вычисления коэффициентов регрессии и коэффициента корреляции.

$$r_B = \frac{\sum(x-\bar{x})(y-\bar{y})}{n\sigma_x\sigma_y};$$

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}; \quad \bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n};$$

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{\sum (x - \bar{x})^2}{n}}; \qquad \sigma_y = \sqrt{\frac{\sum (y - \bar{y})^2}{n}};$$

$$r_B = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x - \bar{x})^2 \sum (y - \bar{y})^2}};$$

$$\rho_{yx} = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sum (x - \bar{x})^2}; \qquad \rho_{xy} = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sum (y - \bar{y})^2}.$$

$$\rho_{yx} = \frac{\sum n_{xy} xy - n\bar{x}\bar{y}}{n\left(\overline{x^2} - (\bar{x})^2\right)}; \qquad \rho_{xy} = \frac{\sum n_{xy} xy - n\bar{x}\bar{y}}{n\left(\overline{y^2} - (\bar{y})^2\right)};$$

$$\rho_{yx} = \frac{\sum n_{xy} xy - n\bar{x}\bar{y}}{n\sigma_x^2}; \qquad \rho_{xy} = \frac{\sum n_{xy} xy - n\bar{x}\bar{y}}{n\left(\overline{y^2} - (\bar{y})^2\right)};$$

$$r_B = \frac{\sum n_{xy} xy - n\overline{x}\overline{y}}{n\sigma_x \sigma_y}$$

$$\rho_{yx} = r_B \frac{\sigma_y}{\sigma_x}; \qquad \rho_{xy} = r_B \frac{\sigma_x}{\sigma_y}.$$

3. Линейные оптимизационные модели с ограничениями

Термин «линейное программирование» впервые появился в 1951 г. в работах американских ученых (Дж. Данциг, Т. Купманс), а первые исследования по линейному программированию (основные задачи и приложения, критерий оптимальности, экономическая интерпретация, методы решения, геометрическая интерпретация результатов решения) были проведены в 1935-1939 годах в Ленинградском университете Л. В. Канторовичем.

Под линейным программированием понимается линейное планирование, т.е. получение оптимального плана - решения в задачах с линейной структурой.

Линейное программирование широко применяется в химической промышленности, управлении производственными процессами и запасами, в экономике и на транспорте.

3.1 Постановка задач линейной оптимизации с ограничениями

Общей задачей линейного программирования (ЗЛП) называют задачу:

Максимизировать или минимизировать функцию

$$f = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \qquad (1)$$

при ограничениях:

$$\begin{cases} \sum_{j+1}^{n} a_{ij} x_j \le b_i \, (i = \overline{1, m_1}), \\ \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \, (i = \overline{m_1 + 1, m_2}), \\ \sum_{j+1}^{n} a_{ij} x_j \ge b_i \, (i = \overline{m_2 + 1, m}) \\ x_j \ge 0 (j = \overline{1, n_1}), \\ x_j - произвольные (j = \overline{n_1 + 1, n}), \end{cases} \qquad (2)$$

где c_j, a_{ij}, b_i -заданные действительные числа, (1) - целевая функция, (2) - ограничения, $\vec{X} = (x_1, x_2, ..., x_n)$ - план задачи.

Экономическая интерпретация задачи ЛП состоит в следующем. Моделируемая система характеризуется наличием нескольких видов «производственной деятельности» $j(j = \overline{1, n})$, для осуществления которых требуются имеющиеся в ограниченном количестве различные ресурсы $b_i, i = \overline{1, m}.$ Расход i-го ресурса на единицу продукта j-го вида производственной деятельности равен a_{ij}. В свою очередь при таком потреблении результат j-го вида производственной деятельности для единицы соответствующего продукта (удельная стоимость или прибыль) характеризуется величиной c_j.

Цель построения модели состоит в определении *уровней* (объемов производства) каждого вида производственной деятельности x_j, при которых оптимизируется (максимизируется или минимизируется) общий результат производственной деятельности системы в целом без нарушения ограничений, накладываемых на использование ресурсов.

Оптимальным решением (или *оптимальным планом*) ЗЛП называется решение $\vec{X} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ системы ограничений (2), при котором линейная функция (1) принимает оптимальное значение.

Термины «решение» и «план» - синонимы, однако первый используется чаще, когда речь идет о формальной стороне задачи (ее математическом решении), а второй - о содержательной стороне (экономической интерпретации).

Симметричной формой записи ЗЛП называют задачу

$$\max f = \sum_{j+1}^{n} c_j x_j \tag{3}$$

$$\begin{cases} \sum_{j+1}^{n} a_{ij} x_j \le b_i (i = \overline{1,m}) \\ x_j \ge 0 (j = \overline{1,n}) \end{cases} \tag{4, 5}$$

или задачу

$$\min f = \sum_{j+1}^{n} c_j x_j \tag{3а}$$

$$\begin{cases} \sum_{j+1}^{n} a_{ij} x_j \ge b_i (i = \overline{1,m}) \\ x_j \ge 0 (j = \overline{1,n}) \end{cases} \tag{4а, 5а}$$

3.2 Решение СЛАУ в форме жордановых таблиц

3.2.1 Основные понятия

Общая форма записи системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) имеет вид:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n = b_m, \end{cases} \qquad (6)$$

где a_{ij} - постоянные коэффициенты,

m - число уравнений,

n - число неизвестных,

b_i - свободные члены,

x_j - неизвестные величины.

Совокупность значений неизвестны, которая обращает все уравнения системы в тождества, называется решением этой системы.

СЛАУ называется совместной, если она имеет хотя бы одно решение и несовместной в противном случае.

Совместная система может иметь одно решение или бесчисленное множество решений.

Теорема Кронекера - Капелли. Для совместности СЛАУ необходимо и достаточно чтобы ранг матрицы этой системы равнялся рангу ее расширенной матрицы.

Теорема. Совместная СЛАУ имеет единственной решение, если ранг ее матрицы равен числу неизвестных ($r= n$) и бесчисленное множество решений, если ранг ее матрицы меньше числа неизвестных ($r< n$).

В линейном программировании системы уравнений – ограничений имеют бесчисленные множества решений, из которых необходимо найти решения соответствующие оптимальному значению функции цели. Все частные решения СЛАУ (1) содержатся в *общем решении* этой системы:

$$\begin{cases} x_1 = b_1 - a_{1\,r+1}x_{r+1} - \ldots - a_{1n}x_n, \\ x_2 = b_2 - a_{2\,r+1}x_{r+1} - \ldots - a_{2n}x_n, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ x_r = b_r - a_{r\,r+1}x_{r+1} - \ldots - a_{rn}x_n, \end{cases} \qquad (7)$$

где $x_1 \ldots x_r$ - базисные переменные,

$x_{r+1} \ldots x_n$ - свободные переменные.

Если в общем решении (7) свободным переменным присвоить нулевые значения, то получится частное решение, называемое *базисным* $(b_1 \ldots b_r, 0, \ldots, 0)$.

Базисное решение, не содержащее отрицательных значений, называется опорным.

3.2.2 Жордановы таблицы

Запишем СЛАУ (7) в форме таблицы:

	1	$-x_{r+1} \ldots -x_s \ldots -x_n$
$x_1 =$	b_1	$a_{1\,r+1}\ldots\ldots a_{1s}\ldots\ldots a_{1n}$
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$
$x_k =$	b_k	$a_{k\,r+1}\ldots\ldots a_{ks}\ldots\ldots a_{kn}$
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$
$x_r =$	b_r	$a_{r\,r+1}\ldots\ldots a_{rs}\ldots\ldots a_{rn}$

Такую таблицу обычно называют жордановой таблицей (модифицированной жордановой таблицей). Первый столбец является заглавным столбцом таблицы, а первая строка – заглавной строкой. Свободные переменные стоят со знаком минус. Во втором столбце (под единицей) располагают свободные члены уравнений.

В качестве базисных можно взять другие переменные. Для перехода к другому базису, в котором меняются местами одна базисная (x_k) и одна свободная (x_s) переменные необходимо выполнить один пересчет таблицы (один шаг жордановых исключений). При выполнении пересчета таблицы строку номер k называют разрешающей строкой, столбец номер s называют разрешающим столбцом, а элемент a_{ks} - разрешающим элементом.

	1	$-x_{r+1} \ldots -x_k \ldots -x_n$
$x_1 =$	b'_1	$a'_{1\,r+1}\ldots\ldots a'_{1s}\ldots\ldots a'_{1n}$
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$
$x_s =$	b'_k	$a'_{k\,r+1}\ldots\ldots a'_{ks}\ldots\ldots a'_{kn}$
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$
$x_r =$	b'_r	$a'_{r\,r+1}\ldots\ldots a'_{rs}\ldots\ldots a'_{rn}$

Новые коэффициенты обозначены символом «штрих», их значения вычисляются по *правилам пересчета таблиц*:

- разрешающий элемент заменить его обратной величиной;
- остальные элементы разрешающей строки разделить на разрешающий элемент;
- остальные элементы разрешающего столбца разделить на разрешающий элемент и изменить знак на противоположный;
- все остальные элементы таблицы вычислить по правилу прямоугольников.

Правило прямоугольников.

Умозрительно выделить прямоугольник, главную диагональ которого образуют пересчитываемый элемент и разрешающий элемент.

Рассмотрим фрагмент таблицы.

$$\begin{array}{l}
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.. \\
\ldots a_{ij} \quad \ldots\ldots\ldots \quad a_{is} \ldots \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
\ldots a_{kj} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad a_{ks} \ldots \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots..
\end{array}$$

a_{ij} - пересчитываемый элемент, a_{ks} - разрешающий элемент.

Элементы a_{ij}, a_{ks} образуют главную диагональ, элементы a_{kj}, a_{ks} образуют побочную диагональ.

Новое значение пересчитываемого элемента равно разности произведений элементов главной и побочной диагоналей, деленной на разрешающий элемент:

$$a'_{ij} = \frac{a_{ij} \cdot a_{ks} - a_{kj} \cdot a_{is}}{a_{ks}}.$$

3.2.3 Алгоритм решения СЛАУ в форме жордановых таблиц

Рассмотрим исходную СЛАУ в общей форме:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n = b_m, \end{cases}$$

Запишем эту систему в виде нуль - равенств.

$$\begin{cases} 0 = b_1 + a_{11}(-x_1) + a_{12}(-x_2) + \ldots + a_{1n}(-x_n), \\ 0 = b_2 + a_{21}(-x_1) + a_{22}(-x_2) + \ldots + a_{2n}(-x_n), \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ 0 = b_m + a_{m1}(-x_1) + a_{m2}(-x_2) + \ldots + a_{mn}(-x_n). \end{cases}$$

Внесем эту систему в жорданову таблицу:

	1	$-x_1 \ldots -x_s \ldots -x_n$
$0 =$	b_1	$a_{11} \ldots a_{1s} \ldots a_{1n}$
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots\ldots\ldots\ldots$
$0 =$	b_k	$a_{k1} \ldots a_{ks} \ldots a_{kn}$
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots\ldots\ldots\ldots$
$0 =$	b_r	$a_{r1} \ldots a_{rs} \ldots a_{rn}$

Здесь на месте базисных переменных пока стоят нули.

I. Уравнения исходной системы записать в жорданову таблицу в виде нуль - равенств (нуль - строк).

II. Выполнить один шаг жордановых исключений.

1) Принять за разрешающую строку любое нуль-равенство, а за разрешающий столбец любой столбец ($a_{ks} \neq 0$).
2) В новой таблице поменять местами заглавные элементы разрешающей строки и разрешающего столбца (0 и x_s или x_k и x_s).
3) Выполнить пересчет таблицы. Правила пересчета приведены выше.
4) Вычеркнуть нуль-столбец (элементы разрешающегося столбца можно вообще не вычислять).

III. Проанализировать новую таблицу.

1) Если имеется нуль-строка со всеми нулевыми элементами, кроме свободного члена, то СЛАУ несовместна.
2) Если есть нуль-строки полностью состоящие из нулей, то их надо вычеркнуть.

3) Если нуль-равенства еще имеются, то необходимо вернуться на пункт II.

IV. После ряда шагов жордановых исключений в таблице будет получено общее решение СЛАУ.

	1	$-x_{r+1} \ldots -x_k \ldots -x_n$
$x_1 =$	b_1'	$a_{1\,r+1}' \ldots a_{1s}' \ldots a_{1n}'$
…	…	………………
$x_s =$	b_k'	$a_{k\,r+1}' \ldots a_{ks}' \ldots a_{kn}'$
…	…	………………
$x_r =$	b_r'	$a_{r\,r+1}' \ldots a_{rs}' \ldots a_{rn}'$

Отметим, что если $r = n$, то в таблице останется только столбец свободных членов. В этом случае СЛАУ имеет единственное решение.

3.2.4 Примеры решения типовых задач

Пример 1. Решить СЛАУ.

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 4x_3 = 15, \\ 2x_1 + x_2 + x_3 = 8, \\ 3x_1 - x_2 \qquad = 5. \end{cases}$$

Решение.

Составим жорданову таблицу.

	1	$-x_1$	$-x_2$	$-x_3$
0 =	15	2	-1	4
0 =	8	2	1	**1**
0 =	5	3	-1	0

Выберем разрешающий элемент. Он выделен жирным шрифтом и подчеркнут.

После пересчета элементов таблица принимает вид:

	1	$-x_1$	$-x_2$	-0
0 =	-17	-6	-5	-4
$x_3 =$	8	2	1	**1**
0 =	5	3	-1	0

Нуль - столбец можно вычеркнуть.

	1	$-x_1$	$-x_2$
0 =	-17	-6	-5
$x_3 =$	8	2	1
0 =	5	3	**-1**

Выберем разрешающий элемент.

После пересчета элементов таблица принимает вид:

	1	$-x_1$
0 =	-42	-21
$x_3 =$	13	5
$x_2 =$	-5	-3

Разделим все элементы нуль - строки на -21.

	1	$-x_1$
0 =	2	**1**
$x_3 =$	13	5
$x_2 =$	-5	-3

Выберем разрешающий элемент.

После пересчета элементов таблица принимает вид:

	1
$x_1 =$	2
$x_3 =$	3
$x_2 =$	1

Ответ: (2; 1; 3).

Пример 2. Решить СЛАУ.

$$\begin{cases} 2x_1 - 3x_2 - x_3 = 2, \\ -x_1 - x_2 + 2x_3 = 1, \\ x_1 - 4x_2 + \ x_3 = 3. \end{cases}$$

Решение.

Составим жорданову таблицу.

	1	$-x_1$	$-x_2$	$-x_3$
0 =	2	2	-3	-1
0 =	1	-1	-1	2
0 =	3	**1**	-4	1

Выберем разрешающий элемент.

После пересчета элементов таблица принимает вид:

	1	$-x_2$	$-x_3$
0 =	-4	**5**	-3
0 =	4	-5	3
$x_1 =$	3	-4	1

Выберем разрешающий элемент.

После пересчета элементов таблица принимает вид:

	1	$-x_3$
$x_2 =$	-4/5	-3/5
0 =	0	0
$x_1 =$	-1/5	-7/5

Найдено общее решение СЛАУ в базисе (x_1 ; x_2):

$$\begin{cases} x_1 = -\frac{1}{5} + \frac{7}{5}x_3; \\ x_2 = -\frac{4}{5} + \frac{3}{5}x_3. \end{cases}$$

3. 3 Базисные и опорные решения СЛАУ

3.3.1 Основные понятия

Для отыскания всех базисных решений необходимо:

1) Получить общее решение СЛАУ в любом базисе и выписать первое базисное решение.
2) Выполняя шаг за шагом ряд жордановых исключений переходить от одного базиса к другому и выписывать соответствующие базисные решения.

Чтобы найти все опорные решения СЛАУ можно получить все базисные решения и выбрать из них решения, не содержащие отрицательных элементов. Оказывается, что если наложить определенные условия на выбор разрешающего элемента, то можно найти опорные решения без полного перебора базисных решений, то есть можно переходить от одного опорного решения к другому опорному решению.

Симплексным отношением называется отношение элемента столбца свободных членов к соответствующему элементу разрешающего столбца. В дальнейшем в столбце свободных членов не будет отрицательных элементов и симплексное отношение будет вычисляться только для положительных элементов разрешающего столбца.

3.3.2 Алгоритм отыскания опорных решений СЛАУ

I. Уравнения исходной системы записать в жорданову таблицу в виде нуль-равенств с *неотрицательными свободными членами*.

II. Выполнить один шаг жордановых исключений.
  1) Принять за разрешающий столбец - столбец, содержащий хотя бы один положительный элемент (не считая свободного члена). Выбрать разрешающую строку (разрешающий элемент) по минимальному симплексному отношению.
  2) В новой таблице поменять местами заглавные элементы разрешающей строки и разрешающего столбца (0 и x_s или x_k и x_s).
  3) Выполнить пересчет таблицы. Правила пересчета приведены выше.
  4) Если разрешающая строка содержала нуль-равенство, то нуль-столбец нужно вычеркнуть (элементы разрешающегося столбца можно вообще не вычислять).

III. Проанализировать новую таблицу.
  1) Если имеется нуль-строка со всеми нулевыми элементами, кроме свободного члена, то СЛАУ несовместна.
  2) Если есть нуль-строки полностью состоящие из нулей, то их надо вычеркнуть.
  3) Если хотя бы один свободный член отрицательный, то допущена ошибка при выборе разрешающего элемента. Необходимо ее устранить.
  4) Если имеется нуль-строка в которой все элементы кроме свободного члена меньше либо равны нулю, то СЛАУ *опорных решений не имеет*.
  5) Если нуль-равенства еще имеются, то необходимо вернуться на пункт II.

IV. После ряда шагов жордановых исключений в таблице будет получено общее решение СЛАУ и соответствующее ему первое опорное решение. Для отыскания других опорных решений необходимо вернуться на пункт II.

3.3.3 Примеры решения типовых задач

Пример 1. В предыдущем примере найдено общее решение СЛАУ в базисе (x_1 ; x_2):

$$\begin{cases} x_1 = -\frac{1}{5} + \frac{7}{5}x_3; \\ x_2 = -\frac{4}{5} + \frac{3}{5}x_3. \end{cases}$$

Выпишем соответствующее ему базисное решение – (-1/5; -4/5; 0).

Найдем базисное решение СЛАУ в базисе (x_2 ; x_3).

	1	$-x_3$
$x_2 =$	-4/5	-3/5
$x_1 =$	-1/5	**-7/5**

После пересчета элементов таблица принимает вид:

	1	$-x_1$
$x_2 =$	-5/7	-3/7
$x_3 =$	1/7	-5/7

Базисное решение найдено (0; -5/7; 1/7)**.**

Пример 2. Найти три опорных решения СЛАУ

$$\begin{cases} x_1 \quad + 2x_4 - 2x_5 = 4; \\ x_2 \quad + 3x_5 = 2; \\ x_3 - x_4 + x_5 = 3. \end{cases}$$

Решение.

Составим жорданову таблицу.

	1	$-x_1$	$-x_2$	$-x_3$	$-x_4$	$-x_5$
0 =	4	**1**	0	0	2	-2
0 =	2	0	**1**	0	0	3
0 =	3	0	0	**1**	-1	1

Здесь можно одновременно выполнить три шага жордановых исключений. Выберем три разрешающих элемента.

После пересчета элементов таблица принимает вид

	1	$-x_4$	$-x_5$
$x_1 =$	4	2	-2
$x_2 =$	2	0	3
$x_3 =$	3	-1	1

Выпишем первое опорное решение (4; 2; 3; 0; 0).

Для отыскания следующего опорного решения выберем новый разрешающий элемент по минимальному симплексному отношению.

	1	$-x_4$	$-x_5$
$x_1 =$	4	**2**	-2
$x_2 =$	2	0	3
$x_3 =$	3	-1	1

После пересчета элементов таблица принимает вид:

	1	$-x_1$	$-x_5$
$x_4 =$	2	1/2	-1
$x_2 =$	2	0	**3**
$x_3 =$	5	1/2	0

Выпишем второе опорное решение (0; 2; 5; 2; 0).

Повторим процедура выбора разрешающего элемента и пересчета таблицы.

	1	$-x_1$	$-x_2$
$x_4 =$	8/3	1/2	1/3
$x_5 =$	2/3	0	1/3
$x_3 =$	5	1/2	0

Выпишем третье опорное решение (0; 0; 5; 8/3; 2/3).

3.4 Графическое решение задач линейного программирования

3.4.1 Геометрическая интерпретация

Геометрическая интерпретация экономических задач дает возможность наглядно представить их структуру и выявить особенности. Графически можно решить только задачи линейного программирования (ЗЛП) с двумя переменными.

Случай двух переменных проясняет свойства ЗЛП, приводит к идее ее решения, делает решения геометрически наглядными.

Пусть дана задача:

$$f=c_1x_1+c_2x_2 \rightarrow max \tag{8}$$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \le b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \le b_2 \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 \le b_m \end{cases} \tag{9}$$

$$x_1 \ge 0, x_2 \ge 0 \tag{10}$$

Рассмотрим геометрическую интерпретацию элементов этой задачи. Введем на плоскости декартову прямоугольную систему координат x_1Ox_2 и сопоставим каждой паре чисел (x_1,x_2) точку плоскости с координатами x_1 и x_2. Выясним сначала, что представляет собой множество точек, соответствующих допустимым решениям данной задачи.

Рассмотрим одно линейное неравенство $a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \le b_1$.
Оно определяет на плоскости одну из двух полуплоскостей, на которые прямая $a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1$ разбивает плоскость. Найдем, с какой стороны от прямой лежит полуплоскость, точки которой удовлетворяют заданному неравенству. Это можно сделать путем подстановки координат одной точки в неравенство. Если координаты точки удовлетворяют неравенству, то эта точка лежит в полуплоскости, соответствующей решению данного неравенства. Штриховку прямой надо произвести так, чтобы она «закрывала» выбранную точку. В противном случае неравенству соответствует другая плоскость.

Каждое из ограничений (9), (10) задает на плоскости x_1Ox_2 некоторую полуплоскость. Допустимое множество планов ЗЛП геометрически изображается пересечением (общей частью) полуплоскостей, определяемых отдельными ограничениями. Полуплоскость - выпуклое множество. Множество называется выпуклым, если ему вместе с двумя произвольными точками принадлежит и прямолинейный отрезок, их соединяющий. Пересечение любого числа выпуклых множеств является выпуклым множеством. Таким образом, область допустимых планов задачи (8) - (10) есть выпуклое множество. На рисунке 6 представлены некоторые ситуации, когда область допустимых решений ЗЛП - выпуклый многоугольник (а), неограниченная выпуклая многоугольная область (б), единственная точка (в), прямая линия (г), луч (д), отрезок (е), пустое множество (ж).

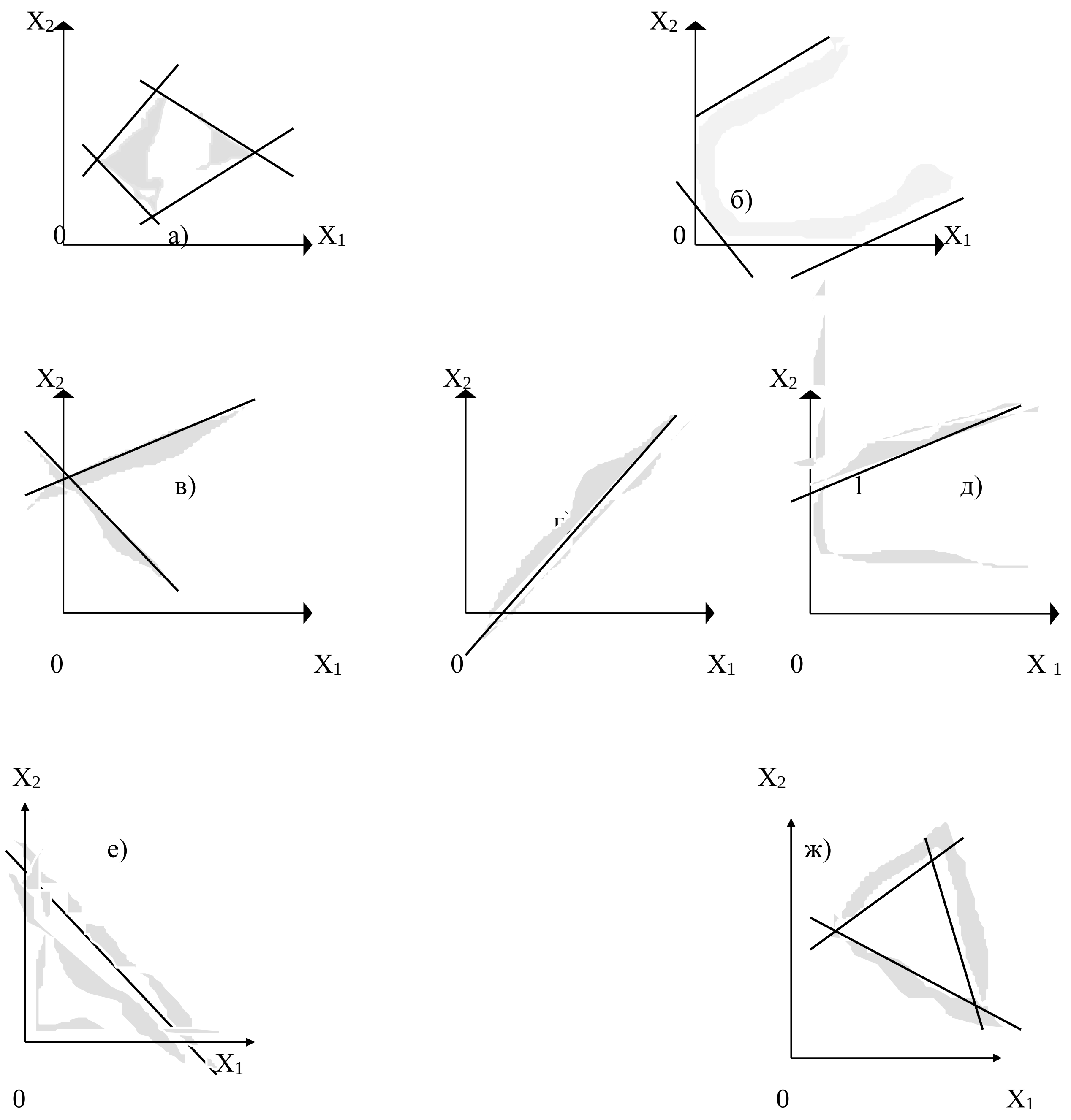

Рисунок 6

Перейдем к геометрической интерпретации *целевой функции*. Пусть область допустимых решений ЗЛП многоугольник $AA_2A_3A_4A_5A_6$ (рисунок 2).

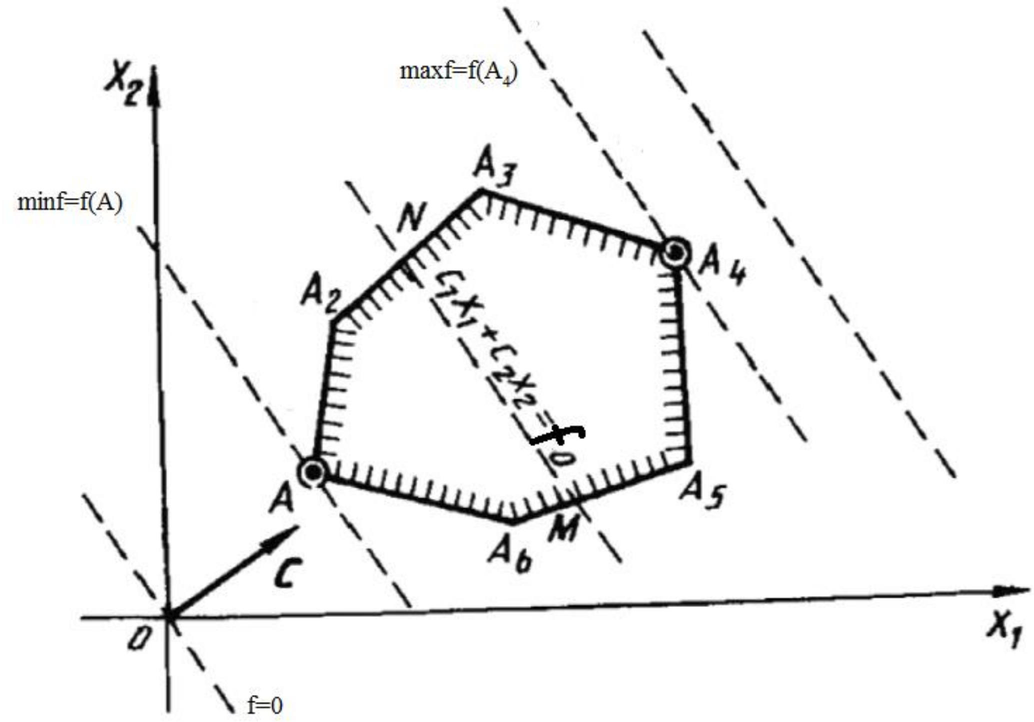

Рисунок 2

Выберем произвольное значение целевой функции $f=f_0$, например $f_0 =0$. Получим $c_1x_1+c_2x_2=f_0$. Это уравнение прямой линии MN. В точках прямой MN целевая функция сохраняет одно и то же постоянное значение f_0.

Считая f_0 параметром, получим семейство параллельных прямых, называемых линиями уровня целевой функции. Нас интересуют те точки области допустимых решений, которые принадлежат линии уровня с наибольшим (наименьшим) значением f_0 по сравнению с его значениями для всех других линий уровня, пересекающихся с областью допустимых решений.

Рассмотри частные производные функции цели по переменным x_1 и x_2 , то есть по направлению осей координат:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = c_1 \qquad (11)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} = c_2 \qquad (12)$$

Каждая частная производная функции показывает скорость ее возрастания вдоль соответствующей оси. Следовательно, c_1 и c_2 - скорости возрастания вдоль осей Ox_1 и Ox_2. Вектор $\bar{c} = (c_1, c_2)$ является градиентом функции. Он показывает направление наискорейшего возрастания целевой функции, вектор $-\bar{c} = (-c_1, -c_2)$ указывает направление наискорейшего убывания целевой функции. Вектор $\bar{c} = (c_1, c_2)$ перпендикулярен к прямым семейства: $c_1 x_1 + c_2 x_2 = f$.

3.4.2 Алгоритм графического решения ЗЛП

Из геометрической интерпретации элементов ЗЛП вытекает следующий алгоритм ее графического решения.

1. С учетом системы ограничений строим область допустимых планов ЗЛП.
2. Строим вектор $\bar{c} = (c_1, c_2)$, соответствующий наискорейшему возрастанию целевой функции или вектор $-\bar{c} = (-c_1, -c_2)$, соответствующий наискорейшему убыванию целевой функции.
3. Проводим произвольную линию уровня $f = f_0$, перпендикулярную к вектору $\bar{c}$ так, чтобы она пересеклась с областью допустимых решений.
4. При отыскания максимума функции перемещаем линю уровня $f = f_0$ в направлении вектора $\bar{c}$ так, чтобы она касалась области допустимых решений в ее крайнем положении (крайней точки) (на рисунке 2 точка С). В случае отыскания минимума функции линию уровня $f = f_0$ перемещают в направлении вектора -$\bar{c}$ (на рис. 2 - точка Е).
5. Определяем оптимальный план $x^* = (x_1^*, x_2^*)$ и экстремальное значение целевой функции $f^* = f(C)$. Точка C лежит на пересечении двух прямых. Ее координаты модно найти графически или решив систему, составленную из уравнений прямых пресекающихся в этой точке.

3.4.3 Пример решения типовой задачи

Предприятию необходимо изготовить два вида продукции А и В, с использованием трех видов ресурсов R_1, R_2, R_3 количество которых ограничено. Исходные данные задачи представлены в таблице:

Вид ресурсов	Количество ресурсов, идущих на изготовление единицы продукции		Запасы ресурсов
	А	В	
R_1	6	6	36
R_2	4	2	20
R_3	4	8	40
Доходы от реализации продукции	12	15	

Требуется составить план выпуска продукции, который дает максимальный доход.

Решение.

Обозначим через x_1 и x_2 количество единиц продукции видов А и В, планируемых к выпуску.

Известно, что доход от реализации единицы продукции А составляет 12 усл. ед. и количество этой продукции - x_1. Следовательно, доход от реализации всей продукции А составит $12x_1$ усл. ед. Аналогично, доход от реализации всей продукции В составит $15x_2$ усл. ед. Учитывая, что доход от реализации продукции должен быть максимальным, целевая функция задачи будет иметь вид:

$$f = 12x_1 + 15x_2 \to \max$$

Известно также, что имеющиеся на предприятии ресурсы ограничены. Это обстоятельство в свою очередь необходимо отразить в модели. Предприятие производит продукцию, используя три вида ресурсов. Естественно, что фактический расход никакого вида ресурса не должен превышать запасов соответствующего вида ресурсов на предприятии. Поскольку расход каждого вида ресурсов на единицу каждого вида продукции и запасы ресурсов известны, это обстоятельство отражается в следующих ограничениях:

$$6x_1 + 6x_2 \le 36$$
$$4x_1 + 2x_2 \le 20$$
$$4x_1 + 8x_2 \le 40$$

Смысл первого ограничения состоит в том, что фактический расход ресурса R_1 на производство продукции А и В, равный $6x_1$+$6x_2$ (здесь $6x_1$ - количество единиц ресурса R_1, идущего на изготовление x_1 единиц продукции А; $6x_2$ - количество единиц ресурса R_1, идущее на изготовление x_2 единиц продукции В) не должен превышать запаса этого ресурса на предприятии, равного 36 ед. Аналогичный смысл имеют 2-е и 3-е ограничения только для ресурсов R_2 и R_3 соответственно.

Количество продукции, выпускаемое предприятием, должно быть величиной положительной или равной нулю (если предприятие определенный вид продукции не производит). Следовательно, в модели должны присутствовать ограничения неотрицательности переменных:

$$x_1 \ge 0, x_2 \ge 0.$$

Таким образом, построена математическая модель нашей задачи как задачи линейного программирования:

$$f = 12x_1 + 15x_2 \to \max$$
$$\begin{cases} 6x_1 + 6x_2 \le 36 \\ 4x_1 + 2x_2 \le 20 \\ 4x_1 + 8x_2 \le 40 \end{cases}$$
$$x_1 \ge 0, x_2 \ge 0$$

Начнем решение задачи с построения области допустимых решений (рисунок 8).

В первую очередь отобразим в прямоугольной системе координат условия неотрицательности переменных. В двумерном пространстве уравнению соответствует прямая линия, а неравенству - полуплоскость, лежащая по одну сторону от прямой. Прямые x_1=0 и x_2=0 совпадают с осями координат. Полуплоскости x_1>0,x_2>0 лежат соответственно справа от оси Ox_2 и выше оси Ox_1. Множество точек, удовлетворяющих одновременно неравенствам $x_1 \ge 0, x_2 \ge 0$ представляют собой пересечение построенных полуплоскостей вместе с граничными прямыми и совпадают с точками первой четверти.

Теперь рассмотрим ограничения задачи. Построим по порядку прямые:

`

$6x_1+6x_2=36$	или	$x_1+x_2=6$	(1)
$4x_1+2x_2=20$	или	$2x_2+x_2=10$	(2)
$4x_1+8x_2=40$	или	$x_1+2x_2=10$	(3)

и определяем, с какой стороны от этих прямых лежат полуплоскости, точки которых удовлетворяют строгим неравенствам:

$$6x_1+6x_2<36$$
$$4x_1+2x_2<20$$
$$4x_1+8x_2<40$$

Для определения полуплоскости решений первого неравенства возьмем произвольную точку плоскости, не лежащую на прямой $6x_1+6x_2=36$, например (0;0), и подставим ее координаты в неравенство $6\cdot 0+6\cdot 0<36$.
В результате подстановки получили верное числовое неравенство 0< 36, и это означает, что начало координат лежит в полуплоскости решений первого неравенства. Сторона, в которой располагается полуплоскость от прямой, указывается штриховой.

Аналогично строим полуплоскость решений остальных неравенств.

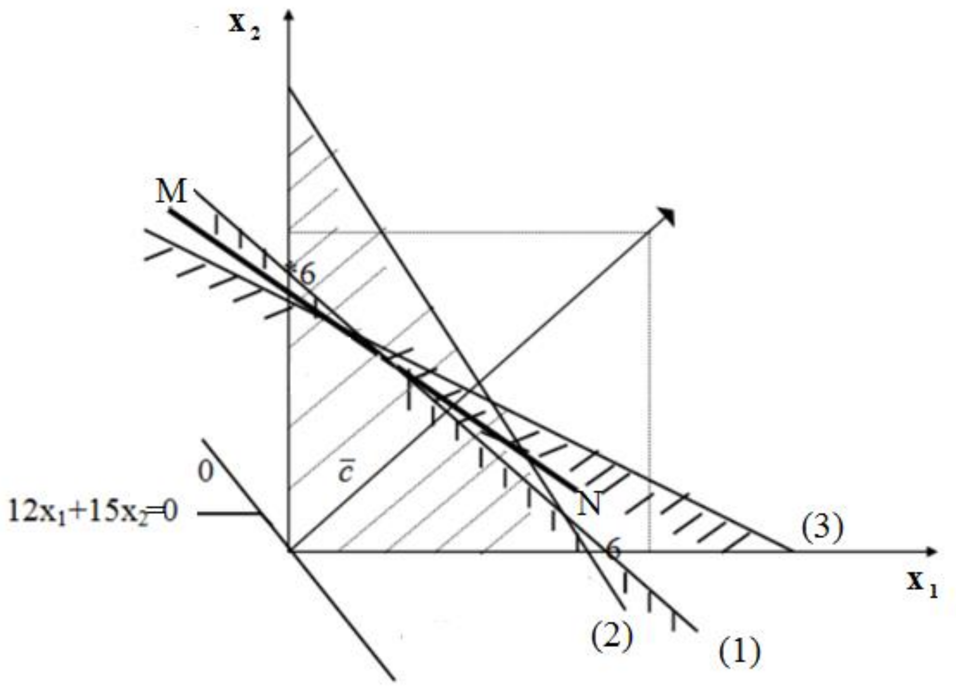

Рисунок 8

Заштрихованная часть плоскости и представляет собой искомый многоугольник допустимых решений задачи (рисунок 8)

Теперь нужно среди точек построенного многоугольника найти такую точку, в которой целевая функция $f=12x_1+15x_2$ достигает максимального значения. Для этого построим прямую линию, заданную уравнением $12x_1+15x_2=0$, которая является линией нулевого уровня функции f.

Направление возрастания линейной функции $f=12x_1+15x_2$ указывает вектор $\bar{c}$ с началом в точке (0;0) и концом в точке $M_1(12,15)$, координаты которой равны коэффициентам при соответствующих переменных функции f.

Для нахождения оптимального плана нужно «передвигать» линию нулевого уровня f параллельно самой себе в направлении вектора $\bar{c}$ до точки ее «последней встречи» с многоугольником, которая и является оптимальным планом задачи. В нашем случае это вершина B многоугольника OABCD - точка пересечения прямых (а) и (в). Координаты (x_1^*, x_2^*) точки найдем, решив систему уравнений.

$$\begin{cases} 6x_1 + 6x_2 = 36 \\ 4x_1 + 8x_2 = 40 \end{cases} \qquad \text{откуда } x_1^*=2,\ x_2^*=4.$$

Найдем соответствующее значение целевой функции:

$$f = f(x^*) = f(2;4) = 12 \cdot 2 + 15 \cdot 4 = 84 \text{ усл. ед.}$$

Итак, для обеспечения максимального дохода от реализации готовой продукции предприятию необходимо выпустить 2 ед. продукции вида А и 4 ед. продукции вида В. При таком плане доход от реализации составит 84 усл. ед.

3.5 Симплексный метод решения задач линейного программирования

3.5.1 Укрупненный алгоритм симплексного метода

Основная теорема линейного программирования.
Линейная функция, определенная на выпуклом l – мерном многограннике, достигает своего оптимального значения в одной или несколько вершинах этого многогранника.

Если линейная функция достигает оптимального значения в нескольких вершинах, то она имеет это оптимальное значение и в любой точке, являющейся выпуклой линейной комбинацией этих вершин.

Приведенная теорема указывает один из методов решения ЗЛП:

1. найти все опорные планы ЗЛВ;
2. вычислить значения функции цели при каждом опорном плане;
3. выбрать требуемое оптимальное значение и соответствующие опорные планы.

При больших размерностях ЗЛП полный перебор опорных планов практически не возможен. Поэтому обычно применяются методы упорядоченного перебора опорных планов. Рассмотрим самый распространенный универсальный метод решения ЗЛП. Этот метод называется симплексным методом или симплекс – методом.

Симплексный метод состоит в порядочном переходе от одного опорного плана ЗЛП к другому. Переходы осуществляются так, чтобы функция цели всякий раз возрастала. Второе название этого метода – метод последовательного улучшения плана.

Для решения ЗЛП симплексным методом необходимо:

1. привести ЗЛП к канонической форме записи;
2. составить симплексную таблицу для решаемой ЗЛП;
3. найти начальный опорный план ЗЛП;
4. найти оптимальный опорный план ЗЛП.

Для решения ЗЛП используются симплексные таблицы. Эти таблицы отличаются от жордановых таблиц только наличием строки содержащей функцию цели.

3.5.2 Алгоритм отыскания начального опорного плана

Опорный план ЗЛП представляет собой опорное решение системы уравнений – ограничений этой ЗЛП, поэтому алгоритм нахождения начального опорного плана ЗЛП очень похож на алгоритм отыскания опорных решения СЛАУ. Перед отысканием начального опорного плана ЗЛП должна быть приведена к канонической форме записи (система ограничений должна быть системой уравнений).

I. Уравнения системы ограничений записать в симплексную таблицу в виде нуль-равенств с *неотрицательными свободными членами*.
II. Выполнить одно преобразование таблицы.

1) Принять за разрешающий столбец - столбец, содержащий хотя бы один положительный элемент, не считая свободного члена (f – строка не учитывается).
2) Выбрать разрешающую строку (разрешающий элемент) по минимальному симплексному отношению.
3) В новой таблице поменять местами заглавные элементы разрешающей строки и разрешающего столбца (0 и x_s или x_k и x_s).
4) Выполнить пересчет таблицы, включая f – строку. Правила пересчета приведены выше.

5) Если разрешающая строка содержала нуль-равенство, то нуль-столбец нужно вычеркнуть (элементы разрешающегося столбца можно вообще не вычислять).

III. Проанализировать новую симплексную таблицу.

1) Если имеется нуль-строка со всеми нулевыми элементами, кроме свободного члена, то ЗЛП не имеет допустимых планов.
2) Если есть нуль-строки полностью состоящие из нулей, то их надо вычеркнуть.
3) Если хотя бы один свободный член отрицательный, то допущена ошибка при выборе разрешающего элемента. Необходимо ее устранить.
4) Если имеется нуль-строка в которой все элементы кроме свободного члена меньше либо равны нулю, то ЗЛП *не имеет опорных планов*.
5) Если нуль-равенства еще имеются, то необходимо вернуться на пункт II.

IV. После ряда преобразований симплексной таблицы в ней будет получен первый опорный план ЗЛП и соответствующая ему функция цели.

3.5.3 Алгоритм отыскания оптимального опорного плана

Перед применением данного алгоритма необходимо найти начальный опорный план и записать его в симплексную таблицу.

I. Если f- строке нет отрицательных элементов, то найденный опорный план оптимален.

1) Ели при этом в f – строке нет нулевых элементов, то оптимальный план единственен. Необходимо выписать ответ.
2) Если среди элементов f - строки имеется l нулевых элементов, необходимо выписать найденный опорный план и выполнить l симплексных преобразований таблицы, то есть получить еще l оптимальных опорных планов. При этом необходимо принимать за разрешающий столбец последовательно все столбцы нулевым элементам f – строки. В этом случае ЗЛП имеет бесчисленное множество оптимальных планов, которые определяются в выпуклой линейной комбинации всех найденных оптимальных *опорных* планов.

II. Если f - строке есть хотя бы один отрицательный элемент, которому соответствует столбец не положительных элементов, то функции цели не ограничена сверху и ЗЛП решений не имеет.

III. Если в f – строке есть хотя бы один отрицательный элемент и в соответствующем ему столбце есть хотя бы один положительный элемент, то найденный опорный план не оптимален. Необходимо перейти к другому опорному плану.

1) Принять за разрешающий столбец, столбец соответствующий наибольшему по модулю отрицательному элементу f – строки.
2) Выбрать разрешающую строку по минимальному симплексному отношению.
3) Выполнить одно симплексное преобразование таблицы.
4) Перейти на пункт I данного алгоритма.

3.5.4 Пример решения типовой задачи

Решить задачу линейного программирования:

$$f = -2x_1 + x_2 - x_3 - x_4 - 1 \qquad (min);$$

$$\begin{cases} -x_1 - x_2 + x_3 + x_4 = 4; \\ -x_1 + 2x_2 + x_3 + x_5 = 7; \\ 2x_1 - x_2 + x_4 + x_5 = 7; \end{cases}$$

$$x_j \geq 0.$$

Решение.

Для использования стандартного алгоритма будем искать максимум функции $F = -f$. $F = 2x_1 - x_2 + x_3 + x_4 + 1$ (*max*).

Составим симплексную таблицу.

	1	$-x_1$	$-x_2$	$-x_3$	$-x_4$	$-x_5$
0 =	4	-1	-1	**<u>1</u>**	1	0
0 =	7	-1	2	1	0	1
0 =	7	2	-1	0	1	1
F=	1	-2	1	-1	-1	0

Выберем разрешающий элемент по минимальному симплексному отношению. В качестве разрешающего столбца удобно взять столбец x_3.

После пересчета таблица принимает вид:

	1	$-x_1$	$-x_2$	$-x_4$	$-x_5$
$x_3 =$	4	-1	-1	1	0
0 =	3	0	3	-1	**<u>1</u>**
0 =	7	2	-1	1	1
F=	5	-3	0	0	0

Выберем разрешающий элемент по минимальному симплексному отношению. В качестве разрешающего столбца удобно взять столбец x_5.

После пересчета таблица принимает вид:

	1	$-x_1$	$-x_2$	$-x_4$
$x_3 =$	4	-1	-1	1
$x_5 =$	3	0	3	-1
$0 =$	4	2	-4	<u>**2**</u>
$F=$	5	-3	0	0

Выберем разрешающий элемент по минимальному симплексному отношению. В качестве разрешающего столбца удобно взять столбец x_4.

После пересчета таблица принимает вид:

	1	$-x_1$	$-x_2$
$x_3 =$	2	-2	1
$x_5 =$	5	1	1
$x_4 =$	2	<u>**1**</u>	-2
$F=$	5	-3	0

Начальный опорный план найден (0; 0; 2; 2; 5). Этот план не является оптимальным, так как в F строке имеется отрицательный элемент в столбце x_1.

Для отыскания оптимального опорного плана выберем в качестве разрешающего столбца, столбец в котором содержится отрицательный элемент F строки, то есть столбец x_1. Выберем разрешающий элемент по минимальному симплексному отношению. После пересчета таблица принимает вид:

	1	$-x_4$	$-x_2$
$x_3 =$	6	2	-3
$x_5 =$	3	-1	<u>**3**</u>
$x_1 =$	2	1	-2
$F=$	11	3	-6

Найден новый опорный план (2; 0; 6; 0; 3). Этот план не является оптимальным, так как в F строке имеется отрицательный элемент в столбце x_2.

Для продолжения процесса выберем в качестве разрешающего столбца, столбец в котором содержится отрицательный элемент F строки, то есть столбец x_2. Выберем разрешающий элемент по минимальному симплексному отношению. После пересчета таблица принимает вид:

	1	$-x_4$ $-x_5$
$x_3 =$	9	
$x_2 =$	1	
$x_1 =$	4	
$F=$	17	1 2

В F строке нет отрицательных элементов. Значит, оптимальный опорный план найден (4; 1; 9; 0; 0).

Максимальное значение функции F равно 17.

Изначально требовалось найти минимум функции $f=-F$, поэтому $f_{\min}=-17$.

3.6. Модель оптимального распределения ресурсов. Транспортная модель

Проблемы, возникающие при рациональной организации перевозок различных грузов, имеют исключительное хозяйственное значение. Математические задачи, к которым можно свести указанные проблемы, называют транспортными. Изучение методов решения транспортных задач (ТЗ) важно еще и потому, что большое количество других прикладных задач можно описать математической моделью, сходной с моделью задачи о перевозках, а, следовательно, и решать по аналогичным алгоритмам. При этом качество плана транспортной задачи можно оценивать по различным критериям. Рассмотрим здесь в качестве такого критерия суммарную стоимость перевозок.

Рассмотрим *постановку транспортной задачи* по критерию стоимости. Пусть некоторый однородный товар (кирпич, пиломатериалы и т.п.) хранится на m складах A_i ($i=1\div m$) и требуется в n пунктах B_j ($j=1\div n$). Известны следующие параметры: a_i – запас товара на i-м складе; b_j – потребность в товаре в j-м пункте; c_{ij} – стоимость перевозки единицы товара из i-го склада в j-й пункт. Предполагается, что стоимость перевозки произвольного количества товара пропорциональна этому количеству. Требуется составить план перевозок товара так, чтобы удовлетворить потребности при имеющихся запасах, обеспечив при этом наименьшую суммарную стоимость перевозок.

Приведённые выше условия – экономическая постановка задачи. Обозначим через x_{ij} количество товара, перевозимого из i-го склада в j-й пункт. Стоимость перевозки товара из A_i в B_j составит $c_{ij}x_{ij}$, а суммарная стоимость перевозок есть $\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}c_{ij}x_{ij}$. Следовательно,

$$z=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}c_{ij}x_{ij}\to\min\ . \qquad (13)$$

Далее, все запасы из пункта A_i должны быть вывезены, т.е.

$$\sum_{j=1}^{n}x_{ij}=a_i,\ i=1\div m. \qquad (14)$$

Все потребности пункта B_j должны быть удовлетворены, т.е.

$$\sum_{i=1}^{m}x_{ij}=b_j,\ j=1\div n. \qquad (15)$$

Естественно предполагать также, что

$$x_{ij}\geq 0,\ i=1\div m,\ j=1\div n. \qquad (16)$$

Математическая модель ТЗ состоит в определении неотрицательного плана перевозок $X=(x_{ij})$, для которого выполняются условия (14) и (15), а целевая функция (13) принимает наименьшее значение. Матрица $X=(x_{ij})_{m\times n}$ называется *матрицей перевозок.*

Рассмотрим решение ТЗ, экономико-математическая постановка которой приведена выше. Для наглядности условия ТЗ можно представить таблицей 38.

Таблица 38

B_j / A_i	b_1	b_2	…	b_n
a_1	c_{11} x_{11}	c_{12} x_{12}	…	c_{1n} x_{1n}
a_2	c_{21} x_{21}	c_{22} x_{22}	…	c_{2n} x_{2n}
…	…	…	…	…
a_m	c_{m1} x_{m1}	c_{m2} x_{m2}	…	c_{mn} x_{mn}

Если сумма всех запасов равна сумме всех заявок, т.е.

$$\sum_{i=1}^{m}a_i=\sum_{j=1}^{n}b_j, \qquad (17)$$

то мы имеем ТЗ закрытого типа.

Определение 1. Всякое неотрицательное решение систем линейных уравнений (8), (9) п.1, определяемое матрицей перевозок **X**, называется планом ТЗ.

Определение 2. План **X***, при котором функция (13) принимает своё минимальное значение, называется *оптимальным планом ТЗ*.

Теорема 3. Для того чтобы ТЗ имела допустимые планы, необходимо и достаточно, чтобы выполнялось равенство (17).

В случае если сумма запасов не равна сумме потребностей (заявок), имеем задачу открытого типа. Если сумма заявок превышает сумму запасов, вводится фиктивный поставщик A_{m+1}, «запас» которого равен разности между суммой заявок и суммой запасов: $a_{m+1}=\sum_{j=1}^{n} b_j-\sum_{i=1}^{m} a_i$. В случае, когда сумма запасов превышает сумму заявок, вводится фиктивный потребитель B_{n+1}, «заявка» которого равна разности между суммой запасов и суммой заявок: $b_{n+1}=\sum_{i=1}^{m} a_i-\sum_{j=1}^{n} b_j$. Стоимости всех фиктивных перевозок полагают равными нулю. Таким образом, задача открытого типа легко сводится к задаче закрытого типа.

Поскольку ТЗ является задачей линейного программирования, она может быть решена симплекс-методом. Но в силу специфики задачи (каждая переменная входит лишь в два уравнения системы и коэффициенты при переменных равны единице) оптимальный план ТЗ может быть получен путем некоторых преобразований транспортной таблицы. Как и в общем случае, оптимальный план ищется среди опорных решений.

Число переменных x_{ij} в ТЗ с m пунктами отправления и n пунктами назначения равно mn, а число уравнений в системах (14) и (15) равно $m+n$. Т.к. в закрытой ТЗ выполняется условие (17), то число линейно независимых уравнений равно $m+n$-1. Следовательно, опорный план ТЗ может иметь не более $m+n$-1 отличных от нуля переменных. Это – базисные переменные. Если в опорном плане число отличных от нуля переменных равно в точности равно $m+n$-1, то план является невырожденным, а если меньше – то вырожденным.

Для определения опорного плана существует несколько методов. Рассмотрим два из них – метод северо-западного угла и метод минимальной стоимости.

3.6.1. Метод северо-западного угла

Пользуясь таблицей 1, будем распределять товар, начиная с левой верхней клетки (1,1), полагая x_{11}=min(a_1,b_1). Если $a_1>b_1$, то $x_{11}=b_1$ и потребитель B_1 будет полностью удовлетворён, и значит, надо положить $x_{i1}=0$, $i=2\div m$ («столбец 1 закрыт»). Переходим в соседнюю ячейку. Соседней здесь считается открытая ячейка снизу или справа от данной – в данном случае это ячейка (1,2). Она заполняется с учётом того, что запас пункта A_1 сократился на величину b_1 и составляет a_1-b_1.

Если же $b_1>a_1$, то запас поставщика A_1 полностью исчерпан, и значит, надо положить $x_{1j}=0$, $j=2\div n$ («строка 1 закрыта»). Переходим в соседнюю ячейку – ячейку (2,1), учитывая, что потребность пункта B_1 сократилась на величину a_1 и составляет b_1-a_1. Аналогичным образом заполняются ячейки (1,2) или (2,1) и т.д. Последней заполняется ячейка (m,n). Рассмотрим применение этого метода на примере.

Пример 1.

Условия ТЗ заданы транспортной таблицей (таблица 39).
Требуется составить опорный план перевозок методом северо-западного угла.

Проверим, является ли задача закрытой. Т.к. $\sum_i a_i=130\neq\sum_j b_j=110$, то ТЗ открытая. Вводим фиктивного потребителя B_5 $b_5=\sum_i a_i-\sum_j b_j=20$ (таблица 40).

Таблица 39

B_j / A_i	45	35	55	65
40	4	1	2	5
60	3	2	3	7
90	4	4	5	2

Таблица 40

B_j / A_i	45	35	55	65
40	4	1	2	5
60	3	2	3	7
90	4	4	5	2
10	0	0	0	0

Будем заполнять таблицу поэтапно.

Этап 1. x_{11}=min(a_1,b_1)=min(40,45)=40. Закрыта 1-я строка. Переходим в следующую ячейку (2, 1) (табл. 4).

Этап 2. x_{12}=min(a_2, b_1-a_1)=min(60,5)=5. Закрыт 1-й столбец. Переходим в следующую ячейку (2,2).

Этап 3. x_{22}=min(55,35)=35. Закрыт 2-й столбец. Переходим в следующую ячейку (2,3).

Этап 4. x_{23}=min(20,55)=20. Закрыта 2-я строка. Переходим в следующую ячейку (3,3).

Этап 5. x_{33}=min(90,35)=35. Закрыт 3-й столбец. Переходим в следующую ячейку (3,4).

Этап 6. x_{34}=min(55,65)=55. Закрыта 3-я строка. Переходим в следующую ячейку (4,4).

Этап 7. x_{44}=min(10,10)=10. Закрыты 4-я строка и 4-й столбец. Заполнение таблицы закончено.

Таблица 41

B_j / A_i	45	35	55	65
40	4 40	1 –	2 –	5 –
60	3 5	2 35	3 20	7 –
90	4 –	4 –	5 35	2 55
10	0 –	0 –	0 –	0 10

Отметим, что число заполненных (базисных) клеток равно $m+n$-1=7, т.е. действительно построен опорный план перевозок.

Получен начальный опорный план с матрицей перевозок

$$\mathbf{X}_{с\text{-}з}=\begin{pmatrix} 40 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 35 & 20 & 0 \\ 0 & 0 & 35 & 55 \end{pmatrix}$$

(фиктивные поставщики и потребители в матрице перевозок не указываются). По этому плану из пункта A_1 завезено 40 ед. груза в B_1, из A_2 завезено 5 ед. груза в B_1, 35 – в B_2 и 20 – в B_3, из A_3 35 ед. груза завезены в B_3 и 55 – в B_4.. Т.е. 10 ед. груза, «завезённые» из фиктивного пункта A_4, на самом деле недовезены в B_4. Затраты по плану $\mathbf{X}_{с\text{-}з}$ составляют $z_{с\text{-}з}$=4·40+3·5+2·35+3·20+
+5·35+2·55=580 (ден. ед.).

При использовании МСЗУ на каждом этапе, кроме последнего, закрывалась либо строка (т.е. один из поставщиков), либо столбец (т.е. один из потребителей). Может оказаться, что на некотором (не последнем) шаге будут одновременно закрываться и строка, и столбец. Тогда в одну из соседних ячеек (желательно с меньшим тарифом) необходимо поставить нуль в явном виде. Эта ячейка в дальнейшем считается базисной (вырожденная задача). Заполнение таблицы происходит чисто механически слева направо сверху вниз без учёта тарифов перевозок. Поэтому полученный опорный план обычно далёк от оптимального.

3.6.2. Метод минимального тарифа

При построении опорного плана этим методом сначала заполняется ячейка таблицы с минимальным тарифом (если таковых несколько, то можно начинать с любой из них; обычно по порядку – слева направо сверху вниз). При этом либо удовлетворяется заявка соответствующего потребителя, либо исчерпывается запас поставщика. Далее ячейки заполняются в порядке возрастания стоимостей.

Пример 2. Рассмотрим применение ММТ на решении той же ТЗ, что в п.3.6.1 (таблицы 2 и 3), и будем поэтапно заполнять таблицу 42.

Этап 1. Начинаем, например, с ячейки (4,1), в которой мы имеем одну из наименьших стоимостей перевозки (c_{41}=0): $x_{41}=\min(a_4,b_1)=\min(10,45)=10$.
Закрыта 4-я строка. Переходим в следующую ячейку (таблица 42).

Этап 2. Среди оставшихся ячеек заполняем ячейку (1,2), имеющую наименьшую стоимость (c_{12}=1): $x_{12}=\min(a_1,b_2)=\min(40,35)=35$. Закрыт 2-й столбец. Переходим в следующую ячейку.

Этап 3. Среди оставшихся ячеек заполняем, например, ячейку (1,3), имеющую одну из наименьших стоимостей (c_{13}=2): x_{13}=min(a_1-b_2, b_3)=min(5,55)=5. Закрыта 1-я строка. Переходим в следующую ячейку.

Этап 4. Среди оставшихся ячеек наименьшую стоимость имеет ячейка (3,4), c_{34}=2. Поэтому x_{34}=min(a_3,b_4)=min(90,65)=65. Закрыт 4-й столбец. Переходим в следующую ячейку.

Таблица 42

B_j / A_i	45	35	55	65
40	4 –	1 35	2 5	5 –
60	3 35	2 –	3 25	7 –
90	4 –	4 –	5 25	2 65
10	0 10	0 –	0 –	0 –

Этап 5. Среди оставшихся ячеек заполняем ячейку (2,1), имеющую одну из наименьших стоимостей (c_{21}=3): x_{21}=min(60,35)=35. Закрыт 1-й столбец. Переходим в следующую ячейку стоимостей, c_{21}=3, . x_{21}=min(a_2, b_1-a_4)=min(60,35)=35. Закрыт 1-й столбец. Переходим в следующую ячейку.

Этап 6. Среди оставшихся ячеек заполняем ячейку (2,4), имеющую наименьшую стоимость (c_{24}=3): x_{24}=min(25, 50)=25. Закрыта 2-я строка. Переходим в следующую ячейку.

Этап 7. Осталась ячейка (3,3): x_{33}=min(25, 25)=25. Закрыты 3-я строка и 3-й столбец.

Заполнение таблицы закончено. Число заполненных (базисных) клеток равно $m+n$-1=7 , т.е. действительно построен опорный план перевозок.

Получен начальный опорный план с матрицей перевозок

$$\mathbf{X}_{н.ст}=\begin{pmatrix} 0 & 35 & 5 & 0 \\ 35 & 0 & 25 & 0 \\ 0 & 0 & 25 & 65 \end{pmatrix}$$

(фиктивный поставщик в матрице перевозок не указан). По этому плану из пункта A_1 завезено 35 ед. груза в B_2 и 5 – в B_4, из A_2 –35 ед. груза в A_1 и 25 – в B_3, из A_3 – 25 ед. груза в B_3 и 65 – в B_4. Те 10 ед. груза, «завезённые» из фиктивного пункта A_4, на самом деле не довезены в B_1. Затраты по плану $\mathbf{X}_{н.ст}$ составляют $z_{н.ст}$=1·35+2·5+3·35+3·25+5·25+2·65=480 (ден. ед.), что на 100 ед. меньше, чем в МСЗУ.

Для МНС также справедливо замечание 2 (о нулевом базисном элементе), только здесь изменяется понятие соседней ячейки. Ячейкой, соседней с данной, считается любая открытая ячейка в данной строке и в данном столбце.

3.6.3. Определение оптимального плана перевозок методом потенциалов

При решении ТЗ, как и при решении любой задачи ЛП, осуществляется последовательный переход от одного опорного плана (если оно не оптимально) к другому. Для проверки оптимальности полученного плана воспользуемся теорией двойственности. Составим к ТЗ двойственную задачу и запишем их в таблице 43.

Таблица 43

Прямая задача	Двойственная задача
$z=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}c_{ij}x_{ij}\to\min$	$w=\sum_{i=1}^{m}a_iu_i+\sum_{j=1}^{n}b_jv_j\to\max$
$\sum_{j=1}^{n}x_{ij}=a_i,\ i=1\div m$	u_i не огр. в знаке, $i=1\div m$
$\sum_{i=1}^{m}x_{ij}=b_j,\ j=1\div n$	v_j не огр. в знаке, $j=1\div n$
$x_{ij}\ge 0,\ i=1\div m,\ j=1\div n$	$u_i+v_j\le c_{ij},\ i=1\div m,\ j=1\div n$

Переменные ДЗ называются:

u_i – потенциал поставщика A_i, $i=1\div m;$

v_j – потенциал потребителя B_j, $j=1\div n$.

Сформулируем в терминах потенциалов критерий оптимальности плана перевозок.

Теорема 4. Пусть **X***$=\{x_{ij}^*\}$ – план перевозок ТЗ. Для того, чтобы этот план был оптимальным, необходимо и достаточно, чтобы существовали потенциалы поставщиков u_i, $i=1\div m$, и потенциалы потребителей v_j, $j=1\div n$, удовлетворяющие условиям:

– сумма потенциалов каждого поставщика и каждого потребителя не превосходит соответствующей стоимости перевозки единицы груза, т.е.

$$u_i+v_j\le c_{ij},\ i=1\div m,\ j=1\div n; \tag{18}$$

– если по плану **X*** имеет место перевозка от поставщика A_i потребителю B_j, то сумма их потенциалов равна соответствующей стоимости перевозки единицы груза, т.е. если $x_{ij}^*>0$, то $u_i+v_j=c_{ij}$.

Т.о., чтобы выполнить проверку оптимальности плана перевозок, необходимо для всех занятых ячеек составить систему уравнений относительно потенциалов:

$$u_i+v_j=c_{ij}. \tag{19}$$

Т.к. занятых ячеек (а, значит, и уравнений (19)) m+n-1, а неизвестных потенциалов $m+n$, то одному из неизвестных нужно придать произвольное значение (обычно полагают $u_1=0$), и тогда остальные потенциалы определяются однозначно. Затем для свободных ячеек проверяются условия (18), или

$$\Delta_{ij}=u_i+v_j-c_{ij}\leq 0 \qquad (18')$$

(Δ_{ij} называется *оценкой* соответствующей ячейки). Если все эти неравенства выполняются, то, согласно приведённому выше критерию, план перевозок оптимальный. Если хотя бы одно из неравенств (18′) не выполняется, то план не является оптимальным. В этом случае из свободных ячеек с положительной оценкой выбирается та, для которой эта оценка является наибольшей. Если наибольших оценок несколько, то выбирается та из ячеек, где меньше тариф.

В транспортной таблице для выбранной свободной ячейки проводится замкнутая ломаная прямая, звенья которой лежат только в строках или столбцах и соединяют какие-либо две ячейки, а вершины (кроме начальной) расположены в занятых ячейках. Такая ломаная прямая называется *циклом.* Для каждой ячейки можно построить *только один* цикл. Вершинам цикла приписываются чередующиеся знаки «+» и «-», причём свободная ячейка снабжается знаком «+». В ячейках, соответствующих отрицательным вершинам цикла, отыскивается наименьшее значение объёма перевозок, $\alpha=\min x_{ij}^{(-)}$, которое перераспределяется по ячейкам цикла, т.е. прибавляется к переменным в ячейках со знаком «+» и вычитается от переменных в ячейках со знаком «-». В ячейках, не вошедших в цикл, переменные остаются неизменными. Ячейка «-», по которой определялась величина α (для неё $x_{ij}=\alpha$), остаётся пустой. Если таковых ячеек несколько, то одна из них (желательно с большим тарифом) остаётся пустой, а в остальных проставляются нули.

В результате перераспределения перевозок по циклу получается новый план с меньшими затратами.

Примеры некоторых циклов показаны на рисунке 9.

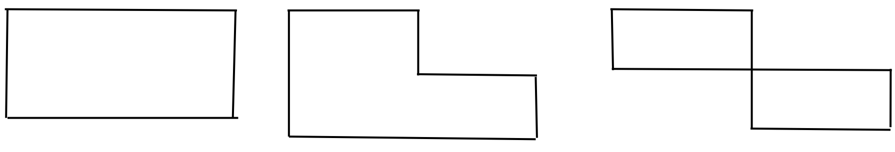

Рисунок 9.

В новом плане вновь определяются потенциалы поставщиков и потребителей, и производится проверка плана на оптимальность. Когда среди оценок не окажется больше положительных, полученный план будет оптимальным.

Алгоритм решения ТЗ методом потенциалов.

Этап 1. Составление начального плана перевозок.

Этап 2. Вычисление потенциалов поставщиков и потребителей; проверка оптимальности плана перевозок. Если план оптимальный, то задача решена; иначе следует переход к этапу 3.

Этап 3. Построение нового (улучшенного) плана перевозок, для которого транспортные затраты меньше или, по крайней мере, равны затратам для предыдущего плана. Далее следует переход к этапу 2.

Пример 3. Рассмотрим применение метода потенциалов для нахождения оптимального плана ТЗ, опорный план которой найден МНС (таблица 5).

Для определения потенциалов составляем систему уравнений (для *занятых ячеек*)

$u_1+v_2=1$, $u_1+v_3=2$, $u_2+v_1=3$, $u_2+v_3=3$, $u_3+v_3=5$, $u_3+v_4=2$, $u_4+v_1=0$.

Полагая $u_1=0$, находим $v_2=1$, $v_3=2$, $u_2=1$, $v_1=2$, $u_3=3$, $v_4=-1$, $u_4=-2$.

Потенциалы проставлены в таблице 44 (столбец u_i и строка v_j), которую мы обозначим «Итерация 0». Потенциалы можно вычислять и непосредственно в таблице, не выписывая систему уравнений. Если известны потенциал и тариф занятой ячейки, то из соотношения $u_i+v_j=c_{ij}$ легко определить неизвестный потенциал (из суммы вычесть известное слагаемое).

Таблица 44(*Итерация* 0)

B_j A_i	45	35	55	65	u_i
40	4 –	1 35	2 5	5 –	0
60	3 35	2 –	3 25	7 –	1
90	4 –	4 –	5 25	2 65	3
10	0 10	0 –	0 –	0 –	-2
v_j	2	1	2	-1	

Определим оценки *свободных ячеек* ($\Delta_{ij}=u_i+v_j-c_{ij}$):

$\Delta_{11}=0+2-4=-2$, $\Delta_{14}=0+(-1)-5=-6$, $\Delta_{22}=1+1-2=0$, $\Delta_{24}=1+(-1)-7=-7$, $\Delta_{31}=3+2-4=1$, $\Delta_{32}=3+1-4=0$, $\Delta_{42}=(-2)+1-0=-1$, $\Delta_{43}=(-2)+2-0=0$, $\Delta_{44}=(-2)+(-1)-0=-3$.

Далее оценки будем также вычислять непосредственно в таблице, помещая их в левом нижнем углу каждой свободной ячейки. Т.к. среди оценок есть положительная, то план $\mathbf{X}_0=\mathbf{X}_{н.ст}$ не является оптимальным. Перейдём к этапу 3 – улучшению плана $\mathbf{X}_0$. Для этого выберем ячейку (3,1) (она имеет положительную оценку 1). Из этой ячейки проводим цикл (таблица 45). В цикл войдут ячейки (3,1) (отмечается знаком «+»), (3,3) (отмечается знаком «-»), (2,3) (отмечается знаком «+»), (2,1) (отмечается знаком «-»). Наименьшее значение груза, стоящее в вершинах цикла со знаком «-», $\alpha=\min(25,35)=25$. Это число прибавляется к переменным в ячейках со знаком «+» и вычитается от переменных в ячейках со знаком «-». В результате получается новый план с меньшими затратами (таблица 46, итерация 1).

Таблица 45

B_j / A_i	45	35	55	65	u_i
40	4 -2	1 35	2 5	5 -6	0
60	ϴ 3 35	2 0	⊕ 3 25	7 -7	1
90	⊕4 1	4 0	ϴ 5 25	2 65	3
10	0 10	0 -1	0 0	0 -3	-2
v_j	2	1	2	-1	

Таблица 46 (*Итерация* 1)

B_j / A_i	45	35	55	65	u_i
40	4 -2	1 35	2 5	5 -5	0
60	3 10	2 0	3 50	7 -6	1
90	4 25	4 -1	5 -1	2 65	2
10	0 10	0 -1	0 0	0 -2	-2
v_j	2	1	2	0	

Для нового плана $\mathbf{X}_1$ определяем новые потенциалы и оценки свободных ячеек (таблица 46). Все оценки неположительные. Следовательно, полученный план

$$\mathbf{X}^{*}=\begin{pmatrix} 0 & 35 & 5 & 0 \\ 10 & 0 & 50 & 0 \\ 25 & 0 & 0 & 65 \end{pmatrix}$$

является оптимальным (фиктивного поставщика в ответе не указываем). Кроме того, план не вырожден (базисные переменные не равны нулю) и альтернативен (некоторые оценки $\Delta_{21}=\Delta_{43}=0$). При данном плане стоимость перевозок

$z_{min}=1\cdot35+2\cdot5+3\cdot10+3\cdot50+4\cdot25+2\cdot65=455$ (ден. ед.).

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1.Бондарь, А.Г. Математическое моделирование в химической технологии./ А.Г.Бондарь. - Киев: Высшая школа, 1973 . - 274с .

2. Кафаров, В.В.Математическое моделирование основных процессов химических производств/В.В.Кафаров, М.Б.Глебов. - М:Высшая школа,1991.-400с.

3.. Мокриевич, А.Г., Дегтярь, Л.А. Элементы математического моделирования: учебное пособие для самостоятельной работы студентов / А.Г.Мокриевич, Л.А.Дегтярь.- пос. Персиановский : ДонГАУ, 2015, 113 с.

4. Закгейм, А.Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие/ А.Ю. Закгейм. – М:Логос,2012.-304 с.

5. Кузнецов, А.В. и др. Руководство к решению задач по математическому программированию/А.В.Кузнецов .- М.: Академия, - 2009. – 251 с.