

УДК: 519.6 : 681.3

Математические модели в расчётах на ЭВМ / Г. И. Станевко, А. Г. Семёнов, Г. С. Ветрова; Кемеровский технологический институт пищевой промышленности. - Кемерово, 2000. - 76с.

ISBN 5-89289-078-3

В предлагаемом пособии излагаются теоретические основы моделирования технических систем. Рассмотрены особенности и методика математических постановок проблемных задач, построения математических моделей и численные методы решения.

Предназначается для студентов всех специальностей инженерно-технических вузов.

Ил.-19, табл.-3, библиогр.-10

Печатается по решению Редакционно – издательского совета Кемеровского технологического института пищевой промышленности.

Рецензенты: зав. кафедрой автоматизации исследований и технической кибернетики, д. т. н., профессор Карташов В.Я.
(Кемеровский государственный университет)
к. ф. -м. н., доцент Черкасов В. С.
(Кемеровский институт Московского государственного университета коммерции)

ISBN 5-89289-078-3

1602110000

М _____
У50(03) – 2000

© -Кемеровский технологический институт пищевой промышленности

Введение

Мы начинаем изучение курса "Математические модели в расчётах на ЭВМ" и сразу определяем цель:

- ознакомить Вас с основными понятиями и положениями процесса моделирования;
- овладеть приемами разработки математических моделей, оценки их точности, анализа результатов и принятия решений;
- изучить прикладное математическое и современное программное обеспечение, используемое в данной проблеме.

I. Математические модели

Основные понятия и определения

Содержание понятий "модель", "моделирование" в различных сферах знания и человеческой деятельности чрезвычайно разнообразно. Однако здесь есть и нечто существенно общее: модель в том или ином смысле, более или менее полно имитирует оригинал – модулируемый объект. Таким образом, мы будем говорить, что *объект В является моделью объекта А (здесь термин "объект" понимается в наиболее широком смысле: объектами могут служить и любые ситуации, явления, процессы и т. д.) относительно некоторой системы S характеристик (свойств), если В строится (или выбирается) для имитации А по этим характеристикам.*

Модель может быть построена как для изучения указанных характеристик (исследовательские модели, которыми мы и будем заниматься), так и для их непосредственного использования (рабочие модели: автопилот, деньги, кукла и т. д.)

Мы будем рассматривать лишь модели, нацеленные на решение поставленной задачи *средствами математики*, и не будем касаться общих вопросов моделирования.

Математическое моделирование имеет два преимущества: оно даёт возможность получения быстрого ответа на поставленный вопрос, на что в реаль-

ной обстановке могут потребоваться иногда даже годы, а также возможность экспериментирования, осуществить которое на реальном объекте зачастую просто невозможно.

Из общих свойств моделей отметим, что поскольку модель строится лишь для имитации и притом лишь части свойств исходного объекта, то, как правило, она оказывается в целом проще его.

1.1. Классификация математических моделей

Строгой классификации математических моделей в настоящее время не существует. Однако их можно классифицировать по некоторым отличительным свойствам:

- если модель предназначена для исследования установившихся процессов или явлений, то ее относят к классу стационарных;
- при исследовании развития объекта во времени используются динамические модели;
- если в модели учитываются случайные воздействия, то модель относят к классу стохастических, в противном случае – к классу детерминированных.

Необходимо особо выделить класс моделей для решения экономических задач, инструментом для которых служит современный раздел науки – математическое программирование, а также моделирование процессов управления и обслуживания, развивающихся на базе теории массового обслуживания.

1.2. Этапы исследований на основе математических моделей

Любое моделирование начинается с детального изучения свойств объекта с привлечением специалистов смежных профессий, а порой и разных наук. На этом этапе выявляются свойства существенные и отбрасываются несущественные. Благодаря этому модель приобретает некую идеализированную форму. Затем приступают к описанию её в виде математических соотношений. Математической моделью достаточно сложного оригинала служит система уравнений

в широком смысле этого термина; разумеется, математическая модель отдельного элемента относительно проще – она может оказаться геометрическим образом, функцией, скалярной величиной или даже конкретным числом. Такая модель может быть реализована не только в виде записи с применением математических символов, но и, скажем, в явно выписанной или подразумеваемой блок-схеме получения ответа по исходным данным. Иногда после разработки математической модели выясняется, что эта же модель соответствует совершенно другому оригиналу. Такое "замыкание" (аналогия) двух или большего числа объектов на общую математическую модель может быть, в частности, использовано для уменьшения времени, затрачиваемого на проведение исследований. *После составления математической модели решаются вопросы:*

- выбора метода решения (каждый метод даёт возможность получить результаты с присущей ему точностью);
- выбора вычислительного средства, а также разработки программ или выбора готового программного продукта и данных для проведения контрольного счета.

Получив результаты контрольного счета, можно решить вопрос *адекватности математической модели, т. е., о мере близости модели к оригиналу*. Это могут быть специальные математические оценки, литературные данные или результаты физического эксперимента.

И, наконец, можем приступить к исследованию с реальными данными, т. е., к экспериментированию; анализу полученных результатов и выработке рекомендаций.

2. Моделирование процессов, приводящих к алгебраическим и трансцендентным уравнениям и системам

2.1. Введение

В инженерных и экономических расчётах встречаются задачи, математическая модель которых представляет собой либо уравнение, либо систему уравнений. Они могут быть как линейные, так и нелинейные. К таким задачам мож-

но отнести конструкторские расчёты, например, синтез кривошипно-шатунных механизмов, задачи на составление различных смесей, задачи на использование оборудования и другие.

Есть старая задача про гусей, которую можно сформулировать на новый лад. Спрашивают нового русского, сколько он отдал за подержанную иномарку, а он отвечает: "Я заплатил за неё *столько*. Но потом оказалось, что машина не прошла таможенную "очистку". Пришлось заплатить пошлину ещё *пол столько*. Запчастей купил на *четверть столько*. Одну *восьмую столько* отдал авто слесарям. Одну *шестнадцатую столько* пришлось выложить в ГАИ за техосмотр. Если сюда накинуть ещё 120 долларов, получится цена машины – 21200 долларов". Спрашивается, сколько было заплачено за подержанную иномарку?

Здесь неизвестная величина x – сумма, заплаченная за иномарку. Это наше *столько*. Покажем, из чего складывается число 21200.

- пошлина $x/2$;
- стоимость запчастей $x/4$;
- работа авто слесарей $x/8$;
- техосмотр $x/16$.

Можно записать: $x + x/2 + x/4 + x/8 + x/16 + 120 = 21200$

или $x + x/2 + x/4 + x/8 + x/16 + 120 - 21200 = 0$

Получили математическую модель задачи в виде линейного уравнения.

Рассмотрим проблему составления смеси. Это могут быть питательные смеси с определённым содержанием витаминов, смеси для получения различных пластмасс, искусственных нитей и т. д. Необходимые ингредиенты А и В содержатся в двух веществах. В 1-м веществе ингредиента А 5 единиц на одну единицу вещества, во 2-м 3. Для В – 4 и 2 соответственно. В смеси должно быть ровно 60 единиц ингредиента А и ровно 44 единицы ингредиента В. Вопрос: сколько следует взять вещества 1 и 2, чтобы получить необходимую смесь?

Из вопроса задачи следует, что здесь две неизвестные величины:

x_1 – количество вещества 1;

x_2 – количество вещества 2.

Эти неизвестные величины должны удовлетворять ограничениям по содержанию ингредиентов в смеси.

Ограничение по ингредиенту А: $5x_1 + 3x_2 = 60$

Ограничение по ингредиенту В: $4x_1 + 2x_2 = 44$

Получили математическую модель в виде системы линейных уравнений.

Очень много примеров можно привести из конструкторских расчётов. Это задачи расчёта всевозможных ферм, нагрузок на балки, определение устойчивости и т. д.

Возьмём задачу расчёта прямого стержня постоянного сечения на устойчивость.

Не будем впадать в детали, но отметим, что необходимо учитывать:

- способ закрепления стержней;
- схемы нагружения;
- профиль (тип сечения) стержня;
- материал, из которого стержень изготовлен и др.

В общем случае величина критической силы $P_{кр}$, при которой прямолинейная форма стержня становится неустойчивой, определяется по формуле Эйлера из уравнения:

$$\operatorname{tg} \alpha L = \alpha L,$$

$$\text{где } \alpha^2 = P_{кр}/(EJ),$$

здесь L – длина стержня, известная величина;

E – модуль продольной упругости материала стержня, известный коэффициент;

J – минимальный осевой момент инерции поперечного сечения стержня, который для круглого стержня определяется по формуле $\pi d^4/64$. Здесь d – диаметр, известная величина.

Вывод: чтобы определить критическую силу, необходимо решить нелинейное уравнение (математическая модель задачи), из которого будет найдено значение величины α , а затем вычислить $P_{кр}$.

Уравнение вида $f(x) = 0$, где $f(x)$ определена и непрерывна на заданном интервале $[a, b]$, называется *алгебраическим*, если для вычисления значений $f(x)$ требуется выполнять только арифметические операции.

Уравнение вида $f(x) = 0$ называется *трансцендентным*, если $f(x)$ включает в себя показательные, логарифмические, тригонометрические и другие функции.

Решение уравнения проводят в два этапа. На первом этапе производится отделение корней – поиск интервалов, в которых содержится только по одному корню. Второй этап связан с уточнением корня в выбранном интервале (определением значения корня с заданной точностью).

2.2. Отделение корней

В общем случае отделение корней уравнения $f(x) = 0$ базируется на теореме, утверждающей, что если непрерывная функция $f(x)$ на концах отрезка $[a, b]$ имеет значения разных знаков, т.е. $f(a) \cdot f(b) < 0$, то в указанном промежутке содержится хотя бы один корень.

Для выбора интервала, в котором находится корень, можно рассмотреть его с некоторым шагом, вычисляя значения $f(x)$ и фиксируя перемены знаков. Шаг определяется по формуле $h = \frac{b-a}{n}$, n - число интервалов.

Можно воспользоваться графической интерпретацией задачи. После построения графика $f(x)$ выбрать интересующий интервал и провести уточнение корня.

2.3. Основные методы уточнения корней

Для уточнения корня на интервале $[a, b]$ используются итерационные методы. Итерационный процесс состоит в последовательном уточнении начального приближения корня x_0 . В результате итераций находится последовательность приближённых значений корня $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$. Если эти значения с ростом n приближаются к истинному значению корня, то говорят, итерационный процесс

сходится. Итерационный процесс продолжается до обеспечения заданной точности корня. К методам уточнения корня относятся метод деления отрезка пополам (метод дихотомии), метод хорд, метод касательных, метод простой итерации.

2.3.1. Метод половинного деления

Пусть непрерывная функция $f(x)$ на концах отрезка $[a, b]$ имеет значения разных знаков, т.е. $f(a) \cdot f(b) < 0$ (рис. 1), тогда на отрезке имеется хотя бы один корень.

Возьмем середину отрезка $c = (a + b)/2$. Если $f(a) \cdot f(c) \leq 0$, то корень явно принадлежит отрезку от a до $(a + b)/2$ и в противном случае от $(a + b)/2$ до b . Поэтому берем подходящий из этих отрезков, вычисляем значение функции в его середине и т.д. (здесь следует организовать цикл) до тех пор, пока длина очередного отрезка не окажется меньше заданной предельной абсолютной погрешности (это управляющее работой цикла условие) $(b - a) < \epsilon$.

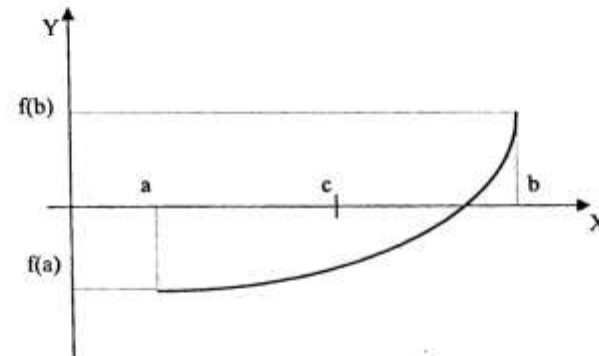


Рис. 2.1. Метод половинного деления

2.4. Решение систем линейных уравнений

Постановка некоторых задач сводится к системе линейных алгебраических уравнений вида:

2.4.2. Метод Зейделя

Метод Зейделя является одним из самых распространённых итерационных методов. Сам итерационный процесс подобен методу простой итерации. Однако уточнённые значения x_1 сразу подставляются в последующие уравнения.

Вычисление новых значений неизвестных x_i ведётся по формуле:

$$x_i = x_{i-1} - \frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{k=1}^{i-1} a_{ik} x_k + \sum_{k=1}^n a_{ik} x_i - b_i \right)$$

Рассмотрим применение на примере:

$$\begin{cases} 5x_1 + 0,24x_2 - 0,08x_3 = 10 \\ 0,08x_1 + 3x_2 - 0,15x_3 = 9 \\ 0,04x_1 - 0,09x_2 + 5x_3 = 20 \end{cases}$$

Преобразуем систему к виду:

$$\begin{cases} x_1 = 2 - 0,048x_2 + 0,016x_3 \\ x_2 = 3 - 0,0267x_1 + 0,05x_3 \\ x_3 = 4 - 0,008x_1 + 0,018x_2 \end{cases}$$

Возьмём за начальное приближение нулевые значения неизвестных, получаем:

$$X^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{Для нахождения значения } x_1 \text{ на следующей итерации} \\ \text{учитываем значения } x_2 \text{ и } x_3, \text{ найденные на предыдущей} \\ \text{итерации. Для нахождения } x_2 \text{ берём значение } x_1, \text{ най-} \\ \text{денное на текущей итерации, но значение } x_3 \text{ берём из предыдущей итера-} \\ \text{ции. Получаем:} \end{array}$$

$$X^{(2)} = \begin{pmatrix} 1,9200 \\ 3,1488 \\ 4,0413 \end{pmatrix} \quad X^{(3)} = \begin{pmatrix} 1,9135 \\ 3,1510 \\ 4,0413 \end{pmatrix} \quad X^{(4)} = \begin{pmatrix} 1,9134 \\ 3,1510 \\ 4,0414 \end{pmatrix}$$

В зависимости от значения точности прекращаем вычисления или продолжаем дальше. Например, $\epsilon = 0,001$. Три знака после запятой совпадают. Система решена. Последние найденные значения берём за ответ.

2.5. Решение систем нелинейных уравнений

Многие практические задачи сводятся к решению систем нелинейных уравнений. При этом прямых методов решения не существует в отличие от систем линейных уравнений.

Для решения систем нелинейных уравнений вида:

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ F_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \dots \dots \dots \dots \\ F_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$

используются итерационные методы. К ним относятся: метод простой итерации, Метод Зейделя, метод Ньютона и др.

Метод простой итерации и метод Зейделя аналогичны соответствующим методам решения систем линейных уравнений.

2.5.1. Применение метода Зейделя

Рассмотрим систему:

$$\begin{cases} x_1^2 + x_2^2 = 1 \\ \sin x_1 + x_2 = 1 \end{cases}$$

Выразим x_1 из первого уравнения, а x_2 из второго, то есть преобразуем систему к виду:

$$\begin{cases} x_1 = \sqrt{1 - x_2^2} \\ x_2 = 1 - \sin x_1 \end{cases}$$

Пусть начальное приближение будет: $x_1^0 = x_2^0 = 0,5$. Выполняем итерационный процесс и получаем: $x_1^1 = \sqrt{1 - (x_2^0)^2} = \sqrt{1 - (0,5)^2} = \sqrt{0,75} = 0,866025$

$$x_2^1 = 1 - \sin(0,8660) = 1 - 0,7618 = 0,2382$$

Далее проводим вычисления по этим же формулам, но уже находим второе приближение, подставляя в формулы найденные значения. Так поступаем до тех пор, пока не достигнем заданной точности. Пусть $\epsilon = 0,001$.

k	1	2	3	4	5	6
x_1	0,5	0,8660	0,9712	0,9847	0,9860	0,9861
x_2	0,5	0,2382	0,1744	0,1669	0,1662	0,1661

Система решена. Последние найденные значения берём за искомое решение.

3. Оптимизационные модели

3.1. Основные понятия и определения

Под *оптимизацией* понимают процесс выбора наилучшего варианта среди всех возможных. Например, выбор наилучшего варианта конструкции, наилучшего способа раскроя материала, наилучшего режима работы оборудования, наилучшего графика перевозок и т. п.

Для выбора математических соотношений, описывающих задачи оптимизации воспользуемся тем, что решение таких задач определяется параметрами двух категорий: параметрами, дающими количественные оценки возможных вариантов и параметрами, от которых эти оценки зависят. Например: объём резервуара зависит от его линейных размеров, прибыль предприятия зависит от трудовых ресурсов, спроса на выпускаемую продукцию и т. п.

Если в конкретной задаче обозначить независимые параметры через

$$x_1, x_2, \dots, x_n$$

а зависимый параметр через F , то величину F можно описать в виде функции

$$F = f(x_1, x_2, \dots, x_n),$$

то процесс оптимизации будет заключаться в том, чтобы найти такие значения аргументов x_1, x_2, \dots, x_n из области определения функции F , при которых эта функция достигает наибольшее или наименьшее значение. Функцию F называют *целевой функцией*. Параметры x_1, x_2, \dots, x_n в инженерной практике называют *проектными параметрами* (при решении экономических задач – *параметрами плана*). Область изменения проектных параметров $D(x_1, x_2, \dots, x_n)$

– *областью проектирования*. Количество проектных параметров, подлежащих учёту, определяет размерность задач и позволяет классифицировать их на *одномерные* ($n = 1$) и *многомерные* ($n \geq 1$).

При решении конкретных задач, как правило, возникает необходимость учитывать *дополнительные ограничения*, налагаемые на проектные параметры, а также связи между параметрами, отражающие законы природы, сырьевые и материальные ресурсы, спрос и предложения рынка и т.п.

Эти связи и ограничения можно описать в виде *ограничений – равенств* или *ограничений – неравенств*, или их совокупностью:

Ограничения – равенства:

$$a_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

$$a_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

$$\dots\dots\dots$$

$$a_m(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

Ограничения – неравенства:

$$a_1 \leq Q_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq b_1$$

$$a_2 \leq Q_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq b_2$$

$$\dots\dots\dots$$

$$a_m \leq Q_m(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq b_m$$

Ограничения сужают область проектирования и иногда позволяют выразить одни проектные параметры через другие и, таким образом, уменьшить размерность решаемой задачи, что весьма существенно сокращают время, затрачиваемое на решение.

3.2. Примеры разработки математических моделей задач оптимизации

Пример 1. Предположим, что нам надо сконструировать банку в форме прямоугольного цилиндра, но такую, чтобы при заданном объёме длина её швов была наименьшей.

Математическая постановка задачи.

Целевой функцией (величиной подлежащей оптимизации) является длина швов L . Она зависит от двух параметров: высоты банки H и радиуса R , и определяется по формуле $L = F(H, R) = 4\pi R + H$, где R, H – проектные параметры из области $D(H, R)$. Ограничение на объём банки $V = \pi R^2 H$ является ограничением-равенством. Воспользуемся им для уменьшения количество проектных па-

раметров. Этого можно достичь, выразив R через V и H , или, выразив H через V и R .

$$\text{В первом случае: } R = \sqrt{\frac{V}{\pi H}} \quad \text{и} \quad L = F(H) = 4\pi\sqrt{\frac{V}{\pi H}} + H.$$

$$\text{Во втором: } H = \frac{V}{\pi R^2} \quad \text{и} \quad L = F(R) = 4\pi R + \frac{V}{\pi R^2}.$$

Во втором случае оптимизируемая функция оказалась проще, поэтому и возьмём её в качестве целевой при естественных ограничениях: $H > 0$, $R > 0$.

Теперь можем сформулировать задачу в стандартной форме:

Задача одномерная.

Проектный параметр: R .

Целевая функция, минимум которой надо найти: $L(R) = 4\pi R + V/\pi R^2$.

Пример 2. Для хранения авиационного горючего требуется спроектировать бак нового типа, компоновка которого показана на рис.3.1.

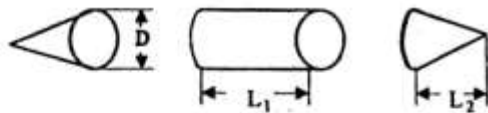


Рис.3.1. К проектированию бака для авиационного горючего.

Бак должен представлять собой тело вращения, изготовленное из трёх кусков металлического листа. Изготавливается он методом сварки трёх листовых заготовок. Объём бака должен составлять 1 м^3 . С целью достижения минимальных веса и стоимости требуется изготовить бак из минимального количества материала. Каковы должны быть значения L_1 , L_2 и D , чтобы выполнялось это требование?

Задачу будем решать, исходя из требования обеспечения минимума боковой поверхности бака

$$S = \pi L_1 D + 2\left[\pi(D^2/2)\sqrt{D^2/4 + L_2^2}\right].$$

Один из трёх проектных параметров L_1 , L_2 или D можно исключить, воспользовавшись формулой объёма бака

$$V = \pi D^2 \left\{ (L_2/6) + (L_1/4) \right\} = 1 \text{ (м}^3\text{)},$$

откуда

$$D = \sqrt{\frac{1}{\pi \left\{ (L_2/6) + (L_1/4) \right\}}}$$

Это позволит сформулировать задачу в стандартной форме:

Задача двухмерная.

Проектные параметры: L_1 , L_2 .

Целевая функция, минимум которой требуется найти:

$$S = \sqrt{\frac{\pi}{(L_2/6) + (L_1/4)}} \cdot \left\{ L_1 + \sqrt{4\pi \left\{ (L_2/6) + (L_1/4) \right\} + L_2^2} \right\}$$

Выводы: для разработки математической модели задач оптимизации необходимо:

- По смысловому содержанию выделить проектные параметры.
- Записать функцию цели.
- Записать систему ограничений.

3.3. Схема решения задач оптимизации

Процесс выбора наибольшего или наименьшего значений целевой функции в области проектирования можно провести по схеме:

1. Определить точки максимума или минимума целевой функции внутри области проектирования и вычислить в этих точках её значения.
2. Вычислить значения целевой функции на границе области проектирования.
3. Сравнить полученные значения функции и выбрать среди них требуемое.
4. За значения проектных параметров x_1, x_2, \dots, x_n принять значения, удовлетворяющие выбранному значению целевой функции.

Оценим некоторые пункты этой схемы с позиции практической реализации.

1. Для нахождения максимального или минимального значения функции мы располагаем классическими методами на базе производных, применимость которых распространяется только на простые, непрерывные и дифференцируемые функции. Получаемая при этом система уравнений

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

подлежит решению. Решение таких систем даже для определения одной точки, подозрительной на экстремум, весьма трудоёмкое мероприятие, а ведь целевая функция может иметь внутри области проектирования несколько экстремумов.

Кроме того, если целевая функция линейная относительно параметров проектирования, например,

$$F = C_1 x_1 + C_2 x_2, \quad (C_1, C_2 - \text{некоторые константы}),$$

то этот аппарат вообще непригоден, поскольку

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = C_1, \quad \frac{\partial F}{\partial x_2} = C_2,$$

отсюда всегда $C_1 = 0$, $C_2 = 0$ и постановка задачи оптимизации теряет всякий смысл, т. к. F вырождается в постоянную величину равную нулю.

2. Если граница области проектирования задана аналитическими соотношениями в виде равенств или неравенств, то практически невозможно вычислить значения целевой функции в каждой точке границы. Из этого следует, что для нахождения экстремумов целевых функций необходимы специальные численные методы. Эти методы существенно различаются между собой применительно к различным классам оптимизационных задач.

3.4. Численные методы решения задач безусловной одномерной оптимизации

Выше было сказано, что оптимизация бывает *одномерной* и *многомерной*. Сейчас мы добавим, что она бывает *условной*, содержащей ограничения, и *безусловной* - без ограничений.

Пусть требуется найти экстремум (максимума или минимума) функции одной независимой переменной

$$y = f(x) \quad \text{при } a \leq x \leq b.$$

Интервал изменения параметра x принято называть интервалом проектирования или интервалом неопределённости.

В дальнейшем условимся:

- говорить только об экстремуме – минимуме целевой функции, поскольку в силу симметричности функции $y = f(x)$ и $y = -f(x)$ относительно оси ОХ, минимум функции $y = f(x)$ является максимумом для функции $y = -f(x)$;
- предполагать, что на интервале неопределённости целевая функция *унимодальна*, т.е. имеет *только один экстремум*.

Последнее предположение не ограничивает применимость методов оптимизации для целевых функций, имеющих несколько *локальных* (местных) экстремумов, т.к. найдя локальные экстремумы и, сравнив их, найдем экстремум *глобальный* (справедливой для всей области проектирования).

Классический метод для функции одной переменной приводит к решению уравнения $\frac{df}{dx} = 0$. Найти его корни можно:

- для простых уравнений непосредственно: путем выделения переменной x для уравнений вида $ax + b = 0$; через дискриминант для уравнений квадратных: $ax^2 + bx + c = 0$ и приводящихся к ним и т.д.;
- для сложных - применением специальных методов: хорд, касательных, последовательных приближений, половинного отделения и т.д. (описанных в главе 2).

Если же $y = f(x)$ и (или) ее производная сложны или имеют разрывы в некоторых точках интервалах $[a, b]$, то применение классического приема затруднительно или невозможно. Численные методы в этих случаях действуют безотказно. Суть этих методов заключается в сужении границ интервала неопределенности до таких размеров, в пределах которых любая точка $\bar{x} = x$ может быть взята в качестве приближенного решения с некоторой, заранее обговоренной точностью. Точность решения, естественно, задается разработчиком либо по длине интервала ΔL , либо по изменению целевой функции ΔF (рис. 3.2.), исходя из смыслового содержания решаемой задачи.

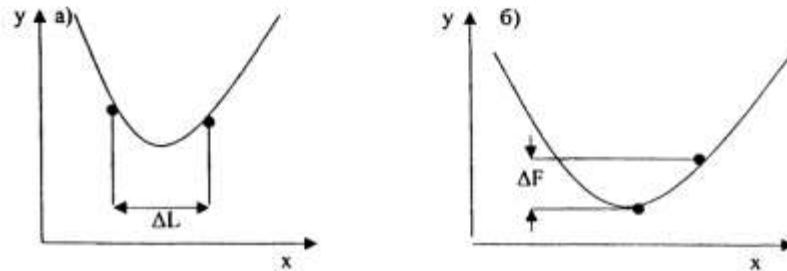


Рис. 3.2. Решение задачи с точностью:

- а) по длине интервала неопределённости ΔL ;
- б) по значениям целевой функции ΔF .

При дальнейшем изложении условимся задавать точность по ΔL .

В основе всех методов заложен алгоритм табулирования функции и принятия решения о новом интервале по её значениям в некотором количестве точек предыдущего интервала. Разнообразие методов вызвано стремлением решить задачу с меньшим объёмом вычислений.

3.4.1. Метод простого перебора

Это самый простой метод, заключающийся в табулировании целевой функции на интервале проектирования с шагом h , и выборе среди её полученных значений наименьшего. В качестве нового интервала выбирается окрест-

ность точки, соответствующая этому наименьшему значению. Описанная процедура позволяет сузить интервал неопределённости за один шаг до величины $Z = 2h$ (рис.3.3).

Можно провести исследования за один прием, протабулировав функцию с шагом $h = \epsilon/2$ в N точках интервала $[a, b]$

$$N = \left[\frac{b-a}{h} \right] + 1 = 2 \left[\frac{b-a}{\epsilon} \right] + 1.$$

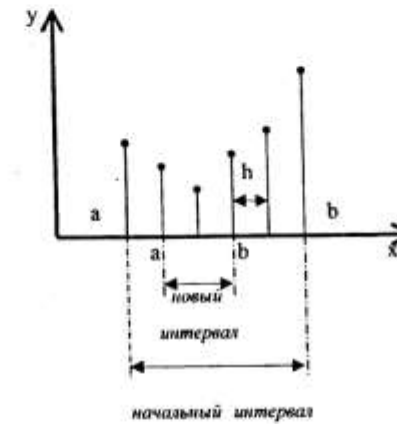


Рис. 3.3. Графическая иллюстрация метода простого перебора

Часто удается сократить объем вычислений за счет поэтапного табулирования функции с шагом h значительно большим чем $\epsilon/2$ на каждом этапе, кроме последнего, и с $h = \epsilon/2$ на последнем. Этот процесс можно провести по схеме:

- Разбить $[a, b]$ на небольшое количество N подинтервалов.
- Провести табулирование функции с шагом $h = (b-a)/N$.
- Определить точку $c = x$, в которой функция имеет минимум.
- За концы нового интервала взять точки $a = c - h$; $b = c + h$ и повторить все сначала для нового интервала $[a, b]$ и т.д., до выполнения условия $|b - a| \leq \epsilon$.

3.4.2. Метод половинного деления

Этот метод сужает интервал на каждом этапе ровно на половину (рис.3.4) и позволяет на первом этапе вычислять значения функции в трех точках, а на каждом последующем только в двух крайних, так, как значение функции в средней точке оказывается уже вычисленным на предыдущем этапе.

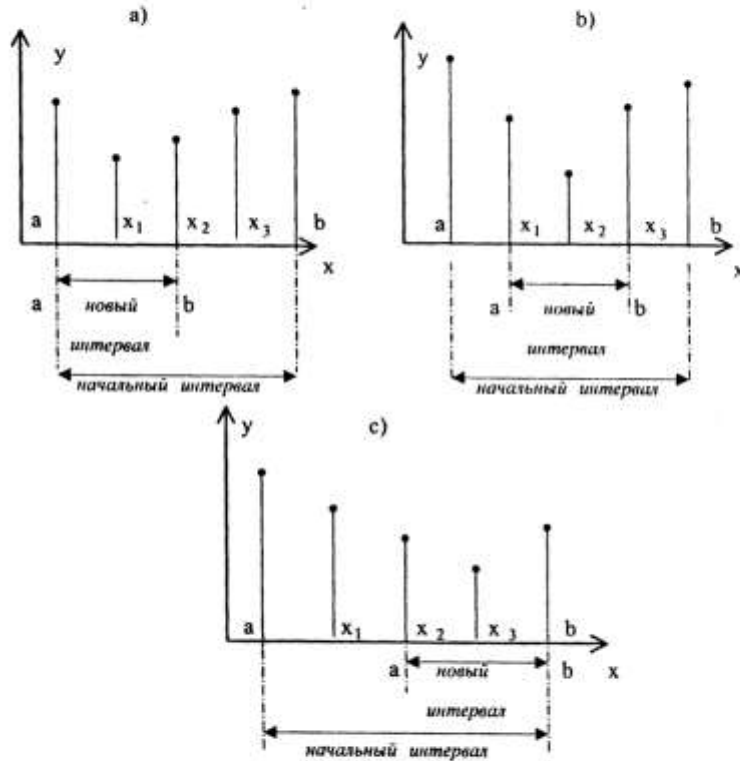


Рис.3.4. К выбору нового интервала в методе половинного деления

3.4.3. Метод золотого сечения

В этом методе сужение интервала осуществляется в результате сравнения функции в только в двух внутренних точках. Выбор этих точек (рис.3.4.) осу-

ществляется так, чтобы на каждом этапе сужения интервала эти точки располагались:

- на одинаковом расстоянии от его концов, т.е. $x_1 - a = b - x_2$
- отношение его оставшейся части к длине всего интервала было равно отношению отбрасываемой части к оставшейся, т.е. для ситуации

$$\text{рис.3.5.a) } \frac{x_2 - a}{b - a} = \frac{b - x_2}{x_2 - a}, \quad \text{а рис.3.5.b) } \frac{b - x_1}{b - a} = \frac{x_1 - a}{b - x_1}$$

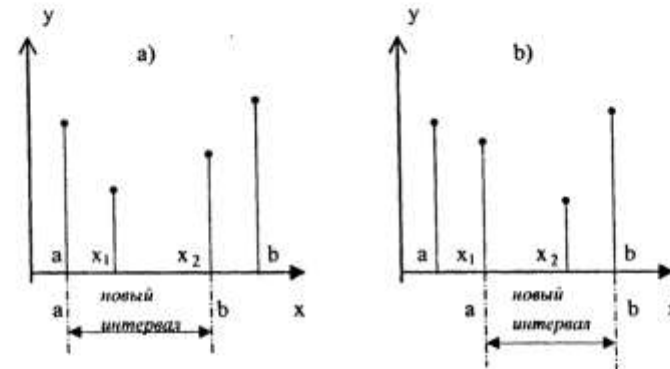


Рис.3.5. Расположение точек и выбор нового интервала в методе золотого сечения

Для вывода формул, определяющих положение точек x_1 и x_2 , обозначим длину всего интервала через Z , длину оставшегося - через z_1 , а длину отбрасываемого - через z_2 , тогда $\frac{z_1}{z} = \frac{z_2}{z_1}$ и $Z = z_1 + z_2$. Из первого уравнения имеем $z_1^2 = Zz_2$. Подставляя сюда значение Z из второго уравнения и, деля обе части на z_1^2 , получаем

$$\left(\frac{z_2}{z_1}\right)^2 + \frac{z_2}{z_1} - 1 = 0.$$

Решая это квадратное уравнение, находим для положительного корня значение

$$\frac{z_2}{z_1} = \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} = 0.618.$$

По рис. 3.5.а) имеем $\frac{z_1}{z_2} = \frac{x_2 - a}{b - a} = 0.618$. Отсюда

$$x_2 = a + 0.618(b - a),$$

из условия равно удаленности точек от концов интервала

$$x_1 = a + 0.382(b - a)$$

Уменьшив интервал на длину $0.382(b-a)$ на очередном этапе, переходим к следующему этапу и т.д., до выполнения условия $|b-a| \leq \epsilon$.

Для обеспечения цикличности процесса при разработке программы, следует переименование концов интервалов на очередном этапе проводить по схеме:

- если $f(x_1) < f(x_2)$, то $a = a$; $b = x_2$;
- если $f(x_1) \geq f(x_2)$, то $a = x_1$; $b = b$.

Оценка объема вычислений показывает, что на первом этапе целевая функция вычисляется в двух внутренних точках, на каждом последующем только в одной внутренней, т. к. значение в другой внутренней оказывается вычисленным на предыдущем этапе, следовательно, этот метод - самый экономичный среди рассмотренных методов.

Эти методы приводят к построению сходящейся по длине последовательности *вложенных подинтервалов* проектирования, на каждом из них выполняются одни и те же действия:

- вычисление координат внутренних точек (x, y) ;
- принятие решения о выборе нового интервала;
- формирование концов этого интервала;
- сравнение его длины с точностью ϵ и принятия решения об окончании процесса или его продолжении.

Поэтому, если концы подинтервалов обозначить через простые переменные a и b , то весь вычислительный процесс можно реализовать итерационным циклом с выходом из него по условию $|b-a| \leq \epsilon$.

3.4.4. Контрольные вопросы.

1. Является ли унимодальной функция, изображённая на рис. 3.5?
2. Как определить численные значения концов интервалов унимодальности этой функции?
3. По условию задачи необходимо сузить интервал $[2,5]$ до точности $\epsilon = 0.01$. Что лучше: решение задачи в один приём, или поэтапно с вычислением функции на каждом этапе не более чем в 10 точках?

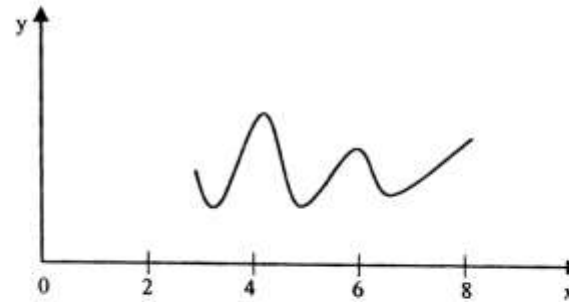


Рис. 3.6. График функции $y = f(x)$

4. Для цикличности процесса и уменьшения объема вычислений методом половинного деления для ситуации, изображённой на рис.3.3.а) необходимо провести переименования: $b = x_2$; $f(b) = f(x_2)$. Какие переименования необходимы для ситуаций б) и с)?

5. Как провести подобные переименования в методе золотого сечения (рис. 3.4 а), б))?

3.5. Многомерная безусловная оптимизация

Пусть целевая функция зависит от n проектных параметров

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n).$$

Существует множество численных методов нахождения её экстремумов, мы же рассмотрим только некоторые из них. Для удобства изложения сути методов будем отыскивать экстремум-максимум. Представим себе, что мы стоим у подножия горы и хотим добраться до её вершины. Для достижения цели нам надо идти всё время выше и выше. Но как идти? Каким маршрутом? Чтобы составить маршрут, надо знать его начальную точку, выбрать путь движения и, наконец, определиться, достижение какой точки следует считать окончанием пути. Путь движения можно разбить на этапы, на каждом этапе выбрать направление движения и определить расстояние, которое надо пройти в данном направлении. Очевидно, что из любой точки к вершине есть много путей. Один пологий, но длинный, другой – короткий, но крутой; а между ними бесчисленное множество промежуточных. С математических позиций движение по любому пути равносильно заданию на его этапах направлений и длин некоторых векторов.

3.5.1. Метод покоординатного подъёма

Идея метода аналогична процессу достижения вершины по пути, каждый этап которого состоит из горизонтальных и вертикальных отрезков.

Изложение метода проведём на уровне алгоритма для целевой функции, зависящей от двух проектных параметров $y = f(x_1, x_2)$. Для изложения сути метода весь процесс приближения к решению разобьём на этапы, а каждый этап – на шаги. По смысловому содержанию решаемой проблемы зададим координаты стартовой точки $M^0(x_1^0, x_2^0)$. На первом этапе параметр x_1 зафиксируем, а x_2 будем считать свободным. В результате наш путь будет соответствовать направлению оси Ox_2 . Целевая функция будет зависеть только от одного параметра и, применив к ней методы одномерной оптимизации, находим экстремум по этому свободному параметру. На этом очередной шаг данного этапа заканчиваем. Взяв полученную точку в качестве начальной и, считая теперь в качестве свободного параметра x_1 , находим экстремум по этому параметру, осуществляя движение по пути, соответствующему направлению оси Ox_1 . В результате по-

лучаем конечную точку $M^1(x_1^1, x_2^1)$ первого этапа. Взяв её в качестве стартовой на втором этапе, и, повторив схему движения первого этапа, получим возможность для продолжения пути на третьем этапе и т.д., процесс следует закончить, если для двух соседних этапов $k-20$ и $k+1-20$ выполняются соотношения

$$|x_i^{k+1} - x_i^k| \leq \varepsilon_i \text{ для } i=1,2,$$

где ε_i -точность вычислений i -го параметра. Впрочем, точность может быть одинаковой по всем параметрам.

3.5.2. Градиентные методы

Перед изложением сути этих методов напомним некоторые сведения о векторах. Вектор – направленный отрезок прямой, или отрезок, один из концов которого называется началом, а другой – его концом. Вектор характеризуется длиной и направлением. На рис.3.6 показан вектор в двухмерном пространстве.

Проекции OA и OB этого вектора на координатные оси – его координаты. Длина вектора $|\overline{OC}| = L = \sqrt{OA^2 + OB^2}$, а направление $tg \alpha = OA / OB$.

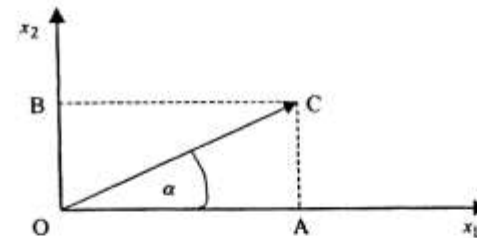


Рис.3.6. Вектор в двухмерном пространстве

В основе градиентных методов заложен факт того, что путь к вершине пролегает вдоль вектора – градиента, т.е., вектора, координатами которого являются частные производные целевой функции:

$$\overline{\text{grad}} f = \left\{ \frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right\}.$$

Этот вектор перпендикулярен линии уровня и указывает направление наибольшего возрастания функции в данной точке. Вектор, противоположный градиенту, называется антиградиентом и указывает направление наибольшего убывания функции. Длина вектора градиента, как и любого вектора, определяется формулой

$$L = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^2}$$

Иногда характер целевой функции бывает хорошо известен, чтобы можно было вычислить компоненты вектора градиента путём непосредственного дифференцирования. Если таким способом частные производные получить не удаётся, то можно вычислить их приближённо в непосредственной окрестности рассматриваемой точки:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{f(x_1, x_2, \dots, x_i + \Delta, \dots, x_n) - f(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n)}{\Delta},$$

где Δ - небольшое смещение в направлении x_i .

Условие $L = 0$ является признаком экстремума. В практических расчётах пользуются приближёнными оценками экстремума, полагая, что экстремум найден, если

$$L \leq \varepsilon_L;$$

или

$$\text{для функций пологих} \quad |f_{k+1} - f_k| \leq \varepsilon_f;$$

$$\text{для функций крутых} \quad \sum_{i=1}^n \frac{x_i^{k+1} - x_i^k}{x_i^{k+1}} \leq \varepsilon_x.$$

В этих признаках $\varepsilon_L, \varepsilon_f, \varepsilon_x$ - заданная точность, k - номер шага.

Алгоритм поиска экстремума заключается в том, что после выбора стартовой точки, определяют в ней направление градиента и шагают вдоль него, используя формулу

$$x_i^{k+1} = x_i^k + h_i v_i^k,$$

где k -номер шага, h_i - шаг по i -му параметру, v_i - составляющая градиента, вычисляемая по формуле

$$v_i = \frac{\frac{\partial f}{\partial x_i}}{\sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 \right]^{1/2}}.$$

Шагать по градиенту можно разными способами:

- с одинаковым шагом h по всем параметрам или со своим для каждого проектного параметра;
- определяя направление градиента перед каждым шагом, или только в конечной точке этапа;
- осуществлять шаги одинаковой длины или уменьшать длину каждого шага и т.д.

Эти способы и определяют название методов. Так метод, в котором градиент вычисляется на каждом шаге, принято называть просто *градиентным*, а метод, в котором градиент вычисляется только в конечной точке этапа, называется *методом наискорейшего подъёма* для экстремума-максимума и *наискорейшего спуска* для экстремума-минимума.

На уровне алгоритма рассмотрим подробнее метод наискорейшего подъёма:

1. Задаём стартовую точку первого этапа.
2. Задаём длину шага.
3. Вычисляем в ней градиент.
4. Шагаем вдоль градиента с этим шагом, проверяя в каждой точке условия прекращения поиска. При выполнении хотя бы одного из них, поиск прекращаем. В противном случае делаем следующий шаг и т.д. до точки, в которой функция начинает убывать.
5. Возвращаемся на шаг назад, принимаем эту точку за стартовую на новом этапе, уменьшаем вдвое длину шага и повторяем процесс с пункта 3.

3.6. Условная оптимизация при решении инженерных задач

До сих пор мы рассматривали численные методы для задач условной оптимизации. На практике довольно часто задача кроме целевой функции предполагает наличие дополнительных условий и становится задачей условной оптимизации. Наиболее простой случай такой оптимизации имеет вид:

$$F = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow \min; \quad a_i \leq x_i \leq b_i,$$

т.е. для каждого проектного параметра введены граничные условия.

Такую задачу можно решить по той же схеме решения, что и для безусловной оптимизации. В том случае, когда значение переменной x_i на k -ой итерации выходит на (или за) нижнюю границу, т.е. оказывается $x_i^k \leq a_i$, то за минимальное значение $\bar{x}_i = a_i$ и поиск продолжается по остальным переменным. Аналогично осуществляется поиск и для верхней границы. Нередко границы области допустимых решений оказываются гораздо сложнее рассмотренных выше. Например,

$$\begin{aligned} F &= f(x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow \min; \\ g_j(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \quad j = 1, 2, \dots, m; \\ a_i &\leq x_i \leq b_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned}$$

Из огромного количество методов решения таких задач, рассмотрим идею только одного, так называемого метода *штрафных функций*. Его суть заключается в переходе от условной оптимизации к безусловной. Вместо начальной целевой функции записывается новая:

$$Z(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) + Q[g_j(x_1, x_2, \dots, x_n)] \rightarrow \min,$$

где $Q[g_j(x_1, x_2, \dots, x_n)]$ – штрафная функция, удовлетворяющая условиям:

$Q[g_j(x_1, x_2, \dots, x_n)] = 0$, если значения всех проектных параметров находятся в области допустимых решений и

$Q[g_j(x_1, x_2, \dots, x_n)] > 0$, если вне её.

Возможным видом штрафной функции может быть

$$Q[g_j(x_1, x_2, \dots, x_n)] = M \sum_{j=1}^m g_j^2(x_1, x_2, \dots, x_n),$$

где M – большое число. Так, если ожидаемое значение целевой функции порядка единиц, то можно принять $M = 1000$. Поскольку в области допустимых решений функции $Q[g_j(x_1, x_2, \dots, x_n)]$ и $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ имеют один и тот же минимум, то получить решение задачи условной оптимизации можно в результате решения нескольких задач безусловной оптимизации, повторяя процедуру оптимизации, используя убывающие значения M :

$$M_1 > M_2 > M_3 > \dots > 0.$$

По мере того, как M_p стремится к нулю, решение оптимизационной задачи на безусловный экстремум стремится к решению задачи на условный минимум.

Рассмотрим на примере процесс перехода от условной оптимизации к безусловной. Требуется найти минимум целевой функции

$$F = x_1 + x_2^2$$

при ограничениях:

$$x_2 = 2(x_1 - 3)^2 + 1;$$

$$(x_1 - 3)^2 + (x_2 - 1)^2 \geq 3;$$

$$0 \leq x_1 \leq 4; \quad 0 \leq x_2 \leq 3.$$

Чтобы удовлетворить требование постановки задачи условной оптимизации, надо второе ограничение записать в форме равенства. Мы сделаем это вводом в левую часть его новой неотрицательной переменной $y \geq 0$, в результате получим

$$(x_1 - 3)^2 + (x_2 - 1)^2 - y - 3 = 0.$$

Теперь составим новую целевую функцию, включающую штрафную с числом $M = 1000$. Тогда задача оптимизации примет вид:

$$F = x_1 + x_2^2 + 1000\{[x_2 - 2(x_1 - 3)^2 - 1] + [(x_1 - 3)^2 + (x_2 - 1)^2 - y - 3]\} \rightarrow \min;$$

$$0 \leq x_1 \leq 4; \quad 0 \leq x_2 \leq 3; \quad y \geq 0.$$

3.7. Задачи условной оптимизации в экономике

Мы рассмотрели задачи условной оптимизации, которые могут быть сформулированы при решении инженерных задач. В экономике такой класс задач является предметом изучения раздела науки – *математического программирования*. Последнее слово появилось в наименовании по той причине, что широкое решение таких задач стало возможным только с появлением электронной вычислительной техники. Совокупность проектных параметров называется планом, а сами параметры – компонентами плана. Ограничений в таких задачах может быть сколько угодно. Самый простой случай ограничений, это когда количество ограничений равно количеству проектных параметров. В этом случае задача имеет единственное решение, т.е. единственный вариант. Такие задачи практически не представляют интереса, т.к. не имеют никакого выбора.

В настоящее время уже выделился определённый класс задач, эффективно решаемых методами математического программирования. Это задачи: распределительные; управления запасами; замены оборудования; упорядочения и согласования; выбора оптимальных режимов движения и др.

Если в решаемой задаче целевая функция и ограничения линейно зависят от проектных параметров, то задача относится к разделу линейного программирования, в противном случае к нелинейному. Рассмотрим только задачи первого класса.

3.7.1. Математическое описание задач линейного программирования

Пример. Цех располагает 4-мя группами оборудования А, В, С, D и выпускает 2 вида продукции. Количество единиц оборудования и его занятость приведены в таблице 3.1.

Определить план выпуска продукции каждого вида, обеспечивающий максимальную прибыль.

Математическая постановка задачи.

Таблица 3.1

Группы оборудования	Количество единиц оборудования в группе	Количество единиц оборудования, используемых при выпуске единицы продукции	
		Вид 1	Вид 2
А	12	2	2
В	10	1	2
С	16	4	0
Д	12	0	4
Прибыль		200 руб.	300 руб.

Обозначим через x_1 и x_2 – количество единиц продукции 1-го и 2-го вида соответственно, планируемое к выпуску. Тогда целевая функция

$$L(x_1, x_2) = 200x_1 + 300x_2$$

Ограничения, определяющие занятость оборудования по группам:

$$\begin{aligned} \text{А: } 2x_1 + 2x_2 &\leq 12 & x_1 + x_2 &\leq 6 \\ \text{В: } x_1 + 2x_2 &\leq 10 & \text{или} & x_1 + 2x_2 &\leq 10 & (1) \\ \text{С: } 4x_1 + 0x_2 &\leq 16 & x_1 &\leq 4 \\ \text{Д: } 0x_1 + 4x_2 &\leq 12 & x_2 &\leq 3 \end{aligned}$$

Естественные ограничения:

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \quad (2)$$

Требуется определить наибольшее значение целевой функции $L(x_1, x_2)$ при ограничениях (1) и (2).

Рассмотрев пример, можем сформулировать задачу линейного программирования в общем виде:

найти наибольшее (наименьшее) значение целевой функции

$$L = \sum_{j=1}^n c_j x_j$$

при ограничениях ресурсных:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

и естественных

$$x_j \geq 0, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

где a_{ij} - коэффициенты при неизвестных в ограничениях.

В задачах линейного программирования ограничения формируют область допустимых решений.

3.7.3. Методы решения

Если задача имеет только *два параметра*, то она может быть решена *графически*. При *большом числе* параметров для решения надо использовать специальный метод, называемый *симплекс – методом*.

Графический метод

Проиллюстрируем его суть на примере решения задачи, рассмотренной в примере, для которой требуется найти максимум целевой функции

$$L(x_1, x_2) = 200x_1 + 300x_2$$

при ограничениях:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 \leq 6 \\ x_1 + 2x_2 \leq 10 \\ x_1 \leq 4 \\ x_2 \leq 3 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{cases}$$

Решение:

1. На плоскости построим систему координат x_1, x_2
2. Построим область допустимых решений. Из естественных ограничений $x_1 \geq 0$ и $x_2 \geq 0$ следует, что она расположена в первой координатной четверти, т.е. выше Ox_1 и правее Ox_2 .

На первом ресурсном ограничении покажем как по ним строим область. Сохранив в ограничении только знак равенства, превращаем это ограничение в уравнение прямой $x_1 + x_2 = 6$. Строим эту прямую. Она делит плоскость на две полуплоскости: полуплоскость, лежащую выше и полуплоскость лежащую ниже её. Для определения требуемой полуплоскости возьмём любую точку, принадлежащую одной из полуплоскостей, и поставим её координаты в рассматриваемое ограничение – неравенство. Для простоты вычислений возьмём начало координат, т.е. точку $O(0,0)$, поставив её координаты в неравенство, получим: $0 \leq 6$, из чего следует вывод о том, что в область допустимых решений входит полуплоскость, расположенная ниже прямой $x_1 + x_2 = 6$.

Аналогично определяем полуплоскости, соответствующие остальным ограничениям. Общая часть всех полуплоскостей образует область проектирования OABCD, заштрихованную на рис.2.6.

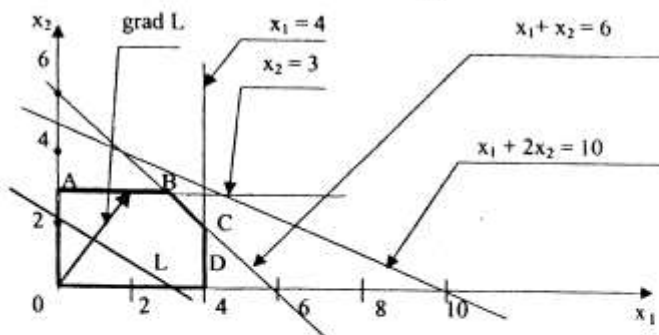


Рис.3.7. К реализации графического метода

Вершинами образованного пятиугольника являются точки пересечения прямых. Любая точка, принадлежащая этому пятиугольнику, определяет допустимое решение задачи или допустимый план, который может быть выполнен при имеющихся ресурсах.

3. Для нахождения оптимального плана нам необходимо найти такую точку, принадлежащую пятиугольнику, в которой целевая функция достигнет наибольшее значение.

Рассмотрим на плоскости x_1x_2 линии уровня этой целевой функции, они представляют семейство прямых линий, параллельных прямой

$$L = 200x_1 + 300x_2$$

Зададим значение L таким, чтобы прямая проходила через область допустимых решений. При $L = 600$ получим прямую $2x_1 + 3x_2 = 6$. Строим её. При параллельном переносе этой прямой вправо целевая функция возрастает, влево — убывает. Это соответствует направлению вектора-градиента. В рассматриваемом примере функция линейна, поэтому компоненты вектора-градиента совпадают с коэффициентами c_1 и c_2 . Строим вектор-градиент из начала координат в точку (c_1, c_2) . Перемещаем прямую перпендикулярно градиенту до последней общей точки этой прямой с областью допустимых решений. В нашем случае общей последней точкой является точка B(3, 3), полученная пересечени-

ем линий: $x_1 + x_2 = 6$ и $x_1 = 3$. Решение $x_1 = 3$ и $x_2 = 3$ — единственное из возможных, позволяющих нам получить наибольшую прибыль в размере 1500 руб.

В общем случае при правильной постановке задачи предельная прямая может совпасть с одной из границ области допустимых решений. Тогда любая точка этой границы является оптимальным решением, что дает право говорить о бесчисленном множестве решений задачи.

Анализ полученного решения

1. Анализируя график можно получить информацию о том, какие ресурсные ограничения являются существенными, а какие таковыми не являются. В нашем случае ограничение

$$x_1 + 2x_2 \leq 10$$

находится вне области допустимых решений, значит, является несущественным и при дальнейших исследованиях его можно не учитывать. Остальные ограничения существенны.

2. В оптимальной точке неравенства переходят в точные равенства, следовательно, соответствующие им ресурсы используются полностью.

3. Подставляя оптимальные значения параметров в оставшиеся ограничения, получим возможность видеть, что одна единица оборудования C и три — оборудования B свободны, и Вы вправе распорядиться ими по своему усмотрению.

Симплекс — метод

Симплекс — простейший многогранник в заданном пространстве. Так в двухмерном пространстве — это треугольник.

Рассмотрим только особенности этого метода. Они заключаются в том, что:

- область допустимых решений представляет собой *выпуклый многогранник*, т.е. такой, который пересекается гиперплоскостью не более, чем в двух точках (рис.3.7);
- решение достигается только *в вершинах области* допустимых решений;
- перебор вершин осуществляется *специальным упорядоченным* способом.

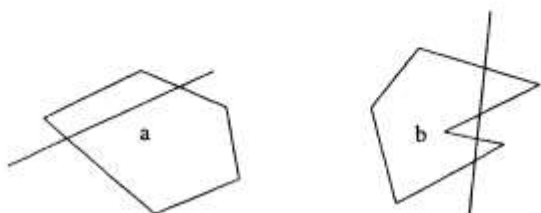


Рис. 3.7. Форма многогранников:
а – выпуклый, б – невыпуклый.

3.8. Теория двойственности

Решая выше поставленную задачу, приходим к выводу, что максимальная прибыль составит 1500 рублей. Возникает вопрос: почему не больше? Что нас лимитирует? То есть, какой-то вид сырья будет полностью использован при оптимальном плане. Это не позволит увеличить выпуск продукции, а, следовательно, и прибыль. Какой? Для получения ответа на этот вопрос посмотрим на график. Точка В получена пересечением прямых $x_1 + x_2 = 6$ и $x_2 = 3$. Эти прямые получены из ограничений по количеству единиц оборудования групп А и D. Следовательно, оборудование этих двух групп при оптимальном плане будет использовано полностью, то есть оно и лимитирует дальнейшее увеличение прибыли. Оборудование групп В и С будет использовано не полностью. А если не две переменных, а больше? Задача уже не может быть решена графически. Этот подход для получения ответа на вопрос не годится.

Можно получить ответ на поставленный выше вопрос иначе. Подставляем найденные значения x_1 и x_2 в ограничения задачи и находим разницу между левой частью неравенств и правой. Лимитировать будет тот вид оборудования, для которого полученная разница равна нулю.

Возникает другой вопрос: есть возможность увеличить количество единиц оборудования в лимитирующих группах, как изменится при этом прибыль? Можно найти ответ на этот вопрос и на поставленные выше, найдя значения двойственных переменных.

С каждой задачей линейного программирования можно связать другую задачу, которую называют сопряжённой задачей (первую – прямой), а вместе они называются парой двойственных задач. Если для прямой задачи необходимо найти n -мерный вектор $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, то для сопряжённой находят m -мерный вектор $Y = (y_1, y_2, \dots, y_m)$. Здесь величины y_j выступают в роли оценок оборудования (сырья).

Для записи сопряжённой задачи следует сначала записать прямую задачу в каноническом виде. В нашем примере достаточно в каждое ограничение по оборудованию ввести ослабляющую переменную. В ограничение по оборудованию группы А вводим переменную x_3 . Получаем: $2x_1 + 2x_2 + x_3 = 12$. Здесь x_3 определяет количество неиспользованного оборудования группы А. В ограничение по оборудованию группы В вводим переменную x_4 , далее x_5 и x_6 .

Рассмотренный пример в каноническом виде:

$$\begin{aligned} \max L &= 200x_1 + 300x_2 \\ \begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + x_3 & = 12 \\ x_1 + 2x_2 + x_4 & = 10 \\ 4x_1 + x_5 & = 16 \\ 4x_2 + x_6 & = 12 \\ x_j \geq 0, \quad j = 1, 2, \dots, 6 \end{cases} \end{aligned}$$

Сопряжённая задача будет иметь вид:

$$\min L^* = 12y_1 + 10y_2 + 16y_3 + 12y_4$$

$$\begin{cases} 2y_1 + y_2 + 4y_3 & \geq 200 \\ 2y_1 + 2y_2 + 4y_4 & \geq 300 \\ y_1 & \geq 0 \\ y_2 & \geq 0 \\ y_3 & \geq 0 \\ y_4 & \geq 0 \end{cases}$$

Для записи сопряжённой задачи необходимо свободные члены прямой, записанной в каноническом виде, умножить на вектор двойственных переменных – будет получена функция цели. Транспонированную матрицу А (матрицу коэффициентов в ограничениях) умножить на вектор У – получены ограничения.

Если одна из двойственных задач решается симплексным методом, то ответ второй задачи получается автоматически (мы не рассматриваем симплексный метод, поэтому не уточняем как). При использовании некоторых пакетов линейного программирования выдаётся как оптимальный план прямой задачи, так и оптимальный план сопряжённой. Если такого нет, то необходимо решать обе задачи.

Как применять двойственные переменные? Для рассмотренного выше примера получаем $Y_{opt} = (100, 0, 0, 25)$. По второй теореме двойственности если $y_1 \neq 0$ (строгое неравенство), то при оптимальном плане первое ограничение выполняется как строгое равенство. Если $y_2 = 0$, то второе ограничение выполняется как строгое равенство, и т. д. Таким образом, зная значения двойственных переменных мы можем определять лимитирующий вид сырья. По значению двойственной переменной можно определить изменение значения функции цели при изменении на единицу запаса лимитирующего сырья. Для рассмотренного примера: если в группе оборудования А будет не 12 единиц, а 13, то функция цели примет значение $1500 + 1 \cdot y_1 = 1500 + 100 = 1600$. Но если уве-

личить на единицу количество оборудования в группе В, то прибыль будет $1500 + 1 \cdot y_4 = 1500 + 25 = 1525$. Такие выводы можно делать при незначительных изменениях запасов сырья. При значительных изменениях двойственные переменные принимают новые значения, и лимитировать могут другие виды сырья.

3.9. Рекомендации по решению задач оптимизации

1. Если Вам предстоит решить практическую задачу одномерной оптимизации, то при определённых навыках программирования Вы можете сами разработать программы, в противном случае следует воспользоваться готовыми программами или поручить их разработку специалисту.

2. При решении задач многомерной оптимизации возьмите на себя участие в их постановке и приведении к виду, удовлетворяющему требованиям применяемых методов, и воспользуйтесь готовыми программными продуктами, лучше современными пакетами для решения инженерных задач, такими, как MATHCAD или MATLAB.

3. Для решения задач линейного программирования пользуйтесь пакетами или инструментом "Поиск решения" табличного процессора Excel. Считаем необходимым сообщить, что в настоящее время существуют специальные пакеты решения таких задач.

4. Моделирование процессов на основе обыкновенных дифференциальных уравнений

4.1. Введение

Дифференциальными уравнениями называются уравнения, содержащие одну или несколько производных. Инженеру часто приходится сталкиваться с ними при разработке новых изделий или технологических процессов, так как большая часть законов физики формулируется именно в виде дифференциальных уравнений. Практически любая задача проектирования, связанная с расче-

том потоков энергии или движения тел, в конечном счёте сводится к решению дифференциальных уравнений.

В зависимости от числа независимых переменных и, следовательно, типа входящих в них производных, дифференциальные уравнения делятся на две существенно различающиеся категории: обыкновенные (ОДУ), содержащие одну независимую переменную и производные по ней, и уравнения в частных производных, содержащие несколько независимых переменных и производные по ним, которые называются частными. В этой главе рассматриваются ОДУ, уравнениям в частных производных посвящена следующая глава.

4.2. Основы теории

ОДУ, записанное в виде

$$F(x, y, y', y'', \dots, y^{(n)}) = 0$$

где

x - независимая переменная;

$y = y(x)$ - неизвестная функция;

$y', y'', \dots, y^{(n)}$ - её производные;

n - порядок старшей производной,

называется обыкновенным дифференциальным уравнением n -го порядка.

Функция $y = y(x)$ - называется *решением дифференциального уравнения*, если она при всех $x \in (a, b)$, удовлетворяет этому уравнению. В общем случае, если уравнение имеет решение, то таких решений бесконечно много, они могут быть заданы в виде $y = y(x, C)$, где C - произвольная константа. При решении инженерных задач требуется найти решение, удовлетворяющее некоторым *дополнительным условиям*. Если эти условия задаются при *одном значении* независимой переменной, то задача называется *задачей с начальными условиями*, или *задачей Коши*. Если условия задаются при *двух или более значениях* независимой переменной, то *задача называется краевой*. Часто в задаче Коши в роли независимой переменной выступает время t . Примером может служить задача о

свободных колебаниях тела, подвешенного на пружине. Если дополнительные условия заданы в виде значений перемещения и скорости про $t = 0$, то имеем задачу Коши. Для той же механической системы можно сформулировать и краевую задачу. В этом случае одно из условий должно состоять в задании перемещения по истечении некоторого промежутка времени. В краевых задачах в качестве независимой переменной часто выступает длина. Известным примером такого рода является дифференциальное уравнение, описывающее деформацию упругого стержня. В этом случае граничные условия обычно задаются на обоих концах стержня.

4.3. Методика разработки моделей на основе ОДУ

Изложим методику на примере решения следующей задачи.

Задача. Разработать модель регулируемого объекта - бака с протекающей через него жидкостью (рис.4.1).

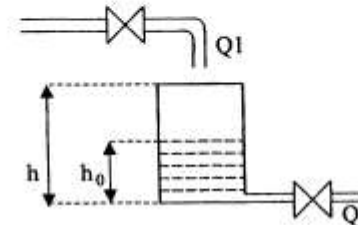


Рис.4.1. Схема бака.

Решение. Из условия материального баланса изменения количества жидкости в баке за время Δt определяется соотношением между расходом на притоке $Q1$ и стоке $Q2$:

$$S\Delta h = (Q1 - Q2)\Delta t,$$

или

$$\frac{\Delta h}{\Delta t} = \frac{Q1 - Q2}{S}.$$

Устремив Δt к нулю, получим уравнение, определяющее состояние объекта при изменении $Q1(t)$ и $Q2(t)$:

$$\frac{d(h(t))}{dt} = \frac{Q1(t) - Q2(t)}{S} \quad (1)$$

В рассматриваемом случае приток $Q1(t)$ не зависит от уровня жидкости в баке, а сток $Q2(t)$ находится в некоторой зависимости от перепада давлений, определяющегося величиной уровня жидкости:

$$Q2(t) = \alpha \sqrt{h(t)}, \quad (2)$$

где α - коэффициент расхода.

Положив $h = h_0$ при $t = 0$, получим задачу Коши. Задав дополнительное условие $h = h_k$ при $t = tk$, получим краевую задачу.

4.4. Методы решения ОДУ

Для решения задачи Коши и краевой применяются существенно различающиеся методы и вычислительные алгоритмы. Рассмотрим методы решения задачи Коши.

Все методы построены для уравнений первого порядка, разрешённых относительно производной, и их систем. Пусть дано дифференциальное уравнение

$$y' = f(x, y)$$

и начальное условие $y(x_0) = y_0$. Требуется найти функцию $y(x)$, удовлетворяющую как указанному уравнению, так и начальному условию. Самым простым методом решения является *метод Эйлера*.

Метод Эйлера

Метод основан на разложении функции в ряд Тейлора в окрестности x_0 :

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{1}{2} h^2 y''(x_0) + \dots$$

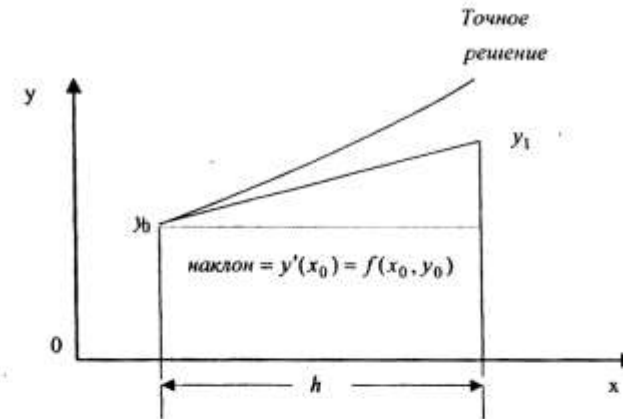


Рис.4.2. Метод Эйлера

Если h мало, то члены, содержащие h во второй или более высоких степенях, являются малыми более высоких порядков и ими можно пренебречь. Тогда

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0).$$

Находим $y'(x_0)$ из дифференциального уравнения, подставив в него начальное условие. Таким образом, можно получить приближённое значение решения в следующей точке. Взяв теперь эту точку за начальную, получим решение в следующей по отношению к ней точке и т.д. Следовательно, расчётную формулу можно записать в виде:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad i = 1, 2, \dots,$$

а результаты решения оформить в виде таблицы 4.1.

Таблица 4.1.

X	x_0	x_1	...	x_i	...
Y	y_0	y_1	...	y_i	...

Графически метод Эйлера представлен на рис.4.2. Ошибка метода имеет порядок h^2 , так как члены ряда Тейлора, содержащие h во второй и более высоких степенях, отбрасываются. Таким образом, для получения более точного решения необходимо уменьшить величину шага, тем самым увеличив машинное время на решение задачи.

Методы Рунге-Кутты

Это группа более точных методов, основанных на сохранении в ряде Тейлора членов порядка h выше второго. Наиболее распространённым из них является метод, при котором удерживаются все члены, включая h^4 . Это метод четвертого порядка точности, для которого ошибка на шаге имеет порядок h^5 . Расчеты по нему производятся по формуле

$$y_{i+1} = y_i + \frac{k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3}{6},$$

$$\text{где } k_0 = hf(x_i, y_i), k_1 = hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_0),$$

$$k_2 = hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1), \quad k_3 = hf(x_i + h, y_i + k_2).$$

4.5. Алгоритмы с автоматическим выбором шага

Если Вам требуется получить решение с заданной точностью ε , то следует воспользоваться алгоритмами с автоматическим выбором шага. Их суть заключается в том, что в каждой точке $x_{i+1} = x_i + h$ получают два значения y_{i+1} : одно при шаге h , другое при шаге $\frac{h}{2}$. Обозначим первое через y_{i+1}^1 , второе через y_{i+1}^2 . Если $|y_{i+1}^2 - y_{i+1}^1| \leq \varepsilon$, то решение в данной точке считается найденным и с шагом h переходим к нахождению решения в следующей точке. Если это условие не выполняется, то возвращаемся в точку x_i , делим шаг пополам, т.е. полагаем $h = \frac{h}{2}$, заменяем y_{i+1}^1 на y_{i+1}^2 и вычисляем в точке x_{i+1} новое зна-

чение y_{i+1}^2 . Опять сравниваем и т.д. В результате получим решение с заданной нами точностью в каждой точке интервала $[a, b]$.

4.6. Методы решения систем дифференциальных уравнений

Формулы Эйлера и Рунге – Кутты, а также алгоритм с автоматическим выбором шага можно применять и для решения систем дифференциальных уравнений первого порядка. Покажем, как это осуществляется на примере системы двух уравнений

$$\frac{dz}{dx} = g(x, y, z)$$

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

при начальных условиях $y(x_0) = y_0$ и $z(x_0) = z_0$.

По Эйлерау

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i, z_i)$$

$$z_{i+1} = z_i + hg(x_i, y_i, z_i), i = 1, 2, \dots$$

По Рунге – Кутта

$$y_{i+1} = y_i + K, \quad z_{i+1} = z_i + L,$$

где

$$K = \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6}, \quad L = \frac{l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4}{6}.$$

Здесь

$$k_1 = hf(x_i, y_i, z_i),$$

$$l_1 = hg(x_i, y_i, z_i),$$

$$k_2 = hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1, z_i + \frac{1}{2}l_1),$$

$$l_2 = hg(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1, z_i + \frac{1}{2}l_1),$$

$$k_3 = hf(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2, z_i + \frac{1}{2}l_2),$$

$$l_3 = hg(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2, z_i + \frac{1}{2}l_2),$$

$$k_4 = hf(x_i + h, y_i + k_3, z_i + l_3),$$

$$l_4 = hg(x_i + h, y_i + k_3, z_i + l_3).$$

4.7. Приведение уравнения n-го порядка к системе уравнений первого порядка

Для демонстрации этого процесса рассмотрим уравнение второго порядка

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = g(x, y, \frac{dy}{dx}).$$

Положим $z = \frac{dy}{dx}$, тогда $\frac{dz}{dx} = \frac{d^2 y}{dx^2}$ и получим два уравнения первого порядка:

$$\frac{dz}{dx} = g(x, y, z),$$

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

$$\text{где } f(x, y, z) = z.$$

Задача Коши в этом случае будет содержать два начальных условия

$$y(x_0) = y_0 \text{ и } z(x_0) = z_0.$$

4.8. Методы решения краевых задач

Изложение проведём на примере решения дифференциального уравнения второго порядка

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = f(x, y, \frac{dy}{dx})$$

при граничных условиях $y(a) = A$ и $y(b) = B$.

Из методов рассмотрим метод конечных разностей, который позволяет свести решение краевой задачи к решению систем алгебраических уравнений.

Разделим интервал $[a, b]$ на n равных частей, тогда для любой точки:

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

где $x_0 = a, x_n = b, h = \frac{b-a}{n}$. Точки x_i , назовём узлами. Зная координаты

узлов и, пользуясь конечно-разностными выражениями для производных

$$y'(x_i) = \frac{1}{2h}(y_{i+1} - y_{i-1}),$$

$$y''(x_i) = \frac{1}{h^2}(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}),$$

после подстановки их в дифференциальное уравнение, получим систему из $(n-1)$ -го алгебраического уравнения с $n-1$ неизвестными y_i . Остается только решить теперь эту систему.

Пример. Привести дифференциальное уравнение $y'' = 2x + y$ при условии $y(0) = 0, y(1) = 1$ и шаге $h = 0.2$ к системе алгебраических уравнений.

В разностной форме это уравнение имеет вид

$$\frac{1}{h^2}(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}) = 2x_i + y_i, \quad i = 1, 2, 3, 4.$$

Приведа к общему знаменателю, и выполнив приведение подобных членов, получим

$$y_{i+1} - (2 + h^2)y_i + y_{i-1} = 2h^2 x_i$$

При $i = 1$ $y_0 = 0, x_0 = 0.2$ получим:

$$-2.04y_1 + y_2 = 0.016.$$

Выполнив аналогичные действия для всех i , получим систему 4-х алгебраических уравнений с 4-мя неизвестными:

$$-2.04y_1 + y_2 = 0.016$$

$$y_1 - 2.04y_2 + y_3 = 0.032$$

$$y_2 - 2.04y_3 + y_4 = 0.048$$

$$y_3 - 2.04y_4 = -0.936$$

Решение этой системы можно получить обычным методом исключения переменных. В более сложных ситуациях для решения таких систем применяется метод прогонки, суть которого будет изложена в главе 5.

4.9. Рекомендации по решению обыкновенных дифференциальных уравнений

1. Если Вы не располагаете готовой программой или компьютером с соответствующим программным обеспечением, и хотите выяснить характер поведения интегральной кривой, воспользуйтесь методом Эйлера.
2. Для получения более точного решения примените метод Рунге-Кутты, для чего разработайте программу или лучше воспользуйтесь готовой.
3. При наличии современного компьютера воспользуйтесь математическими пакетами Mathcad, Matlab или любым табличным процессором.

5. Моделирование процессов, приводящих к дифференциальным уравнениям в частных производных

5.1. Введение

При анализе химико-технологических процессов, нагрева и охлаждения тел и т.п., часто приходится иметь дело с величинами, значения которых меняются от одной точки тела к другой непрерывно.

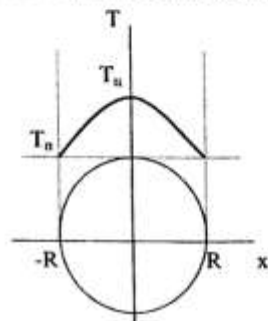


Рис.5.1.

Так, если поместить головку сыра для хранения в холодильник, ее температура будет меняться постепенно. Сначала остынет поверхностный слой, тогда как центральная часть головки будет оставаться теплой. Постепенно охлажденная зона будет занимать все более толстый слой, но в центре головки температура долго будет оставаться более высокой, чем у поверхности. Изменение

температуры внутри головки можно представить графиком $T(x)$, где x – координата, отсчитываемая вдоль диаметра головки (рис. 5.1). Здесь T_n – температура поверхности, R – ее радиус. Очевидно, температура является функцией расстояния от центра головки, а также зависит от времени t

$$T = f(r, t), \quad \text{где } r = |x|.$$

Эта функция непрерывна, т.к. температура в сплошной среде не может измениться скачкообразно. Если вместо симметричной головки взять тело иной формы, температура в нем окажется функцией трех координат и времени

$$T = f(x, y, z, t) \quad (5.1)$$

Такое непрерывное распределение температуры по точкам в сплошной среде называется *полем* температуры. Поля могут быть образованы и другими величинами – давлением, концентрацией растворенного вещества и т.п.

Бывают векторные поля; например, поле скоростей в жидкости или газе. Если в жидкости движется какое-то тело (например, весло в воде), оно увлекает за собой часть жидкости; в то же время, жидкость вдали от тела остается неподвижной. Вектор скорости изменяется от точки к точке, постепенно уменьшаясь до нуля, так что

$$\vec{V} = \vec{V}(x, y, z, t). \quad (5.2)$$

Такое векторное поле можно представить, как комбинацию трех скалярных полей проекций скорости на оси координат.

5.2. Дифференциальное уравнение теплопроводности

Рассмотрим процесс теплообмена в твердом теле. Количество тепла, передаваемое за некоторое бесконечно малое время dt через бесконечно малый элемент dF поверхности, нормальной к координатной оси Ox (рис. 5.2), пропорционально dt и dF , а также зависит от скорости изменения температуры i направлении оси Ox – чем быстрее изменяется температура, тем больше передается тепла. В большинстве случаев связь количества передаваемого тепла с скоростью изменения температуры вдоль Ox принимается линейной:

$$dQ_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} dydzdt. \quad (5.3)$$

Коэффициент пропорциональности λ называется коэффициентом теплопроводности; знак "минус" указывает на известный из физики факт – тепло передается в сторону убывания температуры.

Отношение

$$\frac{dQ_x}{dtdydz} = q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad (5.4)$$

называется плотностью потока тепла в направлении координаты x (численно величина q , соответствует количеству тепла, передаваемому за 1 сек через 1 м^2 поверхности). Аналогично можно записать

$$\begin{aligned} q_y &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial y}, \\ q_z &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial z}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Величины q_x, q_y, q_z можно рассматривать, как компоненты вектора

$$\vec{q} = q_x \vec{i} + q_y \vec{j} + q_z \vec{k}, \quad (5.6)$$

называемого вектором плотности потока тепла. Он определяет направление переноса тепла через данную точку пространства и количество тепла, переносимого за 1 сек в расчете на 1 м^2 площади поверхности, нормальной к этому направлению. Производные температуры по координатам тоже являются компонентами вектора, называемого градиентом температуры

$$\text{grad}T = \frac{\partial T}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial T}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial T}{\partial z} \vec{k}. \quad (5.7)$$

Для определения градиента температуры необходимо знать вид функции (5.1), поэтому он является характеристикой температурного поля. Аналогично

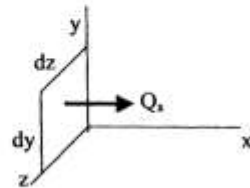


Рис.5.2.

вводятся градиенты других величин – давления, концентрации и т.п. (существуют и градиенты векторных величин, например, скорости, но их рассмотрение требует применения сложного математического аппарата).

В векторной форме закон теплопроводности записывается

$$\vec{q} = -\lambda \cdot \text{grad}T. \quad (5.8)$$

Это соотношение называется *законом Фурье*. Аналогичный вид имеет так называемый *закон Фика*, описывающий диффузию какого-либо вещества в сплошной среде

$$\vec{g}_i = -\rho D_i \cdot \text{grad}c_i, \quad (5.9)$$

где вектор \vec{g}_i – вектор плотности потока массы i -компонента смеси вещества (модуль этого вектора показывает, сколько данного вещества проходит за 1 сек через малый элемент поверхности, нормальной к направлению переноса, в расчете на 1 м^2 площади поверхности), $\text{grad} c_i$ – градиент концентрации данного вещества, ρ – плотность среды, D_i – коэффициент диффузии данного вещества.

В силу аналогии законов Фурье и Фика многие закономерности и расчетные формулы теплообмена оказываются справедливыми и для массообмена (диффузии).

Рассмотрим бесконечно малый элемент сплошной среды в виде параллелепипеда с ребрами dx, dy, dz .

Через левую грань объема в него поступает количество теплоты dQ_x , описываемое формулой (5.3). Одновременно через правую грань из него уходит теплота

$$dQ_{x+dx} = -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x+dx} dydzdt.$$

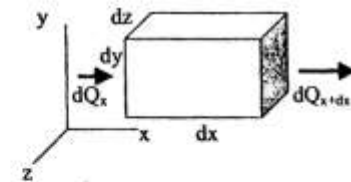


Рис. 5.3

Если температура меняется вдоль оси Ox , значения производных $(\partial T/\partial x)$ на противоположных гранях неодинаковы. В итоге внутри рассматриваемого элемента остается тепло

$$d^2 Q_x = -\lambda dy dz dt \left[\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_x - \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x+dx} \right] = -\lambda dy dz dt \cdot dx \left[\frac{\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_x - \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x+dx}}{dx} \right]$$

Если dx – бесконечно малая величина (т.е., в конце вывода должен быть совершен предельный переход при $dx, dy, dz, dt \rightarrow 0$), выражение в квадратных скобках является второй производной температуры по x (со знаком "минус"); тогда

$$d^2 Q_x = \lambda \cdot dV \cdot dt \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}.$$

Аналогично можно рассмотреть две другие пары противоположных граней. Тогда общее количество тепла, накопленное в объеме за время dt , равно

$$d^2 Q = d^2 Q_x + d^2 Q_y + d^2 Q_z = \lambda \cdot dV \cdot dt \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right).$$

Накопление тепла вызывает нагрев вещества в объеме

$$d^2 Q = dm \cdot c \cdot (\partial T)_t = \rho \cdot dV \cdot c \cdot \frac{\partial T}{\partial t},$$

где $(\partial T)_t = (\partial T / \partial t) \cdot dt$ – частный дифференциал температуры.

Приравняв два выражения для $d^2 Q$, получаем

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = \lambda \nabla^2 T \quad (5.10)$$

- дифференциальное уравнение теплопроводности. Оно получено в предположении постоянства λ и отсутствия внутреннего тепловыделения в сплошной среде (такое тепловыделение может быть обусловлено, например, протеканием химической реакции в веществе или другими физико-химическими процессами). Более общие формы уравнения теплопроводности рассматриваются в литературе по теплообмену.

Символом $\nabla^2 T$ обозначен так называемый лапласиан температуры (сумма вторых частных производных по координатам). Лапласианы различных ве-

личин часто встречаются в дифференциальных уравнениях в частных производных.

Аналогичным образом (применяя законы физики к бесконечно малым объемам) можно получить и другие дифференциальные уравнения, описывающие процессы в сплошных средах. Примеры таких уравнений:

- уравнение диффузии:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \left(\frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} \right) = D_i \nabla^2 c_i; \quad (5.11)$$

- волновое уравнение (уравнение распространения волн в сплошной среде):

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \nabla^2 u, \quad (5.12)$$

где u – величина, волновое колебание которой рассматривается (давление, температура, электрический потенциал и др.), v – скорость распространения волны;

- уравнение Лапласа:

$$\nabla^2 U = 0, \quad (5.13)$$

описывающее стационарные распределения различных величин (температуры, электростатического потенциала и др.) в сплошной среде.

5.3. Краевые задачи для уравнений в частных производных

Уравнение теплопроводности применимо к анализу распространения тепла в любой системе – от куска сыра до стенки атомного реактора. Поэтому при рассмотрении конкретных задач к уравнению надо добавить описание особенностей задачи, отличающих ее постановку от других задач теплопроводности.

Эти особенности называют *условиями однозначности*. Сюда входит описание формы и указание размеров тела, указание значений его физических свойств.

Наиболее важными среди условий однозначности являются *краевые условия*, разделяющиеся на пространственные (граничные) и временные (начальные). Их количество зависит от типа уравнений.

Дифференциальные уравнения в частных производных можно разделить на три типа:

I. *Эллиптические* уравнения описывают стационарные (установившиеся) процессы в замкнутой области пространства. Они не содержат производных по времени и к ним ставятся только граничные условия (на границах рассматриваемой области), которые в свою очередь могут быть разного рода.

Наиболее важные:

а) условия I рода, когда на границах области задаются значения искомых величин;

б) условия II рода, когда на границах задаются значения производных от искомых величин;

в) условия III рода, когда на границах области задаются соотношения между значениями искомых величин и их производных; например, соотношение

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = \alpha(T - T_0) \quad (5.14)$$

выражает так называемый "закон Ньютона-Рихмана" для теплообмена тела с омывающей его жидкостью температуры T_0 (здесь α - постоянный коэффициент теплоотдачи).

Примером эллиптического уравнения может служить уравнение Лапласа.

II. *Параболические* уравнения описывают нестационарные процессы в замкнутой области. Они содержат первые производные искомых величин по времени и краевые условия к ним, помимо граничных, включают еще и начальные - значения искомых величин в начальный момент процесса. Примерами параболических уравнений служат уравнения теплопроводности и диффузии.

III. *Гиперболические* уравнения описывают волновые процессы. В них входят вторые производные по времени; соответственно, в состав краевых условий входят два начальных - значения искомых величин и их производных в начале процесса. Пример гиперболического уравнения - волновое уравнение.

5.4. Численные методы решения

дифференциальных уравнений в частных производных.

Сложная структура дифференциальных уравнений в частных производных приводит к тому, что непосредственное решение их возможно только в редких случаях. Обычно прибегают к приближенным численным методам.

Рассмотрим в качестве простого примера стационарное распределение температуры в двумерной области (например, в тонком квадратном стальном листе, неравномерно подогреваемом и охлаждаемом с краев (рис. 5.4)). Распределение температуры описывается дифференциальным уравнением теплопроводности, в котором отсутствуют производные по времени (процесс стационарный) и по координате z (в тонком листе можно не учитывать изменение температуры по толщине). Поскольку $\lambda \neq 0$, уравнение приводится к виду

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0, \quad (5.15)$$

т.е., к двумерному уравнению Лапласа.

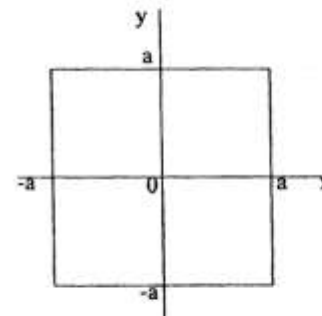


Рис. 5.4

Пусть справа и слева лист подогревается, а сверху и снизу охлаждается, например, по закону

$$T = 300 + 50 \left(1 - \frac{y^2}{a^2} \right) \quad (5.16)$$

при $x = \pm a$,

$$T = 300 - 50 \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right) \quad (5.17)$$

при $y = \pm a$.

Выражения (5.16, 5.17) являются граничными условиями к уравнению (5.15).

Для численного решения дифференциальных уравнений в частных производных чаще всего пользуются различными вариантами метода сеток. На первом рассматриваемую область сеткой из $2N+1$ горизонтальных и $2N+1$ верти-

кальных линий, равноотстоящих друг от друга. Расстояние между соседними линиями составит тогда $h = a / N$. Точки пересечения линий называются *узлами сетки*. Будем обозначать линии сетки номерами: i – для вертикальных (соответствующих определенному значению $x, = ih$, если номер i изменяется от $-N$ до N) и j – горизонтальных (соответствующих определенным значениям $y, = jh$). Тогда узел сетки можно определить по номерам линий, на пересечении которых он лежит.

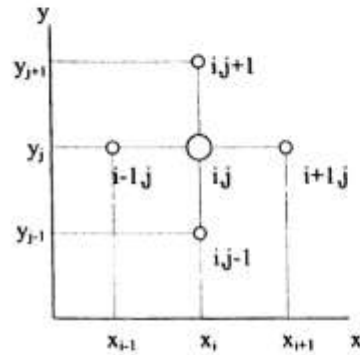


Рис. 5.5

Рассмотрим один из узлов сетки с номерами i, j (рис. 5.5).

Обозначим $T_{i,j} = T(x_i, y_j)$. Аналогично обозначаются значения температуры или ее производных в других узлах сетки. Используя разложение функции $T(x, y)$ в ряд Тейлора, можно записать

$$\begin{aligned} T_{i+1,j} &= T_{i,j} + \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{i,j} h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_{i,j} h^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right)_{i,j} h^3 + \frac{1}{24} \left(\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right)_{i,j} h^4 + \dots \\ T_{i-1,j} &= T_{i,j} - \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{i,j} h + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_{i,j} h^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right)_{i,j} h^3 + \frac{1}{24} \left(\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right)_{i,j} h^4 - \dots \end{aligned} \quad (5.18)$$

Сложим эти выражения почленно

$$T_{i+1,j} + T_{i-1,j} = 2T_{i,j} + \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_{i,j} h^2 + \frac{1}{12} \left(\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right)_{i,j} h^4 + \dots$$

Отсюда можно выразить вторую производную

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{h^2} - \frac{1}{12} \left(\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right)_{i,j} h^2 + \dots \quad (5.19)$$

Видно, что вторая производная может быть приближенно представлена комбинацией значений температуры в узлах сетки. Такое представление, называемое *разностным*, имеет погрешность порядка h^2 . Если сделать шаг сетки достаточно малым, можно добиться того, что погрешность будет меньше любой наперед заданной величины.

Аналогично можно представить и вторую производную температуры по координате y . Подставив приближенные выражения производных в уравнение (5.15), получим его разностное представление

$$\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{h^2} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{h^2} = 0, \quad (5.20)$$

или

$$T_{i,j} = \frac{1}{4} (T_{i-1,j} + T_{i+1,j} + T_{i,j-1} + T_{i,j+1}). \quad (5.21)$$

Записав такие соотношения для каждого узла сетки, получим систему из N^2 линейных алгебраических уравнений для нахождения значений температуры в узлах (кроме узлов, лежащих на границах, для которых значения температур определяются граничными условиями (5.16, 5.17)).

Решение этой системы можно осуществить различными способами. Наиболее простым является метод итераций. Согласно этому методу, во всех внутренних узлах сетки задаются некоторые начальные значения температуры, например, $T = 300$. Затем они подставляются в уравнения (5.21) и вычисляются новые значения температур в узлах, эти значения опять подставляются в уравнения (5.21), вычисляется следующее приближение и т.д. Процесс повторяется, пока в любом узле сетки разность значений температуры, вычисленных в двух последовательных приближениях, не станет меньше требуемой погрешности вычислений.

Несмотря на простоту, метод итераций на сегодня вытеснен более экономичными, хотя и более сложными в программировании методами.

В качестве другого примера рассмотрим решение простейшей нестационарной задачи теплопроводности. Допустим, что тело в форме бесконечной

пластины толщиной $2a$, первоначально нагретое, охлаждается таким образом, что температуры поверхностей равны 270 K и 350 K . Распределение температуры в начальный момент описывается формулой

$$T_0 = 270 + 80 \frac{x+a}{2a} + 150 \left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right). \quad (5.22)$$

выражающей начальное условие задачи. Если пластина имеет бесконечную длину и ширину (практически достаточно, чтобы длина и ширина были гораздо больше толщины пластины), температуру можно считать изменяющейся только по толщине. Направим перпендикулярно поверхностям пластины координатную ось Ox (рис. 5.6).

В этом случае изменение температуры пластины описывается уравнением теплопроводности (5.10), в котором отсутствуют производные температуры по координатам y и z

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (5.23)$$

Граничные условия к этому уравнению

$$\begin{aligned} T &= 270 \quad (x = -a) \\ T &= 350 \quad (x = +a). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Для численного решения уравнения (5.23) методом сеток разобьем непрерывный во времени процесс на шаги Δt , а координатную ось Ox — на шаги Δx . Тогда воображаемая координатная полуплоскость (x, t) окажется покрыта сеткой линий $x = \text{const}$, $t = \text{const}$. Будем обозначать значения координаты в узлах сетки x_i , значения времени — t_j ($x_i = i\Delta x$, $t_j = j\Delta t$; $i = -N \dots N$, $j = 0, 1, 2, \dots$; $N = a/\Delta x$). Тогда входящая в уравнение вторая производная температуры по x может быть заменена разностным представлением (5.19). Для представления и

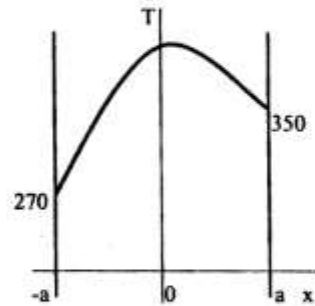


Рис. 5.6

разностной форме производной температуры по времени снова воспользуемся разложением функции $T(x, t)$ в ряд Тейлора

$$T_{i,j+1} = T_{i,j} + \left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_{i,j} \Delta t + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial t^2}\right)_{i,j} (\Delta t)^2 + \dots \quad (5.25)$$

откуда

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_{i,j} = \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta t} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial t^2}\right)_{i,j} \Delta t - \dots$$

Отсюда видно, что производная $(\partial T/\partial x)$ в узле (i, j) может быть приближенно представлена

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_{i,j} \approx \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta t}, \quad (5.26)$$

причем погрешность подобного представления имеет порядок Δt .

Подставив выражения (5.19) и (5.26) в уравнение (5.23), получим

$$\frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta t} = a \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta x)^2}, \quad (5.27)$$

где $a = \lambda/\rho c$ — коэффициент температуропроводности тела. Преобразуем уравнение (5.27) к виду

$$T_{i,j+1} = \frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} (T_{i-1,j} + T_{i+1,j}) + \left(1 + \frac{2a\Delta t}{(\Delta x)^2}\right) T_{i,j}. \quad (5.28)$$

Если определить значения температур в узлах при $j = 0$ (в начальный момент времени) из начального условия (5.22), формула (5.28) позволяет определить температуры в следующий момент времени (через один шаг Δt). Затем по этой же формуле определяются значения температуры в следующий момент и т.д. Значения температур в каждый момент времени вычисляются непосредственно через значения в предыдущий момент (или, как говорят, "на предыдущем слое по времени"). Такая разностная схема решения уравнения (5.23) называется явной. Она очень проста для вычислений, но подробное исследование показывает, что явная схема часто оказывается неустойчивой. Это значит, что неизбежные погрешности округления величин, с которыми работает ЭВМ, при

таким способе решения накапливаются и со временем значения, найденные при численном решении, отклоняются от истинных значений температуры на бесконечно большую величину.

От этого недостатка свободна неявная разностная схема. В этом случае производная температуры по времени представляется разностным выражением

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_{i,j} = \frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\Delta t}, \quad (5.29)$$

получаемым также на основе разложения функции температуры в ряд Тейлора, но с отрицательным шагом по времени (наподобие второго из разложений (5.18)). Разностное уравнение при этом примет вид

$$\frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\Delta t} = a \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta x)^2}, \quad (5.30)$$

В него входят одно значение температуры на слое $j-1$ (предыдущем, т.е., уже рассчитанном) и три значения (в трех узлах) на слое с номером j . Эти значения необходимо найти. Записав соотношения (5.30) для узлов на слое j с номерами от $-N+1$ до $N-1$, получим систему линейных алгебраических уравнений, называемых разностными, для определения значений температур на слое j

$$\alpha_i T_{i-1,j} + \beta_i T_{i,j} + \gamma_i T_{i+1,j} = \chi_i, \quad i = -N+1, \dots, N-1, \quad (5.31)$$

где

$$\alpha_i = 1,$$

$$\beta_i = -2 - \frac{(\Delta x)^2}{a \Delta t},$$

$$\gamma_i = 1,$$

$$\chi_i = -\frac{(\Delta x)^2}{a \Delta t} T_{i,j-1}.$$

Из граничных условий имеем

$$T_{-N,j} = 270,$$

$$T_{N,j} = 350.$$

Для решения системы разностных уравнений, соответствующих дифференциальному уравнению с граничными условиями I или II рода, применяют особую разновидность метода Гаусса – так называемый метод прогонки.

Метод прогонки

Рассмотрим разностное уравнение (5.31) для узла $-N+1, j$. Из него можно выразить неизвестную величину $T_{-N+1,j}$

$$T_{-N+1,j} = -\frac{\gamma_{-N+1}}{\beta_{-N+1}} T_{-N+2,j} + \frac{\chi_{-N+1} - \alpha_{-N+1} T_{-N,j}}{\beta_{-N+1}} = K_{-N+1} T_{-N+2,j} + L_{-N+1}, \quad (5.31)$$

где

$$K_{-N+1} = -\frac{\gamma_{-N+1}}{\beta_{-N+1}}, \quad L_{-N+1} = \frac{\chi_{-N+1} - \alpha_{-N+1} T_{-N,j}}{\beta_{-N+1}}. \quad (5.32)$$

Учитывая, что значение температуры $T_{-N,j}$ известно из граничного условия, видно, что значение $T_{-N+1,j}$ выражено через следующее неизвестное значение $T_{-N+2,j}$. Подставим это выражение в разностное уравнение для узла $-N+2, j$

$$\alpha_{-N+2} (K_{-N+1} T_{-N+2,j} + L_{-N+1}) + \beta_{-N+2} T_{-N+2,j} + \gamma_{-N+2} T_{-N+3,j} = \chi_{-N+2}. \quad (5.33)$$

Отсюда получаем выражение для $T_{-N+2,j}$ через следующее неизвестное значение $T_{-N+3,j}$

$$T_{-N+2,j} = -\frac{\gamma_{-N+2}}{\alpha_{-N+2} K_{-N+1} + \beta_{-N+2}} T_{-N+3,j} + \frac{\chi_{-N+2} - \alpha_{-N+2} L_{-N+1}}{\alpha_{-N+2} K_{-N+1} + \beta_{-N+2}} = K_{-N+2} T_{-N+3,j} + L_{-N+2}. \quad (5.34)$$

Далее это выражение подставляется в уравнение для узла $-N+3, j$, выражается значение $T_{-N+3,j}$ и так далее, вплоть до уравнения в узле $N-1, j$. В итоге каждое неизвестное значение температуры в узле $T_{i,j}$ оказывается выражено через последующее значение $T_{i+1,j}$

$$T_{i,j} = K_i T_{i+1,j} + L_i, \quad (5.35)$$

а значения коэффициентов K_i, L_i , называемых прогоночными, выражаются формулами

$$K_i = -\frac{-\gamma_i}{\alpha_i K_{i-1} + \beta_i}, L_i = \frac{\gamma_i - \alpha_i L_{i-1}}{\alpha_i K_{i-1} + \beta_i}. \quad (5.36)$$

Эта формула пригодна также для расчета прогоночных коэффициентов K_{N+1}, L_{N+1} , если принять, с учетом граничного условия, $K_N = 0, L_N = T_{N,J}$.

Видно, что можно вычислить все значения прогоночных коэффициентов для узлов с номерами от $-N$ до $N-1$, начав с K_N, L_N , пользуясь рекуррентными соотношениями (5.36). Эта часть расчета называется прямым ходом прогонки.

После того, как определены все прогоночные коэффициенты, производится последовательное вычисление неизвестных значений температуры в узлах, начиная с $T_{N+1,J}$

$$\begin{aligned} T_{N+1,J} &= K_{N+1} T_{N,J} + L_{N+1} \\ T_{N+2,J} &= K_{N+2} T_{N+1,J} + L_{N+2} \\ &\vdots \\ T_{-N+1,J} &= K_{-N+1} T_{-N+2,J} + L_{-N+1} \end{aligned} \quad (5.37)$$

Эта часть расчета называется обратным ходом прогонки.

Существует несколько разновидностей метода прогонки, например, для случая, когда на границах области поставлены граничные условия II или III рода; когда дифференциальные уравнения и их разностные представления содержат не одну, а несколько неизвестных величин (матричная прогонка) и другие.

В заключение стоит отметить, что существует метод решения стационарных задач, описываемых эллиптическими уравнениями (например, уравнением Лапласа (5.15)), при котором:

- 1) эти уравнения заменяются на соответствующие им параболические (описывающие решение нестационарной задачи нагрева, охлаждения и т.д.);
- 2) производится расчет изменения искомой величины во времени до тех пор, пока это изменение не становится пренебрежимо малым.

Такой метод решения задач называется *методом установления*. Несмотря на кажущуюся сложность, он оказывается более эффективным, чем прямой расчет стационарного поля искомой величины с помощью метода последовательных приближений.

6. Обработка экспериментальных данных

6.1. Введение

Пусть в результате эксперимента получена таблица 6.1, в которой x_i - значения независимой переменной, y_i - значения исследуемой функции.

Таблица 6.1.

X	x_1	x_2	...	x_i	...	x_n
Y	y_1	y_2	...	y_i	...	y_n

Способы обработки этих данных зависят от поставленной цели, и среди их разнообразия рассмотрим *интерполирование* - построение приближенного или точного аналитического выражения функциональной зависимости $Y=F(x)$. Точки x_i называются *интерполяционными узлами* или *узлами интерполяции*.

В общем случае, через точки (x_i, y_i) можно провести бесчисленное множество кривых, однако, если задать дополнительные условия, то можно получить единственную кривую, но чаще условия задаются в виде требований:

- Прохождения кривой через точки (x_i, y_i) ;
- Расположения её среди точек таким образом, чтобы сумма

квадратов отклонений этой кривой от экспериментальных данных в узлах интерполяции была наименьшей.



Рис. 6.1. К построению функциональных зависимостей

6.3. Аппроксимация функции методом наименьших квадратов

Предполагаемую функциональную зависимость назовём эмпирической и обозначим через $F(x)$. Подберём её аналитическое выражение так, чтобы величина

$$S = \sum_{i=1}^n [F(x_i) - y_i]^2$$

была наименьшей.

Решение поставленной задачи осуществим в два этапа. На первом этапе подберём подходящую эмпирическую формулу и запишем её в общем виде через неизвестные параметры a , b и т.д. На втором этапе определим численные значения этих параметров.

Подбор эмпирической формулы начинается с построения графика по результатам проведённого эксперимента. Затем по виду графика путём сравнения его с графиками известных зависимостей таких, как:

1. $y = a + bx$ - линейная функция
2. $y = ab^x$ - показательная функция
3. $y = a + b \ln x$ - логарифмическая функция
4. $y = ax^b$ - степенная функция
5. $y = a + b/x$ - гиперболическая функция
6. $y = ae^{bx}$ - экспоненциальная функция
7. $y = ax^2 + bx + c$ - полином второй степени

выбирается общий вид эмпирической формулы.

Процесс нахождения параметров эмпирических зависимостей продемонстрируем на примере линейной зависимости

$$Y = A + BX$$

Отклонения этой функции от экспериментальных значений y_i в каждом узле x_i равны

$$E_i = y_i - A - Bx_i$$

Из квадратов отклонений составим функционал

$$S(a, b) = \sum_{i=1}^n E_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - A - Bx_i)^2.$$

Выберем неизвестные A и B такими, при которых этот функционал принимает наименьшее значение. Необходимые условия минимума функционала S

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial A} = 2 \sum_{i=1}^n [(y_i - A - Bx_i)(-1)] = -2 \left\{ \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n A - B \sum_{i=1}^n x_i \right\} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial B} = 2 \sum_{i=1}^n [(y_i - A - Bx_i)(-x_i)] = -2 \left\{ \sum_{i=1}^n y_i x_i - A \sum_{i=1}^n x_i - B \sum_{i=1}^n x_i^2 \right\} = 0. \end{cases}$$

Полученная система содержит два уравнения и две неизвестные величины A и B . Для решения приведём систему к виду:

$$\begin{cases} nA + B \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \\ A \sum_{i=1}^n x_i + B \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{cases}$$

Решив её по методу Крамера, найдем

$$B = \frac{\left(\sum_{i=1}^n x_i \right) \left(\sum_{i=1}^n y_i \right) - n \sum_{i=1}^n y_i x_i}{\left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 - n \sum_{i=1}^n x_i^2}$$

$$A = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n y_i - B \sum_{i=1}^n x_i \right).$$

Параметры в других зависимостях могут быть найдены аналогичным путём. Однако гораздо проще сначала привести зависимость к линейной, а затем воспользоваться уже выведенными, предыдущими формулами.

Продемонстрируем этот процесс на примере зависимости $y = ax^b$.

Прологарифмировав, получим $\ln y = \ln a + b \ln x$. При обозначениях:

$$B = b; Y = \ln y; A = \ln a; X = \ln x,$$

$$Y = A + BX.$$

С учетом этих обозначений формулы для расчёта коэффициентов А и В примут вид:

$$B = \frac{\left(\sum_{i=1}^n \ln x_i \right) \left(\sum_{i=1}^n \ln y_i \right) - n \sum_{i=1}^n (\ln y_i)(\ln x_i)}{\left(\sum_{i=1}^n \ln x_i \right)^2 - n \sum_{i=1}^n (\ln x_i)^2}$$

$$A = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n \ln y_i - B \sum_{i=1}^n \ln x_i \right).$$

Возвращаясь к первоначальным переменным, будем иметь: $b = B$, $a = e^A$.
Определив значение a , и, подставив a и b в исходную формулу, получим её конкретный вид. Значение a отдельно можно было и не вычислять, а сразу воспользоваться формулой

$$a = \exp \left\{ \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n \ln y_i - \sum_{i=1}^n \ln x_i \right) \right\}.$$

Для выбора из них лучшей аппроксимирующей функции нужно определить параметры в них и затем рассчитать следующие величины

На практике исследуются несколько аппроксимирующих зависимостей и для каждой вычисляется величина

$$\Omega = \frac{\sum_{i=1}^n [y_i^* - y_i^m]^2}{n - m}$$

где y_i^* - экспериментальные значения (исходные данные в таблице);

y_i^m - рассчитанные значения по той или иной аппроксимирующей функции;

n - число экспериментальных точек;

m - количество параметров в формуле.

Оценка результатов по величине Ω называется *критерием Гаусса*. Согласно этому критерию наилучшей функциональной зависимостью будет та, при которой величина Ω минимальна.

6.4. Рекомендации по обработке экспериментальных данных

1. Если возникла необходимость в получении дополнительных значений функции на исследуемом интервале, то воспользуйтесь непосредственно мно-гочленом Лагранжа.
2. Если требуется получить аналитический вид зависимости, то примените аппроксимацию по методу наименьших квадратов.
3. Для вычислений воспользуйтесь готовыми программными продуктами: самостоятельными программами, пакетами: EUREKA, MATHCAD, MATLAB, табличным процессором EXCEL и т.д., или разработайте программы сами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Акулич И. А. Математическое программирование в примерах и задачах. Учебное пособие для вузов. –М.: Высшая школа, 1986. –315 с.
2. Волков Е. А. Численные методы. –М.: Наука, 1987. –248 с.
3. Демидович Б. П., Марон И. А. Основы вычислительной математики. –М.: Наука, 1970.
4. Копчёнова Н. В., Марон И. А. Вычислительная математика в примерах и задачах. –М.: Наука, 1972.
5. Кудрявцев Е.М. Исследование операций в задачах, алгоритмах и программах. –М.: Радио и связь, 1984. –184 с.
6. Таха Х. Введение в исследование операций. Пер. с англ. Кн 1. –М.; Мир, 1985. –479 с.
7. Таха Х. Введение в исследование операций. Пер. с англ. Кн 2. –М.; Мир, 1985. –496 с.
8. Турчак Л. И. Основы численных методов: Учеб. пособие. –М.: Наука; Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. –320 с.
9. Тынкевич М. А. Численные методы анализа: Учеб. пособие. –Кемерово, 1997. –123 с.
10. Шуп Т. Решение инженерных задач на ЭВМ. Практическое руководство. Пер. с англ. – М.; Мир, 1982. –238 с., ил.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ	3
1.1. Классификация математических моделей	4
1.2. Этапы исследований на основе математических моделей	4
2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ, ПРИВОДЯЩИХ К АЛГЕБРАИЧЕСКИМ И ТРАНСЦЕНДЕНТНЫМ УРАВНЕНИЯМ И СИСТЕМАМ	5
2.1. Введение	5
2.2. Отделение корней	8
2.3. Основные методы уточнения корней	8
2.3.1. Метод половинного деления	9
2.4. Решение систем линейных уравнений	9
2.4.1. Метод простой итерации	11
2.4.2. Метод Зейделя	12
2.5. Решение систем нелинейных уравнений	13
2.5.1. Применение метода Зейделя	13
3. ОПТИМИЗАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ	14
3.1. Основные понятия и определения	14
3.2. Примеры разработки математических моделей задач оптимизации	15
3.3. Схема решения задач оптимизации	17

3.4. Численные методы решения задач безусловной одномерной оптимизации	19
3.4.1. Метод простого перебора	20
3.4.2. Метод половинного деления	22
3.4.3. Метод золотого сечения	22
3.4.4. Контрольные вопросы	25
3.5. Многомерная безусловная оптимизация	25
3.5.1. Метод покоординатного подъема	26
3.5.2. Градиентные методы	27
3.6. Условная оптимизация при решении инженерных задач	30
3.7. Задачи условной оптимизации в экономике	32
3.7.1. Математическое описание задач линейного программирования	33
3.7.3. Методы решения	34
СИМПЛЕКС – МЕТОД	37
3.8. Теория двойственности	38
3.9. Рекомендации по решению задач оптимизации	41
4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ НА ОСНОВЕ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ	41
4.1. Введение	41
4.2. Основы теории	42
4.3. Методика разработки моделей на основе ОДУ	43
4.4. Методы решения ОДУ	44
МЕТОД ЭЙЛЕРА	44
4.5. Алгоритмы с автоматическим выбором шага	46

4.6. Методы решения систем дифференциальных уравнений	47
4.7. Приведение уравнения n-го порядка к системе уравнений первого порядка	48
4.8. Методы решения краевых задач	48
4.9. Рекомендации по решению обыкновенных дифференциальных уравнений	50
5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ, ПРИВОДЯЩИХ К ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫМ УРАВНЕНИЯМ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ	50
5.1. Введение	50
5.2. Дифференциальное уравнение теплопроводности	51
5.3. Краевые задачи для уравнений в частных производных	55
5.4. Численные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных	57
6. ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ	65
6.1. Введение	65
6.2. Построение интерполяционной зависимости	66
6.3. Аппроксимация функции методом наименьших квадратов	68
6.4. Рекомендации по обработке экспериментальных данных	71
ЛИТЕРАТУРА	73
СОДЕРЖАНИЕ	74