АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ.

(Методы исследования функций классического анализа).

Аналитические методы являются классическими методами отыскания экстремального значения функции (min или max). Они применяются, в основном, в тех случаях, когда известен аналитический вид оптимизируемой функции F от переменных x_i и число переменных x_i невелико. При большом числе переменных возникает, так называемый барьер многомерности и применение аналитических методов становится затруднительным.

Основные понятия.
Необходимые и достаточные условия существования экстремума функции.

1.Экстремумы функций одной переменной.

Необходимым условием существования экстремума непрерывной функции F(x) (при отсутствии ограничений) является равенство 0 производной $\frac{dF}{dx} = 0$

Графически это означает, что касательная к кривой F(x) в этой точке параллельна оси ox.

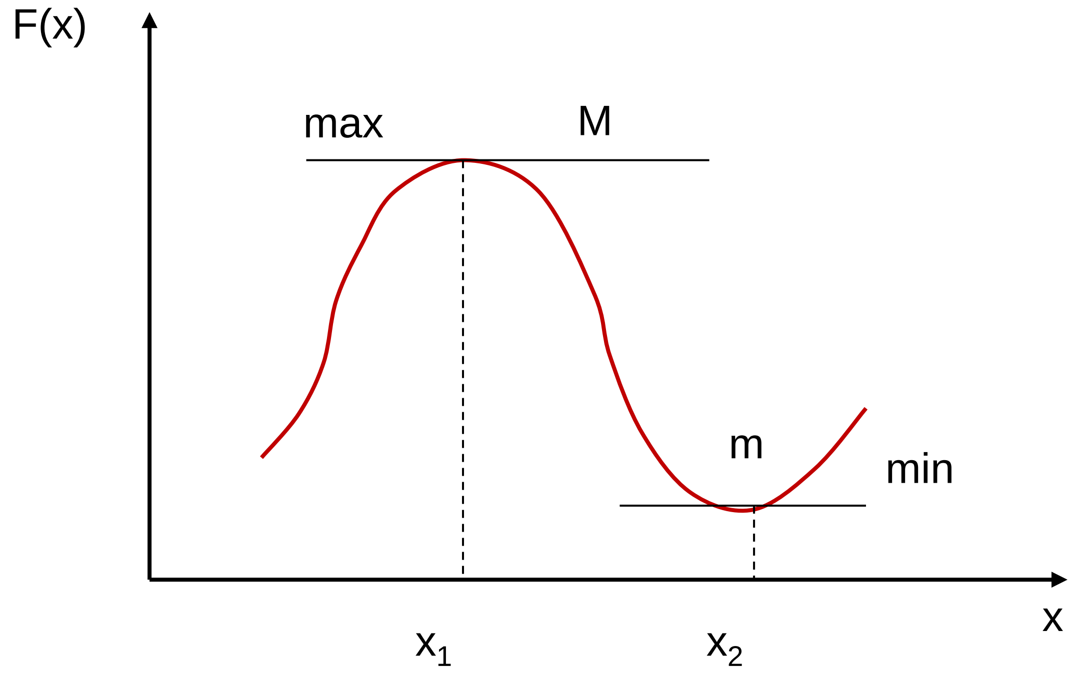


Рис.1

Покажем случай, когда производные в точках экстремума не существуют.

В точках min и max существует конечный разрыв производной $\frac{dF}{dx}$

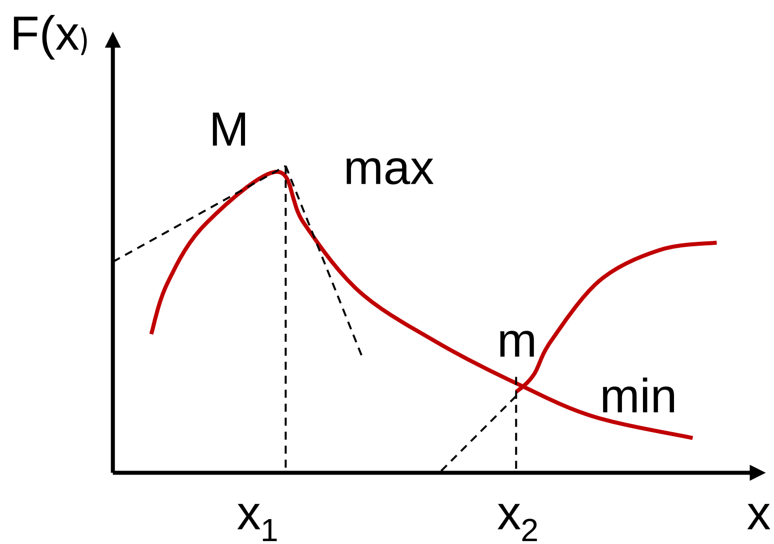


Рис.2

Значение F’(x) в точках экстремума обращаются в бесконечность.

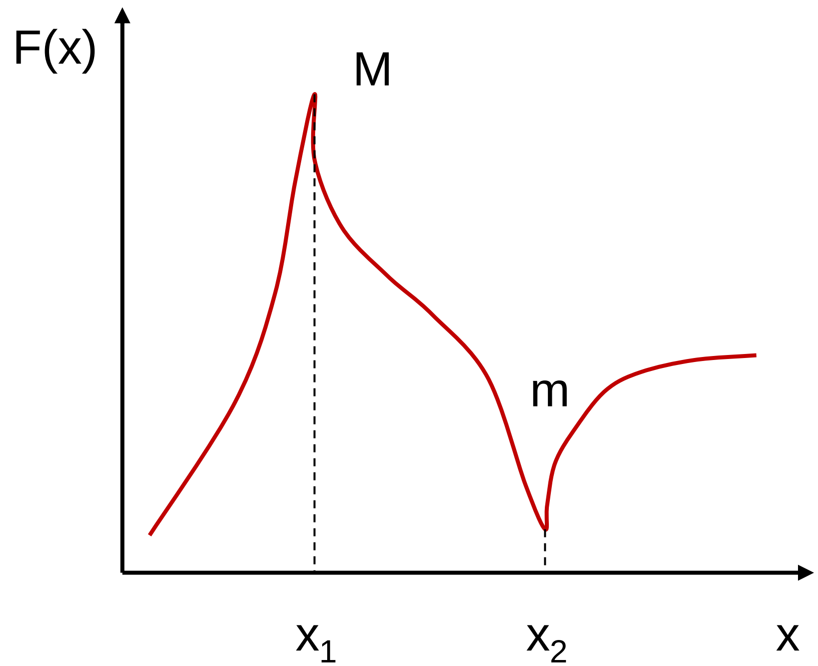


Рис.3

Перечисленные условия : $\frac{dF}{dx}=0,$ *отсутствие производной – необходимые условия. Но их выполнение не означает, что в этой точке функция имеет экстремум (рис.4).*

Для того, чтобы определить, действительно ли в точке существует экстремум необходимо провести дополнительные исследования.

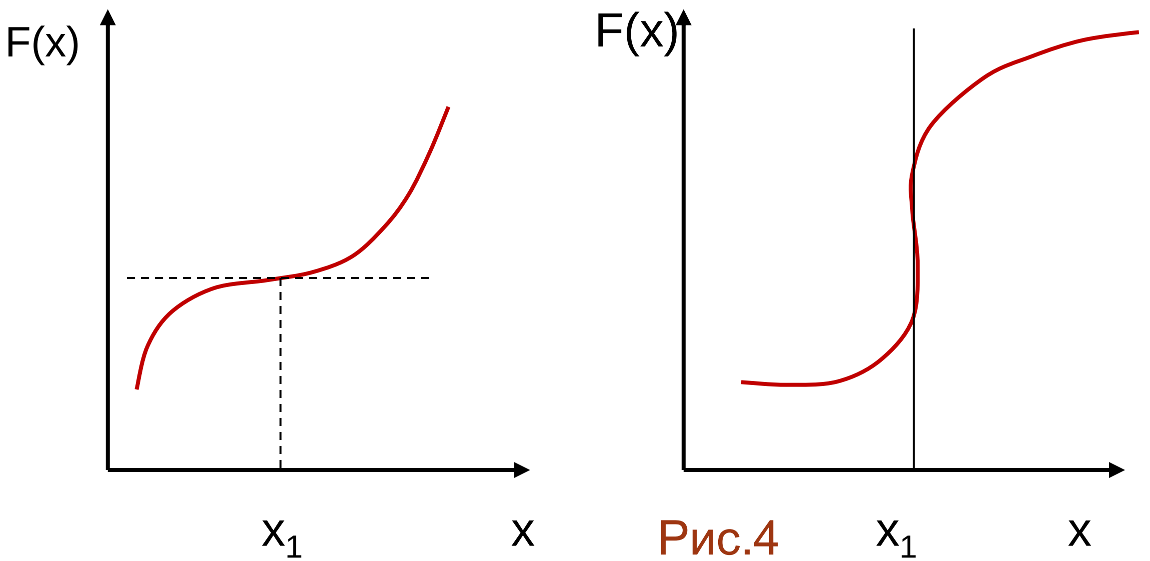


Рис.4

Например:

1. Сравнение значений функции.

Рассчитывают значение функции в точке подозреваемой на экстремум и в двух близких от нее точках слева и справа.

$x_i+\xi$ и $x_i-\xi$

Если оба значения $F(x_i+\xi)$ и $F(x_i-\xi)$ *меньше или больше* ***$F(x_i)$,*** *то в точке* ***x_i max или min соответственно. Если же $F(x_i)$ имеет промежуточное значение, то в точке $F(x_i)$ нет экстремума.***

2. Сравнение знаков производных.

Определяются знаки производных $\frac{dF}{dx}$ в точках $(x_i+\xi)$ и $(x_i-\xi)$.

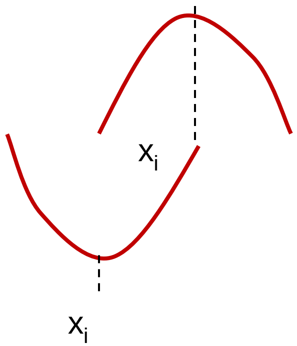
Если знаки различны, то в точке x_i – экстремум (если знак меняется с (+) на (-), то в точке x_i – max, если с (-) на (+) – min). Если знаки совпадают в точках $(x_i+\xi)$ и $(x_i-\xi)$, то точка x_i не является экстремальной.

3. *Исследование знаков высших производных*.

Этот способ можно применять, если в точках x_i (подозреваемый на экстремум) существуют производные высших порядков.

Если $\frac{d^2F}{dx^2} < 0$, ***то в точке x_i – max***

$\frac{d^2F}{dx^2} > 0$ ***, то в точке x_i - min***



Чаще всего пользуются двумя первыми способами, т.к. последний достаточно громоздок.

2.Экстремумы функций многих переменных.

Решение задачи оптимизации усложняется, если критерий оптимальности является функцией нескольких независимых переменных.

Для непрерывной функции $F=F(x_1,x_2,\dots x_n)$, имеющей непрерывные производные первого и второго порядков по всем переменным $x_i (i=1,n)$, необходимым условием экстремума в точке x_i служит равенство 0 частных производных по всем переменным в этой точке.

Т.е. точки, в которых может быть экстремум функции, определяются решением системы уравнений:

$$\frac{\partial F(x_1,x_2,\dots x_n)}{\partial x_i}=0, i=1,\dots,n, \text{или}$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_1}=0$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_2}=0$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_n}=0$$

Левые части уравнений – есть функции факторов $x_1,\dots x_n$. Поэтому решение системы (1) дает оптимальное значение факторов. Если оптимизируется технологический процесс, то этому решению соответствует оптимальный режим.

Рассмотрим частные задачи оптимизации ХТП с использованием математических моделей

ЧАСТНЫЕ ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ
(оптимизация с использованием математических моделей).

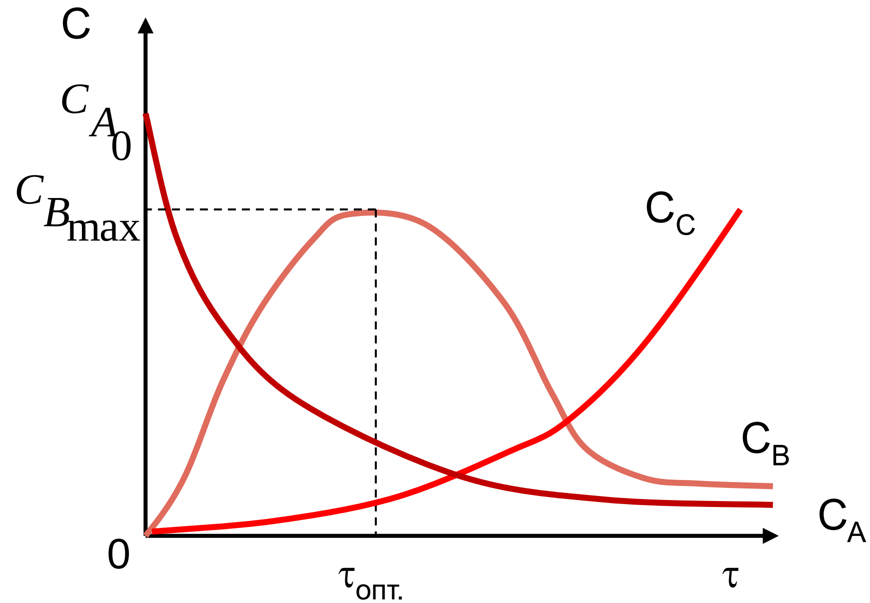
I. Оптимизация РИС

В реакторе ИС протекает реакция:

$$A \xrightarrow{K_1} B \xrightarrow{K_2} c$$

Целевой продукт.

Определить оптимальное время пребывания реагентов в реакторе, при котором достигается максимальный выход целевого продукта B.



$$\frac{dC_A}{dt}=\frac{1}{\tau}\left(C_{A_0}-C_A\right)-k_1C_A; \qquad (1)$$

$$\frac{dC_B}{dt}=\frac{1}{\tau}\left(C_{B_0}-C_B\right)+k_1C_A-k_2C_B; \qquad (2)$$

$$\frac{dC_C}{dt}=\frac{1}{\tau}\left(C_{C_0}-C_C\right)+k_2C_B; \qquad (3)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = 0; \quad C_{B_0} = 0;$$

$$-\frac{1}{\tau}C_B + k_1 C_A - k_2 C_B = 0;$$

$$k_1 C_A \cdot \tau = C_B + k_2 C_B \cdot \tau;$$

$$C_B = \frac{k_1 C_A \cdot \tau}{1 + k_2 \tau};$$

$$C_A - ?$$

(1) приравниваем к нулю

$$C_{A_0} - C_A - k_1 C_A \tau = 0;$$

$$C_{A_0} = C_A \left(1 + k_1 \tau\right);$$

$$C_A = \frac{C_{A_0}}{1 + k_1 \tau}; C_B = \frac{k_1 C_{A_0} \tau}{\left(1 + k_2 \tau\right)\left(1 + k_1 \tau\right)};$$

Для определения τ оптимального для выхода максимального значения концентрации C_B, необходимо уравнение продифференцировать по τ и приравнять производную к 0.

$$\frac{dF}{d\tau}=\frac{k_1 C_{A_0}(1+k_1\tau)\left(1+k_2\tau\right)-k_1 C_{A_0}\tau\left[k_1\left(1+k_2\tau\right)+k_2\left(1+k_1\tau\right)\right]}{\left[\left(1+k_1\tau\right)\left(1+k_2\tau\right)\right]^2}=0;$$

$$\tau_{\text{опт.}}=\frac{1}{\sqrt{k_1\cdot k_2}};$$

$$F=C_{B_{\max}}=\frac{k_1 C_{A_0}\cdot\frac{1}{\sqrt{k_1\cdot k_2}}}{\left(1+\frac{k_1}{\sqrt{k_1\cdot k_2}}\right)\left(1+\frac{k_2}{\sqrt{k_1\cdot k_2}}\right)};$$

II. Задача поиска оптимальной температуры обратимой химической реакции.

Если химическая реакция протекает без побочных стадий, то критерием оптимальности может быть скорость реакции.
Установим ограничения и выберем оптимизирующие параметры.

$$A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} B$$

Целевая функции имеет вид:

$$F = W = k_{01} \cdot e^{\frac{-E_1}{RT}} \cdot C_A - k_{02} \cdot e^{\frac{-E_2}{RT}} \cdot C_B;$$

Критерий оптимальности F зависит от трех параметров T, C_A и C_B.

Но C_A и C_B не можем выбрать в качестве оптимизирующих параметров, т.к. они не являются входами (не являются независимыми) системы, а являются результатами реакции.

Так, для увеличения скорости необходимо иметь как можно больше C_A и меньше C_B. Цель же процесса противоположная – увеличить C_B и уменьшить C_A. Поэтому C_A и C_B нельзя считать независимыми факторами. Следовательно, есть лишь один независимый фактор, влияющий на F – <u>температура</u>.

При различных C_A и C_B, влияние температуры может быть различным.
Поэтому ставим задачу следующим образом: найти оптимальную температуру при фиксированных C_A и C_B. Т.е. C_A и C_B выступают как <u>ограничения</u> в виде равенств.

$$\begin{cases} C_{A/t=0} = C_{A_0}; \\ C_{B/t=0} = C_{B_0} \end{cases}$$

Второе ограничение типа неравенств (обязательное) температура не может превысить некоторого максимального значения T_{max}.
$T \leq T_{max}$;

$$W = k_{1,0} \cdot C_A \cdot e^{\frac{-E_1}{RT}} - k_{2,0} \cdot C_B \cdot e^{\frac{-E_2}{RT}};$$

$$\frac{dW}{dt} = 0;$$

$$k_{1,0} \cdot C_A \cdot e^{\frac{-E_1}{RT}} \cdot \frac{E_1}{R} \cdot \frac{1}{T^2} - k_{2,0} \cdot C_B \cdot e^{\frac{-E_2}{RT}} \cdot \frac{E_2}{\mathrm{R}} \cdot \frac{1}{T^2} = 0;$$

$$T = ?$$

$$k_{1,0} \cdot C_A \cdot e^{\frac{-E_1}{RT}} \cdot E_1 = k_{2,0} \cdot C_B \cdot e^{\frac{-E_2}{RT}} \cdot E_2;$$

$$\frac{E_1 k_{1,0} \cdot C_A}{E_2 k_{2,0} \cdot C_B} = \frac{e^{\frac{-E_2}{RT}}}{e^{\frac{-E_1}{RT}}} = e^{\frac{E_1 - E_2}{RT}};$$

$$\mathbf{ln}(-\text{"}-) = \frac{E_1 - E_2}{RT};$$

$$T = \frac{E_1 - E_2}{k \cdot \mathbf{ln}\left(\frac{E_1 \cdot k_{1,0} \cdot C_A}{E_2 \cdot k_{2,0} \cdot C_B}\right)};$$

МЕТОД МНОЖИТЕЛЕЙ ЛАГРАНЖА.

Часто в задачах отыскания экстремума функций (критерия оптимальности) на независимые переменные накладываются определенные ограничения типа равенств. Это осложняет применение аналитических методов в их классической форме.

Для решения экстремальных задач с ограничениями типа равенств используется метод неопределенных множителей Лагранжа. Этот метод сводит задачу с ограничениями к обычной экстремальной задаче без ограничений.

Пусть требуется найти экстремум функции

$$F(x_1,x_2,\ldots,x_n)\rightarrow min \qquad (1)$$

при этом на независимые переменные накладываются ограничения типа равенств:

$$\phi_i(x_1,x_2,\ldots,x_n)=0; i=1,\ldots,m; m<n; \qquad (2)$$

m – число соотношений (ограничений) (2);

Если число m – условий (2) меньше числа независимых переменных n, т.е. ($x_1,x_2\ldots x_n$), то для решения экстремальной задачи может быть использован следующий прием.

Из системы m – уравнений (2) можно выразить m независимые переменные x_i, как функции остальных n-m переменных, т.е. представить ограничения (2) в виде:

$$x_i = f_i(x_1,x_2,\ldots x_{n-m}) \qquad (3)$$

Подставляя полученные выражения (3) в (1), получим функцию F, которая будет зависеть уже только от n-m переменных, не связанных дополнительными условиями (ограничениями).

$$F(x, f(x)) \qquad (4)$$

Таким образом, мы устранили ограничивающее условие (2) и уменьшили размерность исходной оптимальной задачи.

Поясним на примере:

Допустим дана
$$\begin{cases} F(x_1, x_2) = 5x_1^2 + x_1 x_2 + 3x_2^2 + 10; \\ x_1 + x_2 - 10 = 0; \end{cases}$$

Уравнение связи. (ограничение)

Если есть уравнение связи, то можно выразить зависимые и независимые переменные. Надо избавиться от одной переменной и дифференцировать по другой.

$x_2=10-x_1$

$$F(x_1)=5x_1^2+x_1(10-x_1)+3(10-x_1)^2+10;$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_1}=10x_1+10-2x_1-6(10-x_1)=0;$$

$$14x_1=50;$$

$$x_1=\frac{50}{14};\rightarrow x_2-?$$ Найден оптимум

На практике часто бывает трудно, а иногда и вообще невозможно аналитически решить систему уравнений (2) относительно некоторых переменных, т.е. представить ее в виде (3).

(трудность в определении независимых переменных из $\varphi(x)$)

Особенно, если уравнение трансцендентное.

$$\sin(xy)+\sqrt{xy}=1$$

поэтому для решения задач отыскания экстремума функций многих переменных (1) с ограничениями на независимые переменные (2) используют метод неопределенных множителей Лагранжа. Т.е. искусственно вводят вспомогательную функцию вида:

$$R(x_1, x_2, \dots x_n; \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) = F(x_1, \dots x_n) + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \phi_i (x_1, \dots x_n);$$

Все переменные считаем независимыми, а по количеству уравнений связи (ограничений) вводим новые переменные – множители Лагранжа.

Т.е. уравнение связи (2) (ограничения) теперь входят в функцию цели со своими коэффициентами (весовые коэффициенты) λ.

λ_i – это неопределенные множители Лагранжа.

В данном методе экстремальные точки функции определяются решением системы уравнений, которые получают, приравнивая к нулю производные функции R по всем независимым переменным x_i,i=1,…n и по всем множителям Лагранжа λ_i, i=1,…m.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R(x_1, x_2, \ldots x_n, \lambda_1, \lambda_2, \ldots \lambda_m)}{\partial x_i} = 0; \\ \dfrac{\partial R(x, \ldots x_n, \lambda_1, \ldots \lambda_m)}{\partial \lambda_i} = 0; i = 1, \ldots m; \end{cases}$$

Пример предыдущий:

$$L = 5x_1^2 + x_1 x_2 + 3x_2^2 + 10 + \lambda(x_1 + x_2 - 10);$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial L}{\partial x_1} = 10x_1 + x_2 + \lambda = 0; \\ \dfrac{\partial L}{\partial x_2} = x_1 + 6x_2 + \lambda = 0; \\ \dfrac{\partial L}{\partial \lambda} = x_1 + x_2 - 10 = 0; \end{cases}$$

$$\begin{cases} 10\mathbf{x}_1 + \left(10 - \mathbf{x}_1\right) + \lambda = 0; \\ 6(10 - \mathbf{x}_1) + \mathbf{x}_1 + \lambda = 0; \end{cases}$$

$$-\begin{cases} 9\mathbf{x}_1 + 10 + \lambda = 0; \\ -5\mathbf{x}_1 + 60 + \lambda = 0 \end{cases}$$

$$9\mathbf{x}_1 + 5\mathbf{x}_1 = -10 + 60$$

$$14\mathbf{x}_1 = 50$$

$$\mathbf{x}_1 = \frac{50}{14}$$