

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Томский политехнический университет»

О. Ю. Ромашова

**МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ И РАСЧЕТЫ НА ЭВМ
ТЕХНИКО-ЭКОНОМИЧЕСКИХ ЗАДАЧ**

Учебное пособие

**Издательство ТПУ
Томск 2009**

УДК 621.311.25
Р 69

Ромашова О. Ю.
Р 69 Методы оптимизации и расчеты на ЭВМ технико-экономических задач: учебное пособие. – Томск : Изд-во ТПУ, 2009. – 210 с.

Целью предлагаемого учебного пособия, как и одноименного курса, является:

- теоретическое освоение методов оптимизации и основ технико-экономической оптимизации теплоэнергетического оборудования;
- приобретение навыков математического моделирования процессов и оборудования ТЭС в оптимизационных задачах.

Содержание пособия включает теорию математических методов одномерной и многомерной оптимизации, основы математического моделирования теплоэнергетических установок (ТЭУ) и методики технико-экономического выбора наилучших вариантов при проектировании оборудования и тепловых схем ТЭС и АЭС. В пособии также приведены многочисленные примеры использования математического аппарата в типичных оптимизационных задачах ТЭУ.

Пособие подготовлено на кафедре атомных и тепловых электростанций и предназначено для студентов специальности 140101 «Тепловые электрические станции» Института дистанционного образования.

УДК 621.311.25

Рекомендовано к печати Редакционно-издательским советом Томского политехнического университета

Рецензенты:

В. В. Литвак – д.т.н., зам. директора Регионального центра управления энергосбережением (г. Томск);

С. А. Косяков – к.т.н., руководитель Центра комплексных энергосберегающих технологий (г. Северск).

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время теория оптимизации вносит заметный вклад в ускорение научно-технического прогресса. Успешному применению методов оптимизации способствует современная вычислительная техника. Трудно назвать такую область инженерной деятельности, где бы ни возникали задачи оптимизационного характера: определение наиболее эффективного режима работы различных технических систем, организация производства, дающего наибольшую возможную прибыль при заданных ограниченных ресурсах, и др.

Оптимизация – это выбор наилучшего решения из всех возможных. Выбор наилучшего варианта технической системы осуществляется путем вариации независимых параметров системы на основании некоторого *критерия эффективности.*

Независимые параметры системы, влияющие на эффективность работы системы, называются *оптимизируемыми* (или *управляемыми*) параметрами.

В процессе оптимизации требуется найти *оптимальные* значения оптимизируемых параметров.

Оптимальные параметры соответствуют наиболее эффективной работе системы.

Число оптимизируемых параметров характеризует *размерность* задачи оптимизации.

Выбор оптимальных параметров осуществляется с помощью некоторой функции, связывающей эти параметры и позволяющей судить об эффективности работы системы. Функцию, связывающую оптимизируемые параметры и являющуюся критерием оптимальности (качества) системы, называют *целевой функцией.* Целевая функция достигает минимума (максимума) при оптимальных значениях оптимизируемых параметров. Таким образом, инженерная оптимизационная задача формулируется следующим образом: ***для технической системы путем вариации независимых параметров найти их оптимальные значения, выбрав в качестве критерия эффективности некоторую функцию, которая достигает минимума (максимума) в оптимальной точке и называется целевой функцией.***

Ограничения, накладываемые на оптимизируемые параметры, определяют *допустимую область* решений.

Схема решения практической оптимизационной задачи включает следующие этапы:

- 1) создание математической модели объекта (*специалист*);
- 2) выбор метода решения (*математик*);
- 3) составление программы на ЭВМ, проведение вычислений (*программист*).

В идеальном случае полученные результаты должны удовлетворять специалиста. Однако, как это часто бывает, идеальная и на первый взгляд безупречная схема в реальных условиях не действует. Дело в том, что все этапы взаимосвязаны. Специалист, создающий модель, должен смотреть вперед – предвидеть возможные затруднения при программной реализации. Со своей стороны, математик или программист часто вынужден упрощать модель, изменяя ее. Для этого нужны консультации специалиста. Только после многочисленных корректировок удается добиться от ЭВМ удовлетворительных результатов.

В такой ситуации возрастают требования к математической и компьютерной подготовке специалистов. В новых условиях инженер должен уметь грамотно переводить на математический язык технические задачи, анализировать зависимость их решений от условий, режимов, параметров реальных процессов и выбирать наилучшие варианты, т. е. обладать навыками математического моделирования и оптимизации технических систем. Поэтому курсу методов оптимизации и практическому применению их для технико-экономических расчетов отводится значительная роль в профессиональной подготовке студентов Томского политехнического университета. Поскольку в большинстве случаев аналитическое решение задач оптимизации затруднительно или невозможно, инженер-исследователь должен владеть численными методами, рассчитанными на применение ЭВМ.

Роль ЭВМ в решении оптимизационных задач трудно переоценить. Известно, что первый численный метод оптимизации – линейное программирование – был опубликован в 1939 г. в брошюре советского ученого Л. В. Канторовича «Методы организации и планирования производства». В ней излагались методы, слишком сложные для ручного счета, поэтому работа была практически забыта. И только с появлением ЭВМ линейное программирование возродилось. За применение линейного программирования в экономике Л. В. Канторовичу в 1975 г. была присуждена Нобелевская премия.

Между потребностью решить задачу оптимизации и ее приведением к однозначной, подходящей для решения на ЭВМ форме существует значительная дистанция. Этот этап называется *постановкой задачи*. От постановки задачи значительно зависит качество и достоверность получаемых результатов, а также скорость их получения. Постановка каждой задачи оптимизации включает два объекта: множество допустимых решений и целевую функцию, которую следует минимизировать или максимизировать на указанном множестве.

Математическая формулировка оптимизационной задачи в общем виде

$$F(X) \rightarrow \min (\max),$$

$$X \in D$$

где n – размерность задачи;

$F(X)$ – целевая функция;

$X(x_1, x_2, \dots, x_n)$ – n -мерный вектор независимых оптимизируемых параметров;

D – допустимая область решений. Множество допустимых решений задается системой ограничений на оптимизируемые параметры в виде равенств и неравенств.

В дальнейшем будем рассматривать лишь задачи и методы *минимизации*, т. к. любую задачу поиска максимума функции

$$F(X) \rightarrow \max,$$

$$X \in D$$

можно свести к задаче минимизации заменой целевой функции на противоположную величину

$$-F(X) \rightarrow \min,$$

$$X \in D.$$

Классификация методов оптимизации

В зависимости от числа оптимизируемых параметров задачи и методы оптимизации делятся на *одномерные* ($n = 1$) и *многомерные* ($n \geq 2$).

В зависимости от характера функции и области определения решать многомерные задачи минимизации можно *аналитически* (точно) либо одним из *численных* методов (с заданной погрешностью).

При *отсутствии ограничений* на оптимизируемые параметры задачи оптимизации и методы их решения называются *безусловными* (т. е. без условий, без ограничений).

При *наличии ограничений* задачи и методы называются *условными* (иначе – с условиями). Для численного решения задач *с ограничениями* используются методы *математического программирования*.

Для решения безусловных задач минимизации аналитическим методом используется классический аппарат, заключающийся в приравнивании нулю частных производных целевой функции по всем оптимизируемым параметрам и решении полученной системы уравнений. Аналитическое решение условных задач минимизации с ограничениями дает метод неопределенных множителей Лагранжа. Аналитические методы имеют ограниченное применение в инженерных задачах, т. к. требуют дифференцируемости исследуемой функции и накладывают особые условия на ограничения. Основными методами являются *численные*, успешному использованию которых способствуют ЭВМ.

Основные понятия и определения хорошо изложены в [1–4].

1. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЪЕКТОВ ОПТИМИЗАЦИИ

Оптимизация – это выбор наилучшего решения из всех возможных. Для того чтобы использовать методы оптимизации на практике, надо прежде всего сформулировать рассматриваемую задачу на математическом языке, т. е. построить математическую модель объекта оптимизации.

Математическое моделирование – это замещение оригинала математической моделью. Математическое моделирование наилучшим образом подходит для целей оптимизации, т. к. позволяет сравнивать между собой большое число вариантов.

Этапы построения математической модели приведены на рис. 1.1. Общий подход к моделированию теплоэнергетических установок изложен в [5].



Рис. 1.1

1.1. Основы теории погрешностей

Общие методические указания изложены в [6].

Обозначим: A – точное число; a – приближенное число.

Абсолютная погрешность

$$\Delta = |a - A|.$$

Относительная погрешность

$$\delta = \frac{\Delta}{|A|}.$$

Десятичная запись числа

$$a = \alpha_1 \cdot 10^m + \alpha_2 \cdot 10^{m-1} + \dots + \alpha_n \cdot 10^{m-n+1} + \dots,$$

где α_i – цифры числа ($i = 1, 2, \dots, n$); $\alpha_1 \neq 0$;

m – старший десятичный разряд.

Значащие цифры

Значащими цифрами приближенного числа a называются все цифры в его десятичном изображении, отличные от нуля, и нули, если они содержатся между значащими цифрами или расположены в конце числа и указывают на сохранение разряда точности.

Пример 1.1. В числе 0,001405 значащими являются четыре цифры: **1, 4, 0, 5.**

Верные знаки в узком смысле

Приближенное число $a = \alpha_1 \cdot 10^m + \alpha_2 \cdot 10^{m-1} + \dots + \alpha_n \cdot 10^{m-n+1} + \dots$ содержит n *верных знаков в узком смысле*, если абсолютная погрешность этого числа не превосходит *половины единицы* десятичного разряда, выражаемого n -й значащей цифрой, считая слева направо, т. е. если выполняется неравенство

$$\Delta \leq 0,5 \cdot 10^{m-n+1}.$$

Пример 1.2. Приближенное число $a = 7,21508$ имеет абсолютную погрешность $\Delta = 0,00007$.

$\Delta = 0,00007 \leq 0,5 \cdot 10^{-3}$; разряд 10^{-3} указывает позицию последней справа верной значащей цифры, т. е. число a имеет четыре верных знака в узком смысле: **7, 2, 1, 5.**

Верные знаки в широком смысле

Приближенное число $a = \alpha_1 \cdot 10^m + \alpha_2 \cdot 10^{m-1} + \dots + \alpha_n \cdot 10^{m-n+1} + \dots$ содержит n верных знаков в широком смысле, если абсолютная погрешность этого числа не превосходит единицы десятичного разряда, выражаемого n -й значащей цифрой, считая слева направо, т. е.

$$\Delta \leq 1 \cdot 10^{m-n+1}.$$

Пример 1.3. $a = 7,21508$; $\Delta = 0,00007$.

$\Delta = 0,00007 \leq 1 \cdot 10^{-4}$; разряд 10^{-4} указывает позицию последней справа верной значащей цифры, т. е. число a имеет пять верных знаков в широком смысле: **7, 2, 1, 5, 0**.

Предельная абсолютная погрешность

Предельная абсолютная погрешность может быть вычислена по формуле

$$\Delta^* \leq \omega \cdot 10^{m-n+1},$$

где m – верхний разряд;
 n – количество верных значащих цифр;
 $\omega = 0,5$, если верные значащие цифры указаны в узком смысле;
 $\omega = 1$, если верные значащие цифры указаны в широком смысле.

Предельная относительная погрешность

Предельная относительная погрешность может быть вычислена по формуле

$$\delta a^* = \frac{\omega}{\alpha_1 \cdot 10^{n-1}},$$

где α_1 – первая значащая цифра числа a ;
 n – количество верных значащих цифр;
 $\omega = 0,5$, если верные значащие цифры указаны в узком смысле;
 $\omega = 1$, если верные значащие цифры указаны в широком смысле.

Пример 1.4. Определить, какое равенство точнее: $a_1 = 13/19 \approx 0,684$ или $a_2 = \sqrt{52} \approx 7,21$.

Находим предельные абсолютные погрешности чисел a_1 и a_2 . Для этого берем числа a_1 и a_2 с большим числом десятичных знаков: $13/19 \approx 0,68421$; $\sqrt{52} \approx 7,2111$. Определяем предельные абсолютные погрешности, округляя их с избытком:

$$\Delta a_1^* = |0,68421 - 0,684| \leq 0,00022;$$

$$\Delta a_2^* = |7,2111 - 7,21| \leq 0,0012.$$

Находим предельные относительные погрешности:

$$\delta a_1^* = \Delta a_1^* / a_1 = 0,00022 / 0,684 \approx 0,00033 = 0,033 \quad \%;$$

$$\delta a_2^* = \Delta a_2^* / a_2 = 0,0012 / 7,21 \approx 0,00017 = 0,017 \quad \%.$$

Второе равенство является более точным, поскольку $\delta a_2^* < \delta a_1^*$.

Пример 1.5. Определить предельные абсолютную и относительную погрешности приближенного числа $a = 96,387$, если оно содержит только верные цифры в узком смысле.

Так как для числа $a = 96,387$ последняя верная значащая цифра 7 стоит в разряде тысячных долей (10^{-3}), то $\Delta a \leq 0,5 \cdot 10^{-3}$, т. е. $\Delta a \leq 0,0005$, или $\Delta a^* = 0,0005$. Тогда число a можно записать как $96,387 \pm 0,0005$.

Предельная относительная погрешность

$$\delta a^* = \frac{1}{2,9 \cdot 10^{5-1}} = 0,000005 = 5 \cdot 10^{-6}.$$

Пример 1.6. Определить предельные абсолютную и относительную погрешности приближенного числа $b = 6,32$, если оно содержит только верные цифры в широком смысле.

Последняя цифра приближенного числа $b = 6,32$ стоит в разряде сотых долей (10^{-2}). Так как это число содержит верные цифры в широком смысле, то, следовательно, $\Delta b \leq 1 \cdot 10^{-2}$, т. е. $\Delta b \leq 0,01$, или $\Delta a^* = 0,01$. Тогда число b можно записать как $6,32 \pm 0,01$.

Предельная относительная погрешность

$$\delta b^* = \frac{1}{\alpha_1 \cdot 10^{n-1}} = \frac{1}{6 \cdot 10^{3-1}} = 0,0016667.$$

Погрешности алгебраических действий

- суммы $\Delta(a + b) = \Delta a + \Delta b$;
- разности $\Delta(a - b) = \Delta a + \Delta b$;
- произведения $\delta(a \cdot b) = \delta a + \delta b$;
- частного $\delta(a / b) = \delta a + \delta b$;
- m -й степени $\delta a^m = m \cdot \delta a$;
- корня m -й степени $\delta \sqrt[m]{a} = \frac{1}{m} \cdot \delta a$.

Правила подсчета цифр

При сложении и вычитании приближенных чисел в результате следует сохранить столько десятичных знаков, сколько их в приближенном, данном с наименьшим числом десятичных знаков.

Пример 1.7. $a = 0,12$; $b = 0,37401$; $a + b = 0,49401 \approx 0,49$.

При умножении и делении в результате следует сохранить столько значащих цифр, сколько их в приближенном, данном с наименьшим числом значащих цифр.

Пример 1.8. $a = 0,2$; $b = 0,41$; $a \cdot b = 0,82 \approx 0,8$.

При возведении приближенного числа в квадрат или куб в результате следует сохранить столько значащих цифр, сколько их в основании степени.

Пример 1.9. $a = 9,5$; $a^2 = 90,25 \approx 90$.

При извлечении квадратного или кубического корней из приближенного числа в результате следует сохранить столько значащих цифр, сколько их в подкоренном числе.

Пример 1.10. $a = 12,1$; $\sqrt{a} = 3,478505426... \approx 3,48$.

При вычислении промежуточных результатов следует сохранить на одну цифру больше, чем требуют правила. В окончательном результате эта «запасная» цифра отбрасывается.

1.2. Определение параметров воды и водяного пара с помощью ПЭВМ

Математическое моделирование теплоэнергетических установок (ТЭУ) является составной частью большинства технико-экономических задач. Особое место в процессе моделирования ТЭУ занимает расчет термодинамических параметров воды и пара в элементах тепловой схемы с помощью ПЭВМ. Наибольшую трудность представляет определение параметров пара в процессе расширения его в турбине, т. к. выбор расчетных формул зависит от состояния пара, которое по мере его расширения в турбине может изменяться и поэтому требует контроля.

Определение термодинамических и теплофизических параметров воды и водяного пара в компьютерных расчетах можно вести с помощью функций, разработанных и оформленных на языке ПАСКАЛЬ в виде программного модуля TABL1.TPU сотрудниками кафедры АТЭС: доцентами А. В. Воробьевым и Л. А. Беляевым и аспирантом А. С. Матвеевым.

Подключение модуля TABL1.TPU

Программный модуль TABL1.TPU хранится в памяти ПЭВМ в объектных кодах в библиотеке модулей TPU и подключается автоматически, наряду с другими модулями (PRINTER, GRAF и т. д.), после обращения к нему предложением USES... сразу после заголовка программы, например:

```
Program TURBINA;  
Uses TABL1;  
Var...;  
...
```

1.2.1. Определение параметров перегретого пара в процессе расширения

Известно, что весь процесс расширения пара в турбине лежит в области перегретого пара (см. рис. 1.2).

Заданы:

P_0, t_0 – давление и температура пара на входе в отсек;

P_1 – давление пара за отсеком;

KPD – внутренний относительный КПД отсека.

Найти t_1, h_1 – температуру и энтальпию пара за отсеком.

Учитывая тот факт, что для теоретического процесса расширения пара в турбине выполняется $S = \text{const}$, алгоритм расчета может быть следующим.

Алгоритм расчета параметров перегретого пара	Обращение в программе к функциям из TABL1
$h_0 = f(P_0, t_0);$ $S_0 = f(P_0, t_0);$ $h_{1t} = f(P_1, S_0);$ $h_1 = h_0 - (h_0 - h_{1t}) \cdot KPD;$ $t_1 = f(P_1, h_1)$	$h_0 := \mathbf{H_PT}(P_0, t_0);$ $S_0 := \mathbf{S_PT}(P_0, t_0);$ $h_1 := \mathbf{H_PS}(P_1, S_0);$ $t_1 := \mathbf{T_PH}(P_1, h_1);$

1.2.2. Определение параметров мокрого пара в процессе расширения

Известно, что весь процесс расширения пара в турбине лежит в области мокрого пара (см. рис. 1.3).

Заданы:

P_0, x_0 – давление и степень сухости пара на входе в отсек;

P_1 – давление пара за отсеком;

KPD – внутренний относительный КПД отсека.

Найти h_1, x_1 – энтальпию и степень сухости пара за отсеком.

Алгоритм расчета параметров мокрого пара	Обращение в программе к функциям из TABL1
$h_0 = f(P_0, x_0)$	$h0 := \mathbf{H_PX}(P0, X0)$
$S_0 = f(P_0, x_0)$	$S0 := \mathbf{S_PX}(P0, X0)$
$h_1' = f(P_1)$	$h1I := \mathbf{HSW_P}(P1)$
$h_1'' = f(P_1)$	$h1II := \mathbf{HSP_P}(P1)$
$S_1' = f(P_1)$	$S1I := \mathbf{SSW_P}(P1)$
$S_1'' = f(P_1)$	$S1II := \mathbf{SSP_P}(P1)$
$x_{1t} = (S_0 - S_1'') / (S_1'' - S_1')$	
$h_{1t} = f(P_1, x_{1t})$	
$h_1 = h_0 - (h_0 - h_{1t}) \cdot KPD$	
$x_1 = (h_1 - h_1') / (h_1'' - h_1')$	

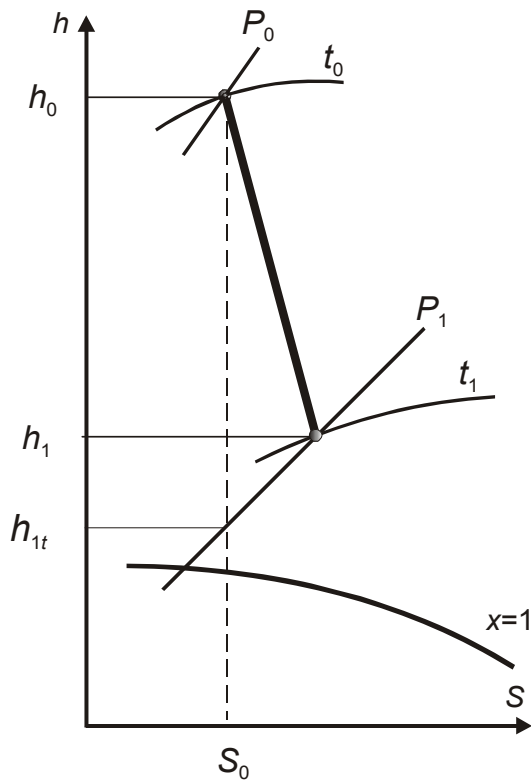


Рис. 1.2. Процесс расширения перегретого пара

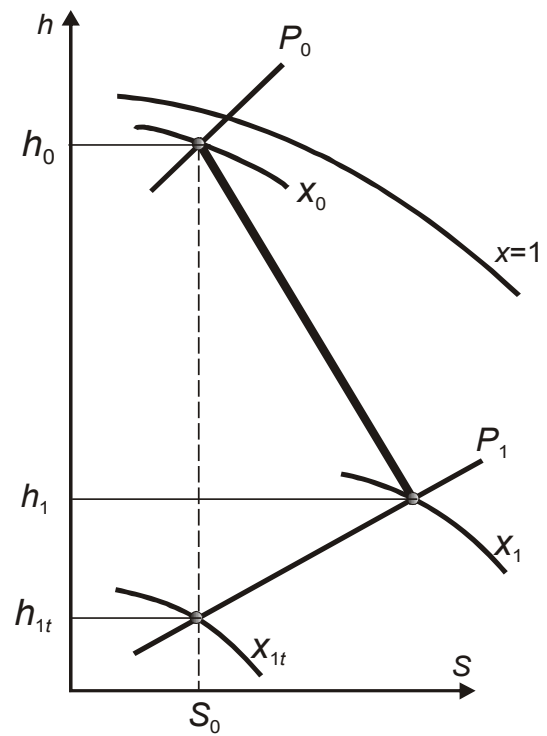


Рис. 1.3. Процесс расширения мокрого пара

Здесь и в дальнейшем в идентификаторах, обозначающих параметры кипящей жидкости (h' , S' , V') и сухого насыщенного пара (h'' , S'' , V''), для одного штриха принято обозначение «I», а для двух штрихов – «II».

1.2.3. Проверка состояния пара в конце теоретического расширения

Пар на входе в отсек – *перегретый*.

Если пар на входе в отсек – *мокрый*, то контролировать его состояние в конце расширения не требуется, т. к. в этом случае *весь процесс лежит в области мокрого пара*.

Оценить состояние пара в конце теоретического расширения от параметров на входе в отсек (P_0, t_0) до давления на выходе P_1 (рис. 1.4) можно, *сравнивая энтропию теоретического процесса S_0 с энтропией сухого насыщенного пара S_1'' при давлении P_1* .

Если $S_0 > S_1''$ (рис. 1.4, *а*), то конец теоретического расширения (точка $1t$) лежит в области *перегретого* пара. В этом случае для определения энтальпии h_{1t} необходимо воспользоваться функциями перегретого пара из модуля TABL1 [1].

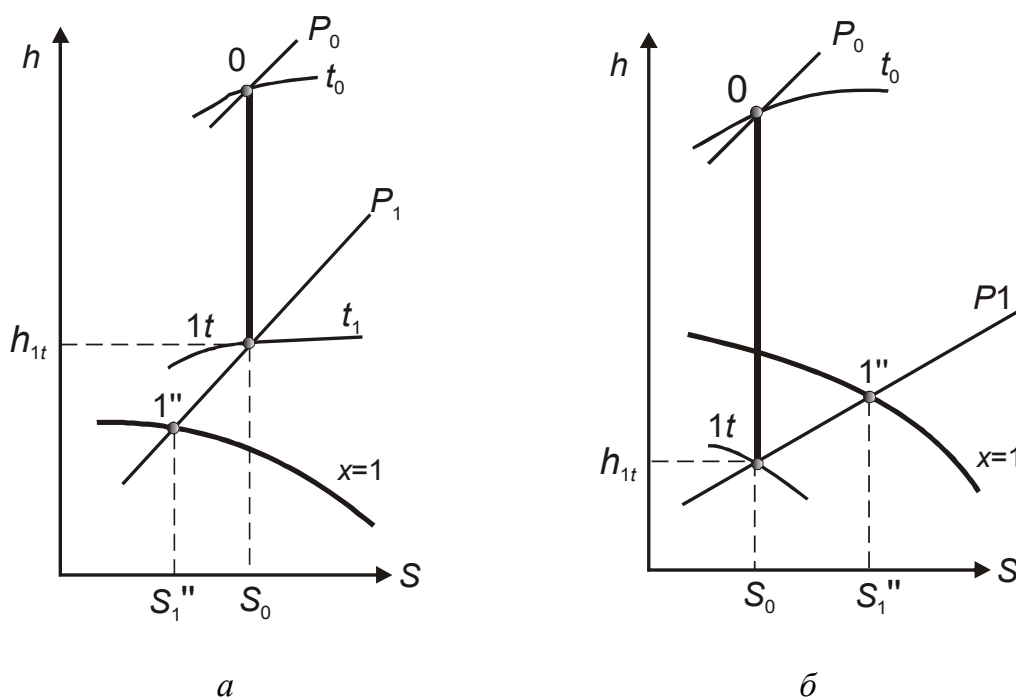


Рис. 1.4

Если $S_0 < S_1''$ (рис. 1.4, *б*), то конец теоретического расширения лежит в области *мокрого* пара и расчет параметров в этой точке надо выполнять с помощью функций насыщения из модуля TABL1 [1] и формул мокрого пара.

Блок-схема алгоритма проверки состояния пара в конце теоретического расширения приведена на рис. 1.5.

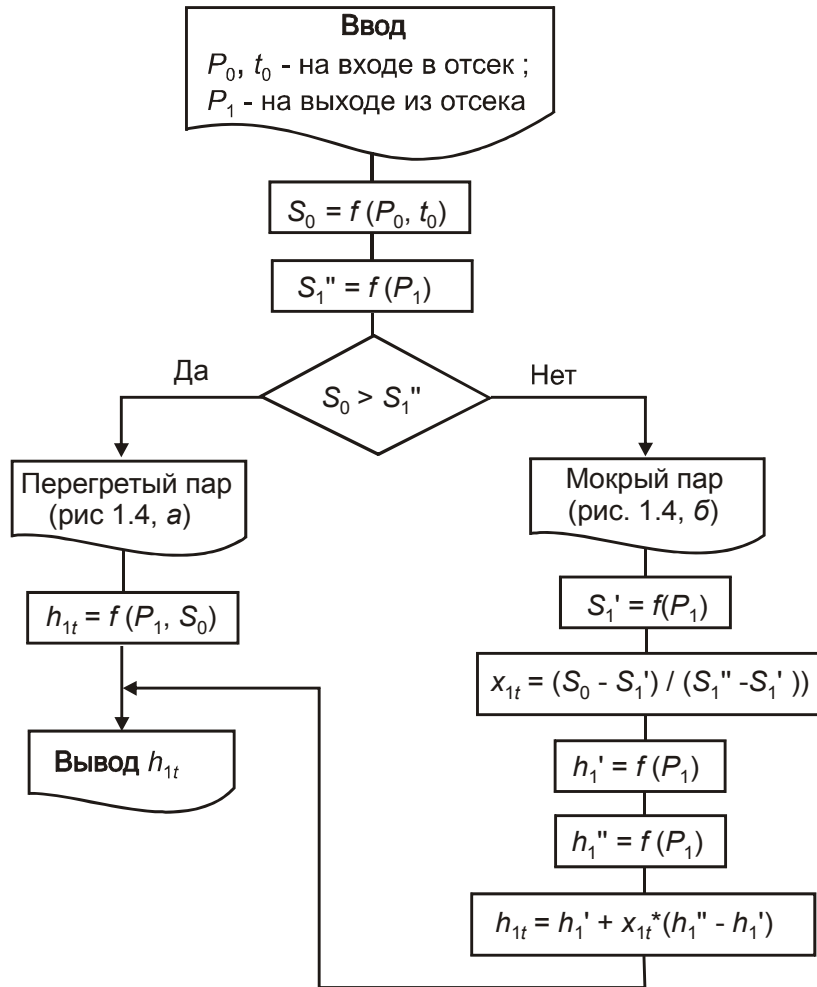


Рис. 1.5

Приведем пример программы, работающей по этому алгоритму.

```

Program PROCESS1;
Uses TABL1;
Var P0,t0,h0,S0,S1,h1t,S1I,S1II,h1I,h1II,x1t      : real;
Begin
  Writeln (' Введите P0 [МПа], t0 [C], P1[МПа] ');
  Readln (P0, t0, P1);
  h0:=H_PT(P0, t0);      S0:=S_PT(P0, t0);
  S1II:=SSP_P(P1);
  If S0>S1II then begin {перегретый пар в конце теор. расширения}
    h1t:=H_PS(P1,S0)    end
  else begin {мокрый пар в конце теор. расширения}
    S1I:=SSW_P(P1);
    x1t:=(S0-S1I)/(S1II-S1I);
    h1I:=HSW_P(P1);
    h1II:=HSP_P(P1);
    h1t:= h1I+x1t*(h1II-h1I) end;
  Writeln ('h1t=', h1t:7:1);
  Readln;
  End.
  
```

1.2.4. Проверка состояния пара в конце действительного расширения

Такая проблема может возникнуть, если процесс теоретического расширения заканчивается в области *мокрого* пара.

Если же теоретический процесс заканчивается в области *перегретого* пара, то конец действительного процесса также лежит в области *перегретого* пара и *контролировать состояние пара в конце действительного расширения не надо*.

Для точки, характеризующей состояние пара в конце действительного процесса, как правило, бывают известны давление P_1 и энтальпия h_1 . Поэтому определять состояние пара (перегретый или мокрый) в этой точке удобно, *сравнивая энтальпию пара в конце действительного расширения h_1 с энтальпией сухого насыщенного пара h_1'' при давлении P_1* (рис. 1.6).

Если $h_1 > h_1''$ (рис. 1.6, *а*), то конец действительного расширения (точка 1) лежит в области *перегретого* пара. Для определения параметров пара в точке 1 необходимо воспользоваться функциями перегретого пара из модуля TABL1 [1, с. 4].

Если $h_1 < h_1''$ (рис. 1.6, *б*), то конец действительного расширения лежит в области *мокрого* пара и для расчета параметров пара в этой точке надо воспользоваться функциями насыщения из модуля TABL1 и формулами мокрого пара.

Блок-схема алгоритма определения состояния пара в конце действительного процесса расширения в турбине приведена на рис. 1.7.

Обозначения параметров в алгоритме соответствуют процессам на рис. 1.6.

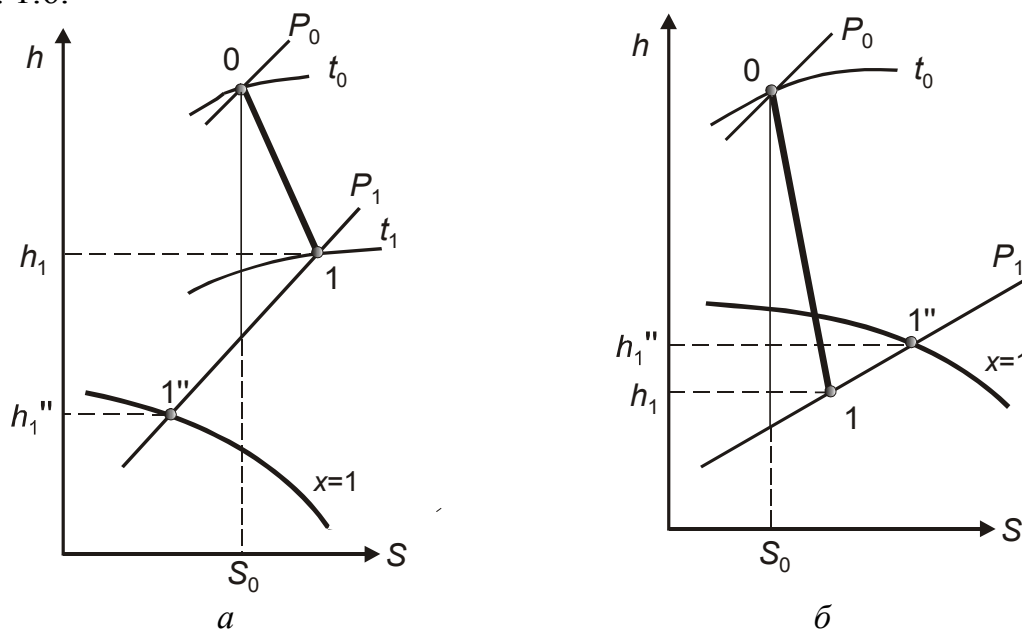


Рис. 1.6

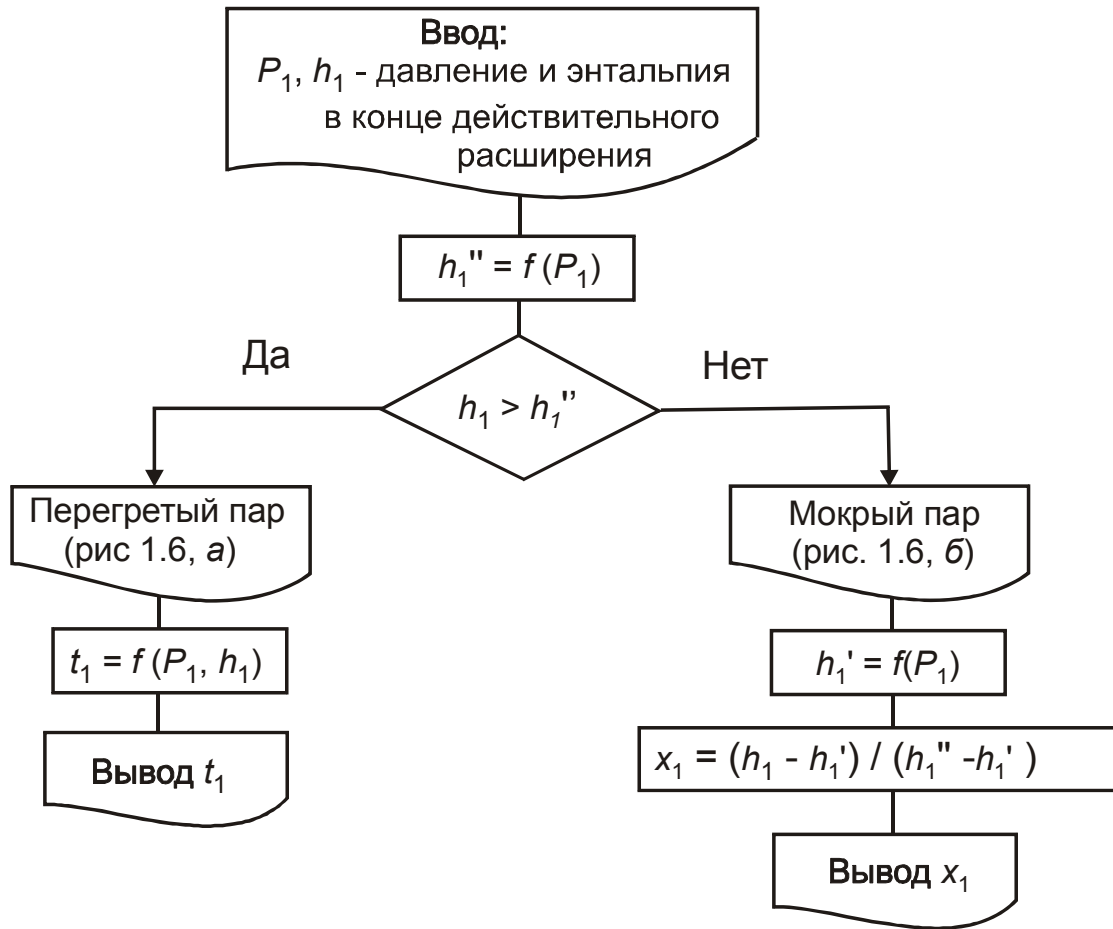


Рис. 1.7

Приведем фрагмент программы, соответствующий этому алгоритму:

```

...
h1III:=HSP_P(P1);
If h1>h1III then begin {перегретый пар в конце действ. расширения}
    t1:=T_PH(P1,h1) end
    else begin {мокрый пар в конце действ. расширения}
    h1I:= HSW_P('C','P',P1);
    x1:= (h1 - h1I) / (h1III-h1I) end; ...
  
```

1.3. Численные методы решения нелинейных уравнений при моделировании теплового оборудования ТЭС

1.3.1. Численные методы решения нелинейного уравнения с одним неизвестным

Способы решения нелинейных уравнений численными методами изложены в [6–8].

Любое уравнение с одним неизвестным можно представить в виде

$$f(x) = 0. \quad (1.1)$$

Решением уравнения (1.1) называется совокупность значений x , при которых уравнение (1.1) обращается в тождество.

Каждое значение x из этой совокупности называется *корнем* ξ уравнения.

Решить уравнение численным методом означает:

- 1) установить, имеет ли оно корни, сколько корней;
- 2) найти значения корней с заданной точностью.

Задача численного решения уравнения (1.1) состоит из двух этапов:

- 1) *отделения корней* (нахождения достаточно малых окрестностей, содержащих одно значение корня);
- 2) *уточнения корня* (вычисления корня с заданной точностью).

К наиболее популярным численным методам решения нелинейного уравнения с одним неизвестным относятся:

- *метод половинного деления;*
- *метод простой итерации;*
- *метод хорд;*
- *метод Ньютона.*

1.3.1.1. Графическое решение нелинейного уравнения

Способ 1

Решить уравнение (1.1) означает *найти точки пересечения* графика функции $y = f(x)$ с *осью абсцисс* (корень ξ – на рис. 1.8).

Способ 2

Уравнение вида $f(x) = 0$ путем преобразований заменяется на уравнение

$$f_1(x) = f_2(x). \quad (1.2)$$

Графически решить уравнение (1.2) означает *найти точки пересечения графиков функций* $y = f_1(x)$ и $y = f_2(x)$ (корень ξ – на рис. 1.9).

Графический способ удобно использовать для приближенной оценки значения корня с дальнейшим его уточнением одним из перечисленных выше численных методов.

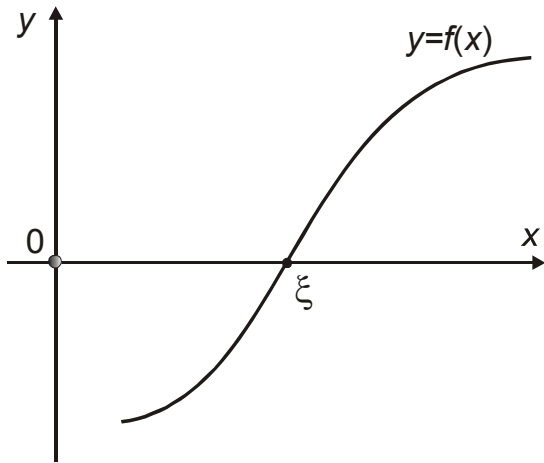


Рис. 1.8

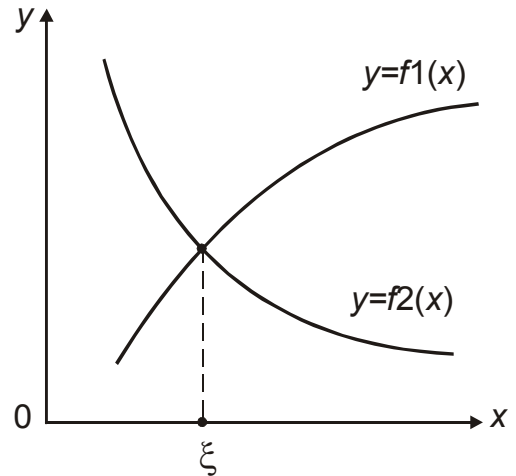


Рис. 1.9

Пример 1.11. Отделить корни уравнения $\sin(x) - \ln(x) = 0$ и найти их приближенные значения графическим способом.

Решение

Преобразуем заданное уравнение к виду (1.2) $\sin(x) = \ln(x)$ и найдем точку пересечения графиков $y = \sin(x)$ и $y = \ln(x)$ (рис. 1.10).

Единственный корень ξ лежит на отрезке $[1; \pi/2]$.

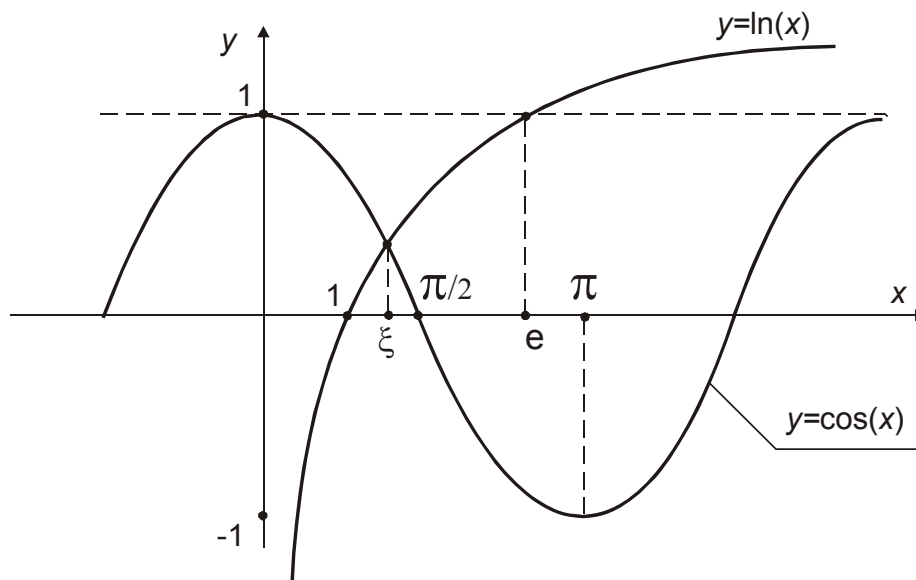


Рис. 1.10

1.3.1.2. Метод половинного деления

Известно, что функция $f(x)$ непрерывна на $[a, b]$ и имеет единственный корень. Это означает, что выполняется $f(a) \cdot f(b) < 0$.

Суть метода половинного деления состоит в том, что для нахождения корня делим отрезок $[a; b]$ пополам точкой

$$c = (a + b) / 2,$$

определяем знак функции в точках a, b, c и выбираем каждый раз ту половину отрезка, на котором функция меняет знак (рис. 1.11):

$[a; c]$, если $f(a) \cdot f(c) < 0$;

$[c; b]$, если $f(c) \cdot f(b) < 0$.

Расчет заканчивается, когда интервал, содержащий корень, уменьшится до заданной погрешности.

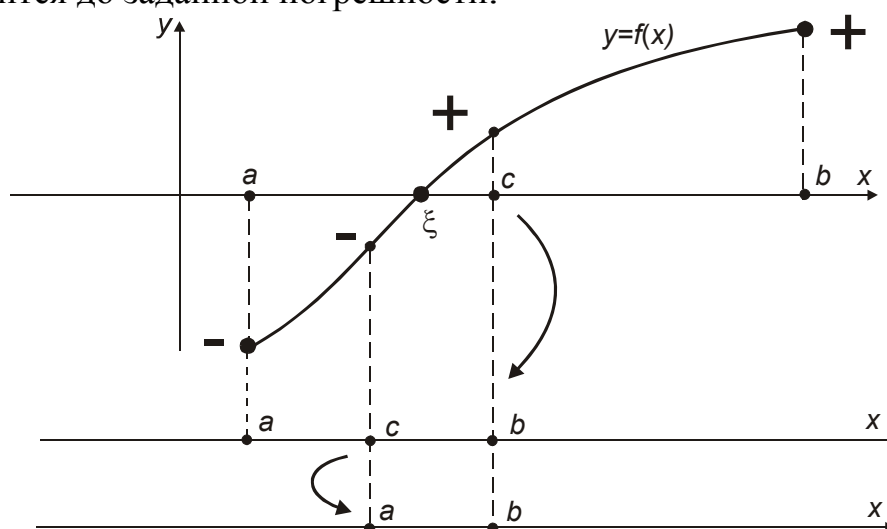


Рис. 1.11

Алгоритм метода половинного деления приведен на рис. 1.12.

1.3.1.3. Метод простой итерации

Уравнение (1) приведем к виду

$$x = \varphi(x). \quad (1.3)$$

Это можно сделать, преобразовав уравнение (1.1) различными способами.

Итерационная формула имеет вид

$$x_n = \varphi(x_{n-1}), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Схема применения этой формулы следующая.

Принимается x_0 – начальное приближение к корню уравнения (3).

Итерация 1. $x_1 = \varphi(x_0)$.

Итерация 2. $x_2 = \varphi(x_1)$ и т. д.

Таким образом, образуем числовую последовательность

$$x_0, x_1, x_2, \dots, x_n, \dots,$$

которую называют *последовательностью приближений*, или *итерационной последовательностью* (от латинского **iteration** – повторение).

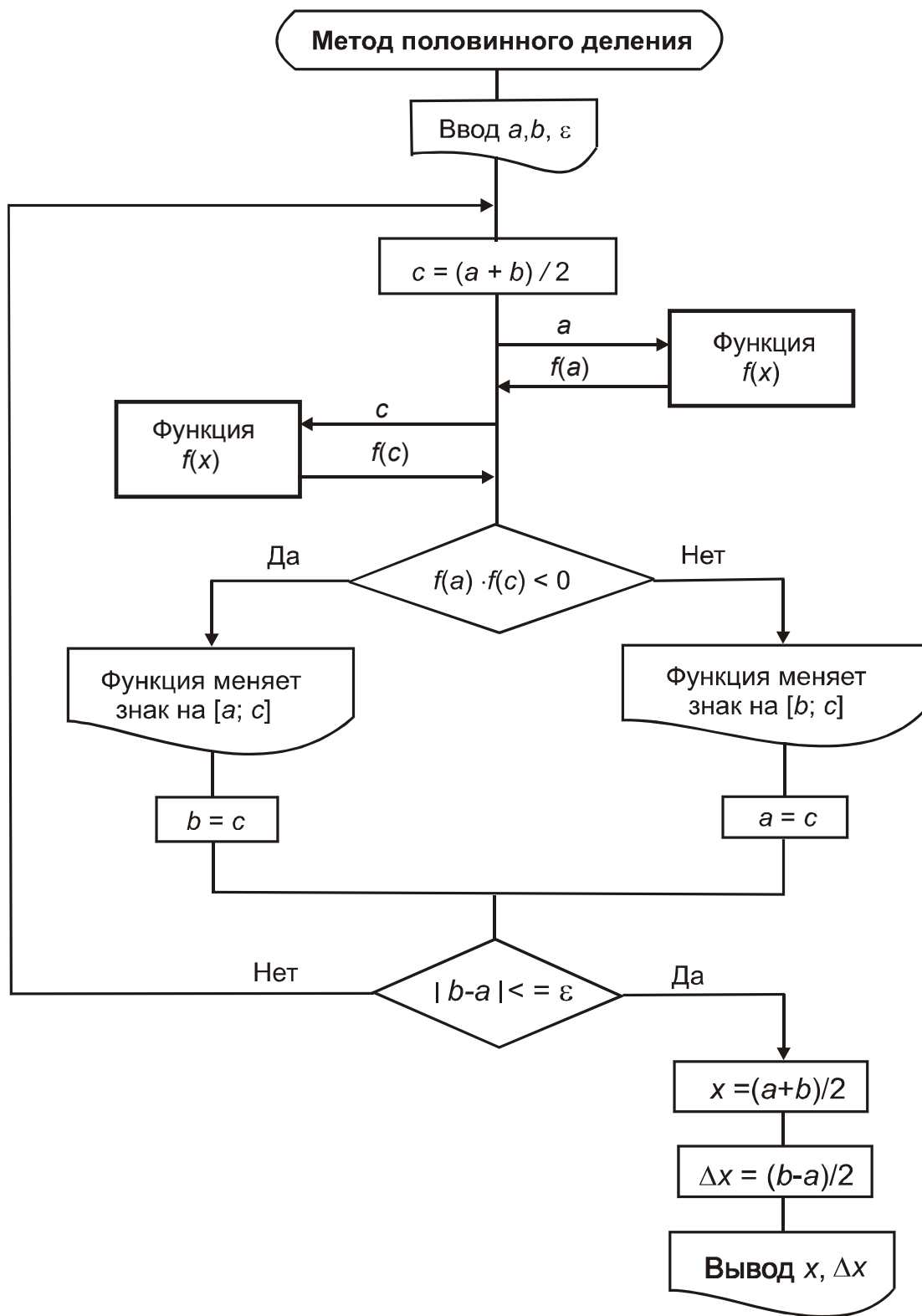


Рис. 1.12

Итерационный процесс заканчивается, когда значения x на двух последних шагах отличаются друг от друга меньше, чем на величину наперед заданного числа ε :

$$|x_n - x_{n-1}| \leq \varepsilon.$$

Алгоритм метода простой итерации приведен на рис. 1.13.



Рис. 1.13. Алгоритм метода простой итерации

Достаточное условие сходимости итерационного процесса

Если на всем интервале $[a, b]$ выполняется условие

$$|\varphi'(x)| < 1, \tag{1.4}$$

то процесс сходится.

Преобразование уравнения к итерационному виду

Сходимость итерационного процесса существенно зависит от записи функции $\varphi(x)$.

Уравнение $f(x) = 0$ можно привести к виду $x = \varphi(x)$ многими способами; например, для функции $f(x) = x^2 - c$, где $c \geq 0$, это можно сделать следующим образом:

1) прибавить к левой и правой частям x :

$$x = x^2 + x - c;$$

2) разделить на x :

$$x = c/x, \quad x \neq 0;$$

3) преобразовать к виду:

$$x = x - \left(\frac{x^2 - c}{2 \cdot x} \right) = \frac{1}{2} \left(x + \frac{c}{x} \right).$$

Однако, чтобы итерационный процесс был сходящимся, привести уравнение $y = f(x)$ к виду $x = \varphi(x)$ надо таким образом, чтобы выполнялось условие (1.4).

В некоторых случаях, помимо обычных преобразований, полезно иметь в виду следующие приемы:

1) уравнение (1.1) приводят к виду

$$x = x - m \cdot f(x), \quad m \neq 0,$$

где

$$\varphi(x) = x - m \cdot f(x).$$

Тогда

$$\varphi'(x) = 1 - m \cdot f'(x).$$

Подбирают (если это возможно) m таким образом, чтобы на $[a; b]$ выполнялось

$$|\varphi'(x)| = |1 - m \cdot f'(x)| < 1;$$

2) пусть $|\varphi'(x)| > 1$ на всем отрезке $[a, b]$, тогда вместо функции $y = \varphi(x)$ будем рассматривать функцию $x = \beta(y)$, обратную $\varphi(x)$. Будем решать уравнение $y = \beta(y)$, для которого

$$|\beta'(x)| = \frac{1}{|\varphi'(x)|} < 1.$$

Практическое использование метода простой итерации

Достоинство метода – простота алгоритма.

Недостатки:

- 1) не всегда обеспечивает сходимость;
- 2) для недифференцируемой функции выяснить сходимость перед использованием алгоритма невозможно, это будет известно лишь в процессе расчетов.

Недостатки метода простой итерации заставляют в любой программе, использующей этот метод, *предусматривать контроль сходимости (счетчик итераций) и прекращать счет, если сходимость не обеспечивается.*

В технических задачах продифференцировать функцию $\varphi(x)$ и тем более проанализировать поведение $\varphi'(x)$ с целью доказательства сходимости почти не предоставляется возможным. Поэтому следует помнить **основное правило**, позволяющее успешно применять метод простой итерации на практике: *чем ближе начальное приближение к точному значению корня уравнения, тем больше вероятность того, что итерационный процесс – сходящийся*, из чего следует, что в компьютерных расчетах инженерных задач *возрастает роль специалиста*, здравый смысл и опыт (решения задач подобного рода) которого заменить не сможет ни математик, ни программист.

Пример 1.12. Уточнить значение корня уравнения $1/x - \ln(x) = 0$ с точностью $\varepsilon = 0,001$ методом простой итерации, приняв в качестве начального приближения $x_0 = 2$.

Решение

Уравнение задано в виде (1.1). Приведем его к виду (1.3). Для этого прибавим к обеим частям x :

$$x = x + 1/x - \ln(x).$$

Итерация 1

$$x_0 = 2; \quad x_1 = x_0 + 1/x_0 - \ln(x_0) = 2 + 1/2 - \ln(2) = 1,8069;$$

$$|x_1 - x_0| = |1,8069 - 2| = 0,1931 > \varepsilon.$$

Итерация 2

$$x_1 = 1,8069;$$

$$x_2 = x_1 + 1/x_1 - \ln(x_1) = 1,8069 + 1/1,8069 - \ln(1,8069) = 1,7687;$$

$$|x_2 - x_1| = |1,7687 - 1,8069| = 0,1382 > \varepsilon.$$

Итерация 3

$$x_3 = x_2 + 1/x_2 - \ln(x_2) = 1,7638; \quad |x_3 - x_2| = 0,049 > \varepsilon.$$

Итерация 4

$$x_4 = x_3 + 1/x_3 - \ln(x_3) = 1,7633; \quad |x_4 - x_3| = 0,0005 < \varepsilon.$$

Расчет закончили.

1.3.1.4. Метод хорд

Известно, что функция $f(x)$ непрерывна на $[a, b]$ и имеет единственный корень. Это означает, что выполняется $f(a) \cdot f(b) < 0$.

По методу хорд за очередное приближение x_n к точному значению корня ξ принимается точка пересечения хорды, проведенной к графику функции на отрезке $[a, b]$, с осью абсцисс (рис. 1.14).

Значение абсциссы в этой точке находится из уравнения хорды

$$x_n = a - \frac{f(a)}{f(a) - f(b)} \cdot (b - a), \quad (1.5)$$

где a и b – координаты нового отрезка, изменяющиеся в процессе итераций.

При этом следует помнить, что *неподвижен тот конец, для которого знак функции совпадает со знаком ее второй производной*.

Алгоритм метода хорд приведен на рис. 1.15.

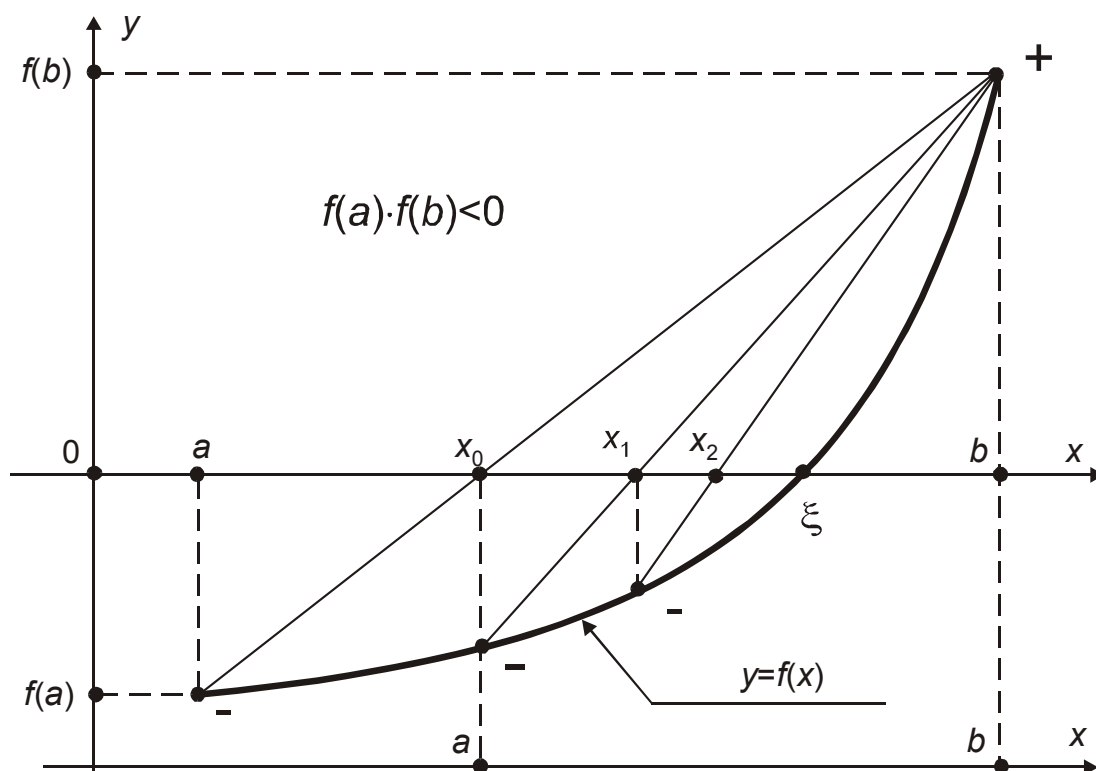


Рис. 1.14. Графическая иллюстрация метода хорд

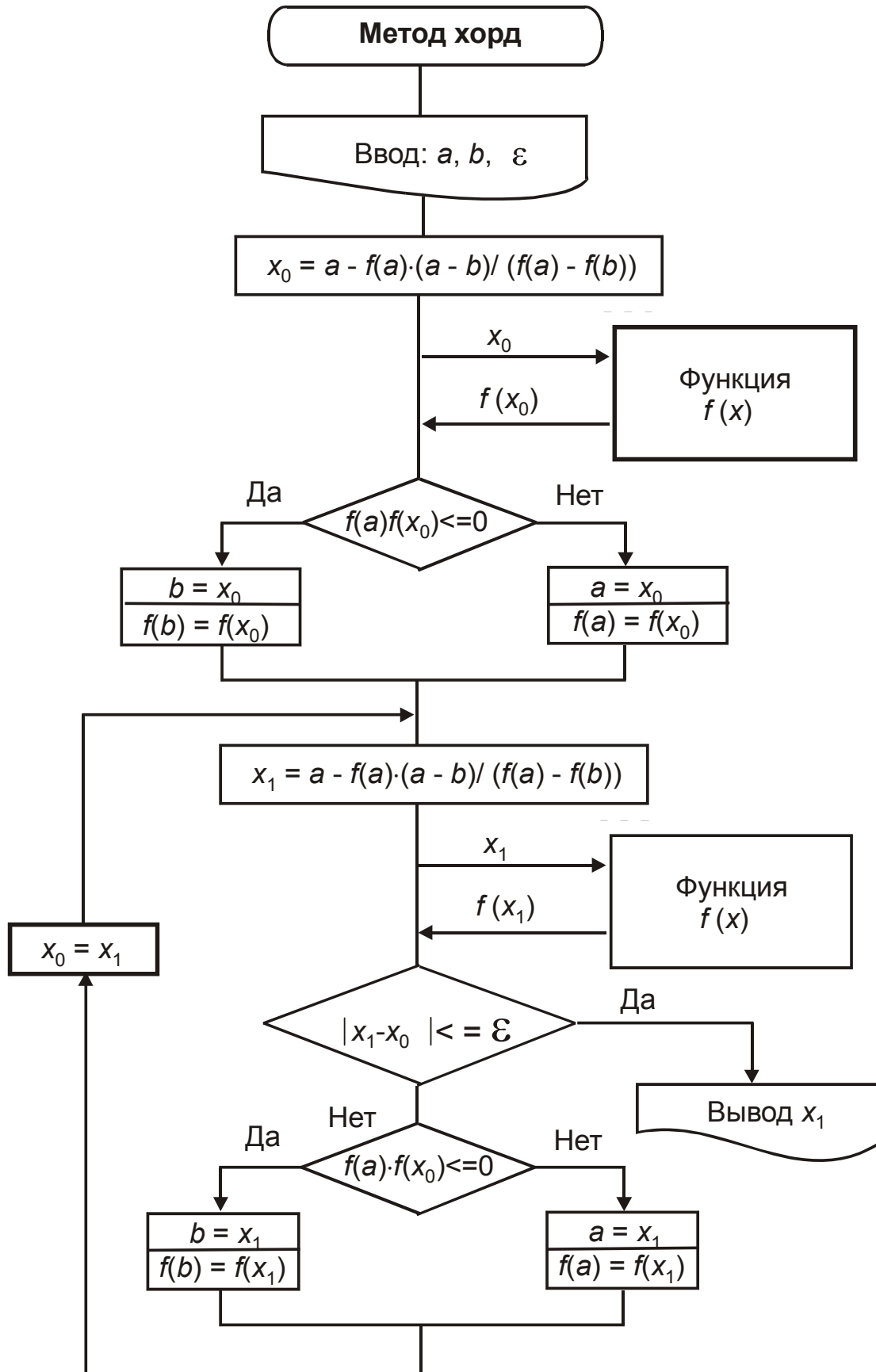


Рис. 1.15

1.3.1.5. Метод Ньютона

Известно, что функция $f(x)$ имеет корень на рассматриваемом отрезке $[a, b]$.

Геометрически метод Ньютона эквивалентен замене небольшой дуги кривой $y = f(x)$ касательной, проведенной в некоторой точке кривой (рис. 1.16). За очередное приближение к точному значению корня ξ принимается точка пересечения касательной с осью абсцисс.

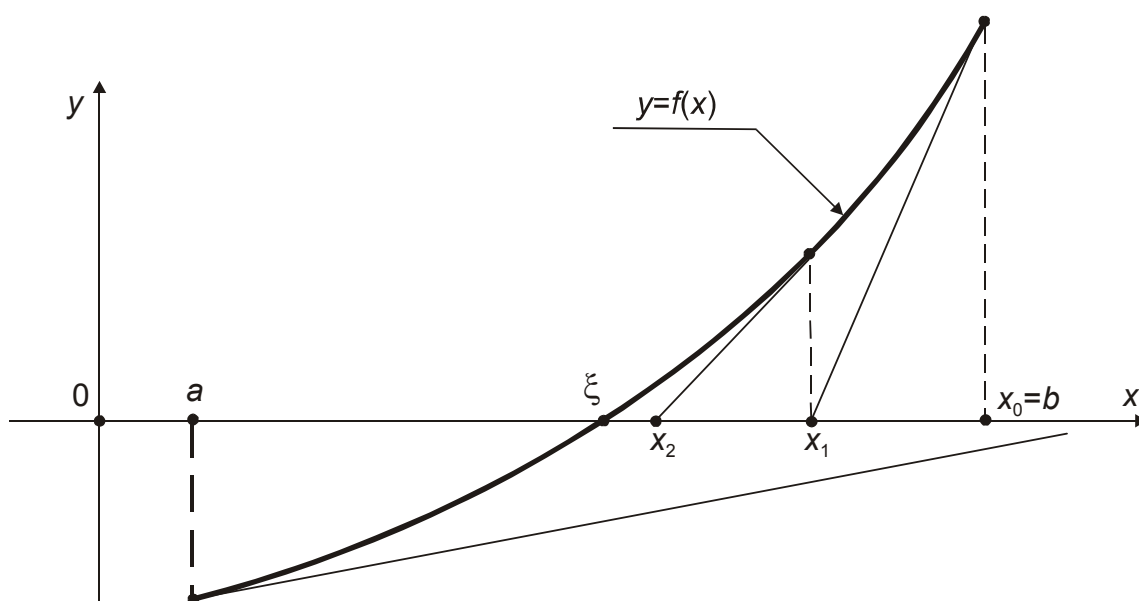


Рис. 1.16. Графическая иллюстрация метода Ньютона

Итерационная формула Ньютона –

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.6)$$

В качестве начального приближения x_0 можно принять тот конец отрезка $[a, b]$, на котором знаки функции и ее второй производной совпадают.

Алгоритм метода Ньютона приведен на рис. 1.17.

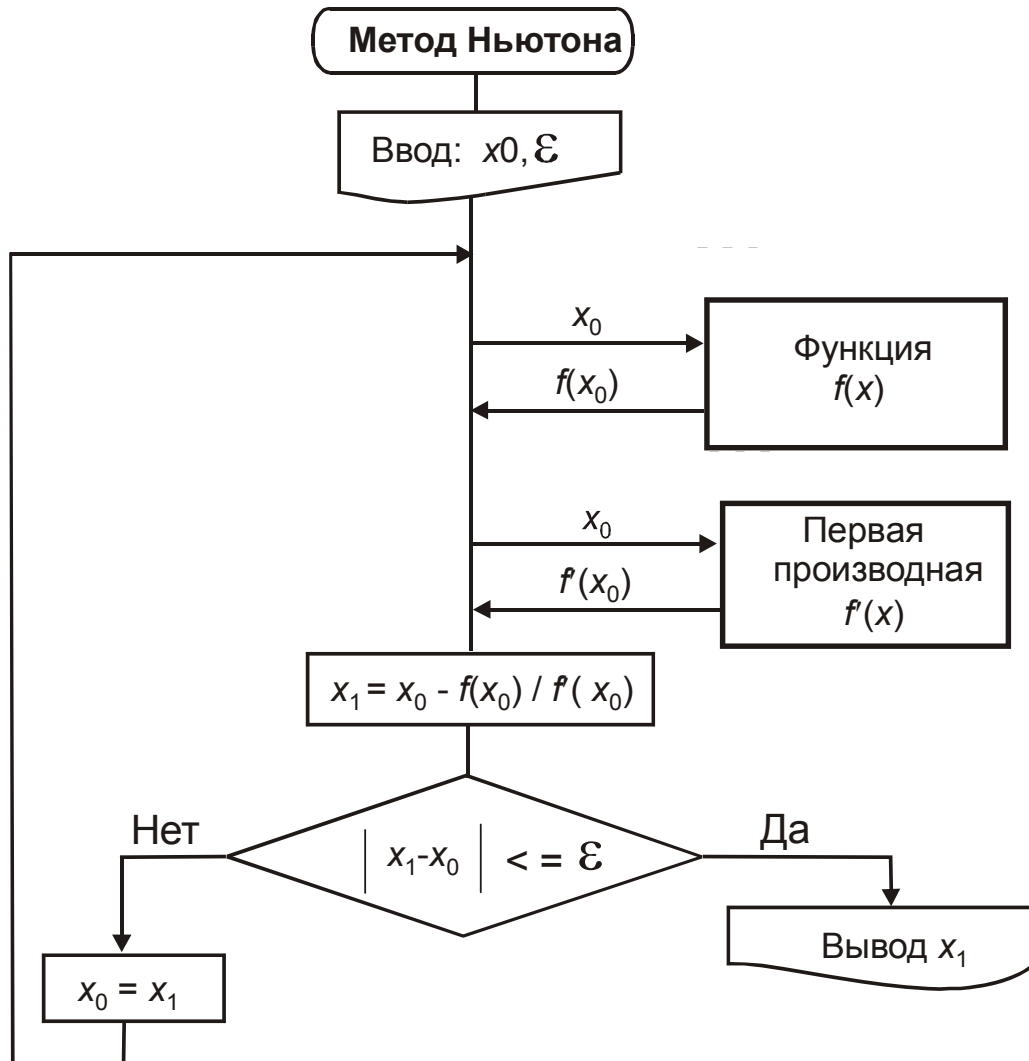


Рис. 1.17. Алгоритм метода Ньютона

1.3.1.6. Видоизмененный метод Ньютона

Вычисления упрощаются, если производную вычислять один раз – в точке начального приближения x_0 .

Итерационная формула видоизмененного метода Ньютона –

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_0)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.7)$$

1.3.2. Оптимальная последовательность расчета схем теплоэнергетических установок

Сложность и трудоемкость расчета тепловых схем ТЭС и АЭС в значительной мере обусловлены наличием расчетных циклов как в технологической схеме, так и в элементах оборудования. С моделированием тепловых схем на основе комплексного подхода можно ознакомиться в [5, 9–10].

Существование цикла означает, что параметры, выходящие из какого-либо участка схемы, влияют на значения потоков, входящих в данный участок схемы. Для схемы на рис. 1.18 количество отсепарированной воды $\alpha_{с.в.}$ зависит от расхода α_c , входящего в сепаратор (С) пара из части высокого давления (ЧВД) турбины. Вместе с тем величина α_c определяется с помощью расхода пара α_1 на подогреватель П1: $\alpha_c = \alpha_0 - \alpha_1$, в то время как значение α_1 , в свою очередь, зависит от $\alpha_{с.в.}$. Таким образом, в данной схеме поток α_c выступает в качестве *обратной связи*, а совокупность элементов **ЧВД–С–П1** представляет собой *замкнутый контур* или *цикл*.

Расчет замкнутого контура основывается на *разрыве обратных связей* в нем. Такой разрыв делает схему *разомкнутой*, что позволяет осуществить последовательный безитерационный ее расчет. Например, разорвав связь α_c между ЧВД и сепаратором в схеме на рис. 1.18, получим новую схему, лишенную контура между элементами **ЧВД, С, П1** (см. рис. 1.19). В разомкнутой схеме появился новый входящий в сепаратор поток α_c^* . Если задать значение потока α_c^* , то можно определить $\alpha_c = f(\alpha_c^*)$, рассчитав последовательно элементы **С, П1, ЧВД**.

Для того чтобы все параметры в разомкнутой схеме соответствовали параметрам в замкнутой, необходимо выполнение равенства

$$\alpha_c^* = \alpha_c$$

или

$$\alpha_c^* = f(\alpha_c^*).$$

Этим как бы замыкаются разорванные связи.

Последнее равенство есть математическое подтверждение возможности использования для решения задачи методов последовательных приближений.

Пример 1.13. Пусть для схемы на рис. 1.18 известны

$$h_0, h_1, h_2, h_3, h_c, h_k, h'_1, h'_2, h'_3, h'_k, h_{в1}, h_{в2}, \alpha_0 = 1.$$

Найти относительные расходы пара и воды.

Последовательность расчета может быть следующей.

1. Задаем начальное приближение $\alpha_c^* = 0,8$.

2. Из уравнений материального и теплового балансов сепаратора

$$\alpha_c^* = \alpha_{с.п.} + \alpha_{с.в.} \quad (1.7)$$

$$\alpha_c^* \cdot h_2 \cdot 0,99 = \alpha_{с.п.} \cdot h_c + \alpha_{с.в.} \cdot h'_2 \quad (1.8)$$

определяем $\alpha_{с.п.}$ и $\alpha_{с.в.}$.

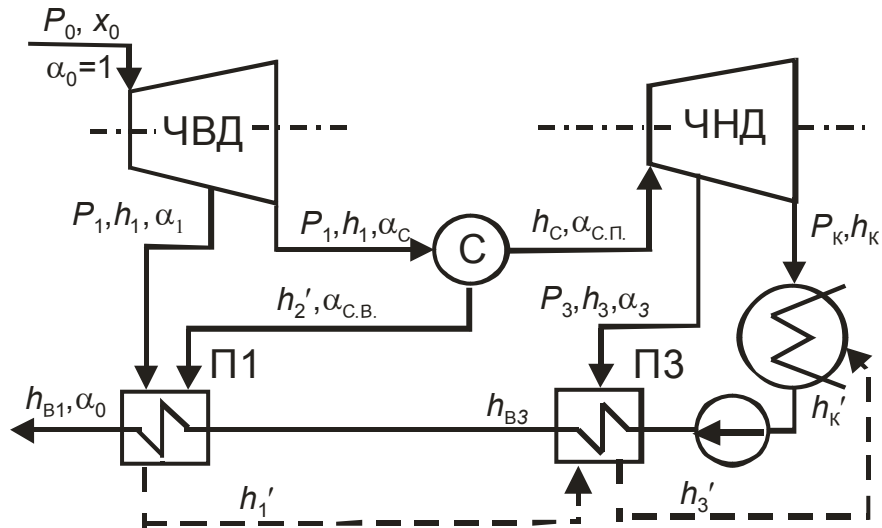


Рис. 1.18. Схема паротурбинной установки

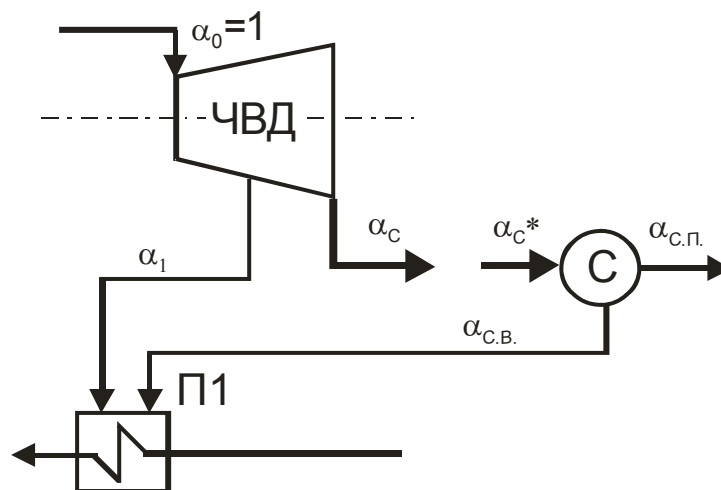


Рис. 1.19. Фрагмент схемы паротурбинной установки

3. Составляем уравнение теплового баланса для подогревателя П1

$$(\alpha_1 \cdot (h_1 - h'_1) + \alpha_{C.В.} \cdot (h'_2 - h'_1)) \cdot 0,98 = \alpha_0 \cdot (h_{B1} - h_{B3}) \quad (1.9)$$

и определяем из него α_1 .

4. Рассчитываем расход пара на выходе из ЧВД

$$\alpha_c = \alpha_0 - \alpha_1.$$

5. Сравниваем α_c и α_c^* . Если $\left| \frac{\alpha_c - \alpha_c^*}{\alpha_c} \right| > \varepsilon$, где ε – наперед задан-

ная погрешность, то полагаем $\alpha_c^* = \alpha_c$ и расчет повторяем, начиная с п. 2. В противном случае переходим к п. 6.

6. Рассчитываем подогреватель ПЗ, не входящий в замкнутый контур, и определяем расход пара α_3 :

$$(\alpha_3 \cdot (h_3 - h'_3) + (\alpha_1 + \alpha_{c.в.}) \cdot (h'_1 - h'_3)) \cdot 0,98 = \alpha_0 \cdot (h_{в3} - h'_k). \quad (1.10)$$

Блок-схема расчета относительных расходов рабочего тела для схемы на рис. 1.18 приведена на рис. 1.20.

Перед составлением программы расчета относительных расходов требуется переписать уравнения (1.7–1.10), выразив из них соответствующие переменные:

$$\alpha_{c.п.} = (\alpha_c \cdot h_2 \cdot 0,99 - \alpha_c \cdot h'_2) / (h_c - h'_2); \quad (a)$$

$$\alpha_{c.в.} = \alpha_c - \alpha_{c.п.}; \quad (b)$$

$$\alpha_1 = (\alpha_0 \cdot (h_{в1} - h_{в3}) / 0,98 - \alpha_{c.в.} \cdot (h'_2 - h'_1)) / (h_1 - h'_1); \quad (c)$$

$$\alpha_3 = \dots \quad (d)$$

Программа, соответствующая алгоритму на рис. 1.20, представлена ниже.

```

PROGRAM ITERAC;
USES TABL1;
VAR h0, h1, h2, hc, hk, ... : VAR;
BEGIN
  { Ввод исходных данных } A0:=1; Eps=0.005; ...
  Ac:=0.8; { Начальное приближение }
REPEAT
    Ac_p:= ...; { Из уравнения a }
    Ac_w:= ...; { Из уравнения b }
    A1:=...; { Из уравнения c }
    AAc:=Ac; { Переприсвоение }
    Ac:=A0-A1; { Уточнение }
UNTIL ABS(B) <= Eps;
    A3:=...; { Из уравнения d }
WRITELN ('A1=' , A1:7:4, 'Ac=' , Ac:7:4, ...);
READLN;
END.

```

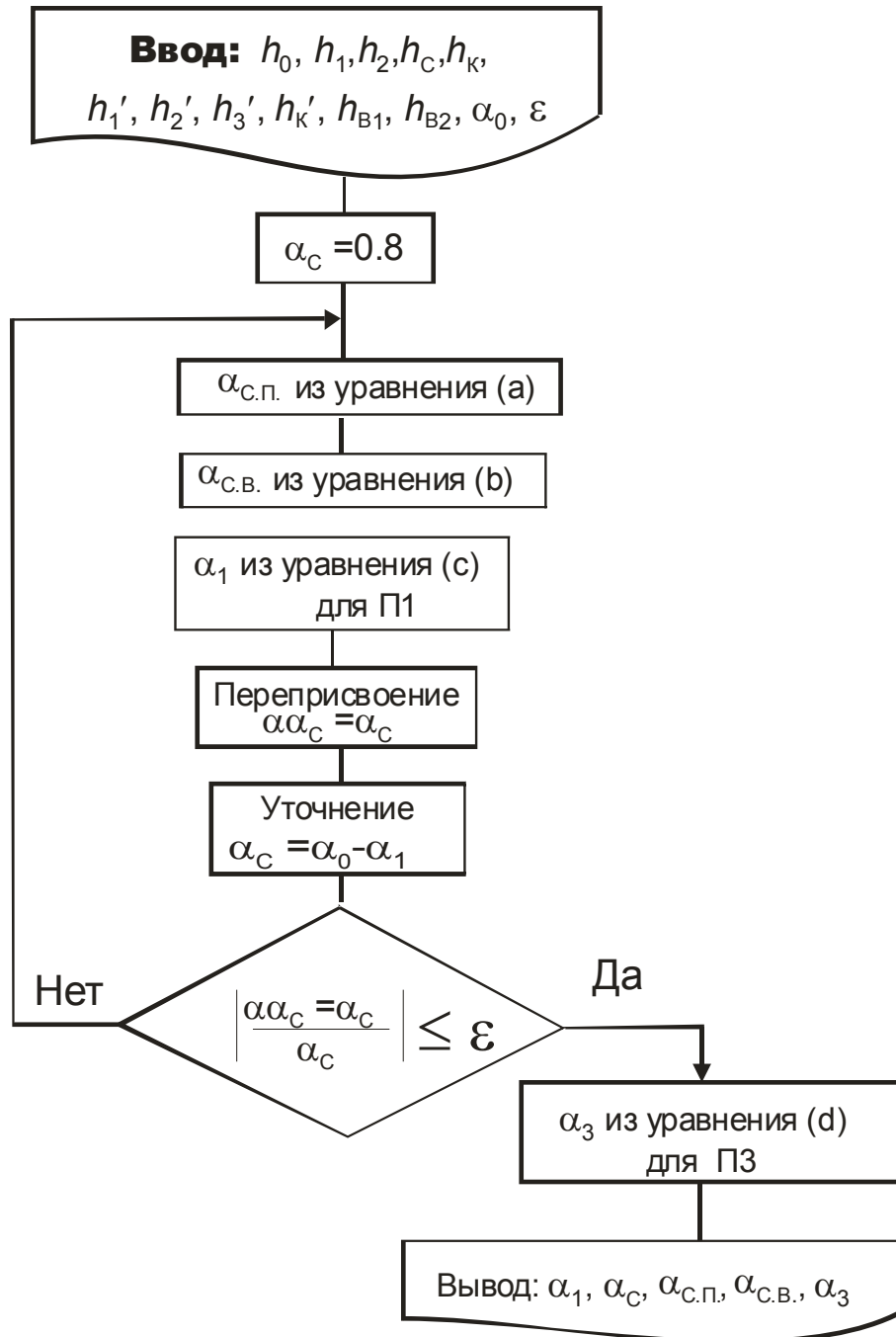


Рис. 1.20. Алгоритм расчета относительных расходов пара и воды

Анализ сложных схем показывает, что разрыв обратных связей можно осуществить множеством путей, следовательно, можно получить множество последовательностей расчета.

Возникает задача поиска наиболее рационального пути, при котором уменьшается порядок системы уравнений и время ее счета. Покажем существующие приемы снижения трудоемкости итерационного расчета на примере схемы на рис. 1.21 [5].

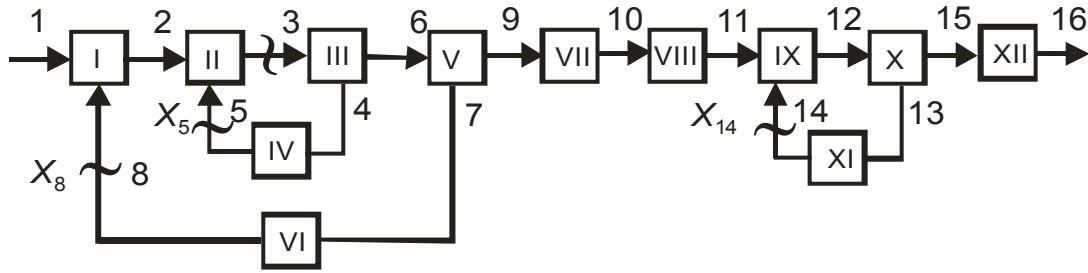


Рис. 1.21

1-й способ. Разорвем потоки **5, 8, 14**. Имеем систему уравнений

$$\begin{cases} X_5 = f(X_5); \\ X_8 = f(X_8); \\ X_{14} = f(X_{14}). \end{cases} \quad (1.11)$$

Если потоки однопараметрические, например, под неизвестными подразумеваются расходы рабочего тела, то система (1.11) включает три уравнения. Если же потоки трехпараметрические (расход G , давление P , энтальпия h):

$$X_5 = f(G_5, P_5, h_5); \quad X_8 = f(G_8, P_8, h_8); \quad X_{14} = f(G_{14}, P_{14}, h_{14}),$$

то система (1.11) включает уже 9 уравнений.

2-й способ. Разрыв обратных связей можно осуществить в два этапа.

I этап. Сначала разрываются связи **5** и **8** и рассчитывается совокупность элементов **I–VI**, что означает расчет системы

$$\begin{cases} X_5 = f(X_5); \\ X_8 = f(X_8), \end{cases}$$

после этого рассчитываются элементы **VII, VIII**, не охваченные контуром.

II этап. Разрывается связь **14** и рассчитывается совокупность элементов **IX–X–XI**, охваченных системой уравнений

$$\{X_{14} = f(X_{14}),$$

а затем выполняется расчет последнего элемента **XII** схемы.

Достоинства 2-го способа – элементы VII, VIII и XII, не охваченные контурами, рассчитываются один раз.

3-й способ. Разорвем поток **3**. Это позволит заменить систему уравнений

$$\begin{cases} X_5 = f(X_5); \\ X_8 = f(X_8) \end{cases}$$

системой более низкого порядка

$$\{X_3 = f(X_3).$$

Таким образом, при решении систем уравнений ТЭУ итерационными способами надо помнить:

1. Правильным выбором разрываемых потоков (обратных связей) можно существенно уменьшить размерность решаемой задачи. Очень часто задачу решения системы уравнений высокого порядка можно свести к решению нескольких систем более низкого порядка.

2. Размерность решаемой задачи можно снизить с помощью двух операций:

а) выделением в схеме элементов, охваченных контурами, и элементов, которые не входят ни в один из контуров;

б) выбором внутри контура наилучшей совокупности потоков, разрыв которых превращает контур в разомкнутую последовательность.

Учет рекомендаций, изложенных выше, позволяет успешно использовать в итерационных расчетах *метод Зейделя*.

1.3.3. Решение системы нелинейных уравнений методом простой итерации

Задана система n нелинейных уравнений

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0; \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0; \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0. \end{cases} \quad (1.12)$$

Чтобы использовать метод простой итерации, систему (1.12) надо представить в виде

$$\begin{cases} x_1 = \varphi_1(x_1, x_2, \dots, x_n); \\ x_2 = \varphi_2(x_1, x_2, \dots, x_n); \\ \dots \\ x_n = \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_n). \end{cases} \quad (1.13)$$

Затем, задав n начальных приближений $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}$ и столько же значений погрешностей по каждой переменной $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$, можно выполнить итерационный расчет согласно блок-схеме на рис. 1.22.

Практическая реализация этого алгоритма наталкивается на значительные проблемы сходимости, которые в большинстве случаев могут быть преодолены, если квалификация специалиста позволяет оценить начальные приближения очень близкими к значениям корней.

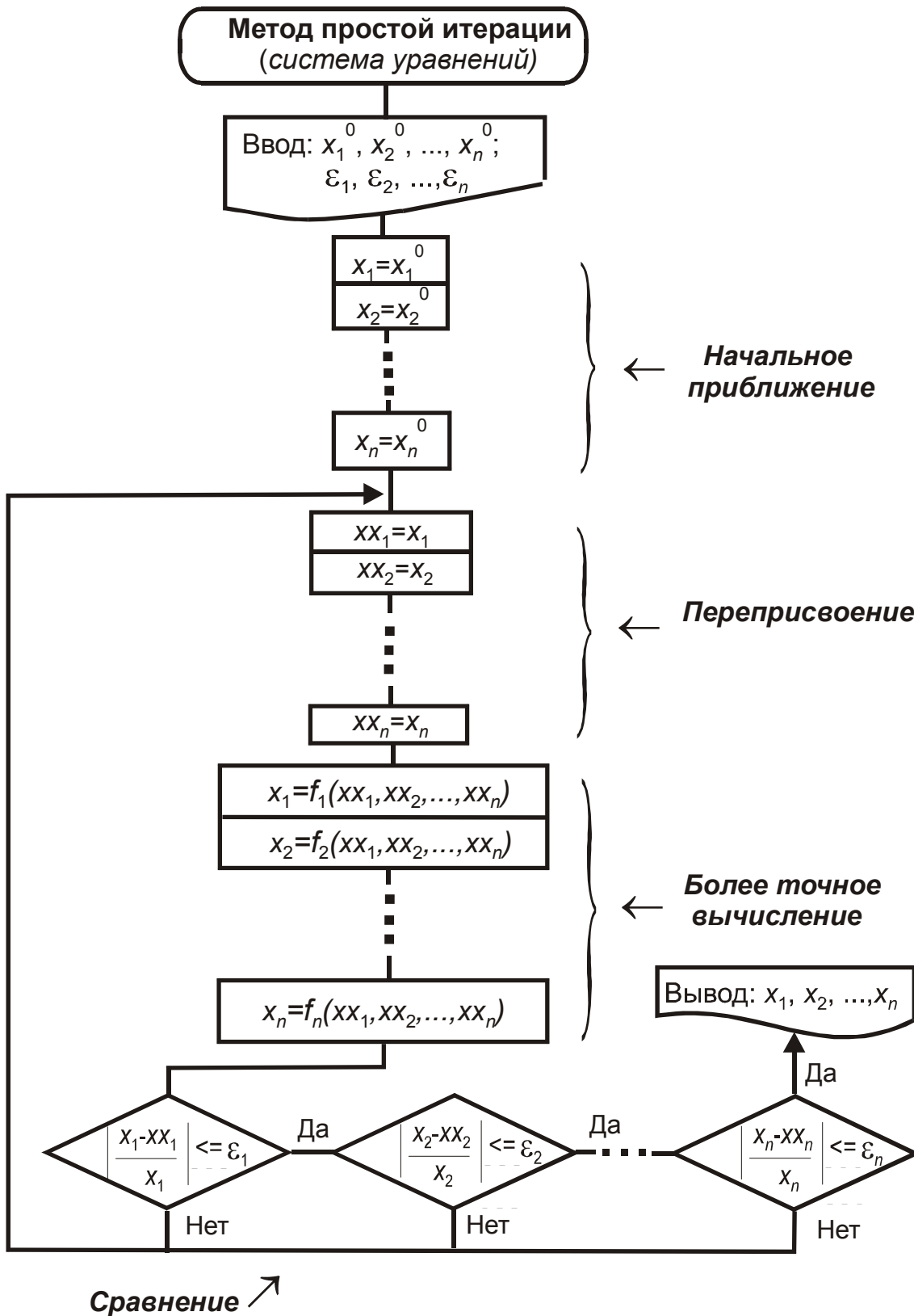


Рис. 1.22. Алгоритм метода простой итерации для системы уравнений

1.3.4. Решение системы нелинейных уравнений методом Зейделя

Основная идея метода заключается в том, что *при вычислении $(k + 1)$ -го приближения неизвестной x_i учитываются уже вычисленные ранее $(k + 1)$ -е приближения неизвестных x_1, x_2, \dots, x_{i-1} .*

Сравнение метода Зейделя с методом простой итерации приведем для системы трех уравнений.

Метод простой итерации		Метод Зейделя	
Начальные приближения x_1^0, x_2^0, x_3^0			
Шаг 1	$x_1^1 = \varphi_1(x_1^0, x_2^0, x_3^0)$	Шаг 1	$x_1^1 = \varphi_1(x_1^0, x_2^0, x_3^0)$
	$x_2^1 = \varphi_2(x_1^0, x_2^0, x_3^0)$		$x_2^1 = \varphi_2(x_1^1, x_2^0, x_3^0)$
	$x_3^1 = \varphi_3(x_1^0, x_2^0, x_3^0)$		$x_3^1 = \varphi_3(x_1^1, x_2^1, x_3^0)$
Шаг 2	$x_1^2 = \varphi_1(x_1^1, x_2^1, x_3^1)$	Шаг 2	$x_1^2 = \varphi_1(x_1^1, x_2^1, x_3^1)$
	$x_2^2 = \varphi_2(x_1^1, x_2^1, x_3^1)$		$x_2^2 = \varphi_2(x_1^2, x_2^1, x_3^1)$
	$x_3^2 = \varphi_3(x_1^1, x_2^1, x_3^1)$		$x_3^2 = \varphi_3(x_1^2, x_2^2, x_3^1)$
и т. д.		и т. д.	

1.3.5. Использование метода половинного деления в поверочном тепловом расчете поверхностного пароводяного подогревателя

Постановка задачи

Для регенеративного поверхностного подогревателя ТЭС (рис. 1.23) известны:

P_1, t_1 – давление (МПа) и температура ($^{\circ}\text{C}$) греющего пара;

G_B – расход нагреваемой воды, кг/с;

$t_{в1}$ – температура воды на входе, $^{\circ}\text{C}$;

F – площадь теплообменной поверхности, м^2 .

Составить математическую модель теплообменника с целью расчета температуры воды $t_{в2}$ на выходе из подогревателя (недогрева θ).

Изменением теплоемкости воды c_p пренебречь.

Математическое описание задачи

В основу расчета положены два уравнения

1) уравнение теплового баланса

$$Q = G_1 \cdot (h_1 - h'_1) \cdot \eta = G_B \cdot (t_{B2} - t_{B1}) \cdot c_p; \quad (1.14)$$

2) уравнение теплопередачи

$$Q = K \cdot F \cdot (t_{B2} - t_{B1}) / \ln((t_{s1} - t_{B1}) / (t_{s1} - t_{B2})). \quad (1.15)$$

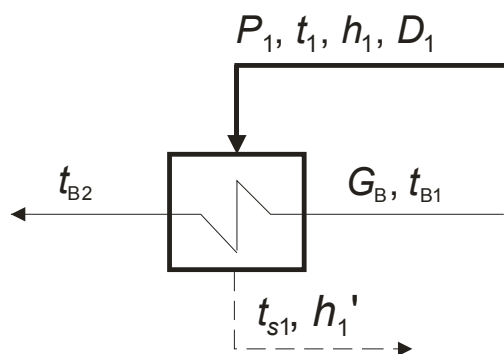


Рис. 1.23. Схема пароводяного подогревателя

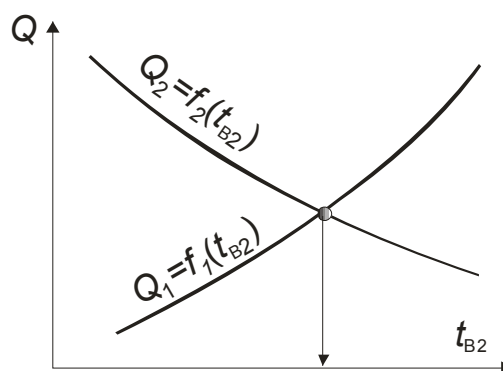


Рис. 1.24. Графическое решение уравнений (1.13) и (1.14)

Термодинамические параметры

– энтальпия пара в отборе $h_1 = f(P_1, t_1)$;

– температура и энтальпия дренажа греющего пара в состоянии насыщения

$$t_{s1} = f(P_1);$$

$$h'_1 = f(P_1).$$

Если коэффициент теплопередачи K не задан, то необходимо написать ряд зависимостей для его нахождения. Чтобы не загромождать алгоритм метода половинного деления, положим $K = \text{const}$, что реально при малых отклонениях от расчетного режима.

Выбор численного метода

Чтобы определить t_{B2} , надо совместно решить систему уравнений (1.14–1.15). Аналитического решения у этой задачи нет. Для ее решения традиционно применяется *графо-аналитический метод*. Согласно этому методу принимается ряд значений t_{B2} , для которых вычисляются значения Q по формулам (1.14) и (1.15) и строятся две графические за-

зависимости $Q_1 = f_1(t_{B2})$ и $Q_2 = f_2(t_{B2})$. Точка пересечения полученных графиков дает решение задачи (см. рис. 1.24).

Графо-аналитический метод не годится для компьютерных расчетов, поэтому приведем систему уравнений (1.14–1.15) к уравнению вида (1.1) и применим один из численных методов. Для этого приравняем правые части уравнений теплового баланса и теплопередачи и перенесем все в одну сторону

$$G_B \cdot (t_{B2} - t_{B1}) \cdot c_p - \frac{K \cdot F \cdot (t_{B2} - t_{B1})}{\ln\left(\frac{t_{s1} - t_{B1}}{t_{s1} - t_{B2}}\right)} = 0. \quad (1.17)$$

Имеем нелинейное трансцендентное уравнение $f(t_{B2}) = 0$, к которому можно применить *метод половинного деления*.

Определим границы отрезка $[a, b]$, содержащего искомый корень t_{B2} :

$$a = t_{B1} + \delta t;$$

$$b = t_s - \delta t,$$

где δt – малое число, например: $\delta t = 0,01$.

Для использования метода *простой итерации* уравнение (1.16) надо представить в виде $t_{B2} = f(t_{B2})$

$$t_{B2} = t_{B1} + \frac{K \cdot F}{G_B \cdot c_p} \cdot \frac{(t_{B2} - t_{B1})}{\ln\left(\frac{t_{s1} - t_{B1}}{t_{s1} - t_{B2}}\right)}. \quad (1.17)$$

Начальное приближение можно оценить $t_{B2}^0 = t_{s1} - 5$.

Сходимость итерационного процесса для зависимости (1.17) не гарантирована, а ее проверка увеличивает трудоемкость расчета.

Когда известен отрезок, содержащий корень, наиболее простым и успешным является *метод половинного деления*.

Алгоритм расчета t_{B2} методом половинного деления

Последовательность расчета t_{B2} представлена в виде блок-схемы на рис. 1.25.

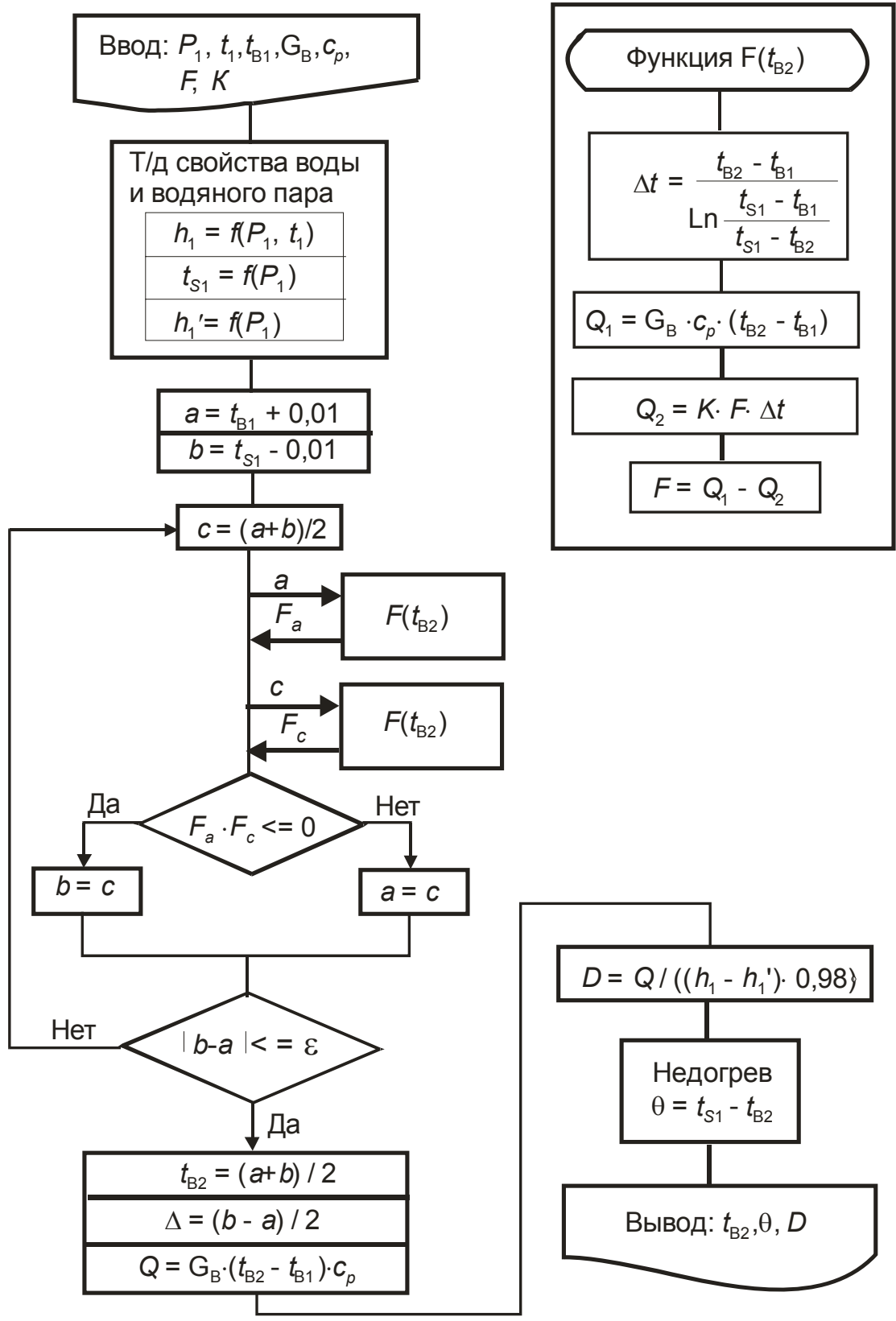


Рис. 1.25. Алгоритм поверочного теплового расчета теплообменника

Программа расчета $t_{в2}$ методом половинного деления

```
Program POL_DEL;
Uses TABL1; { Подключение модуля расчета т/д параметров }
Const Cp=4,19; KPD:=0,99;
Var P1, t1,... : real;
Function F(tв2: real): real;
Begin { Начало функции}
    delt:= (tв2-tв1)/ln((ts1-tв1)/(ts1-tв2));
    Q1:= Gв*(tв2-tв1)*Cp;
    Q2:= K*F* delt;
    F:=Q1-Q2;
End; { Конец функции}
Begin {Начало основной программы}
    {Ввод исходных данных в программе}
    P1:=0,1; {МПа} t1:=240; {C} Gв:=100; {кг/с} tв1:=70; {C}
    F:=380; {м2} K:=3; {кВт/(м2*К)}
    Eps:=0,05; {Погрешность расчета}
    {Конец ввода исходных данных}
    h1:=H_PT(P1,t1); { Обращение к функции из модуля TABL1 }
    ts1:=TSP(P1); { Обращение к функции из модуля TABL1 }
    h1I:= TSW_P(P1); { Обращение к функции из модуля TABL1 }
    a:=tв1+0.01;
    b:=ts1-0.01;
Repeat
    c:=(a+b)/2;
    F1:=F(a)*F(c);
    If F1<=0 then b=c else a=c;
Until (b-a)<=Eps;
tв2:=(a+b)/2;
Ned:=ts1-tв2; {Недогрев, °C}
Q:=Gв*(tв2-tв1)*Cp; {Тепловая нагрузка, кВт}
D:=Q/(h1-h1I)/KPD; {Расход пара, кг/с}
Writeln (Q:9:1, D:5:1, tв2:6:1);
Readln;
End. {Конец программы}
```

1.3.6. Использование метода Зейделя для расчета теплопередачи при конденсации пара в поверхностном теплообменнике

Постановка задачи

Для регенеративного поверхностного подогревателя ТЭС (рис. 1.23) известны:

P_1, t_1 – давление и температура греющего пара;

G_B – расход нагреваемой воды;

t_{B1}, t_{B2} – температура воды на входе и выходе;

P_B – давление воды;

w – скорость воды;

d_H, d_{BH}, δ_{CT} – соответственно наружный, внутренний диаметр и толщина стенки трубок теплообменной поверхности;

H – характерный геометрический размер (для вертикальных теплообменников – среднее расстояние между перегородками);

λ_{CT} – теплопроводность стали.

Составить математическую модель теплообменника с целью расчета коэффициента теплопередачи K и площади поверхности F .

Математическое описание задачи

Тепловой баланс

а) по воде $Q = G_B \cdot (h_{B2} - h_{B1})$;

б) по пару $Q = D_1 \cdot (h_1 - h'_1) \cdot 0,98$.

Уравнение теплопередачи

$$Q = K \cdot F \cdot \Delta t.$$

Среднелогарифмический температурный напор

$$\Delta t = \frac{t_{B2} - t_{B1}}{\ln \left(\frac{t_{S1} - t_{B1}}{t_{S1} - t_{B2}} \right)}.$$

Средняя температура воды

$$t_{cp} = t_{S1} - \Delta t.$$

Термодинамические параметры

а) воды: $h_{B1} = f(P_B, t_{B1})$; $h_{B2} = f(P_B, t_{B2})$;

б) пара (дренажа): $h_1 = f(P_1, t_1)$; $t_{S1} = f(P_1)$;

$$h'_1 = f(P_1); r = h_1 - h'_1.$$

Теплофизические параметры

а) воды: $\lambda_B = f(P_B, t_{cp}); \mu_B = f(P_B, t_{cp});$

$$v_B = f(P_B, t_{cp}); Pr_B = f(P_B, t_{cp});$$

б) пленки конденсата:

$$\lambda' = f(t_{s1});$$

$$\mu' = f(t_{s1});$$

$$v' = f(t_{s1});$$

$$\rho' = f(t_{s1});$$

$$Pr' = f(t_{s1}).$$

Коэффициент теплоотдачи при конденсации пара зависит от числа Рейнольдса пленки конденсата

$$Re_K = \frac{q \cdot H}{r \cdot \rho' \cdot v'}$$

где q – плотность теплового потока, Вт/м²;

H – характерный геометрический размер (для ПНД – среднее расстояние между перегородками, для ПВД – произведение числа змеевиков в пакете на наружный диаметр трубок $n \cdot d_H$).

Если $Re_K < 100$, то

$$\alpha_1 = 1,18 \cdot \lambda' \cdot \left(\frac{g}{(v')^2} \right)^{1/3} \cdot Re_K^{-1/3}.$$

Для $Re_K > 100$

$$\alpha_1 = \lambda' \cdot \left(\frac{g}{(v')^2} \right)^{1/3} \cdot \frac{0,16 \cdot (Pr')^{1/3} \cdot Re_K}{Re_K - 100 + 63,2 \cdot (Pr')^{1/3}}.$$

Коэффициент теплоотдачи при вынужденном течении однофазной среды внутри труб

$$\alpha_2 = 0,021 \cdot \left(\frac{\lambda_B}{d_{BH}} \right) \cdot \left(\frac{\lambda_B \cdot d_{BH}}{v_B} \right)^{0,8} \cdot Pr_B^{0,43}.$$

Алгоритм расчета температуры воды методом Зейделя

Последовательность расчета t_{B2} представлена в виде блок-схемы на рис. 1.26.

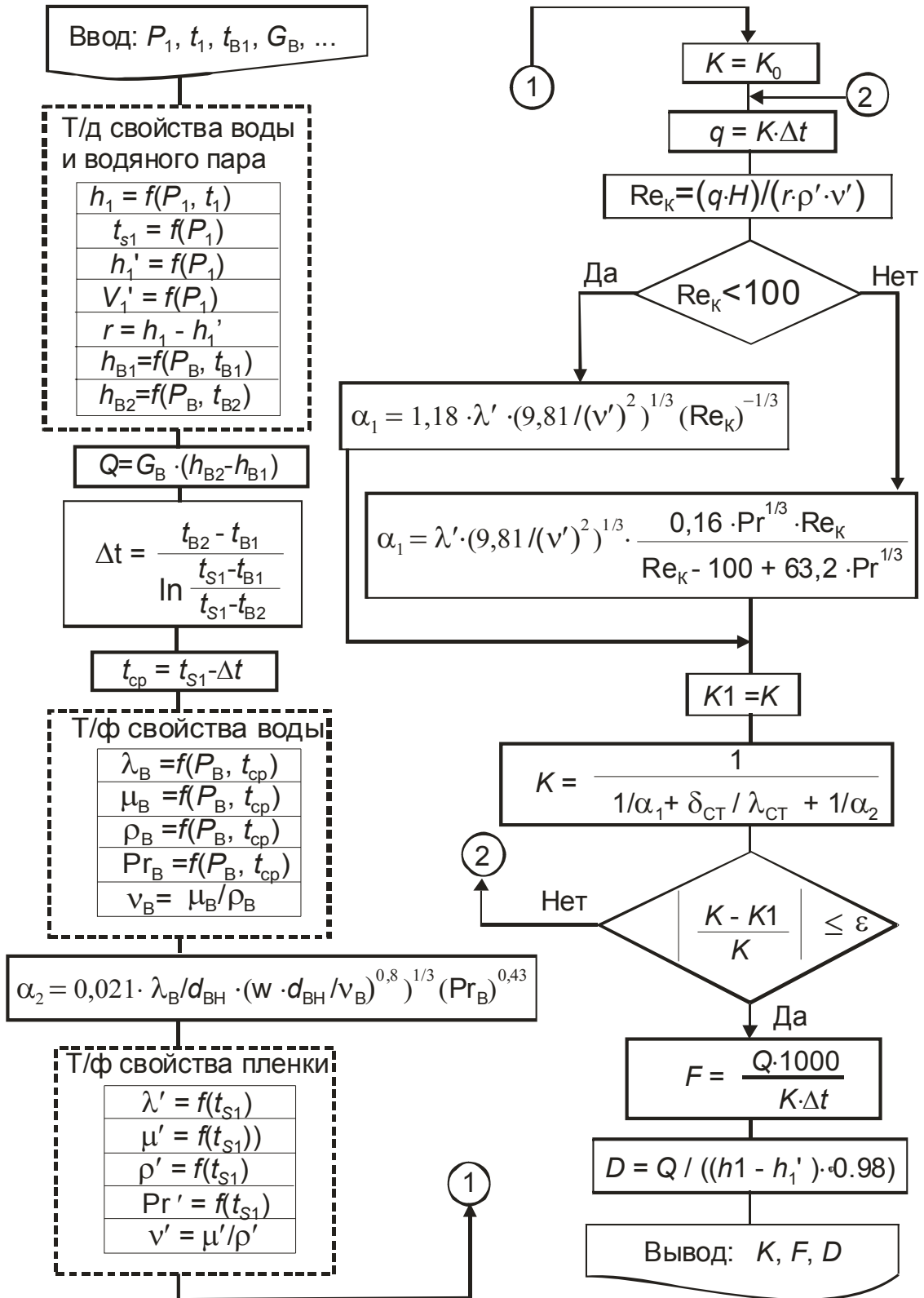


Рис. 1.26. Алгоритм теплового расчета теплообменника при конденсации пара

1.3.7. Использование метода Зейделя при переводе конденсационной турбоустановки в теплофикационный режим

Постановка задачи

Исходная схема конденсационной турбоустановки с заданными начальными параметрами P_0, t_0 и давлением в конденсаторе P_K^0 приведена на рис. 1.27. Из расчета схемы на конденсационный режим (будем в дальнейшем называть его *расчетным*) с максимальным расходом свежего пара D_0 известны параметры и расходы рабочего тела во всех элементах тепловой схемы:

$P_1^0, h_1^0, h_1'^{(0)}, D_1^0$ – для первого регенеративного отбора и подогревателя П1;

$P_2^0, h_2^0, h_2'^{(0)}, D_2^0$ – для второго отбора и подогревателя П2;

$D_K^0 = D_0 - D_1^0 - D_2^0$ – расход пара в конденсатор,

N_3^0 – электрическая мощность турбины.

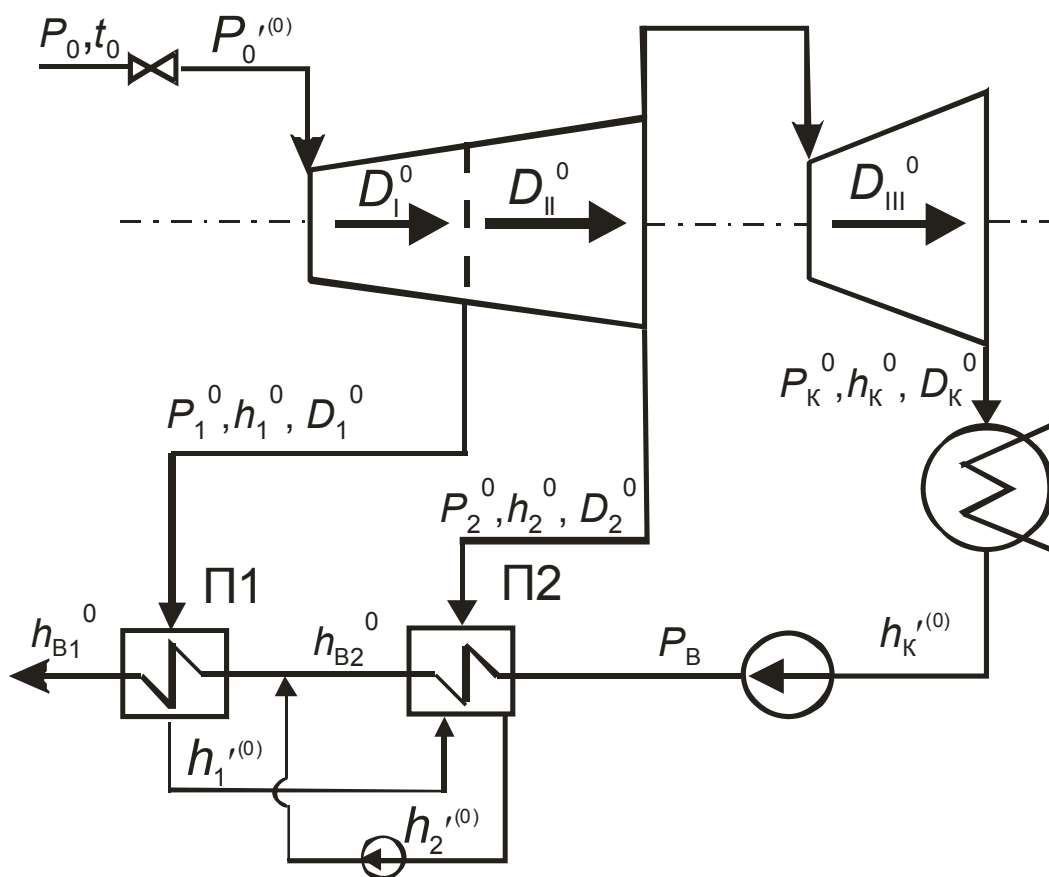


Рис. 1.27. Схема турбоустановки до реконструкции

С целью отпуска заданного количества тепла Q от турбины устанавливается сетевой подогреватель (СП) (рис. 1.28), на который организуется подача пара из камеры нижнего нерегулируемого отбора.

Требуется рассчитать тепловую схему турбоустановки в новом (теплофикационном) режиме при заданной температуре t_{oc} обратной сетевой воды и определить электрическую мощность турбины, учитывая, что зависимость внутреннего относительного КПД η''_{oi} последнего отсека от объемного расхода пара определена в результате испытаний. Считать, что КПД проточной части первых двух отсеков η'_{oi} и η''_{oi} заданы и остаются постоянными.

Кроме того, заданы:

$$P_0 = \text{const}; t_0 = \text{const}, D_0 = \text{const};$$

недогрев в регенеративных подогревателях θ ;

недогрев в сетевом подогревателе θ_c ;

давление питательной воды P_B .

Система парораспределения – дроссельная.

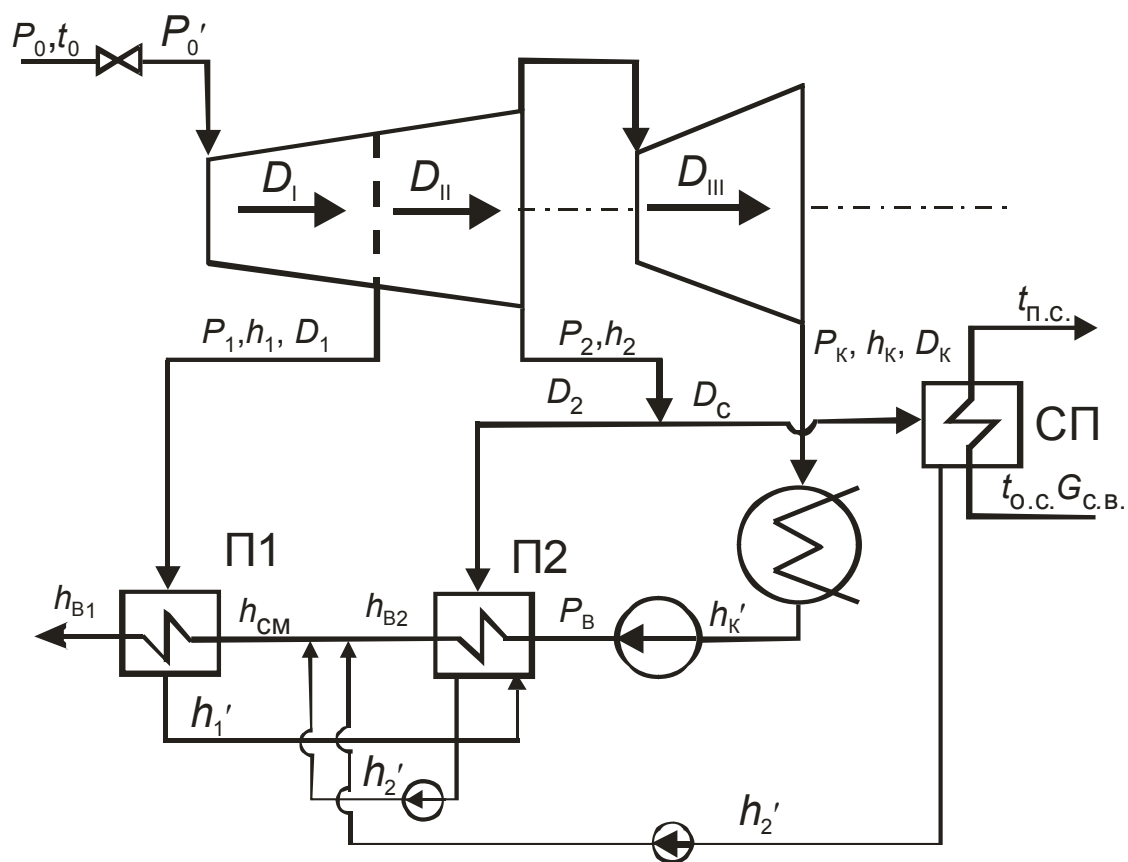


Рис. 1.28. Схема турбоустановки после реконструкции

Качественное описание задачи

При заданном расходе свежего пара D_0 дополнительный отпуск пара из нерегулируемого отбора D_c на СП приведет к изменению расхода пара по проточной части турбины по сравнению с их значениями в расчетном режиме. В соответствии с зависимостью Стодолы – Флюгеля это вызовет изменение давления пара в турбине. Значения P_1 и P_2 понизятся по сравнению со своими исходными значениями P_1^0 и P_2^0 .

При неизменном положении регулирующих клапанов (РК) ($P'_0 = \text{const}$) падение давления по проточной части вызовет увеличение расхода свежего пара D_0 . Учитывая, что расход ограничен максимальным значением, для поддержания $D_0 = \text{const}$ требуется дополнительное дросселирование в РК, что приведет к снижению давления пара P'_0 на входе в первую ступень турбины (дроссельная система парораспределения) либо в сопловой сегмент регулирующей ступени (сопловая система). Качественная картина изменения параметров пара в турбине с дроссельным парораспределением в связи с организацией нерегулируемого теплофикационного отбора приведена на рис. 1.29.

Практические расчеты режимов отпуска тепла из нерегулируемых отборов конденсационных турбин при небольшой доле тепловой нагрузки показывают, что изменение давлений пара существенно в последних ступенях и незначительно для верхних. Поэтому очень часто дополнительным дросселированием в РК можно пренебречь.

Математическое описание модели с целью расчета схемы в теплофикационном режиме

Абсолютные расходы пара через отсеки турбины в расчетном режиме:

$$D_I^0 = D_0;$$

$$D_{II}^0 = D_0 - D_I^0;$$

$$D_{III}^0 = D_0 - D_I^0 - D_2^0.$$

Расход пара на сетевой подогреватель

$$D_c = Q / (h_2 - h'_2) / 0,98. \quad (1.18)$$

Тепловой баланс сетевого подогревателя по воде

$$Q = G_{c.в.} \cdot (t_c - h_{oc}) \cdot c_p. \quad (1.19)$$

Температура сетевой воды за СП

$$t_c = t_{s2} - \theta_c. \quad (1.20)$$

Расходы по отсекам турбины в новом режиме (см. рис. 1.28)

$$D_I = D_0; \quad (1.21)$$

$$D_{II} = D_0 - D_{III};$$

$$D_K = D_{III} = D_0 - D_1 - D_2 - D_c. \quad (1.22)$$

Параметры пара в конденсаторе

$$t_{SK} = t_{B1}^0 + (t_{SK}^0 - t_{B1}^0) \cdot D_K / D_K^0; \quad (1.23)$$

$$P_K = f(t_{SK}), \quad (1.24)$$

где t_{B1}^0 – расчетная температура охлаждающей воды на входе в конденсатор; можно принять: $t_{B1}^0 = 12$ °С независимо от режима;

t_{SK}^0 – температура насыщения в конденсаторе при давлении P_K^0 в расчетном режиме.

Уравнения Стодолы – Флюгеля для I, II и III отсеков турбины соответственно:

$$\frac{D_K}{D_K^0} = \sqrt{\frac{P_2^2 - P_K^2}{(P_2^0)^2 - (P_K^0)^2}} \Rightarrow P_2; \quad (1.25)$$

$$\frac{D_{II}}{D_{II}^0} = \sqrt{\frac{P_1^2 - P_2^2}{(P_1^0)^2 - (P_2^0)^2}} \Rightarrow P_1; \quad (1.26)$$

$$\frac{D_0}{D_0} = \sqrt{\frac{((P_0') - P_1^2)}{(P_0'^{(0)})^2 - (P_1^0)^2}} \Rightarrow P_0'. \quad (1.27)$$

Уравнения теплового баланса для регенеративных подогревателей и точки смешения:

$$D_1 \cdot (h_1 - h_1') \cdot 0,98 = D_{П.В.} \cdot (h_{B1} - h_{CM}); \quad (1.28)$$

$$D_2 \cdot (h_2 - h_2') \cdot 0,98 + D_1 \cdot (h_1' - h_2') \cdot 0,98 = D_K \cdot (h_{B2} - h_K'); \quad (1.29)$$

$$D_1 + D_2 + D_c + D_K = D_{П.В.};$$

$$((D_1 + D_2 + D_c) \cdot h_2' + D_K \cdot h_K') \cdot 0,99 = D_{П.В.} \cdot h_{CM}. \quad (1.30)$$

Параметры пара в процессе расширения в турбине (см. рис. 1.29):

$$h_0 = f(P_0, t_0); \quad (1.31)$$

$$t'_0 = f(P'_0, h_0); \quad (1.32)$$

$$S_1 = f(P'_0, t'_0); \quad (1.33)$$

$$h_{1t} = f(P_1, S_1); \quad (1.34)$$

$$h_1 = h_0 - (h_0 - h_{1t}) \cdot \eta'_{oi}; \quad (1.35)$$

$$S_2 = f(P_1, h_1); \quad (1.36)$$

$$h_{2t} = f(P_2, S_2); \quad (1.37)$$

$$h_2 = h_1 - (h_1 - h_{2t}) \cdot \eta''_{oi}; \quad (1.38)$$

$$S_3 = f(P_2, h_2); \quad (1.39)$$

$$V_2 = f(P_2, h_2); \quad (1.40)$$

$$h_{kt} = f(P_k, S_3); \quad (1.41)$$

$$h_k = h_2 - (h_2 - h_{kt}) \cdot \eta_{oi}^{\text{III}}; \quad (1.42)$$

$$V_k = f(P_k, h_k); \quad (1.43)$$

$$\eta_{oi}^{\text{III}} = f(V_2, V_k, D_k). \quad (1.44)$$

Параметры дренажей:

$$h'_1 = f(P_1); \quad (1.45)$$

$$t_{s1} = f(P_1); \quad (1.46)$$

$$h'_2 = f(P_2); \quad (1.47)$$

$$t_{s2} = f(P_2); \quad (1.48)$$

$$h'_k = f(P_k). \quad (1.49)$$

Параметры воды на выходе из подогревателей:

$$t_{B1} = t_{s1} - \theta; \quad (1.50)$$

$$h_{B1} = f(P_B, t_{B1}); \quad (1.51)$$

$$t_{B2} = t_{s2} - \theta; \quad (1.52)$$

$$h_{B2} = f(P_B, t_{B2}). \quad (1.53)$$

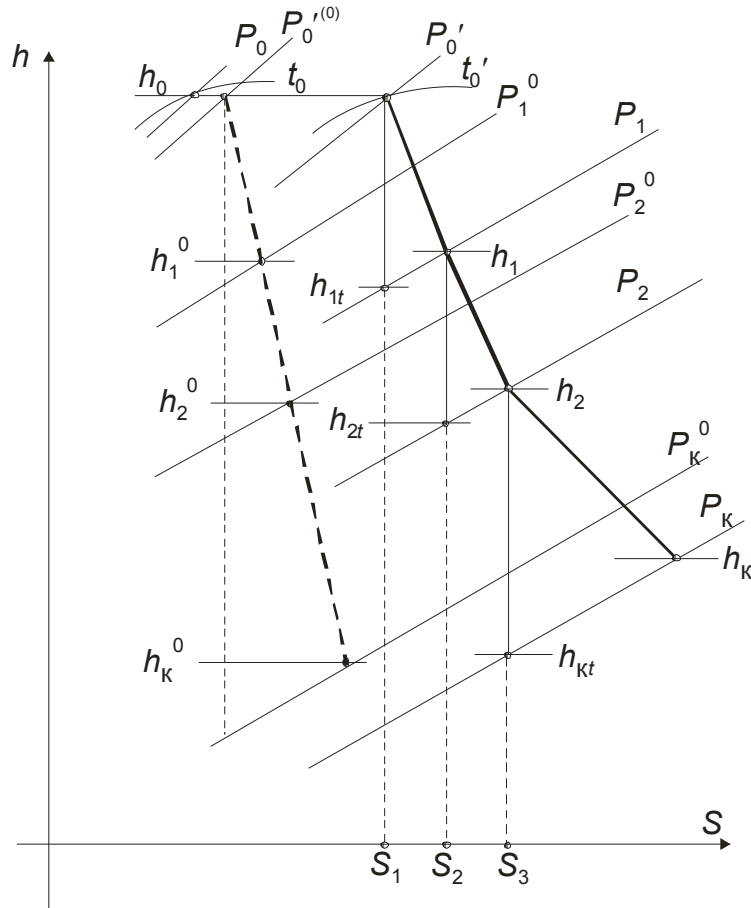


Рис. 1.29. Процесс расширения пара в турбине в конденсационном режиме (пунктиром) и теплофикационном (сплошная линия)

Выбор метода решения задачи

Для простейшей схемы турбоустановки имеем сложную систему (1.19–1.54), состоящую из тридцати шести уравнений с тридцатью шестью неизвестными: 1) D_c ; 2) $G_{c.в.}$; 3) t_c ; 4) D_{II} ; 5) D_k ; 6) t_{sk} ; 7) P_k ; 8) P_2 ; 9) P_1 ; 10) P'_0 ; 11) D_1 ; 12) D_2 ; 13) h_{cm} ; 14) h_0 ; 15) t'_0 ; 16) S_1 ; 17) h_{1t} ; 18) h_1 ; 19) S_2 ; 20) h_{2t} ; 21) h_2 ; 22) S_3 ; 23) V_2 ; 24) h_{kt} ; 25) h_k ; 26) V_k ; 27) η_{oi}^{III} ; 28) h'_1 ; 29) t_{s1} ; 30) h'_2 ; 31) t_{s2} ; 32) h'_k ; 33) t_{bl} ; 34) h_{bl} ; 35) t_{b2} ; 36) h_{b2} .

Анализируя приведенные выше зависимости (1.19–1.54), легко увидеть, что расчет значений D_1 , D_2 и D_c позволяет определить расходы пара по отсекам турбины, в том числе и в конденсатор D_k , что даст возможность пересчитать давления пара по проточной части P_k , P_2 , P_1 и P'_0 по зависимостям Стодолы – Флюгеля. Однако расчет уравнений тепловых балансов подогревателей с целью определения D_1 , D_2 и D_c требует знания параметров пара, воды и дренажей в подогревателях, которые, в свою очередь, зависят от значений P_k , P_2 , P_1 и P'_0 .

Таким образом, ни одно из уравнений (1.19–1.54) не решается самостоятельно, все они увязаны в систему. Решать систему тридцати шести уравнений методом простой итерации означает задать тридцать шесть приближений и в дальнейшем сводить все уравнения системы к тождествам до тех пор, пока значение каждой переменной будут отличаться от своего предыдущего значения менее чем наперед заданную погрешность. Естественно, процесс этот трудоемкий, кроме того – успех сомнителен, т. к. в значительной степени определяется правильным выбором начальных приближений по каждой из тридцати шести неизвестных.

Упростить решение задачи можно, разбив ее на подсистемы меньшего порядка и разомкнутые последовательности. Так, например, если определены давления пара по проточной части турбины, то определение энтальпий пара, воды и дренажей для решения уравнений теплового баланса не требует итераций, т. е. большинство зависимостей системы можно развернуть в последовательности, не вызывающие циклических вычислений. Кроме того, снизить трудоемкость расчета можно *правильным выбором начальных приближений внутри циклов*. В теории математического моделирования поставленная задача эквивалентна оптимальному выбору и разрыву обратных связей в циклических схемах. Грамотно задав начальные приближения, можно надеяться на успешное применение метода Зейделя.

Учитывая, что расход питательной воды через регенеративные подогреватели в новом режиме не изменился, можно предположить, что расходы пара на регенеративные подогреватели D_1 и D_2 будут мало отличаться от их значений D_1^0 и D_2^0 в расчетном режиме.

Поэтому в качестве начальных приближений рекомендуется принять

$$D_1 = D_1^0; D_2 = D_2^0.$$

Тогда, считая $D_0 = \text{const}$ и определив D_c из (1.19), можно оценить расход пара в конденсатор D_k из уравнения (1.23). Новое значение D_k позволяет пересчитать давление пара в конденсаторе по зависимостям (1.24–1.25). Учитывая изменения расходов пара по отсекам турбины и конечных параметров пара в новом режиме, пересчитываются давления пара в отборах P_1 и P_2 и на входе в турбину P'_0 по формулам (1.26–1.30).

Далее определяются параметры пара, дренажа и воды по уравнениям (1.32–1.54), которые позволяют уточнить значения расходов D_1 и D_2 . С новыми значениями D_1 и D_2 вычисления повторяются. Расчет заканчивается, когда значения каждого из расходов будут отличаться от своего предыдущего значения менее, чем наперед заданную погрешность.

Алгоритм расчета схемы

Алгоритм расчета схемы турбоустановки в теплофикационном режиме приведен на рис. 1.30.

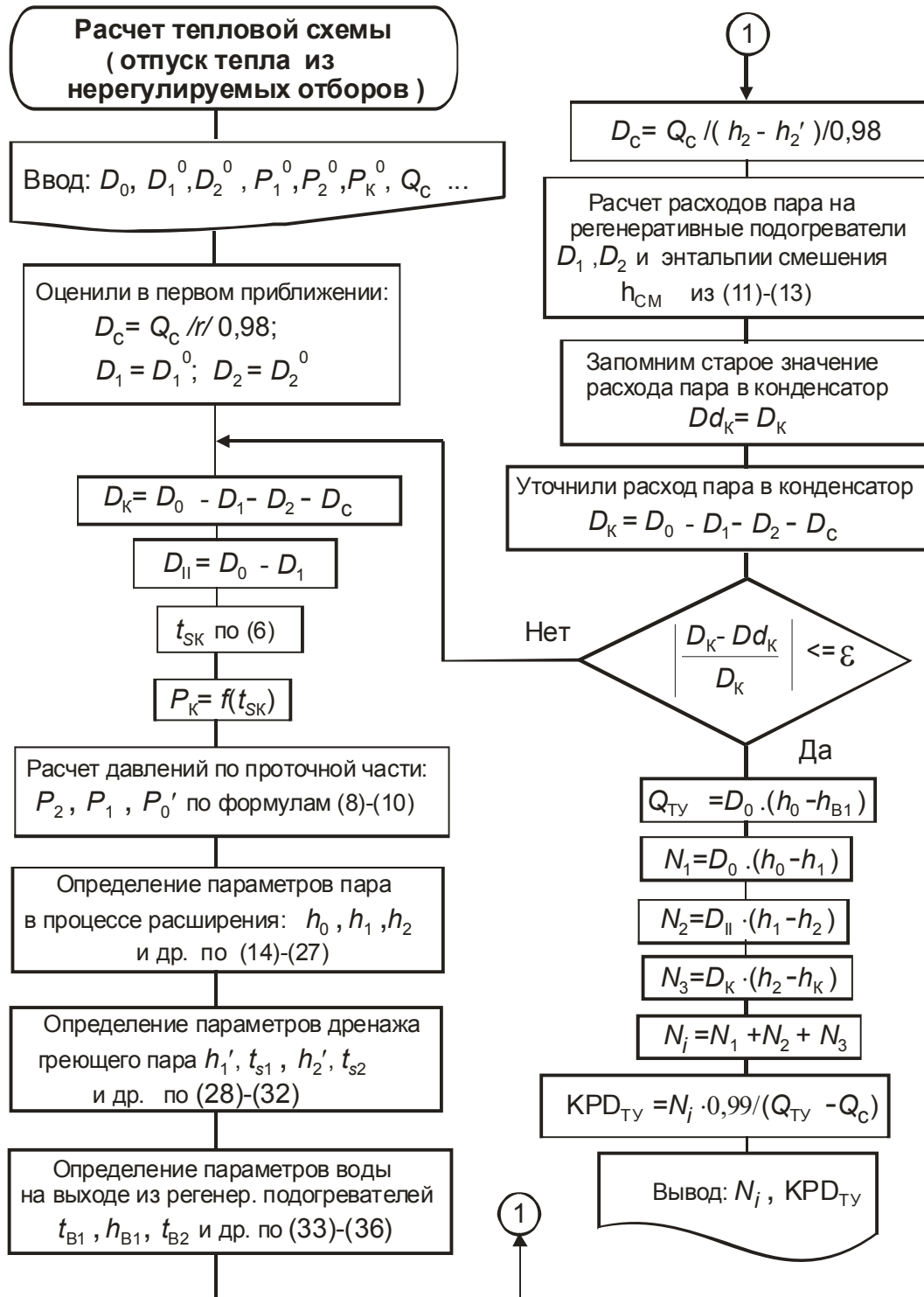


Рис. 1.30. Алгоритм расчета схемы турбоустановки после ее реконструкции с целью отпуска тепла из нерегулируемых отборов

1.3.8. Моделирование тепловой схемы

Постановка задачи

Для заданной тепловой схемы влажнопаровой турбоустановки (см. рис. 1.31) **известны** в качестве исходных данных или расчета:

P_0 – начальное давление пара;

x_0 – начальная степень сухости;

P_K – конечное давление пара;

$P_1, P_2, \dots, P_D, \dots$ – давления пара в регенеративных отборах и деаэраторе;

x_c – степень сухости пара за сепаратором;

$t_{пп1}, t_{пп2}$ – температуры пара за первой и второй ступенями промежуточного перегрева соответственно;

θ – недогрев воды до температуры насыщения пара в поверхностных регенеративных подогревателях;

определены с использованием модуля термодинамических параметров:

h_0 – энтальпия пара на входе в турбину;

h_1, h_2, h_3, \dots – энтальпии пара в регенеративных отборах;

h_c – энтальпия пара за сепаратором;

h'_0, h'_1, h'_2, \dots – энтальпии дренажа греющего пара при давлениях P_0, P_1, P_2 и т. д.

Рассчитать относительные расходы пара и воды в характерных точках схемы: $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_D, \alpha_4, \alpha_c, \alpha_{с.п.}, \alpha_{с.в.}, \alpha_{пп1}, \alpha_{пп2}, \alpha_{ок}, \alpha_{п.в.}$.

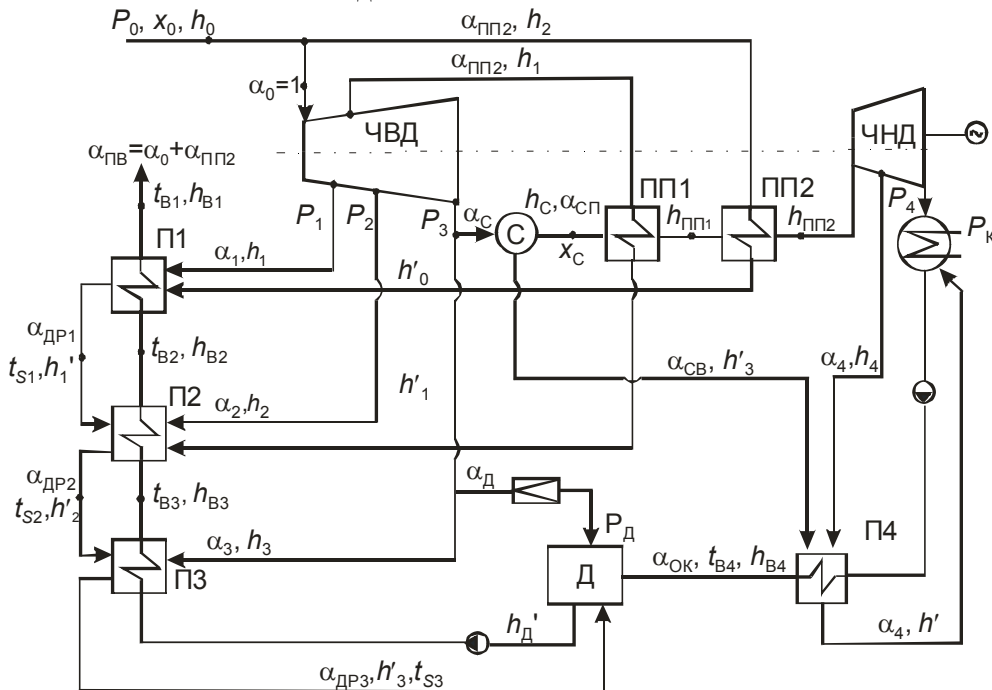


Рис. 1.31

Математическое описание

Для расчета параметров пара, дренажа и воды в характерных точках схемы на ПЭВМ необходимо воспользоваться функциями из модуля TABL1.tpu. Методические указания и примеры расчета параметров пара в процессе расширения его в турбине даны в разделе 1.2 настоящей работы.

Чтобы применить функции из модуля TABL1, необходимо оценить состояние рабочего тела для всех потоков, входящих в расчет элементов заданной схемы. Состояние пара в процессе расширения в турбине (перегретый / мокрый) определяется в результате схематичного построения процесса в h, s -диаграмме (см. рис. 1.32), откуда:

– пар в процессе расширения в ЧВД (точки 0, 1*t*(1), 2*t*(2), 3*t*(3)) – *мокрый*;

– пар на выходе из сепаратора (точка с) – *мокрый* (сухой насыщенный, если $x = 1$);

– пар после пароперегревателей (точки P_1 и P_2) – *перегретый*;

– состояние пара в отборе на П4 (4*t*(4)) и на выходе из турбины ($kt(k)$) *требуется оценить*, в зависимости от давлений P_4 и P_k он может быть и перегретым, и мокрым.

Уравнения теплового и материального балансов для элементов тепловой схемы (потери тепла в окружающую среду пренебрегаем)

$$\text{П1:} \quad \alpha_1 \cdot (h_1 - h'_1) + \alpha_{\text{пп2}} \cdot (h'_0 - h'_1) = \alpha_{\text{п.в.}} \cdot (h_{\text{в1}} - h_{\text{в2}}), \quad (1.55)$$

где $\alpha_{\text{п.в.}} = \alpha_0 + \alpha_{\text{пп2}}$. Расчет подогревателя П1 производится с целью определения α_1 .

$$\text{П2:} \quad \alpha_2 \cdot (h_2 - h'_2) + \alpha_{\text{пп1}} \cdot (h'_1 - h'_2) + \alpha_{\text{др1}} \cdot (h'_1 - h'_2) = \alpha_{\text{п.в.}} \cdot (h_{\text{в2}} - h_{\text{в3}}), \quad (1.56)$$

где $\alpha_{\text{др1}} = \alpha_1 + \alpha_{\text{пп2}}$. Расчет П2 производится с целью определения α_2 . Расчет П2 производится с целью определения α_2 .

$$\text{П3:} \quad \alpha_3 \cdot (h_3 - h'_3) + \alpha_{\text{др2}} \cdot (h'_2 - h'_3) = \alpha_{\text{п.в.}} \cdot (h_{\text{в3}} - h'_d); \quad (1.57)$$

где $\alpha_{\text{др2}} = \alpha_{\text{др1}} + \alpha_2 + \alpha_{\text{пп1}}$. Расчет П3 производится с целью определения α_3 .

$$\text{С:} \quad \alpha_c = \alpha_{\text{с.в.}} + \alpha_{\text{с.п.}} \quad (1.58)$$

$$\alpha_c \cdot h_3 = \alpha_{\text{с.в.}} \cdot h'_3 + \alpha_{\text{с.п.}} \cdot h_c; \quad (1.59)$$

Цель расчета сепаратора – определение расходов воды $\alpha_{\text{с.в.}}$ и пара $\alpha_{\text{с.п.}}$ на выходе.

$$\text{ПП1:} \quad \alpha_{\text{пп1}} \cdot (h_1 - h'_1) = \alpha_{\text{с.п.}} \cdot (h_{\text{пп1}} - h_c) \quad (1.60)$$

Цель расчета ПП1 – определение расхода пара $\alpha_{\text{пп1}}$.

$$\text{ПП2:} \quad \alpha_{\text{ПП2}} \cdot (h_0 - h'_0) = \alpha_{\text{с.п.}} \cdot (h_{\text{ПП2}} - h_{\text{ПП1}}). \quad (1.61)$$

Цель расчета ПП2 – определение расхода пара $\alpha_{\text{ПП2}}$.

$$\text{Д:} \quad \alpha_{\text{д}} + \alpha_{\text{др3}} + \alpha_{\text{о.к.}} = \alpha_{\text{п.в.}}; \quad (1.62)$$

$$\alpha_{\text{д}} \cdot h_3 + \alpha_{\text{др3}} \cdot h_3 + \alpha_{\text{о.к.}} \cdot h_{\text{в4}} = \alpha_{\text{п.в.}} \cdot h'_\text{д}. \quad (1.63)$$

где $\alpha_{\text{др3}} = \alpha_{\text{др2}} + \alpha_3$. Расчет деаэратора производится с целью определения $\alpha_{\text{д}}$ и $\alpha_{\text{о.к.}}$.

$$\text{П4:} \quad \alpha_4 \cdot (h_4 - h'_4) + \alpha_{\text{с.в.}} \cdot (h'_3 - h'_4) = \alpha_{\text{о.к.}} \cdot (h_{\text{в4}} - h'_\text{к}) \quad (1.64)$$

Расчет П4 производится с целью определения α_4 .

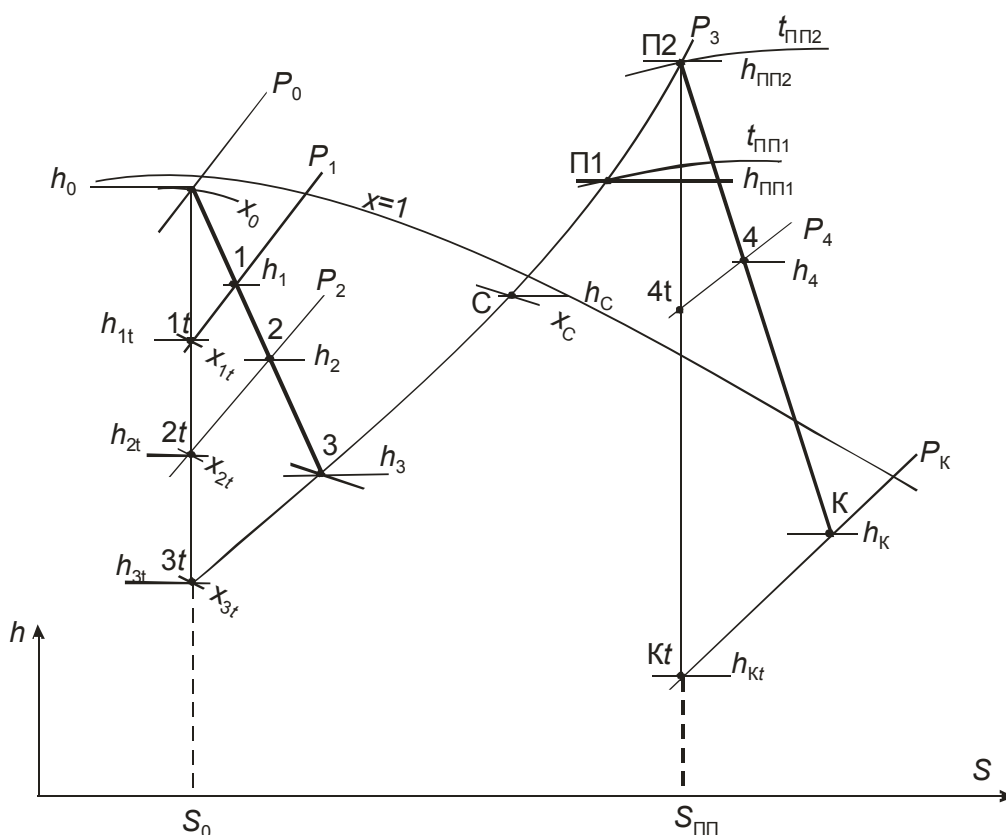


Рис. 1.32. Процесс расширения пара в турбине

Выбор численного метода

Элементы П1, П2, П3, С, Д, ПП1, ПП2 охвачены контуром, т. к. ни один из них не решается самостоятельно. Так, чтобы определить α_1 из П1, надо знать $\alpha_{\text{ПП2}}$, который находится из теплового баланса ПП2 после расчета сепаратора. В расчет П2, П3 и деаэратора входят неизвестные значения дренажей вышестоящих подогревателей и поэтому эти элементы также не могут быть рассчитаны. Для расчета сепаратора

с целью определения $\alpha_{с.в.}$ и $\alpha_{с.п.}$ необходимо знать расход пара на выходе из турбины α_c , который зависит от расходов $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_d$.

Таким образом, имеем один замкнутый контур, который описывается системой девяти уравнений (1.55–1.64) с девятью неизвестными

$$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_c, \alpha_{с.в.}, \alpha_{с.п.}, \alpha_{пп1}, \alpha_{пп2}, \alpha_d, \alpha_{о.к.}.$$

Подогреватель П4 не входит в указанный контур и может быть рассчитан самостоятельно после расчета системы уравнений (1)–(10).

Превратить замкнутый контур в разомкнутую последовательность можно двумя путями:

- разорвав потоки пара на пароперегреватели ПП1 и ПП2 (что означает задать значения $\alpha_{пп1}$ и $\alpha_{пп2}$ соответственно);
- разорвав поток пара α_c на входе в сепаратор.

Наилучший способ – второй, т. к. он требует разрыва лишь одного потока и соответственно организации одного расчетного цикла.

Алгоритм расчета

Приведен на рис. 1.33 в виде блок-схемы.

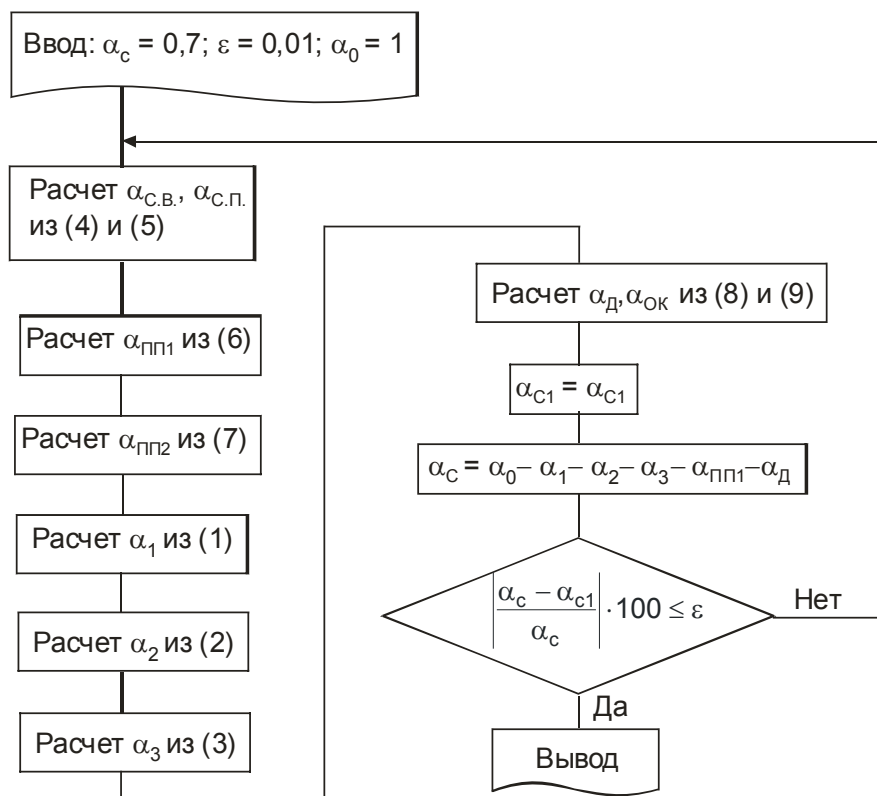


Рис. 1.33. Алгоритм расчета относительных расходов для схемы на рис. 1.31

2. МЕТОДЫ ОДНОМЕРНОЙ МИНИМИЗАЦИИ

2.1. Предварительные сведения

Рассматриваем простейшие задачи минимизации, в которых целевая функция зависит от одной переменной, а допустимым множеством является отрезок вещественной оси

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min; \\ x &\in [a, b]. \end{aligned}$$

Теоретический материал и примеры использования различных алгоритмов приведены в [1–4].

Глобальный минимум

Число $x^* \in [a, b]$ называется *точкой глобального (абсолютного) минимума*, или просто *точкой минимума*, функции $f(x)$ на отрезке, если $f(x^*) \leq f(x)$ для всех $x \in [a, b]$.

Значение функции $f_{\min} \leq f(x^*)$ называют *глобальным (абсолютным) минимумом*, или просто *минимумом*, функции $f(x)$ на отрезке $[a, b]$.

На рис. 2.1 точка M – глобальный минимум, точка N – глобальный максимум.

Локальный минимум

Число $x^* \in [a, b]$ называется *точкой локального минимума* функции $f(x)$ на отрезке $[a, b]$, если $f(x^*) \leq f(x)$ для всех $x \in [a, b]$, достаточно близких к x^* .

На рис. 2.1 точки A и B – локальные минимумы.

Необходимое условие минимума

функции одной переменной в точке x^*

$$f'(x^*) = 0. \quad (2.1)$$

Достаточные условия минимума

функции одной переменной в точке x^* :

- 1) $f'(x^*) = 0$;
- 2) $f''(x^*) > 0$.

$$(2.2)$$

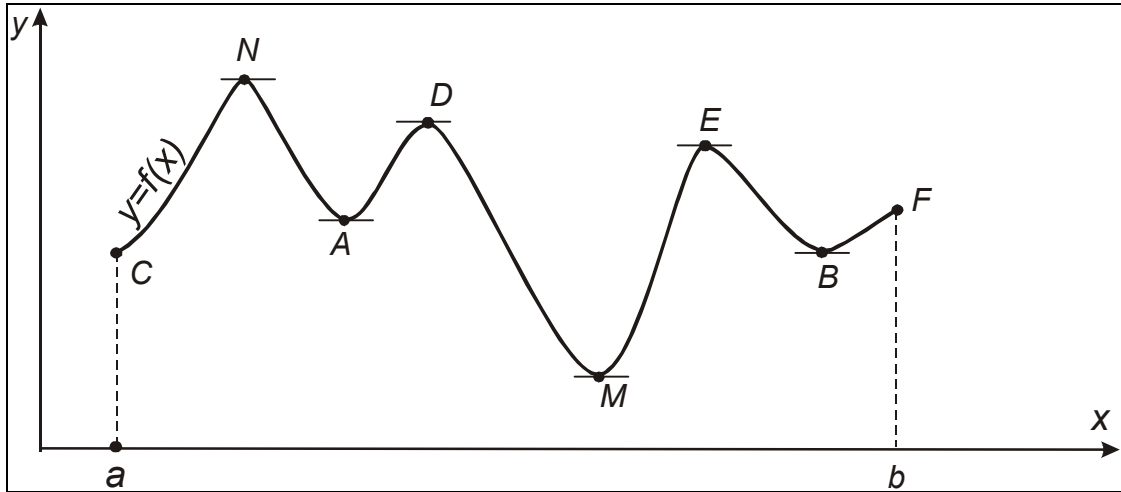


Рис. 2.1

Унимодальные функции

Многие методы поиска точки минимума $f(x)$ приспособлены только для функций, у которых каждый локальный минимум является одновременно и глобальным. Этим свойством обладают *унимодальные функции*.

Функция $f(x)$ является *унимодальной*, если с увеличением x слева от x^* она монотонно убывает, справа – монотонно возрастает. На рис. 2.2 изображены графики унимодальных функций. Пример функции, не являющейся унимодальной, приведен на рис. 2.1.

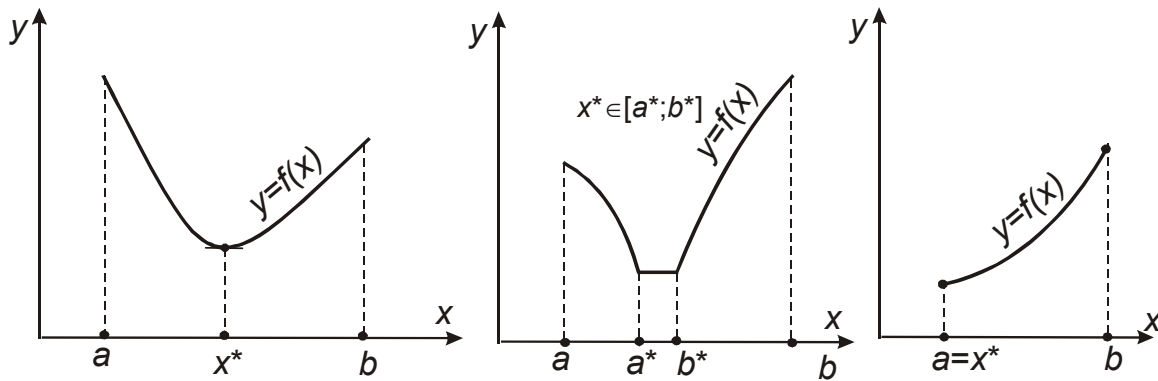


Рис. 2.2. Графики унимодальных функций

Выпуклые функции

Функция $f(x)$, заданная на отрезке $[a, b]$, называется *выпуклой* на этом отрезке, если для всех $x', x'' \in [a, b]$ и произвольного числа $\mu \in [0, 1]$ выполняется неравенство

$$f(\mu \cdot x' + (1 - \mu) \cdot x'') \leq \mu \cdot f(x') + (1 - \mu) \cdot f(x''). \quad (2.3)$$

Если функция $f(x')$ – выпуклая на $[a, b]$, то на любом отрезке $[x', x''] \subset [a, b]$ ее график расположен не выше хорды, проведенной через точки графика с абсциссами x' и x'' (рис. 2.3).

Можно показать, что всякая выпуклая непрерывная на отрезке $[a, b]$ функция является унимодальной. Обратное, вообще говоря, неверно (рис. 2.4).

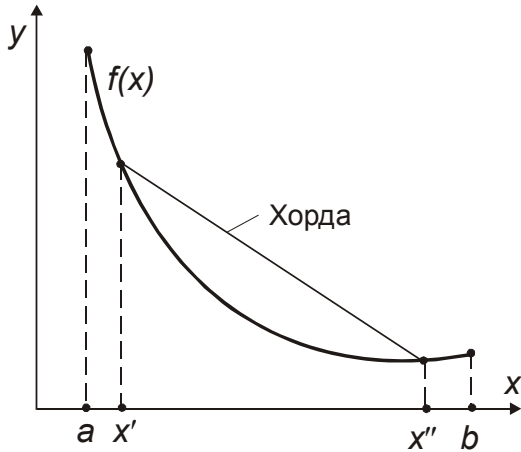


Рис. 2.3. Взаимное расположение графика выпуклой функции и хорды

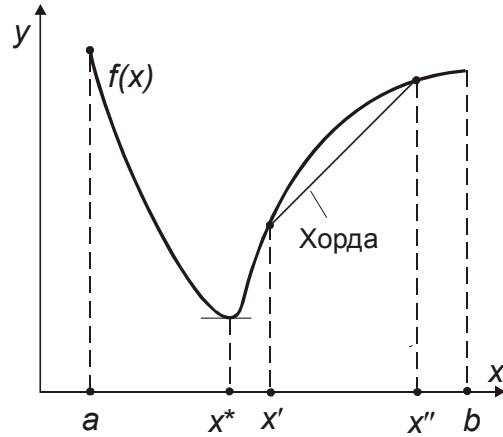


Рис. 2.4. График унимодальной, но не выпуклой функции

Условие Липшица

Функция $f(x)$ удовлетворяет на отрезке $[a, b]$ условию Липшица, если существует такое число L (константа Липшица), что выполняется

$$|f(x_1) - f(x_2)| \leq L \cdot |x_1 - x_2| \quad (2.4)$$

для всех x_1 и x_2 , принадлежащих $[a, b]$, т. е. если скорость изменения целевой функции $f(x)$ на любом участке отрезка $[a, b]$ ограничена некоторым числом L , одним и тем же для всех участков.

Условие (2.4) означает, что модуль углового коэффициента любой хорды графика не превосходит L . Кроме того, если в некоторой точке существует касательная к графику $f(x)$, то модуль ее углового коэффициента также не может превышать L . Так, функция $f(x) = \sqrt{x}$ на отрезке $[0; 1]$ условию Липшица не удовлетворяет, потому что при $x \rightarrow 0$ угловой коэффициент касательной к ее графику неограниченно возрастает (см. рис. 2.5).

Численные методы, в отличие от аналитических, дают *приближенное* решение. Точность расчета точки минимума x^* и минимально-

го значения функции f_{\min} определяется числом итерационных вычислений (шагов), в зависимости от метода.

Стратегия поиска (минимума) численным методом – это алгоритм выбора точек на $[a, b]$, в которых последовательно вычисляются значения функции. *Наилучшей* стратегией называется такая, которая требует *наименьшего количества вычислений функции* при заданной точности. Разные методы обладают различной стратегией.

«Удачная» тройка чисел

Тройку чисел $x_1 < x_2 < x_3$ называют «удачной», если $f(x_2) \leq \min\{f(x_1), f(x_3)\}$ и $f(x_2) < \max\{f(x_1), f(x_3)\}$ (рис. 2.6). Она называется «удачной», потому что отрезок $[x_1; x_3]$, включающий эти точки, *обязательно содержит точку минимума!*

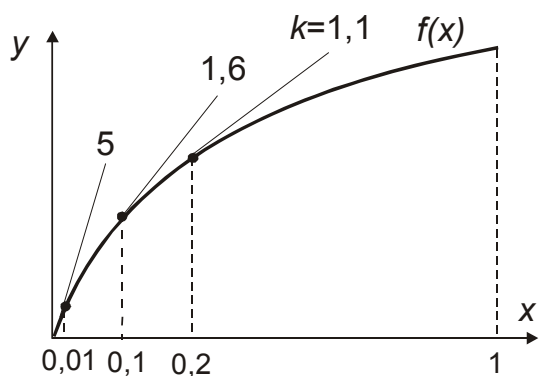


Рис. 2.5. График функции $f(x) = \sqrt{x}$, $x \in [0; 1]$, не удовлетворяющей условию Липшица

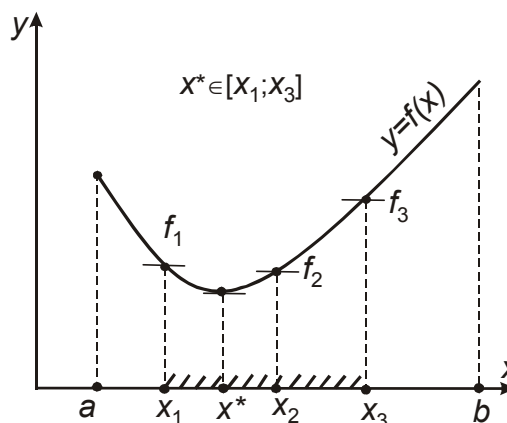


Рис. 2.6. (x_1, x_2, x_3) – «удачная» тройка чисел

Классификация численных методов одномерной минимизации

Все численные методы поиска минимума функции одной переменной можно разделить на *прямые* методы (нулевого порядка, использующие только значения функции и не требующие вычисления ее производных) и методы первого и более высоких порядков, *использующие производные*.

Достоинства прямых методов:

- позволяют исследовать целевые функции любого класса, в том числе недифференцируемые;
- имеют простые алгоритмы и программы оптимизации;
- требуют малого объема машинной памяти.

Недостатки прямых методов:

- требуют большого времени работы ЭВМ, т. к. стратегия поиска далека от наилучшей;
- для получения решения с высокой точностью необходимо большое число вычислений функции; если же существуют ограничения на число ее вычислений (например, по причине экспериментального определения функции), то прямые методы дают низкую точность.

Прямые методы:

- метод перебора;
- метод поразрядного поиска;
- методы исключения отрезков;
- метод парабол и др.

Методы исключения отрезков:

- метод дихотомии (первый метод деления отрезка пополам);
- второй метод деления отрезка пополам;
- метод Фибоначчи;
- метод «золотого сечения» и др.

Методы, использующие производные функции:

- метод средней точки;
- метод хорд;
- метод Ньютона;
- метод кубической аппроксимации и др.

Методы исключения отрезков

Все методы исключения отрезков работают по алгоритму: для унимодальной на $[a, b]$ функции $f(x)$ на каждой итерации выбирают точки x_1 и x_2 такие, что $a < x_1 < x_2 < b$. Точки x_1 и x_2 называются «пробными». Сравниваются значения $f(x)$ в этих точках (см. рис. 2.7).

Если $f(x_1) \leq f(x_2)$ (см. рис. 2.7, а), то для дальнейшего рассмотрения оставляется $[a, b]$, т. е. на следующей итерации x_2 переходит в b .

Если $f(x_1) > f(x_2)$ (см. рис. 2.7, б), это означает, что точка минимума x^* принадлежит отрезку $[x_1, b]$, т. е. на следующей итерации точка x_1 переходит в a .

При выборе точек x_1 и x_2 учитывают следующие обстоятельства:

- 1) точки x_1 и x_2 должны быть расположены симметрично относительно середины отрезка $[a, b]$, чтобы относительное уменьшение от-

резка на очередной итерации не зависело от того, какая часть $([a; x_1])$ или $(x_2; b])$ исключается из дальнейшего рассмотрения;

2) для того, чтобы максимально сузить область поиска, «отсекая как лишние большие куски», точки x_1 и x_2 должны быть расположены близко к середине отрезка;

3) желательно одну из пробных точек (x_1 или x_2) использовать на следующей итерации, чтобы уменьшить количество вычислений функции.

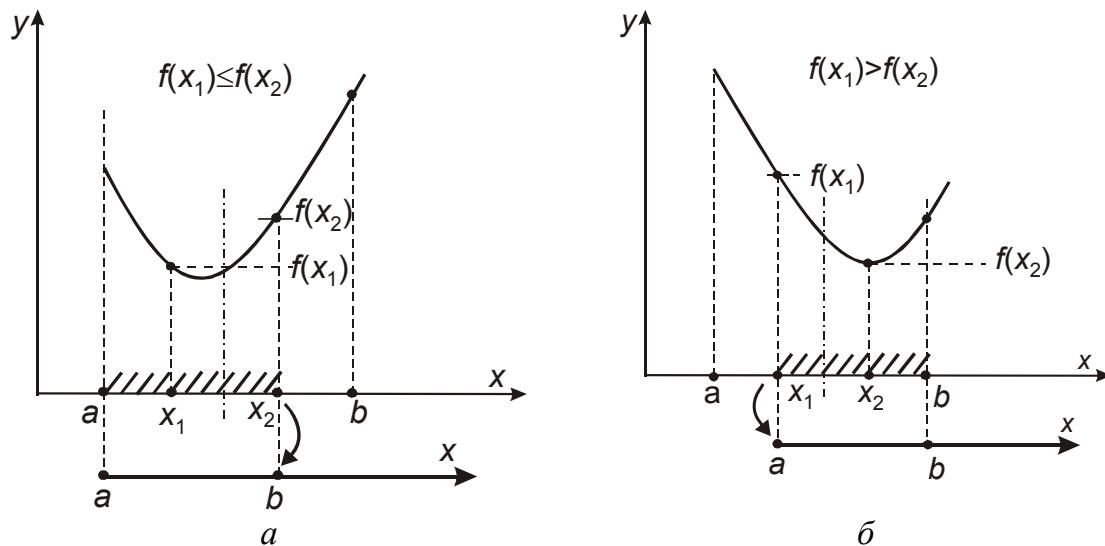


Рис. 2.7. Графическая иллюстрация методов исключения отрезков

2.2. Метод матанализа (классический)

Метод дает *точное* решение и требует дифференцируемости функции.

Необходимое условие минимума функции одной переменной в некоторой точке x^* –

$$f'(x^*) = 0. \quad (2.1)$$

Достаточные условия минимума функции одной переменной в точке x^* :

- 1) $f'(x^*) = 0$;
 - 2) $f''(x^*) > 0$.
- (2.2)

Последовательность минимизации классическим методом

1. Решаем уравнение $f'(x) = 0$ на интервале $x \in [a, b]$, корни которого являются точками возможного экстремума функции (*стационарными* точками).

2. Вычисляем значения функции во всех стационарных точках и на концах отрезка $[a, b]$.

3. Выбираем минимальное значение функции f_{\min} и соответствующее ему значение x^* .

Пример 2.1

$$f(x) = x^3 - 3 \cdot x + 1 \rightarrow \min, \quad x \in [-3, 3].$$

Решение

1. $f'(x) = 3 \cdot x^2 - 3$; $3 \cdot x^2 - 3 = 0$. Стационарные точки: $x_1 = -1$; $x_2 = 1$.

2. Вычисляем значения функции в стационарных точках и на концах отрезка:

$$x = -3; f(-3) = (-3)^3 - 3 \cdot (-3) + 1 = -17;$$

$$x = -1; f(-1) = 3;$$

$$x = 1; f(1) = -1;$$

$$x = 3; f(3) = 1.$$

3. Минимальное значение функции $f_{\min} = \min\{-17, 3, -1, 1\} = -17$; точка минимума x^* .

Примечание. Для данной задачи не вызывает затруднений вычисление второй производной $f''(x) = 6 \cdot x$, поэтому точку локального минимума можно определить по ее знаку.

Определим знак второй производной в стационарных точках:

$$f''(-1) = 6 \cdot (-1) = -6 < 0 \text{ – точка максимума};$$

$$f''(1) = 6 \cdot (1) = 6 > 0 \text{ – точка минимума}.$$

Сравниваем значения функции в точке минимума и на концах отрезка и выбираем наименьшее $f_{\min} = -17$ в точке $x^* = -3$.

2.3. Метод перебора

Метод перебора – простейший из прямых методов (это его *достоинство*).

Суть метода:

1) разобьем отрезок $[a, b]$ на n равных частей точками $x_i = a + i \cdot (b - a) / n$, $i = 0, 1, \dots, n$;

2) вычислим значения $f(x)$ в точках x_i ;

3) сравнивая значения $f(x_i)$ между собой, найдем точку x_m , $0 \leq m \leq n$, для которой $f(x_m) = \min f(x_i)$, $0 \leq i \leq n$;

4) положим $x^* = x_m$; $f_{\min} = f(x_m)$.

Погрешность определения точки минимума не превосходит

$$\varepsilon_n = (b - a) / n$$

или

$$\varepsilon_N = (b - a) / (N - 1).$$

Здесь и в дальнейшем будем обозначать: N – количество вычислений функции; n – количество итераций. Для метода перебора

$$n = N - 1.$$

На практике удобно использовать алгоритм, когда задаются не количеством вычислений функции на заданном отрезке, а шагом изменения Δx оптимизируемого параметра в заданных граница x_{\min}, x_{\max} (рис. 2.8).

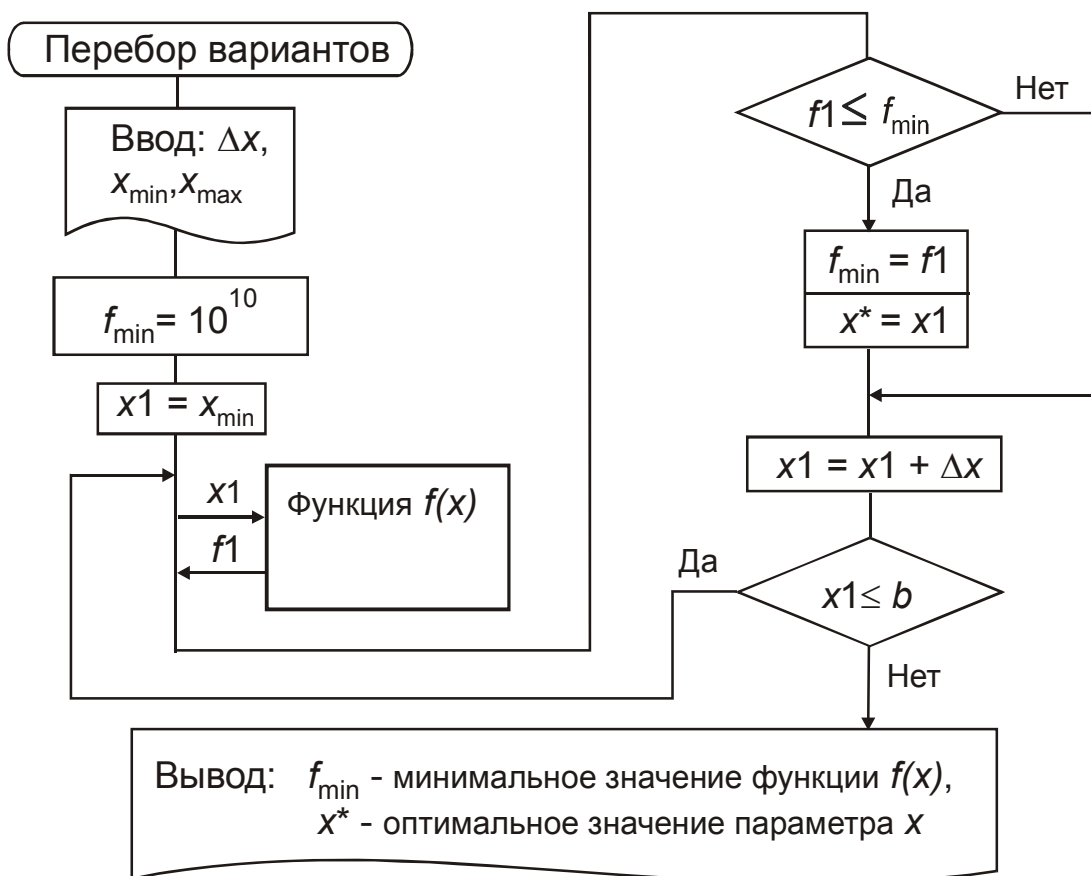


Рис. 2.8. Алгоритм метода перебора

При практической реализации метода перебора для *неунимодальных* функций основная проблема заключается в установлении величины шага Δx . Характер функции может быть таков, что даже при сравнительно малом Δx возникает опасность «проскочить» глобальный минимум (см. рис. 2.9). В общем случае невозможно решить вопрос о том,

насколько малым следует выбирать шаг, чтобы значение приближенного минимума отличалось от истинного не более, чем на $\varepsilon_f > 0$:

$$\left| \min f(x_i) - \min f(x^*) \right| \leq \varepsilon_f, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.5)$$

Однако для функций, удовлетворяющих условию Липшица с константой L , выбор шага Δx по формуле

$$\Delta x = 2 \cdot \varepsilon_f / L$$

гарантирует выполнение условия (2.5).

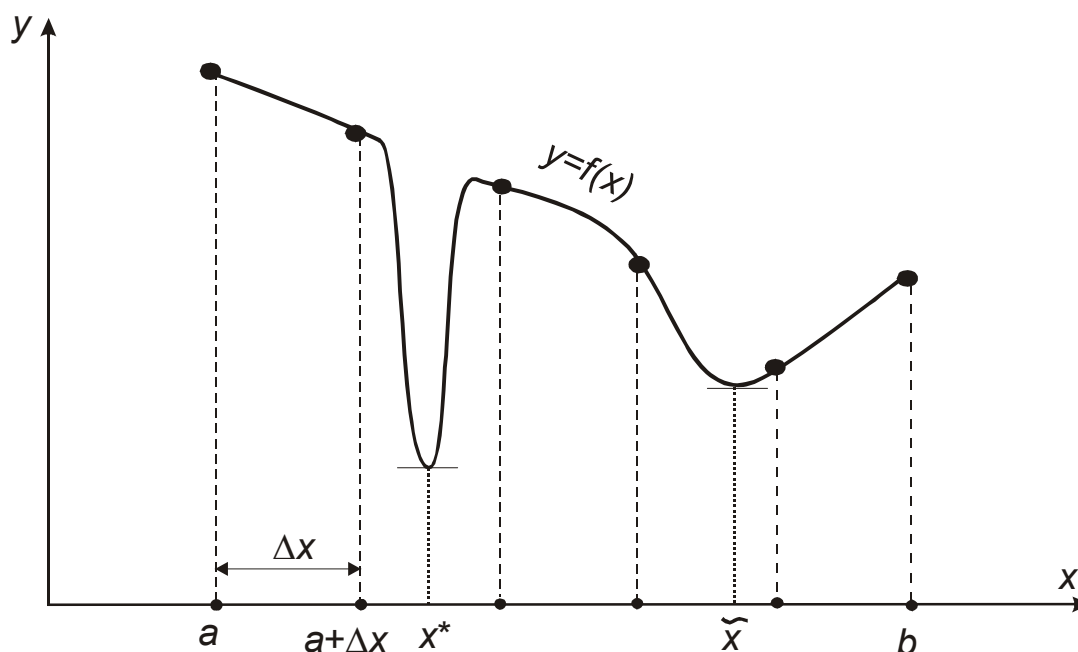


Рис. 2.9

2.4. Метод дихотомии (первый метод деления отрезка пополам)

Метод дихотомии относится к методам исключения отрезков. Точки x_1 и x_2 располагаются близко к середине отрезка $[a, b]$:

$$x_1 = \frac{a+b-\delta}{2}; \quad x_2 = \frac{a+b+\delta}{2},$$

где δ — малое число, выбирается из диапазона $[0, 2\varepsilon]$;

ε — погрешность расчета x^* .

Отношение длин нового и исходного отрезков близко к $\frac{1}{2}$, отсюда название метода.

Алгоритм метода дихотомии приведен на рис. 2.10.

Погрешность определения точки минимума после n итераций

$$\varepsilon_n \approx \frac{b-a}{2^{n+1}},$$

где a и b – координаты *исходного* отрезка.

Если известно число вычислений функции N , то погрешность определяется

$$\varepsilon_N \approx \frac{b-a}{2^{\frac{N}{2}+1}},$$

т. к. для метода дихотомии $n = N/2$.

Пример 2.2. Найти точку минимума функции $f(x) = x^2 + e^{-x}$ на отрезке $[0, 1]$ методом дихотомии с погрешностью $\varepsilon = 0,01$.

Решение

Примем $\delta = 0,01$. Расчеты выполняем в соответствии с алгоритмом на рис. 2.10.

Итерация 1. $a = 0; b = 1;$

$$x_1 = (a + b - \delta) / 2 = (0 + 1 - 0,01) / 2 = 0,495;$$

$$x_2 = (a + b + \delta) / 2 = (0 + 1 + 0,01) / 2 = 0,505;$$

$$f_1 = 0,495^2 + e^{-0,495} = 0,8545;$$

$$f_2 = 0,505^2 + e^{-0,505} = 0,8585.$$

Так как $f_1 < f_2$, принимаем $b = x_2 = 0,505$;

$$\varepsilon_n = (b - a) / 2 = (0,505 - 0) / 2 = 0,2525 > \varepsilon.$$

Переходим к следующей итерации.

Итерация 2. $a = 0; b = 0,505;$

$$x_1 = (0 + 0,505 - 0,01) / 2 = 0,2475; \quad f_1 = 0,2475^2 + e^{-0,2475} = 0,842;$$

$$x_2 = (0 + 0,505 + 0,01) / 2 = 0,2575; \quad f_2 = 0,2575^2 + e^{-0,2575} = 0,839;$$

Так как $f_1 > f_2$, принимаем $a = x_1 = 0,2475$;

$$\varepsilon_n = (b - a) / 2 = (0,505 - 0,2475) / 2 = 0,12875 > \varepsilon.$$

Переходим к следующей итерации.

Дальнейший расчет сводим в табл. 2.1.

Таблица 2.1

	a	b	x_1	x_2	$f(x_1)$	$f(x_2)$	Примечание	ε_n
Ит.3	0,2475	0,505	0,3713	0,3813	0,8277	0,8284	$b = x_2$	0,062
Ит.4	0,2475	0,3813	0,3094	0,3194	0,8296	0,8286	$a = x_1$	0,036
Ит.5	0,3094	0,3813	0,3404	0,3504	0,8277	0,8272	$a = x_1$	0,0204
Ит.6	0,3404	0,3813	0,3559	0,3659	0,8272	0,8275	$b = x_2$	0,0128
Ит.7	0,3404	0,3659	0,3481	0,3581	0,82720	0,8272	$b = x_2$	$\varepsilon_n = 0,009$

Результаты расчета: $x^* = (0,3404 + 0,3582) / 2 = 0,3493$;
 $f_{\min} = 0,3493^2 + e^{-0,3493} = 0,8272$.

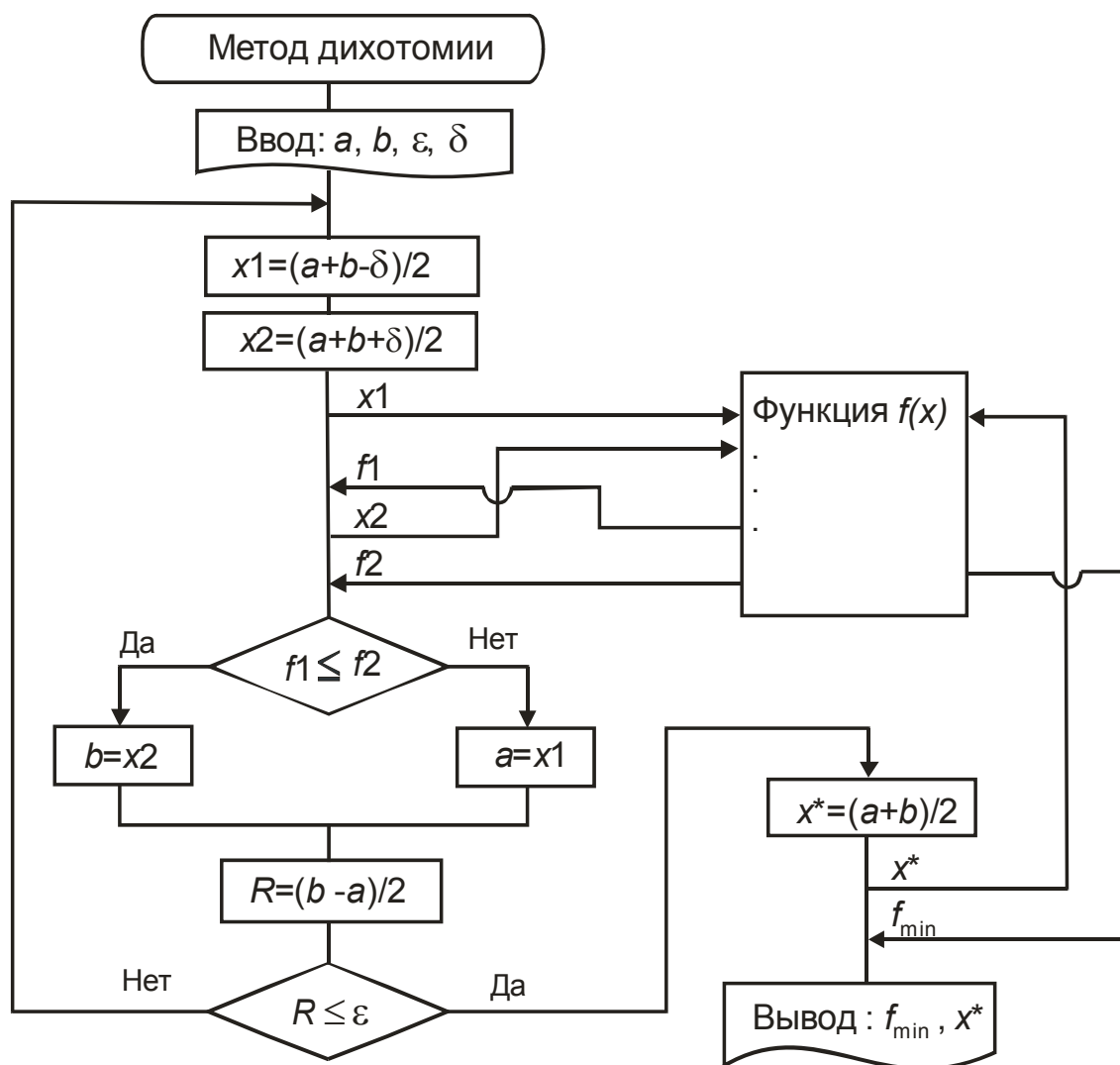


Рис. 2.10. Алгоритм метода дихотомии

2.5. Метод «золотого» сечения

Метод «золотого» сечения – самый популярный из методов исключения отрезков.

Обладает *наилучшей* после метода Фибоначчи стратегией поиска точки минимума, т. к. одна из пробных точек (x_1 или x_2) переходит на следующую итерацию и поэтому на всех шагах алгоритма, кроме первого, требуется лишь одно вычисление функции.

В соответствии с алгоритмом каждая из точек x_1 и x_2 делит отрезок $[a, b]$ на две неравные части так, что *отношение длины всего отрезка к длине его большей части равно отношению длин большей и меньшей частей отрезка*:

$$\frac{(b-a)}{(x_2-a)} = \frac{(x_2-a)}{(x_1-a)}. \quad (2.6)$$

Точки, обладающие таким свойством, называются точками «золотого» сечения отрезка $[a, b]$.

Рассмотрим отрезок $[0;1]$ (рис. 2.11). Пусть x_2 делит его в отношении некоторого числа τ , т. е. $x_2 = \tau$, тогда симметрично расположенная точка $x_1 = 1 - \tau$. Подставим $a = 0$; $b = 1$ и значения x_1 и x_2 в отношение (2.6):

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\tau}{1-\tau}.$$

Решим квадратное уравнение: $\tau^2 = 1 - \tau$; $\tau_{1,2} = \frac{-1 \pm \sqrt{5}}{2}$.

Положительный корень $\tau = \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} = 0,61803\dots$ позволяет вычислять координаты точек x_1 и x_2 отрезка $[a, b]$ на всех итерациях метода «золотого» сечения:

$$x_1 = a + (1 - \tau) \cdot (b - a); \quad x_2 = a + \tau \cdot (b - a).$$

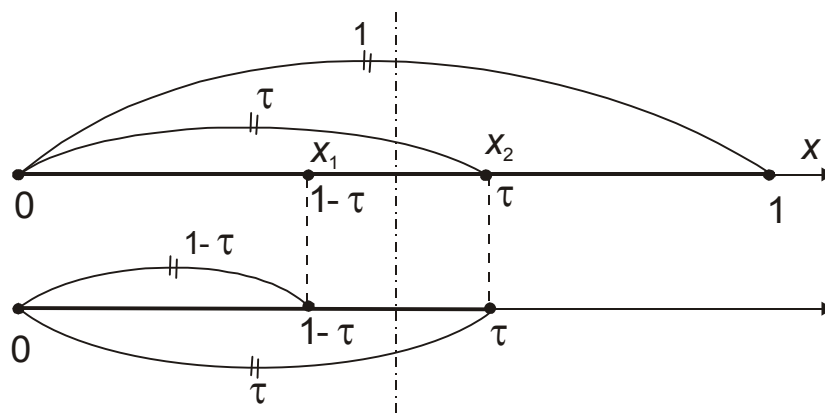


Рис. 2.11. «Золотое» сечение единичного отрезка точками x_1 и x_2

Алгоритм метода «золотого» сечения приведен на рис. 2.12.

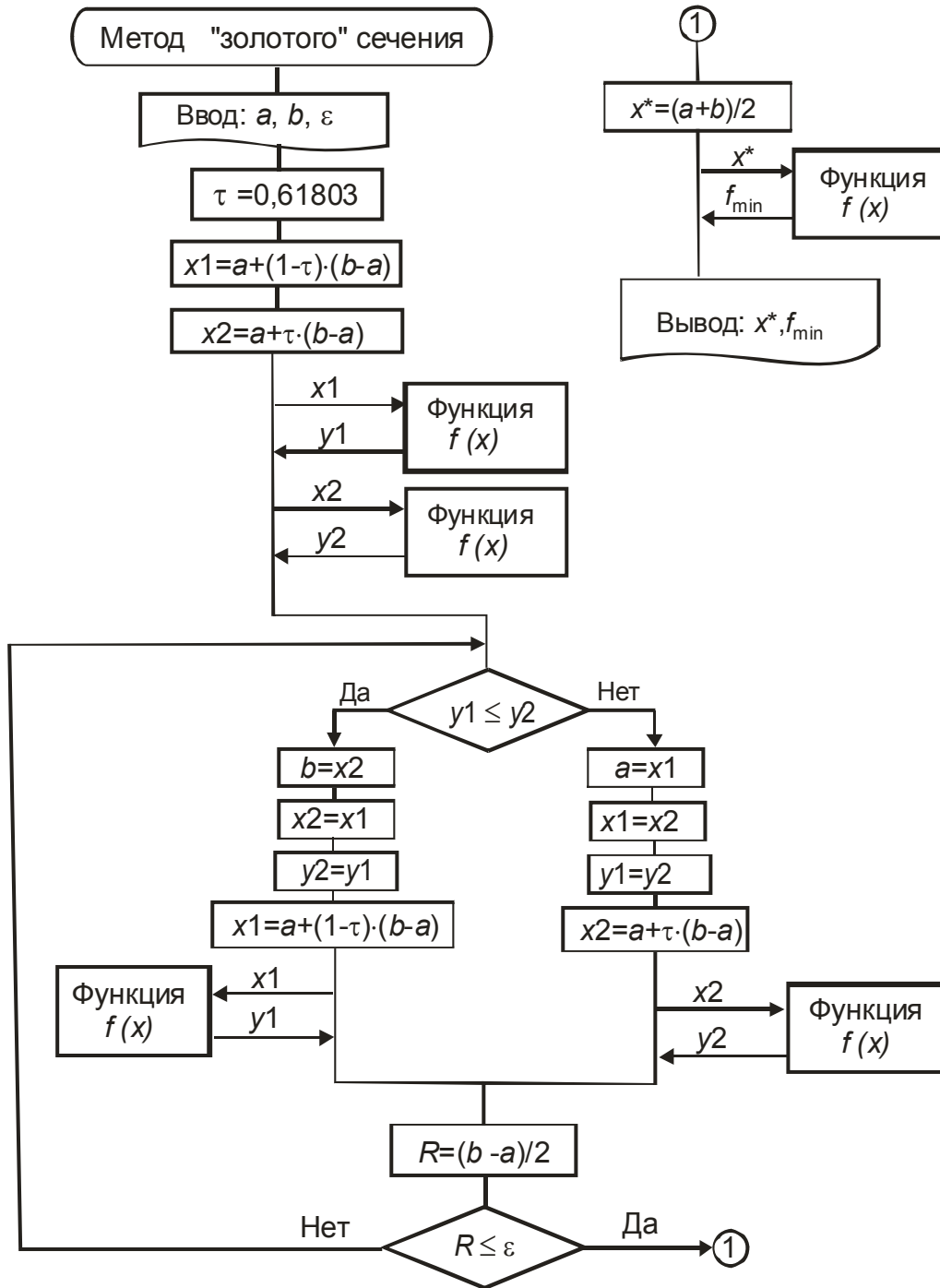


Рис. 2.12. Алгоритм метода «золотого» сечения

Точность определения точки минимума после n итераций равна

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2} \cdot \tau^n \cdot (b - a),$$

где a и b – координаты *исходного* (!) отрезка.

Для метода «золотого» сечения количество вычислений функции на одно больше числа итераций: $N = n + 1$.

Пример 2.3. Найти точку минимума функции $f(x) = x^2 + e^{-x}$ на отрезке $[0,1]$ методом «золотого» сечения с погрешностью $\varepsilon = 0,01$.

Решение

Расчеты выполняем в соответствии с алгоритмом на рис. 2.12; $\tau = 0,618034$.

Итерация 1

$$a = 0; \quad b = 1;$$

$$x_1 = a + (1 - \tau) \cdot (b - a) = 0 + (1 - 0,618034) \cdot (1 - 0) = 0,3819;$$

$$x_2 = a + \tau \cdot (b - a) = 0 + 0,618034 \cdot (1 - 0) = 0,6180;$$

$$f(x_1) = 0,3819^2 + e^{-0,3819} = 0,8284;$$

$$f(x_2) = 0,6180^2 + e^{-0,6180} = 0,9209.$$

Так как $f(x_1) < f(x_2)$, принимаем:

$$b = x_2 = 0,6180; \quad x_2 = x_1 = 0,3819; \quad f(x_2) = f(x_1) = 0,8284.$$

$$\varepsilon_n = (b - a) / 2 = (0,6180 - 0) / 2 = 0,3090 > \varepsilon.$$

Переходим к следующей итерации.

Итерация 2

$$a = 0; \quad b = 0,6180; \quad x_2 = 0,3819; \quad f_2 = 0,8284;$$

$$x_1 = 0 + (1 - 0,618034) \cdot (0,6180 - 0) = 0,2361;$$

$$f_1 = 0,2361^2 + e^{-0,2361} = 0,8454.$$

Так как $f_1 > f_2$, принимаем:

$$a = x_1 = 0,2361; \quad x_1 = x_2 = 0,3819; \quad f_1 = f_2 = 0,8284;$$

$$\varepsilon_n = (b - a) / 2 = (0,6180 - 0,2361) / 2 = 0,1910 > \varepsilon.$$

Дальнейший расчет сводим в табл. 2.2.

Таблица 2.2

	a	b	x_1	x_2	$f(x_1)$	$f(x_2)$	Примечание	ε_n
Ит.3	0,2361	0,6180	0,3819	0,4721	0,8284	0,8466	$b=x_2$	0,118
Ит.4	0,2361	0,4721	0,32624	0,3819	0,82806	0,8284	$b=x_2$	0,0729
Ит.5	0,2361	0,3819	0,29179	0,32624	0,83206	0,82806	$a=x_1$	0,0451
Ит.6	0,29179	0,3819	0,32624	0,34750	0,82806	0,82721	$a=x_1$	0,0278
Ит.7	0,32624	0,3819	0,34750	0,36064	0,82721	0,82729	$b=x_2$	0,0172
Ит.8	0,32624	0,3606	0,33938	0,34750	0,82739	0,82721	$a=x_1$	0,0106
Ит.9	0,33938	0,3606	0,34750	0,35249	0,82721	0,82718	$a=x_1$	$\varepsilon_n=0,006<0,01$

Результаты расчета:

$$x^* = (0,3475 + 0,3606) / 2 = 0,3541; \quad f_{\min} = 0,3541^2 + e^{-0,3541} = 0,8272.$$

Графическая иллюстрация метода для данного примера приведена на рис. 2.13.

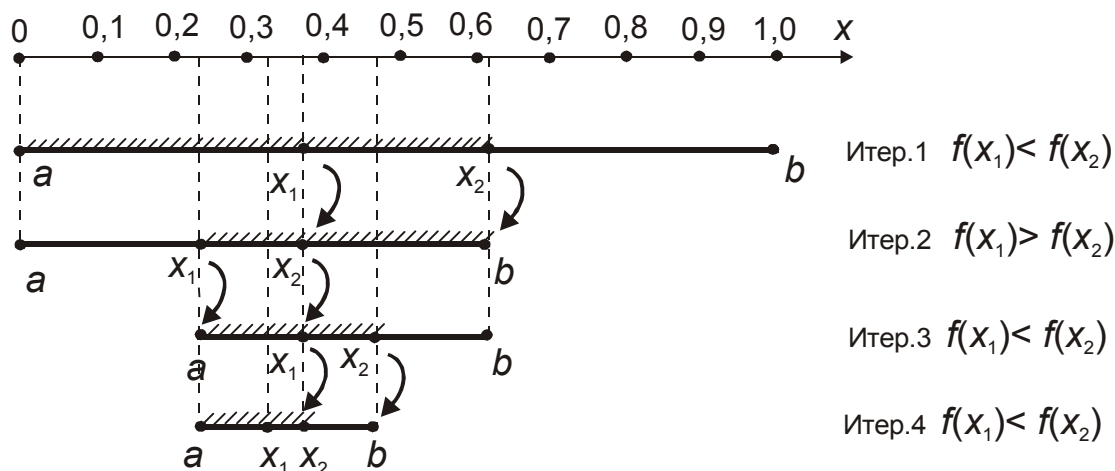


Рис. 2.13. Графическая иллюстрация метода «золотого» сечения для примера 2.3

2.6. Метод Фибоначчи

Метод Фибоначчи *теоретически* обладает *наилучшей* среди методов исключения отрезков стратегией. Однако на практике он используется редко, т. к. в соответствии с алгоритмом еще до начала расчетов надо знать количество вычислений функции N .

На каждом этапе метода Фибоначчи интервал $[a, b]$ делится точками x_1 и x_2 в отношении последовательных чисел Фибоначчи.

Числа Фибоначчи вырабатываются рекуррентной формулой

$$F_k = F_{k-1} + F_{k-2}; F_0 = F_1 = 1.$$

На первой итерации точка x_2 выбирается из условия деления отрезка $[a, b]$ в отношении $\frac{F_{N-1}}{F_N}$, а точка x_1 – в отношении $\frac{F_{N-2}}{F_N}$, где N – количество вычислений функции:

$$x_1 = a + \frac{F_{N-2}}{F_N} \cdot (b - a); \quad (2.7)$$

$$x_2 = a + \frac{F_{N-1}}{F_N} \cdot (b - a). \quad (2.8)$$

На k -й итерации (рис. 2.14) точки x_{1k} и x_{2k} вычисляются по формулам

$$x_{1k} = a_k + \frac{F_{N-k-1}}{F_{N-k+1}} \cdot (b_k - a_k);$$

$$x_{2k} = a_k + \frac{F_{N-k}}{F_{N-k+1}} \cdot (b_k - a_k).$$

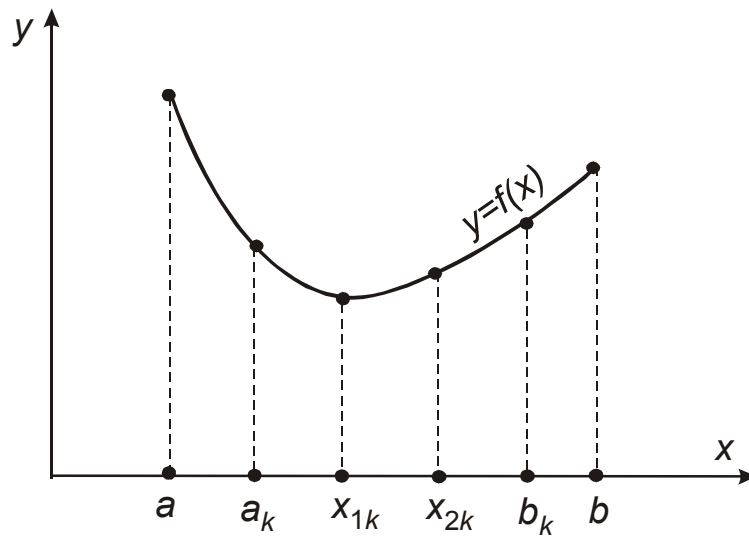


Рис. 2.14. К методу Фибоначчи

При $N \rightarrow \infty$ метод Фибоначчи переходит в метод «золотого» сечения.

Графическая иллюстрация метода Фибоначчи для числа вычислений функции $N = 6$ (количество итераций $n = 5$) приведена на рис. 2.15. Для определенности условно будем отбрасывать правую часть, считая, что всегда $f(x_1) < f(x_2)$.

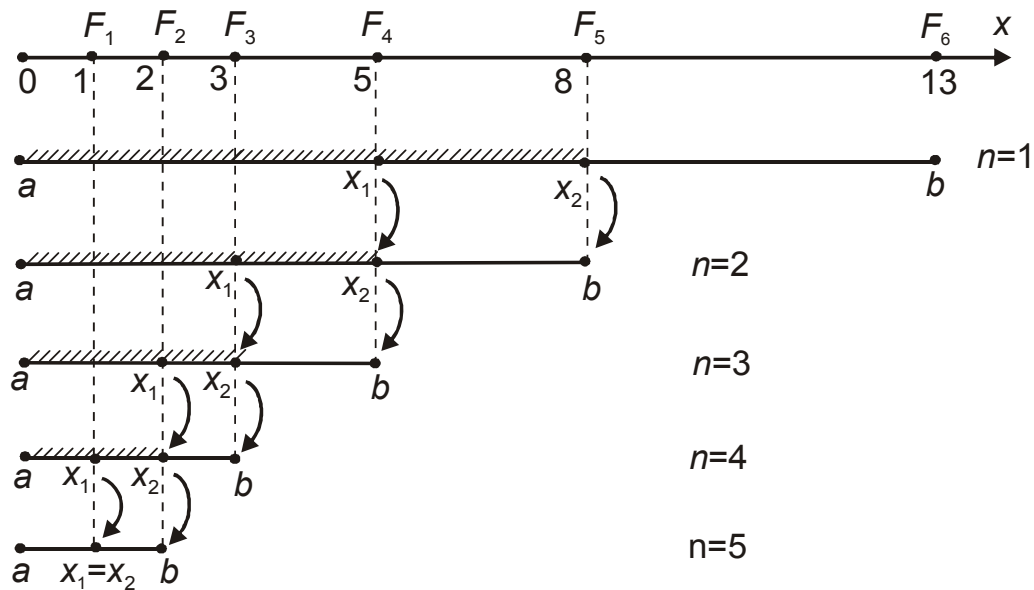


Рис. 2.15. Иллюстрация метода Фибоначчи для $N = 6$

Недостатки метода Фибоначчи (не позволяющие широко использовать его в оптимизационных расчетах):

1) так как практически никогда неизвестно, какое число вычислений функции требуется для обеспечения заданной точности, надо хранить избыточный набор чисел Фибоначчи либо многократно генерировать числа по мере необходимости;

2) метод Фибоначчи нелегко приспособить к часто используемому критерию останова, требующему, чтобы значения функции на окончательном интервале неопределенности разнились не более, чем на заданную величину.

Погрешность метода Фибоначчи

$$\varepsilon_N = \frac{1}{2 \cdot F_N} \cdot (b - a),$$

где a и b – координаты *исходного* (!) отрезка.

Согласно алгоритму метода одна из пробных точек всегда переходит на следующую итерацию, поэтому связь между числом вычислений функции N и количеством итераций n такая же, как в методе золотого сечения $N = n + 1$.

Пример 2.4. Найти минимум функции $f(x) = x^3 - 3 \cdot x + 1$ методом Фибоначчи на отрезке $[0,5; 2]$, если задано $N = 5$. Определить погрешность расчета точки минимума.

Решение

Найдем шесть последовательных чисел Фибоначчи:

$$F_0 = 1; F_1 = 1; F_2 = 2; F_3 = 3; F_4 = 5; F_5 = 8; F_6 = 13.$$

Итерация 1

$$a = 0,5; b = 2,0;$$

$$x_1 = a + \frac{F_4}{F_6} \cdot (b - a) = 0,5 + \frac{5}{13} \cdot (2 - 0,5) = 1,0769;$$

$$x_2 = a + \frac{F_5}{F_6} \cdot (b - a) = 0,5 + \frac{8}{13} \cdot (2 - 0,5) = 1,4231.$$

Значения функции в пробных точках:

$$f_1 = 1,0769^3 - 3 \cdot 1,0769 + 1 = -0,9818;$$

$$f_2 = 1,4231^3 - 3 \cdot 1,4231 + 1 = -0,3872.$$

Сравниваем значения функции в пробных точках. Так как $f_1 < f_2$, для дальнейшего рассмотрения оставляем отрезок $[a, x_2]$ и переприсваиваем $b = x_2 = 1,4231$; $x_2 = x_1 = 1,0769$; $f_2 = f_1 = -0,9818$.

Итерация 2

$$a = 0,5; b = 1,4231;$$

$$x_2 = 1,0769; f_2 = -0,9818;$$

$$x_1 = a + \frac{F_3}{F_5} \cdot (b - a) = 0,5 + \frac{3}{8} \cdot (1,4231 - 0,5) = 0,8462;$$

$$f_1 = -0,9328.$$

Так как $f_1 > f_2$, для дальнейшего рассмотрения оставляем отрезок $[x_1, b]$ и принимаем:

$$a = x_1 = 0,8462; x_1 = x_2 = 1,0769; f_1 = f_2 = -0,9818.$$

Итерация 3

$$a = 0,8462; b = 1,4231;$$

$$x_1 = 1,0769; f_1 = -0,9818;$$

$$x_2 = a + \frac{F_3}{F_4} \cdot (b - a) = 0,8462 + \frac{3}{5} \cdot (1,4231 - 0,8462) = 1,1923;$$

$$f_2 = -0,8819.$$

Так как $f_1 < f_2$, для дальнейшего рассмотрения оставляем отрезок $[a, x_2]$ и принимаем:

$$b = x_2 = 1,1923; x_2 = x_1 = 1,0769; f_2 = f_1 = -0,9818.$$

Итерация 4

$$a = 0,8462; b = 1,1923;$$

$$x_2 = 1,0769; f_2 = -0,9818;$$

$$x_1 = a + \frac{F_1}{F_3} \cdot (b - a) = 0,8462 + \frac{1}{3} \cdot (1,1923 - 0,8462) = 0,9616;$$

$$f_1 = 0,9616^3 - 3 \cdot 0,9616 + 1 = -0,9956.$$

Так как $f_1 < f_2$, для дальнейшего рассмотрения оставляем отрезок $[a, x_2]$.

$$b = x_2 = 1,0769; x_2 = x_1 = 0,9616; f_2 = f_1 = -0,9956.$$

Итерация 5 (последняя)

$$a = 0,8462; b = 1,0769;$$

$$x_2 = 0,9616; f_2 = -0,9956;$$

$$x_1 = a + \frac{F_0}{F_2} \cdot (b - a) = 0,8462 + \frac{1}{2} \cdot (1,0769 - 0,8462) = 0,9616;$$

$$f_1 = 0,9616^3 - 3 \cdot 0,9616 + 1 = -0,9956.$$

Решение задачи: $x^* = \bar{x} = 0,9616; f_{\min} = -0,9956.$

2.7. Метод средней точки

Метод средней точки используется для дифференцируемых на $[a, b]$ функций, он аналогичен методу деления отрезка пополам. Однако вместо вычисления двух значений функции вблизи середины отрезка метод требует одного вычисления производной $f'(x)$ в средней точке отрезка

$$\bar{x} = \frac{(a + b)}{2}.$$

Если $f'(\bar{x}) > 0$, то \bar{x} лежит на участке монотонного возрастания функции (рис. 2.16, а), поэтому $x^* < \bar{x}$ и точку минимума x^* надо искать на $[a, \bar{x}]$.

При $f'(\bar{x}) < 0$ \bar{x} принадлежит участку монотонного убывания функции (рис. 2.16, б), следовательно $x^* \in [\bar{x}, b]$. Если $f'(\bar{x}) = 0$, то $x^* = \bar{x}$.

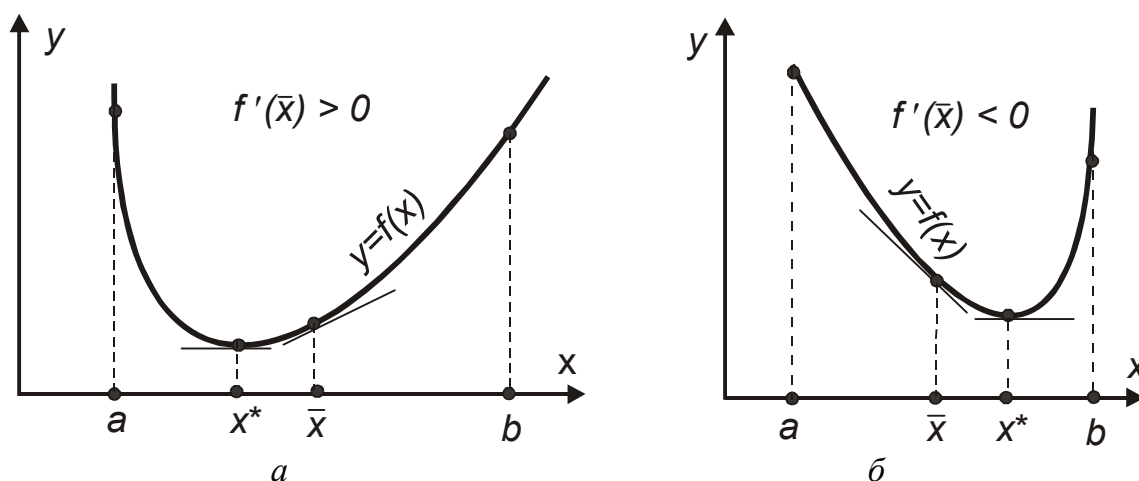


Рис. 2.16. Взаимное расположение средней точки отрезка и точки минимума

Алгоритм метода приведен на рис. 2.17.

Пример 2.6. Найти точку минимума функции $f(x) = x^2 + e^{-x}$ на отрезке $[0, 1]$ методом средней точки с погрешностью $\varepsilon = 0,01$.

Решение

Расчеты выполняем в соответствии с алгоритмом на рис. 2.17. Запишем выражение для производной

$$f'(\bar{x}) = 2 \cdot \bar{x} - e^{-\bar{x}}.$$

Итерация 1

$$a = 0; \quad b = 1;$$

$$\bar{x} = (a + b) / 2 = (0 + 1) / 2 = 0,5;$$

$$f'(\bar{x}) = 2 \cdot 0,5 - e^{-0,5} = 0,3935.$$

Так как $|f'(\bar{x})| > \varepsilon$ и $|f'(\bar{x})| > 0$, принимаем $b = \bar{x} = 0,5$ и переходим к следующей итерации.

Итерация 2

$$a = 0; \quad b = 0,5;$$

$$\bar{x} = (0 + 0,5) / 2 = 0,25;$$

$$f'(\bar{x}) = 2 \cdot 0,25 - e^{-0,25} = 0,2788 < 0. \text{ Принимаем } a = \bar{x} = 0,25.$$

Дальнейший расчет сводим в табл. 2.3.

Таблица 2.3

	a	b	\bar{x}	$f'(\bar{x})$	Примечание
Итерация 3	0,25	0,5	0,375	0,0627	$b = \bar{x}$
Итерация 4	0,25	0,375	0,3125	-0,1066	$a = \bar{x}$
Итерация 5	0,3125	0,375	0,3437	-0,0217	$a = \bar{x}$
Итерация 6	0,3437	0,375	0,3613	0,0258	$b = \bar{x}$
Итерация 7	0,3437	0,3613	0,3525	0,00207	$x^* = 0,3525$

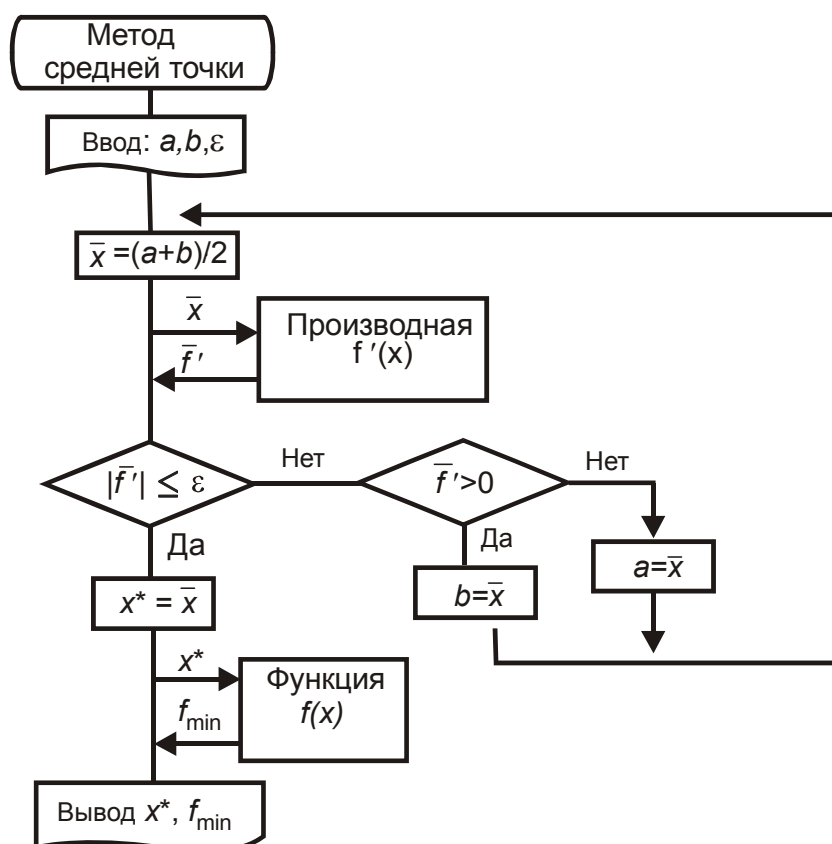


Рис. 2.17. Алгоритм метода средней точки

2.8. Метод парабол

Является методом полиномиальной аппроксимации. Идея методов полиномиальной аппроксимации заключается в том, что для функции $f(x)$ строится аппроксимирующий многочлен и его точка минимума служит приближением к x^* . Метод эффективен для функций, которые являются *унимодальными* и, кроме того, достаточно *гладкими* (по крайней мере, *непрерывными*). Метод парабол – простейший из методов полиномиальной аппроксимации, он использует полиномы второго порядка.

На каждой итерации метода парабол строится квадратный трехчлен, график которого (парабола) проходит через три выбранные точки графика функции $y = f(x)$. Точка минимума параболы \tilde{x} является очередным приближением к точке минимума x^* исследуемой функции (рис. 2.18).

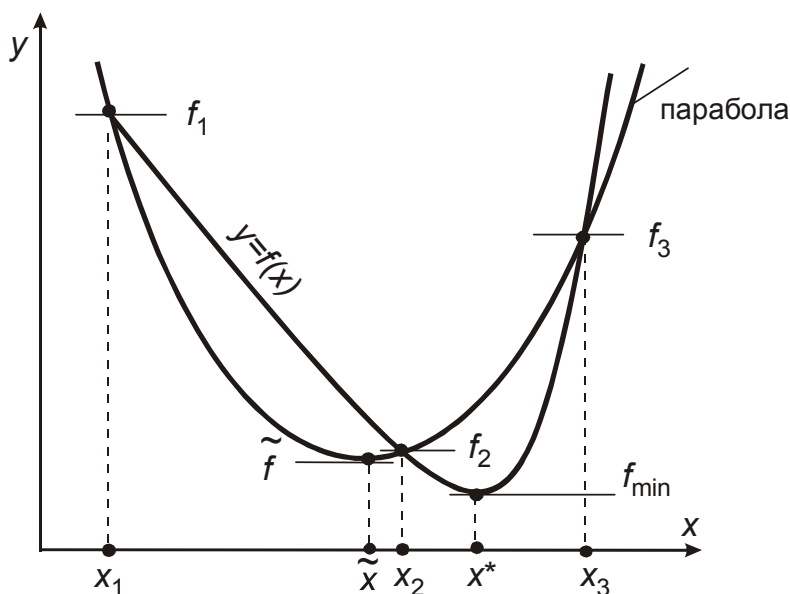


Рис. 2.18. Взаимное расположение графика функции $y = f(x)$ и параболы

Алгоритм метода парабол

Пусть $f(x)$ унимодальна на $[a, b]$ и достигает минимума во внутренней точке отрезка.

1. Выберем три точки x_1, x_2, x_3 , для которых выполняются неравенства

$$x_1 < x_2 < x_3; \quad f_1 \geq f_2 \geq f_3.$$

Из унимодальности $f(x)$ следует, что $x^* \in [x_1, x_3]$.

2. Построим квадратный трехчлен

$$q(x) = a_0 + a_1 \cdot (x - x_1) + a_2 \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_2),$$

график которого проходит через точки $A_1(x_1, f_1)$; $A_2(x_2, f_2)$; $A_3(x_3, f_3)$.

Коэффициенты a_1 , a_2 , a_3 определяем по формулам

$$a_0 = f_1 ;$$

$$a_1 = \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} ;$$

$$a_2 = \frac{1}{x_3 - x_2} \cdot \left(\frac{f_3 - f_1}{x_3 - x_1} - \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \right).$$

3. Определим точку минимума квадратного трехчлена (параболы)

$$\tilde{x} = \frac{1}{2} \cdot \left(x_1 + x_2 - \frac{a_1}{a_2} \right)$$

и значение функции в этой точке $\tilde{f} = f(\tilde{x})$.

4. Выбираем из точек x_1 , x_2 , x_3 и \tilde{x} новую «удачную» тройку чисел (см. рис. 2.19).

Случай I. $x_1 \leq \tilde{x} \leq x_2$:

а) если $\tilde{f} \geq f_2$, то $x^* \in [\tilde{x}, x_3]$, т. е.

$$x_1 = \tilde{x}, \quad f_1 = \tilde{f} ;$$

$$x_2 = x_2 ;$$

$$x_3 = x_3 .$$

б) если $\tilde{f} < f_2$, то $x^* \in [x_1, x_2]$, т. е.

$$x_1 = x_1 ;$$

$$x_2 = \tilde{x}, \quad f_2 = \tilde{f} ;$$

$$x_3 = x_2, \quad f_3 = f_2 .$$

Случай II. $x_2 \leq \tilde{x} \leq x_3$:

а) если $\tilde{f} \geq f_2$, то $x^* \in [x_1, \tilde{x}]$, т. е.

$$x_1 = x_1 ;$$

$$x_2 = x_2 ;$$

$$x_3 = \tilde{x}, \quad f_3 = \tilde{f} ;$$

б) если $\tilde{f} < f_2$, то $x^* \in [x_2, x_3]$, т. е.

$$x_1 = x_2 ; \quad f_1 = f_2 ;$$

$$x_2 = \tilde{x} \quad ; \quad f_2 = \tilde{f} ;$$

$$x_3 = x_3 .$$

5. Алгоритм повторяем, начиная с п. 2.

Условием окончания поиска служит близость к нулю разности

$$\Delta = |\tilde{x}^{k+1} - \tilde{x}^k|$$

чисел \tilde{x} , найденных на данной и предыдущей итерациях, т. е. неравенство

$$|\Delta| \leq \varepsilon,$$

где ε – погрешность расчета.

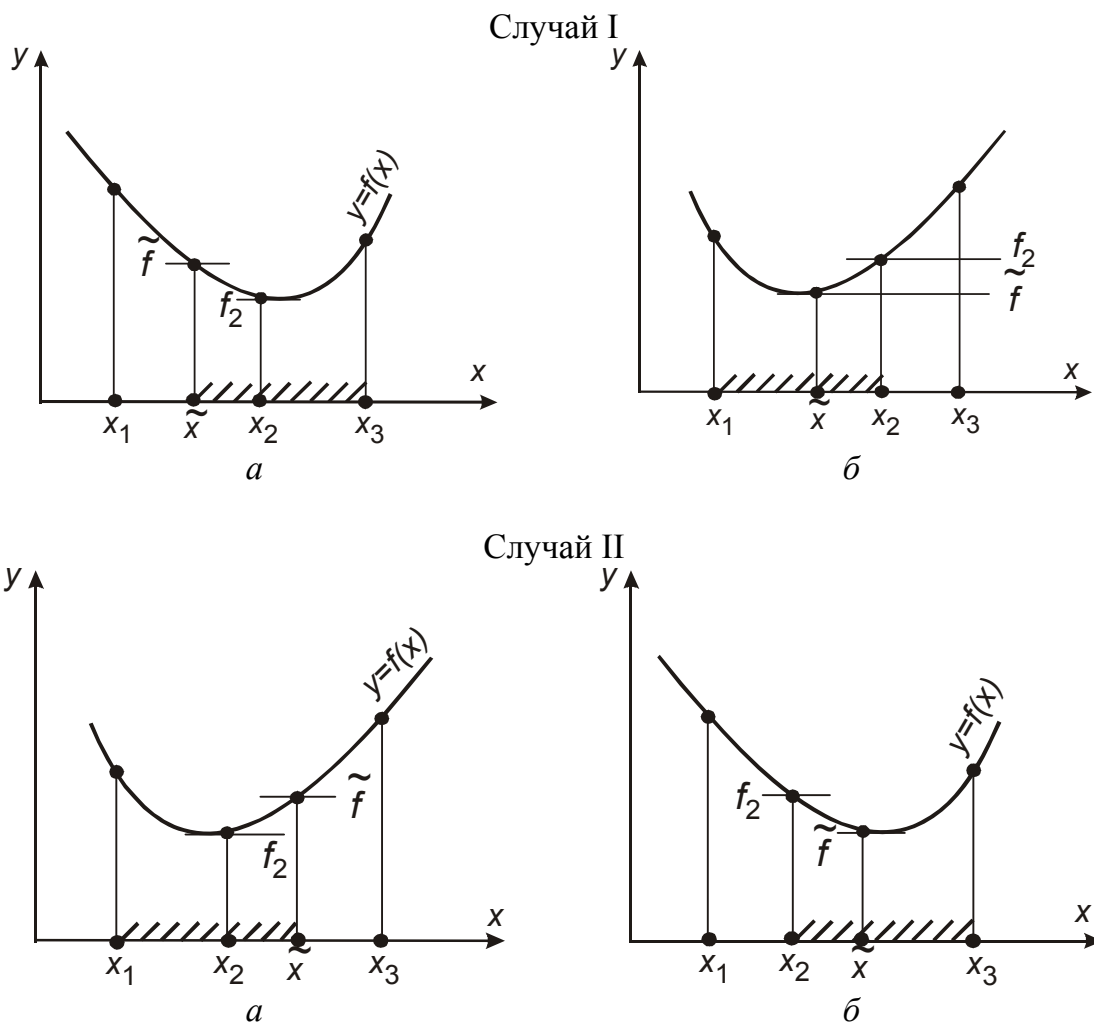


Рис. 2.19. Выбор «удачной» тройки чисел для очередной итерации метода парабол

Пример 2.7. Найти точку минимума функции $f(x) = x^2 + e^{-x}$ на отрезке $[0, 1]$ методом парабол. За критерий останова принять абсолютную разницу двух последних значений \tilde{x} не более 0,05.

Решение

Итерация 1

Выберем «удачную» тройку чисел: $x_1 = 0,1$; $x_2 = 0,3$; $x_3 = 0,9$.

Значения функции в этих точках: $f_1 = 0,9148$, $f_2 = 0,8308$, $f_3 = 1,2166$.

2. Коэффициенты квадратного трехчлена:

$$a_0 = f_1 = 0,9148;$$

$$a_1 = \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} = \frac{0,8308 - 0,9148}{0,3 - 0,1} = -0,4200;$$

$$a_2 = \frac{1}{x_3 - x_2} \cdot \left(\frac{f_3 - f_1}{x_3 - x_1} - \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \right) = \\ = \frac{1}{0,9 - 0,3} \cdot \left(\frac{1,2166 - 0,9148}{0,9 - 0,1} - \frac{0,8308 - 0,9148}{0,3 - 0,1} \right) = 1,3287.$$

Аппроксимирующий трехчлен можно записать как

$$q(x) = 0,9148 + 0,4200 \cdot (x - 0,1) + 1,3287(x - 0,1) \cdot (x - 0,3).$$

3. Точка минимума квадратного трехчлена

$$\tilde{x} = \frac{1}{2} \cdot \left(x_1 + x_2 - \frac{a_1}{a_2} \right) = \frac{1}{2} \cdot \left(0,1 + 0,3 - \frac{-0,42}{1,3287} \right) = 0,3580.$$

4. Значение функции в точке \tilde{x}

$$\tilde{f} = 0,3580^2 + e^{-0,3580} = 0,8272.$$

Итерация 2

Новая «удачная» тройка чисел: x_2, \tilde{x}, x_3 .

Переприсваиваем:

$$x_1 = x_2 = 0,3; f_1 = f_2 = 0,8308;$$

$$x_2 = \tilde{x} = 0,3580; f_2 = \tilde{f} = 0,8272;$$

$$x_3 = 0,9; f_3 = 1,2166.$$

2. Коэффициенты квадратного трехчлена:

$$a_0 = f_1 = 0,8308;$$

$$a_1 = \frac{0,8272 - 0,8308}{0,3580 - 0,3} = -0,0621;$$

$$a_2 = \frac{1}{0,9 - 0,3580} \cdot \left(\frac{1,2166 - 0,8308}{0,9 - 0,3} - \frac{0,8272 - 0,8308}{0,3580 - 0,3} \right) = 1,3008.$$

3. Точка минимума квадратного трехчлена

$$\tilde{x} = \frac{1}{2} \cdot \left(0,3 + 0,3580 - \frac{-0,0621}{1,3008} \right) = 0,3529.$$

4. Значение функции в точке \tilde{x}

$$\tilde{f} = 0,3529^2 + e^{-0,3529} = 0,8272.$$

5. Сравниваем значения \tilde{x} на первом и втором шагах:

$$\Delta = |0,3529 - 0,3580| = 0,0051 \approx \varepsilon.$$

За точку минимума примем последнее значение \tilde{x}

$$x^* = 0,3529.$$

3. МЕТОДЫ МНОГОМЕРНОЙ МИНИМИЗАЦИИ

В общем виде задача поиска минимума функции многих переменных может быть записана

$$F(X) \rightarrow \min , \\ X \in D ,$$

где $F(X)$ – целевая функция многих переменных;

$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ – n -мерный вектор оптимизируемых параметров;

n – размерность задачи;

$n D$ – допустимая область решения.

Теоретический материал по методам многомерной минимизации хорошо изложен в [1].

3.1. Графическая интерпретация целевой функции. Линии уровня

Для произвольной целевой функции $Y = F(X)$ векторного аргумента $X \in E^n$ оптимизируемых параметров уравнение $Y = F(X)$ определяет в $(n+1)$ -мерном пространстве E^{n+1} некоторую *гиперповерхность*.

Когда $n = 2$, это – обычная поверхность в трехмерном пространстве $Y(x_1, x_2)$ (см. рис. 3.1). При этом для каждого постоянного C из множества значений функции $F(x_1, x_2)$ уравнение $F(x_1, x_2) = C$ неявно задает кривую в координатах (x_1, x_2) на плоскости $Y = C$. На рис. 3.1 показано пересечение поверхности функции двумя такими плоскостями: $Y = F^1$ и $Y = F^2$.

Если несколько таких кривых, соответствующих некоторой выборке значений параметра $C(F^1, F^2, \dots)$, изобразить на одной плоскости, получится контурный график функции. Образующие его кривые $F^1 = \text{const}$, $F^2 = \text{const}$ принято называть *линиями уровня* (см. рис. 3.2).

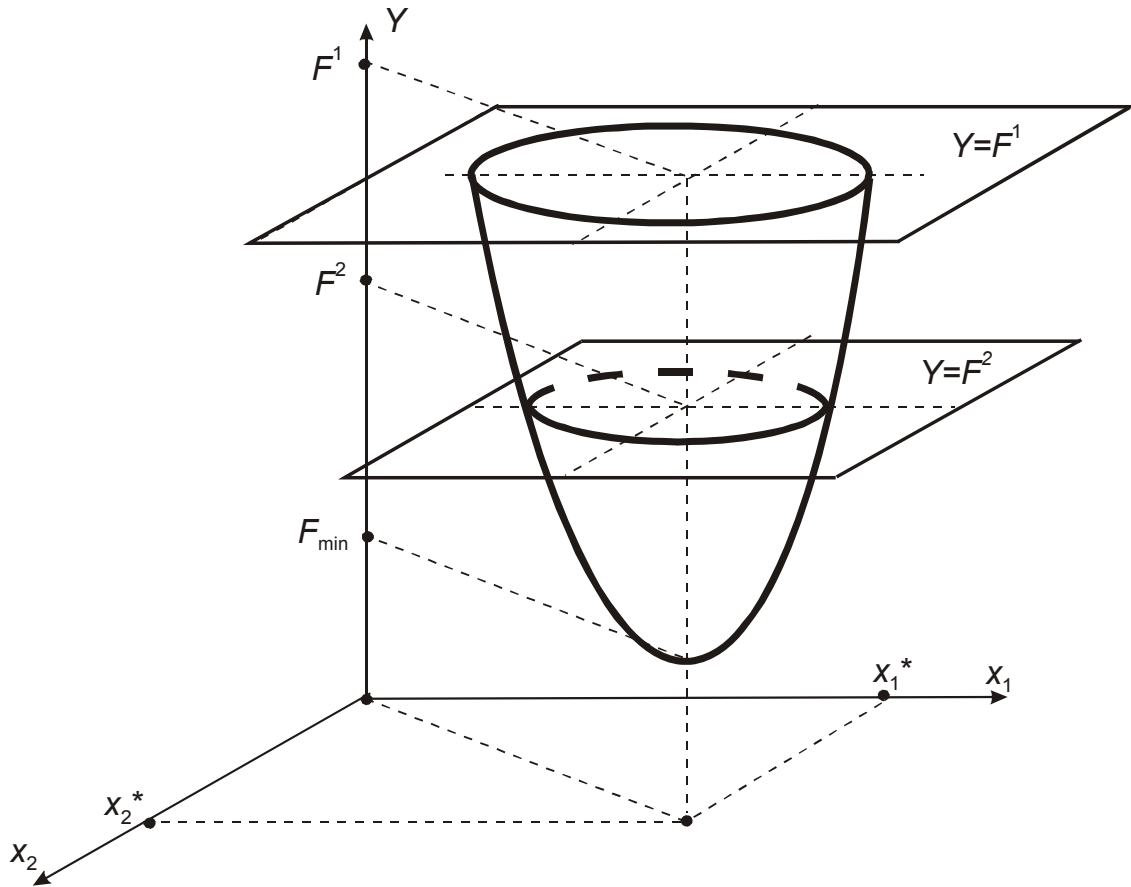


Рис. 3.1. Графическое представление целевой функции двух переменных $Y = F(x_1, x_2)$

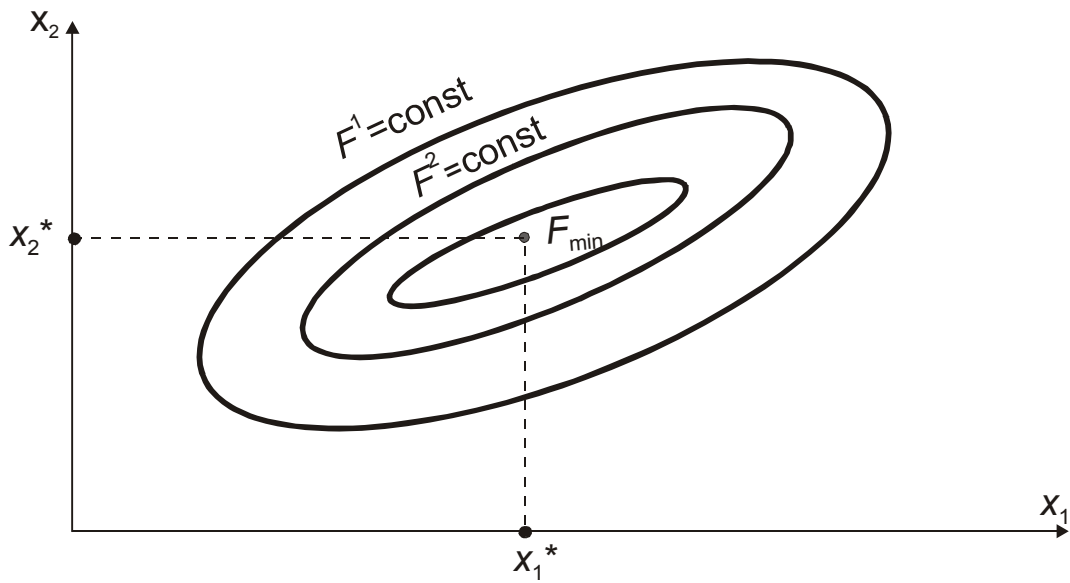


Рис. 3.2. Линии уровня целевой функции $Y = F(x_1, x_2)$

Пример 3.1. Изобразить графически несколько линий уровня целевой функции $Y = (x_1 - 2)^2 + 5 \cdot (x_2 - 1)^2 - 5 \cdot x_1 - 4 \cdot x_2 + 2$.

Решение

Построим линию уровня $F = 0$.

Будем решать уравнение

$$(x_1 - 2)^2 + 5 \cdot (x_2 - 1)^2 - 5 \cdot x_1 - 4 \cdot x_2 + 2 = 0,$$

задавая значение одной координаты и вычисляя значение второй.

Сначала найдем точки пересечения (если они существуют) с осями Ox_1 и Ox_2 .

Примем $x_2 = 0$ и найдем значения координаты x_1 :

$$(x_1 - 2)^2 + 5 \cdot (0 - 1)^2 - 5 \cdot x_1 - 4 \cdot 0 + 2 = 0;$$

$$x_1^2 - 9 \cdot x_1 + 11 = 0;$$

$$D = b^2 - 4 \cdot a \cdot c = (-9)^2 - 4 \cdot 1 \cdot 11 = 37;$$

$$x_1 = \frac{-b \pm \sqrt{D}}{2 \cdot a} = \frac{9 \pm \sqrt{37}}{2 \cdot 1};$$

$$x_1' = 1,46;$$

$$x_1'' = 7,54.$$

Отметим в координатах (x_1, Ox_2) точки $A_1(1,46; 0)$ и $A_2(7,54; 0)$ (см. рис. 3.3).

Примем $x_1 = 0$ и найдем значения координаты x_2 :

$$5 \cdot x_2^2 - 14 \cdot x_2 + 11 = 0; D = -24 < 0.$$

Отрицательное значение дискриминанта означает, что последнее уравнение не имеет действительных корней, а линия уровня $F = 0$ – точек пересечения с осью Ox_2 .

Для $x_2 = 1$ решение квадратного уравнения относительно x_1 дает корни $x_1' = 0,23$; $x_1'' = 8,77$. Отмечаем точки $A_3(0,23; 1)$ и $A_4(8,77; 1)$ (см. рис. 3.3).

Аналогично получаем попарно координаты точек $A_5(0,35; 2)$ и $A_6(8,65; 2)$; $A_7(2; 3)$ и $A_8(7; 3)$; $A_9(5; -0,54)$ и $A_{10}(5; 3,34)$; $A_{11}(3; -0,43)$ и $A_{12}(3; 3,23)$ и отмечаем их на графике.

Построим линию уровня $F = -11$.

$$\text{Решаем уравнение } (x_1 - 2)^2 + 5 \cdot (x_2 - 1)^2 - 5 \cdot x_1 - 4 \cdot x_2 + 2 = -11.$$

Точек пересечения с осями координат нет.

Примем $x_2 = 1$ и найдем значения координаты x_1 :

$$x_1^2 - 9 \cdot x_1 + 13 = 0; D = 29; x_1' = 1,81; x_1'' = 7,19.$$

Отмечаем на рис. 3.3 точки $B_1(1,81; 1)$ и $B_2(7,19; 1)$.

Примем $x_2 = 2$. Решаем квадратное уравнение $x_1^2 - 9 \cdot x_1 + 14 = 0$; $D = 25$; $x_1' = 2$; $x_1'' = 7$. Отмечаем точки $B_3(2; 2)$ и $B_4(7; 2)$.

Аналогично получаем координаты точек $B_5(5; 0,15)$ и $B_6(5; 2,65)$.

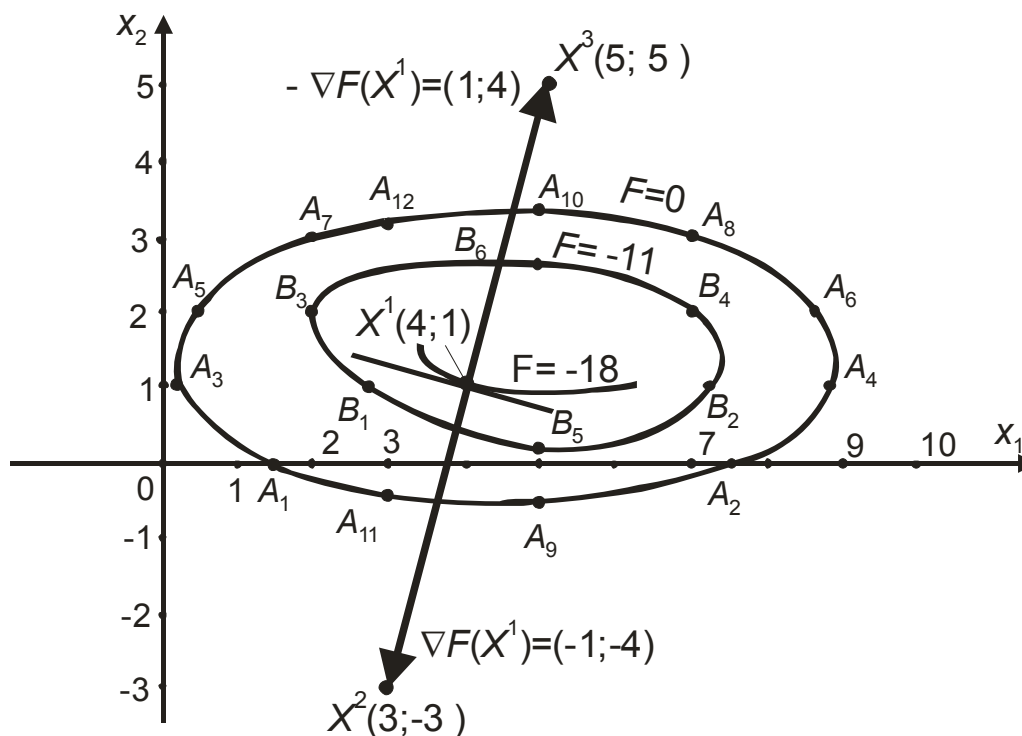


Рис. 3.3. Линии уровня целевой функции
 $Y = (x_1 - 2)^2 + 5 \cdot (x_2 - 1)^2 - 5 \cdot x_1 - 4 \cdot x_2 + 2$

3.2. Классификация численных методов многомерной минимизации

Известно, что технические оптимизационные задачи имеют ограничения на оптимизируемые параметры и поэтому требуют привлечения методов условной минимизации. Интерес же к методам безусловной минимизации объясняется следующими причинами:

- алгоритмы условной минимизации в большинстве случаев строятся на основе алгоритмов оптимизации без ограничений;
- задачи минимизации с ограничениями очень часто решаются путем преобразования их в задачи безусловной минимизации.

По виду функции численные методы многомерной безусловной минимизации делятся на две большие группы:

- методы для негладких функций (методы «слепого» поиска);
- методы для гладких функций (методы спуска).

Методы, использующие лишь значения функции и не требующие их дифференцируемости, называются *прямыми* или методами *нулевого порядка*.

Методы *первого порядка* требуют вычисления первых производных, а методы *второго* и высшего порядков дополнительно требуют вычисления производных второго и более высокого порядков.

Для *негладких функций* используются только *прямые методы*, основными из них являются:

- метод *перебора*;
- метод *многогранника*;
- метод *случайного поиска*.

Прямые методы применимы для всех видов минимизируемых функций (это их *достоинство (!)*), но использовать их следует лишь в тех случаях, когда никакой метод иного типа применить нельзя.

Недостатки прямых методов:

- низкая эффективность;
- весьма сомнительные, а иногда и просто отсутствующие гарантии сходимости.

Методы спуска:

- метод *координатного* спуска (метод нулевого порядка);
- группа *градиентных* методов (методы первого порядка: *градиентный*, метод *наискорейшего* спуска, метод *сопряженных направлений* и др.);
- группа методов второго порядка (метод *Ньютона*; метод *переменной метрики* и др.).

3.3. Дифференцирование функции многих переменных

Градиент функции $F(X)$ многих переменных в некоторой точке $X \in E^n$ – это вектор, координатами которого являются частные производные функции в этой точке:

$$\text{Grad } F(X) = \nabla F(X) = F'(X) = \left(\frac{\partial F(X)}{\partial x_1}, \frac{\partial F(X)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial F(X)}{\partial x_n} \right). \quad (3.4)$$

В малой окрестности точки X градиент указывает направление *наискорейшего возрастания* функции, а его норма характеризует *скорость* этого возрастания. Вектор-антиградиент указывает направление *наискорейшего убывания* функции.

В любой точке поверхности целевой функции $F(X)$ *вектор-антиградиент перпендикулярен касательной* к линии уровня $F(X) = \text{const}$ в этой точке (см. рис. 3.4).

Норма вектора-градиента

$$\|\nabla F(X)\| = \sqrt{\left(\frac{\partial F(X)}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial F(X)}{\partial x_2}\right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial F(X)}{\partial x_n}\right)^2}. \quad (3.5)$$

В точке с координатами $X^* (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$, где имеет место экстремум функции, *вектор-градиент и все его компоненты обращаются в ноль* $F'(X^*) = (0; 0; \dots; 0)$.

При перемещении из некоторой точки X^0 n -мерного пространства с координатами $(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)$ в некоторую точку X^1 вдоль вектора-градиента заданной функции $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ координаты новой точки $(x_1^1, x_2^1, \dots, x_n^1)$ можно рассчитать по формулам:

$$\begin{aligned} x_1^1 &= x_1^0 + \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_1}; \\ x_2^1 &= x_2^0 + \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_2}; \\ &\dots \\ x_n^1 &= x_n^0 + \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_n}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Для функции двух переменных графическая иллюстрация перемещения из точки $X^0(x_1^0; x_2^0)$ в точку $X^1(x_1^1; x_2^1)$ вдоль градиента приведена на рис. 3.5.

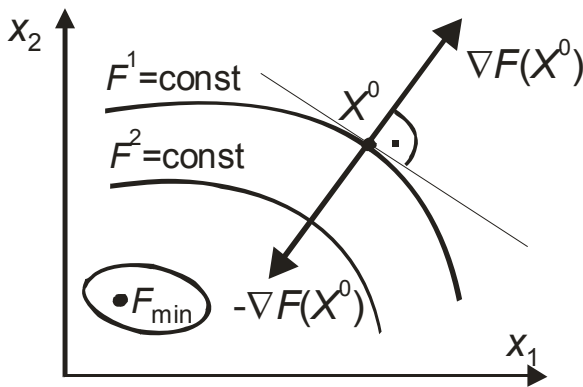


Рис. 3.4. Графическое изображение градиента и антиградиента функции двух переменных в некоторой точке

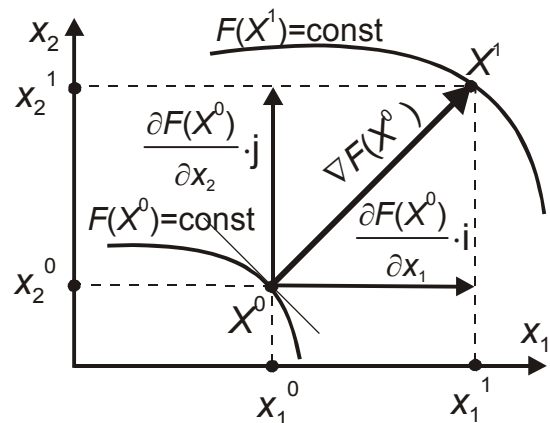


Рис. 3.5. Перемещение вдоль градиента из точки $X^0(x_1^0, x_2^0)$ в точку $X^1(x_1^1, x_2^1)$

Пример 3.3. Вычислить градиент функции

$$F(X) = x_1^2 + 3 \cdot x_2^2 - 4 \cdot (x_3 - 1)^2 - x_1 \cdot x_2 + 5 \cdot x_2 \cdot x_3 + 3 \cdot x_1 - x_2$$

в точке $X^1(1; 1; 1)$.

Решение

Частные производные:

$$\frac{\partial F(X)}{\partial x_1} = 2x_1 - x_2 + 3; \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial F(X)}{\partial x_2} = 6x_2 - x_1 + 5x_3 - 1; \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial F(X)}{\partial x_3} = -8x_3 + 5x_2 + 8. \quad (3.9)$$

Градиент в точке X^1

$$\nabla F(1;1;1) = (2 \cdot 1 - 1 + 3; 6 \cdot 1 - 1 + 5 \cdot 1 - 1; -8 \cdot 1 + 5 \cdot 1) = (4; 9; -3).$$

Пример 3.4. Изобразить графически градиент и антиградиент функции

$$F(X) = (x_1 - 2)^2 + 5 \cdot (x_2 - 1)^2 - 5 \cdot x_1 - 4 \cdot x_2 + 2 \text{ в точке } X^0(4; 1).$$

Решение

Вычислим значение целевой функции в заданной точке $X^0(4; 1)$:

$F = (4 - 2)^2 + 5 \cdot (1 - 1)^2 - 5 \cdot 4 - 4 \cdot 1 + 2 = -18$. Условно покажем линию уровня $F = -18$ в координатах $(x_1 O x_2)$ (см. рис. 3.3).

Частные производные функции:

$$\frac{\partial F(X)}{\partial x_1} = 2 \cdot x_1 - 9; \quad \frac{\partial F(X)}{\partial x_2} = 10 \cdot x_2 - 14.$$

Значения частных производных в точке $X^0(4; 1)$:

$$\frac{\partial F(X^0)}{\partial x_1} = 2 \cdot x_1 - 9 = 2 \cdot 4 - 9 = -1;$$

$$\frac{\partial F(X^0)}{\partial x_2} = 10 \cdot x_2 - 14 = 10 \cdot 1 - 14 = -4.$$

Градиент $\nabla F(X^0) = (-1; -4)$, антиградиент $-\nabla F(X^0) = (1; 4)$.

Учитывая, что координаты вектора – это проекции на оси координат, отмечаем на рис. 3.3 векторы $\nabla F(X^0)$ и $-\nabla F(X^0)$. Перемещение вдоль векторов градиента и антиградиента дает координаты новых точек X^1 и X^2 : $X^1(3; -3)$, $X^2(5; 5)$.

С другой стороны, координаты точек $X^1(x_1^1; x_2^1)$ и $X^2(x_1^2; x_2^2)$ можно посчитать по формулам

$$x_1^1 = x_1^0 + \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_1} = 4 + (-1) = 3; \quad x_2^1 = x_2^0 + \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_2} = 1 + (-4) = -3;$$

$$x_1^2 = x_1^0 - \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_1} = 4 - (-1) = 5; \quad x_2^2 = x_2^0 - \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_2} = 1 - (-4) = 5;$$

затем отметить на рисунке точки $X^1(3; -3)$ и $X^2(5; 5)$ и, соединив их с исходной $X^0(4; 1)$, получить векторы градиента и антиградиента соответственно.

Матрица Гессе

Матрица Гессе функции $F(X)$ многих переменных – это матрица вторых производных:

$$H(X) = F''(X) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_2 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Пример 3.5. Вычислить матрицу Гессе для функции из примера 3.3.

Решение

Продифференцируем выражение (3.7) последовательно по x_1 , x_2 и x_3 и получим первую строку матрицы Гессе:

$$\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1 \partial x_1} = 2; \quad \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1 \partial x_2} = -1; \quad \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_1 \partial x_3} = 0.$$

Продифференцируем выражение (3.8) последовательно по x_1 , x_2 и x_3 и получим вторую строку матрицы Гессе:

$$\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_2 \partial x_1} = -1; \quad \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_2 \partial x_2} = 6; \quad \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_2 \partial x_3} = 5.$$

Третья строка матрицы Гессе получается в результате последовательного дифференцирования выражения (3.9) по x_1 , x_2 и x_3 :

$$\frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_3 \partial x_1} = 0; \quad \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_3 \partial x_2} = 5; \quad \frac{\partial^2 F(X)}{\partial x_3 \partial x_3} = -8.$$

Таким образом, получили матрицу Гессе

$$H(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 6 & 5 \\ 0 & 5 & -8 \end{pmatrix}.$$

Первый дифференциал

Первый дифференциал функции многих переменных в точке X^0

$$dF(X^0) = \sum_{j=1}^n \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_j} \cdot \Delta x_j, \quad (3.11)$$

где Δx_j – приращение отдельной координаты при перемещении из некоторой точки X^0 на малую величину $\Delta X(\Delta x_1, \Delta x_2, \dots, \Delta x_n)$.

В векторной форме первый дифференциал функции $F(X)$ в точке X^0 записывается как скалярное произведение вектора-градиента в этой точке $\nabla F(X^0)$ и вектора приращений ΔX :

$$dF(X^0) = (\nabla F(X^0), \Delta X). \quad (3.12)$$

Второй дифференциал

Второй дифференциал функции многих переменных в точке X^0

$$d^2 F(X^0) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 F(X^0)}{\partial x_i \partial x_j} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta x_j, \quad (3.13)$$

или в векторной форме

$$d^2 F(X^0) = (H(X^0) \cdot \Delta X, \Delta X). \quad (3.14)$$

Приращение функции

– через первый дифференциал

$$\Delta F(X^0) = dF(X^0) + O(|\Delta X|), \quad (3.15)$$

где $O(|\Delta X|)$ – остаточная погрешность,

или
$$\Delta F(X^0) \approx dF(X^0) = (\nabla F(X^0), \Delta X); \quad (3.16)$$

– через первый и второй дифференциалы

$$\Delta F(X^0) = dF(X^0) + \frac{1}{2} d^2 F(X^0) + O(|\Delta X|^2), \quad (3.17)$$

где $O(|\Delta X|^2)$ – остаточная погрешность более низкого порядка.

Вычисление частных производных

1. *Аналитический способ.* С помощью известных в математике правил частные производные определяются в виде аналитических выражений.

2. *Численный способ (численное дифференцирование).* Производные подсчитываются с помощью соответствующих разностей

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} \approx \frac{F(x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, x_i + \Delta x_i, x_{i+1}, \dots, x_n) - F(x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_n)}{\Delta x_i}.$$

При численном дифференцировании следует учитывать следующие противоречивые обстоятельства:

- с одной стороны, чем меньше Δx_i ($\Delta x_i \rightarrow 0$), тем ближе приближенное значение частной производной к ее точному значению;
- с другой стороны, Δx_i не может быть сколь угодно малым, т. к. при этом возрастает погрешность расчета.

В задачах, связанных с выбором оптимальных термодинамических параметров паротурбинных установок, следует принимать относительный шаг дифференцирования равным

$$\frac{\Delta x_i}{x_i} \approx (0,0001 \div 0,005).$$

Нормированный вектор-градиент

Деление каждой компоненты вектора на его норму нормализует вектор

$$\nabla F_n(X) = \frac{\nabla F(X)}{\|\nabla F\|} = \frac{\left(\frac{\partial F(X)}{\partial x_1}, \frac{\partial F(X)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial F(X)}{\partial x_n} \right)}{\sqrt{\left(\frac{\partial F(X)}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial F(X)}{\partial x_2} \right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial F(X)}{\partial x_n} \right)^2}}.$$

3.4. Классический метод минимизации функции многих переменных

Необходимые и достаточные условия минимума функции многих переменных в точке \bar{X}

Необходимые условия существования минимума

1. Градиент равен нулю в этой точке \bar{X} , т. е.

$$\|\nabla F(\bar{X})\| = 0,$$

или
$$\frac{\partial F(\bar{X})}{\partial x_1} = 0; \quad \frac{\partial F(\bar{X})}{\partial x_2} = 0; \quad \dots; \quad \frac{\partial F(\bar{X})}{\partial x_n} = 0.$$

2. Матрица Гессе функции $F(\bar{X})$ неотрицательна (положительно полуопределена): $H(\bar{X}) \geq 0$.

Достаточные условия существования минимума

1. Градиент равен нулю: $\|\nabla F(\bar{X})\| = 0$.

2. Матрица Гессе положительно определена: $H(\bar{X}) > 0$.

Алгоритм классического метода

1. Находим частные производные функции $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ последовательно по всем переменным и приравняем их нулю

$$\begin{cases} \frac{\partial F(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_1} = 0; \\ \frac{\partial F(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_2} = 0; \\ \dots \\ \frac{\partial F(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_n} = 0. \end{cases}$$

2. Решаем полученную систему уравнений, корни которой являются *стационарными* точками.

3. Находим матрицу Гессе $H(X)$ в стационарных точках минимизируемой функции. Если $H(X) > 0$, то исследуемая точка соответствует минимуму функции.

Пример 3.11. С помощью классического метода найти стационарные точки функции $F(X) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - x_1 - 2x_3 - x_2x_3$ и определить, являются ли они точками минимума.

Решение

1. Определяем частные производные:

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = 2x_1 - 1 = 0;$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_2} = 2x_2 - x_3 = 0;$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_3} = 2x_3 - x_2 - 2 = 0.$$

2. Решив полученную систему трех уравнений, получим стационарную точку

$$\bar{X} = \left(\frac{1}{2}; \frac{2}{3}; \frac{4}{3} \right).$$

$$3. \text{ Матрица Гессе } H(\bar{X}) = A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

4. Чтобы определить, является ли матрица H положительно определенной, воспользуемся критерием Сильвестра:

$$\Delta_1 = 2 > 0; \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} = 4 > 0; \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{vmatrix} = 6 > 0.$$

Так как все миноры положительны, матрица Гессе положительно определена, откуда следует, что стационарная точка $\bar{X} = \left(\frac{1}{2}; \frac{2}{3}; \frac{4}{3} \right)$ является точкой минимума.

3.5. Теоретические основы методов спуска

Роль квадратичных функций для анализа и сравнения методов многомерной минимизации

Квадратичные функции и их свойства играют важную роль в теории многомерной минимизации. Это объясняется следующими причинами:

1) если метод непригоден для квадратичных функций, то очень мало шансов, что он может быть использован для функций с более сложной структурой;

2) в достаточно малой окрестности оптимальной точки X^* всякую неквадратичную гладкую функцию с положительно определенной матрицей Гессе можно аппроксимировать квадратичной функцией.

Квадратичная функция n переменных в общем виде

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{j=1}^n b_j \cdot x_j + C. \quad (3.1)$$

Положив $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$, получим симметричную матрицу $A = (a_{ij})$, с помощью которой выражение (3.1) можно записать в матричной форме

$$F(X) = \frac{1}{2} \cdot (A \cdot X, X) + (B, X) + C, \quad (3.2)$$

где $B = (b_j)$, $j = 1, 2, \dots, n$.

Пример 3.2. Записать функцию

$$F(X) = 2 \cdot x_1^2 - 2 \cdot x_1 \cdot x_2 + 3 \cdot x_1 \cdot x_3 + x_2^2 - \\ - 5 \cdot x_2 \cdot x_3 + 4 \cdot x_3^2 + 7 \cdot x_1 - 8 \cdot x_2 + 9 \cdot x_3 + 10$$

в матричном виде.

Решение

$$A = \begin{pmatrix} 2 \cdot 2 & -2 & 3 \\ -2 & 1 \cdot 2 & -5 \\ 3 & -5 & 4 \cdot 2 \end{pmatrix}; \quad B = (7 \quad -8 \quad 9); \quad C = 10;$$

тогда

$$F(X) = \frac{1}{2} \cdot \left(\begin{pmatrix} 4 & -2 & 3 \\ -2 & 2 & -5 \\ 3 & -5 & 8 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \right) + (7 \quad -8 \quad 9) \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + 10.$$

Выпуклые функции

Функция $F(X)$, заданная на выпуклом множестве $D \subset E^n$, называется *выпуклой*, если для любых точек $X^1, X^2 \in D$ и любого скаляра $\mu \in [0, 1]$ выполняется неравенство

$$F(\mu \cdot X^1 + (1 - \mu) \cdot X^2) \leq \mu \cdot F(X^1) + (1 - \mu) \cdot F(X^2). \quad (3.18)$$

Для выпуклой функции любой ее локальный минимум является одновременно и глобальным.

Достаточным условием *строгой* выпуклости функции $F(X)$ является *положительная определенность* её матрицы Гессе $H(X)$, а *сильной* выпуклости – *положительная* определенность матрицы $H(X) - L \cdot E$, где E – единичная матрица, а $L > 0$.

Собственные значения и собственные векторы

Ненулевой вектор U , для которого $A \cdot U = \lambda \cdot U$, называется *собственным вектором* квадратной матрицы A , а число λ – соответствующим ему *собственным значением* этой матрицы.

Собственные значения находятся из характеристического уравнения

$$\det(A - \lambda \cdot E) = 0,$$

где E – единичная матрица (на главной диагонали – единицы, все остальные значения равны нулю).

Если λ_i – собственное значение матрицы A , то нетривиальное (ненулевое) решение однородной системы линейных уравнений

$$(A - \lambda_i \cdot E) \cdot U = 0$$

дает соответствующий ему собственный вектор.

Пример 3.6. Найти собственные значения и собственные векторы матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}.$$

Решение

Матрица (2×2) имеет два собственных значения λ_1 и λ_2 .

$$A1 = A - \lambda \cdot E = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} - \lambda \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - \lambda & 1 \\ 3 & 4 - \lambda \end{pmatrix};$$

$$\det A1 = (2 - \lambda) \cdot (4 - \lambda) - 1 \cdot 3 = \lambda^2 - 6 \cdot \lambda + 5.$$

Решаем уравнение $\lambda^2 - 6 \cdot \lambda + 5 = 0$:

$$D = b^2 - 4ac = 36 - 4 \cdot 1 \cdot 5 = 16; \lambda_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{D}}{2 \cdot a} = \frac{6 \pm \sqrt{16}}{2 \cdot 1}.$$

Собственные значения: $\lambda_1 = 5$; $\lambda_2 = 1$.

Собственные векторы:

а) первый собственный вектор $U_1(x_1; x_2)$ определяем из решения системы уравнений $(A - \lambda_1 \cdot E) \cdot U_1 = 0$.

Обозначим $A1 = A - \lambda_1 \cdot E$, тогда

$$A1 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} - 5 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 & 1 \\ 3 & -1 \end{pmatrix};$$

$$A1 \cdot U_1 = \begin{pmatrix} -3 & 1 \\ 3 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \cdot x_1 + 1 \cdot x_2 \\ 3 \cdot x_1 - 1 \cdot x_2 \end{pmatrix}.$$

Находим координаты первого собственного вектора, решая систему уравнений

$$\begin{cases} -3 \cdot x_1 + x_2 = 0; \\ 3 \cdot x_1 - x_2 = 0, \end{cases}$$

откуда x_1 – любое число, а $x_2 = 3 \cdot x_1$,

например, $U_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \end{pmatrix}$ или $U_1 = \begin{pmatrix} -0,5 \\ -1,5 \end{pmatrix}$ и т. д.

б) второй собственный вектор $U_2(x_1, x_2)$ определяем из решения системы уравнений $(A - \lambda_2 \cdot E) \cdot U_2 = 0$.

Обозначим $A2 = A - \lambda_2 \cdot E$, тогда

$$A2 = A - \lambda_2 \cdot E = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} - 1 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 3 & 3 \end{pmatrix};$$

$$A2 \cdot U_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 3 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \cdot x_1 + 1 \cdot x_2 \\ 3 \cdot x_1 + 3 \cdot x_2 \end{pmatrix}.$$

Находим координаты второго собственного вектора, решая систему уравнений

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 0; \\ 3 \cdot x_1 + 3 \cdot x_2 = 0, \end{cases}$$

откуда x_1 – любое число, $x_2 = -x_1$ или, наоборот, x_2 – любое число, $x_1 = -x_2$, например, $U_2 = \begin{pmatrix} 7 \\ -7 \end{pmatrix}$ или $U_2 = \begin{pmatrix} -0,1 \\ 0,1 \end{pmatrix}$ и т. д.

Квадратная матрица A называется *положительно определенной* ($A > 0$), если все ее собственные значения λ положительные. Матрица называется *положительно полуопределенной* ($A \geq 0$), если $\lambda \geq 0$. Матрица является *знаконеопределенной*, если среди ее собственных значений имеются и положительные, и отрицательные.

Чтобы выяснить, является ли матрица A положительно определенной, можно воспользоваться **критерием Сильвестра**: для того, чтобы матрица A была положительно определенной, необходимо и достаточно, чтобы все ее угловые миноры были положительными:

$$\Delta_1 = a_{11} > 0; \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} > 0; \quad \Delta_n = \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} > 0.$$

Пример 3.7. Матрица $A(2 \times 2)$ из примера 3.6 является положительно определенной, т. к. оба ее собственных значения ($\lambda_1 = 5 > 0$ и $\lambda_2 = 1 > 0$) являются положительными.

Пример 3.8. Матрица $A = \begin{pmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ является положительно полуопределенной, т. к. $\lambda_1 = 6$; $\lambda_2 = 0$.

Пример 3.9. Матрица $A = \begin{pmatrix} -7 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$ является знаконеопределенной, т. к. $\lambda_1 = 7 < 0$; $\lambda_2 = 4 > 0$.

Пример 3.10. Доказать, что матрица $A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 3 \\ -2 & 2 & -2 \\ 3 & -2 & 8 \end{pmatrix}$ положительно определена.

Решение

Воспользуемся критерием Сильвестра:

$$\Delta_1 = 4 > 0; \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 2 \end{vmatrix} = 4 > 0; \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} 4 & -2 & 3 \\ -2 & 2 & -2 \\ 3 & -2 & 8 \end{vmatrix} = 22 > 0.$$

Так как все миноры положительны, матрица A – положительно определена.

Возможные и приемлемые направления

Вектор направления

Любой n -мерный вектор-столбец $d = (d_1, d_2, \dots, d_n)$ может служить направлением.

Пусть даны точка $X^0 \in E^n$ и направление $d \neq 0$. При изменении скалярной величины h от 0 до ∞ точка $X^1 = X^0 + h \cdot d$ описывает луч, исходящий из точки X^0 в направлении d .

Пример 3.12. На плоскости $X^0 = (x_1^0; x_2^0) = (1; 3)$; $d = (d_1; d_2) = (-2; 5)$; $h = 0,1$.

Найти новую точку $X^1 = (x_1^1, x_2^1)$ при перемещении из X^0 в направлении d с шагом h .

Решение

$$x_1^1 = x_1^0 + h \cdot d_1 = 1 + 0,1 \cdot (-2) = 0,8;$$

$$x_2^1 = x_2^0 + h \cdot d_2 = 3 + 0,1 \cdot 2 = 3,5;$$

$$X^1 = (0,8; 3,5).$$

Возможные направления:

- а) для методов без ограничений – это любое направление d ;
- б) для методов с ограничениями – это всякое направление, не нарушающее ограничений.

Приемлемые направления

– это направления, *обеспечивающие убывание целевой функции* (для задач с ограничениями еще и не нарушающие ни одно из ограничений).

Для двумерного случая примеры возможных и приемлемых направлений приведены на рис. 3.6.

Условие спуска

Построение убывающей последовательности значений функции в соответствии с условием (3.1) требует отрицательного приращения функции на каждой итерации $\Delta F^k = F(X^{k+1}) - F(X^k) < 0$.

Учитывая, что в первом приближении приращение функции равно ее первому дифференциалу

$$\Delta F(X^k) \approx (\nabla F(X^k), \Delta X^k),$$

и обозначив вектор приращений переменных ΔX^k на k -й итерации, как некоторый вектор направления d^k , гарантию спуска запишем

$$(\nabla F(X^k), d^k) < 0.$$

Таким образом, направление d^k в малой окрестности точки X^k обеспечивает убывание функции, если скалярное произведение вектора-градиента $\nabla F(X^k)$ в этой точке на направление d^k отрицательно.

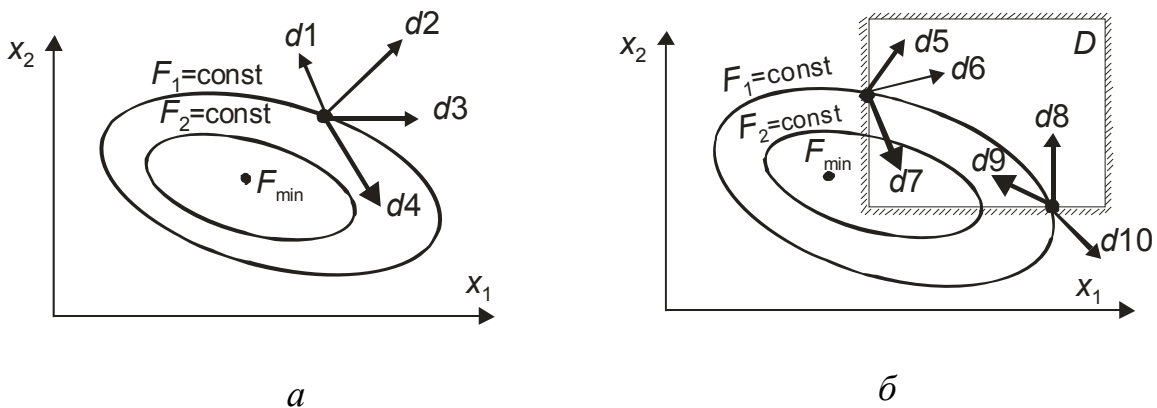


Рис. 3.6. Возможные и приемлемые направления:
 а – задача без ограничений: d1, d2, d3, d4 – возможные направления,
 d4 – приемлемое направление;
 б – задача с ограничениями: d5, d6, d7, d8, d9 – возможные направления,
 d7, d9 – приемлемые направления

Скалярное произведение можно расписать

$$(\nabla F(X^k), d^k) = |\nabla F(X^k)| \cdot |d^k| \cdot \cos \varphi,$$

где φ – угол между векторами $\nabla F(X^k)$ и d^k .

Таким образом, если угол φ между векторами – острый ($90 < \varphi < 180$), то в направлении d^k функция *возрастает* (см. рис. 3.7), если же угол φ – тупой ($0 < \varphi < 90$), то в направлении d^k функция *убывает* (см. рис. 3.8).

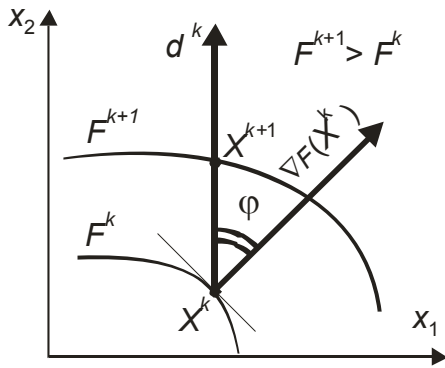


Рис. 3.7. Перемещение из точки X^k в точку X^{k+1} вдоль направления d^k возрастания функции ($0 < \varphi < 90$)

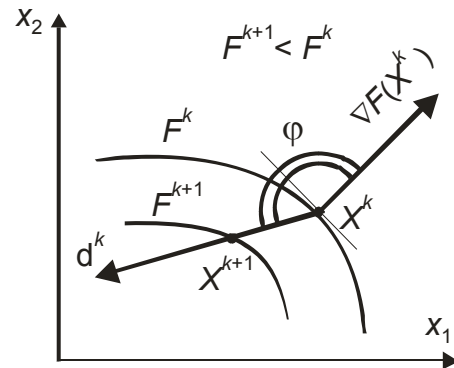


Рис. 3.8. Перемещение из точки X^k в точку X^{k+1} вдоль направления d^k убывания функции ($90 < \varphi < 180$)

Пример 3.13. Для целевой функции $F(x_1, x_2) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1 \cdot x_2$ проверить, какие из направлений $d_1(4, 0)$, $d_2(3, -3)$, $d_3(-4, -2)$ обеспечивают убывание функции из точки $X^0(1, 1)$?

Решение

1. Градиент целевой функции в точке $X^0(1, 1)$

$$\nabla F(1, 1) = (4 \cdot x_1 + x_2, 2 \cdot x_2 + x_1) = (5, 3).$$

2. Скалярные произведения градиента на заданные направления:

$$(\nabla F(X^0), d_1) = (5 \cdot 4 + 3 \cdot 0) = 20 > 0;$$

$$(\nabla F(X^0), d_2) = (5 \cdot 3 + 3 \cdot (-3)) = 6 > 0;$$

$$(\nabla F(X^0), d_3) = (5 \cdot (-4) + 3 \cdot (-2)) = -26 < 0.$$

Направление d_3 является приемлемым, т. е. указывает на убывание функции в малой окрестности точки X^0 .

Графическая иллюстрация решения задачи представлена на рис. 3.9.

Модельная схема методов спуска

Пусть X^k – текущее приближение к искомой точке минимума X^* .

Шаг 1. Проверка соблюдения условий останова алгоритма.

Если условия выполняются, то вычисления прекращают, полагая

$$X^* = X^k; \quad F_{\min} = F(X^k).$$

Шаг 2. Расчет направления поиска.

Выбрать направление, вдоль которого предполагается расположить следующую точку, т. е. рассчитать n -мерный вектор d^k , называемый направлением.

Шаг 3. Расчет длины шага.

Вычислить положительное число h^k (длину шага), обеспечивающее убывание функции

$$F(X^{k+1}) < F(X^k)$$

при перемещении из X^k в X^{k+1} .

Итерационная формула

$$X^{k+1} = X^k - h^k \cdot d^k.$$

Шаг 4. Пересчет оценки решения:

$$X^k = X^{k+1};$$

$$F(X^k) = F(X^{k+1});$$

$$k = k + 1.$$

Вернуться к шагу 1.

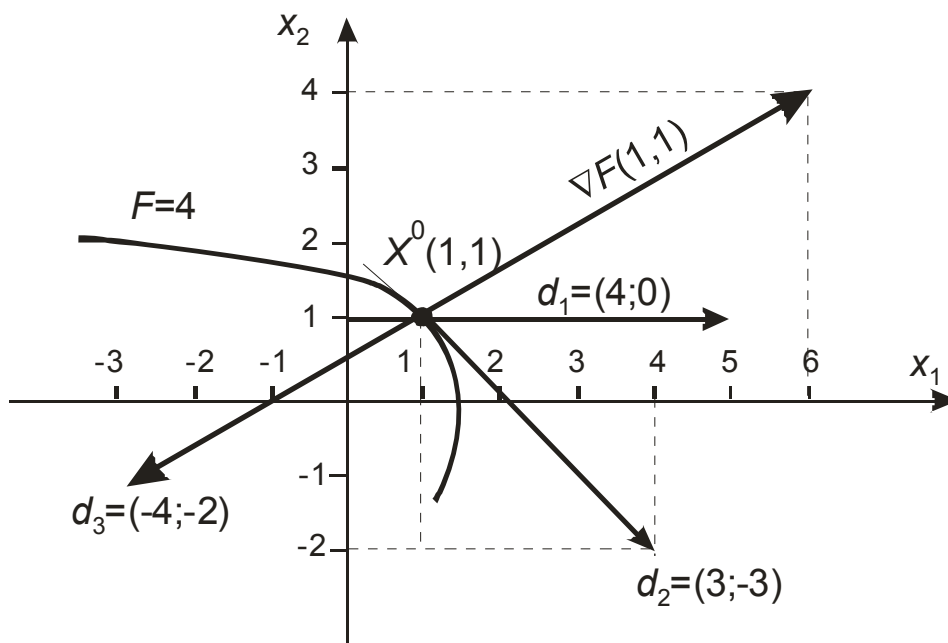


Рис. 3.9. Возможные направления функции $F = 2x_1^2 + x_2^2 + x_1 \cdot x_2$ точке $X^0(1,1)$

Примечание. В качестве условий останова алгоритма можно принять:

- 1) $\rho(X^{k+1}, X^k) \leq \varepsilon_\rho$, где ρ означает расстояние между точками X^k и X^{k+1} ;
- 2) $|F(X^{k+1}) - F(X^k)| \leq \varepsilon_F$;
- 3) $\|\nabla F(X^k)\| \leq \varepsilon_{\nabla F}$.

Здесь ε_ρ , ε_F , $\varepsilon_{\nabla F}$ – заранее заданные погрешности расчета расстояния между точками, значениями функции и нормы градиента соответственно.

Условия сходимости методов спуска

1. Функция F дважды непрерывно дифференцируема.
2. Функция «существенно» убывает на каждой итерации.

Неудачный выбор шага h^k может привести к тому, что величины уменьшения функции по итерациям $\Delta F = F^{k+1} - F^k$ будут слишком быстро стремиться к нулю ($\Delta F \rightarrow 0$), т. е. существенного уменьшения функции не будет.

3. При всех k (номер итерации) угол φ между направлением спуска d^k и градиентом $\nabla F(X^k)$ отличается от прямого не менее, чем на фиксированную ненулевую величину $\Delta\varphi$. Если d^k и $\nabla F(X^k)$ – ортогональны ($\varphi = 90^\circ$), то метод расчета выдает векторы, вдоль которых $F^k = \text{const}$.

4. Множество уровня $L(F(X^0))$ замкнуто и ограничено (X^0 – начальная точка спуска).

Примечание.

Для данной функции $F(X)$ и числа β множеством уровня $L(\beta)$ называется совокупность всех точек X , удовлетворяющих неравенству

$$F(X) \leq \beta.$$

Пример 3.14. Для целевой функции $F = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2$ найти множество уровня $L(9)$.

Решение

Множество уровня заданной функции для $\beta = 9$ – это совокупность точек, лежащих внутри круга $(x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2 \leq 9$ (заштрихованная область на рис. 3.10).

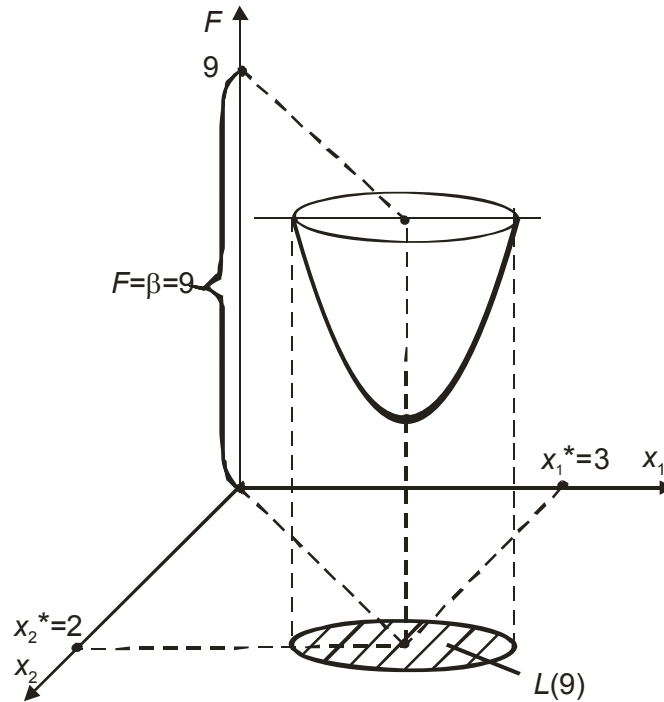


Рис. 3.10. Множество уровня $L(9)$ функции $F = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2$

3.6. Методы спуска

Методы спуска – это методы направленного поиска безусловного минимума функции многих переменных.

Методы спуска заключаются в построении последовательности точек $X^0, X^1, \dots, X^k, \dots$, для которых выполняется условие

$$F(X^0) > F(X^1) > \dots > F(X^k) > \dots \quad (3.3)$$

Они требуют дифференцируемости функции, что дает информацию о поведении функции в малой окрестности точек X^k и позволяет вести направленный поиск точки минимума.

3.6.1. Градиентный метод

Суть градиентного метода: *в каждой точке поиска определяется вектор-градиент и делается шаг в этом направлении (если ищем максимум) или противоположном (если ищем минимум).*

В дальнейшем будем вести речь лишь о поиске минимума целевой функции и ее антиградиенте. Последовательность расчета минимума целевой функции градиентным методом полностью укладывается в модельную схему спуска (п. 3.1.1.8), согласно которой на каждой итерации рассматриваемого метода решаются две задачи.

Задача 1. Определение направления спуска

Для этой цели вычисляют частные производные минимизируемой функции в начальной точке спуска X^0 :

$$\frac{\partial F(X^0)}{\partial x_1}, \quad \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_2}, \quad \dots, \quad \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_n}.$$

Абсолютные значения частных производных по x_1, x_2, \dots, x_n — это отрезки, соответствующие перемещению вдоль осей координат Ox_1, Ox_2, \dots, Ox_n соответственно. Знак производной указывает направление перемещения.

Спуск вдоль антиградиента функции F из заданной точки X^0 с координатами $(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)$ соответствует перемещению из этой точки в некоторую точку X^1 , координаты которой $(x_1^1, x_2^1, \dots, x_n^1)$ вычисляются:

$$x_1^1 = x_1^0 - \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_1}; \quad x_2^1 = x_2^0 - \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_2}; \quad \dots; \quad x_n^1 = x_n^0 - \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_n}.$$

Для функции $F(x_1; x_2)$ двух переменных перемещение из точки X^0 в точку X^1 на полную длину антиградиента проиллюстрировано на рис. 3.11, а.

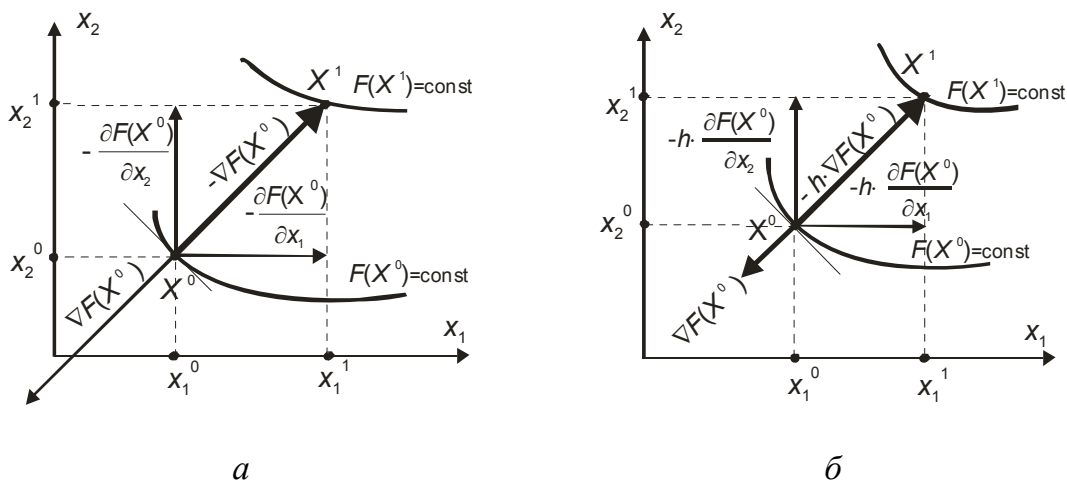


Рис. 3.11. Перемещение вдоль антиградиента из точки $X^0(x_1^0, x_2^0)$ в точку $X^1(x_1^1, x_2^1)$ на полную длину вектора (а) и с некоторым шагом $h > 1$ (б)

Задача 2. Выбор шага в направлении спуска

Перемещение вдоль антиградиента на всю его длину может привести к расхождению процесса минимизации (будем удаляться от F_{\min} все дальше и дальше, как на рис. 3.12). Чтобы значение функции в конечной точке спуска на каждой итерации не превышало ее значения в исходной точке, следует изменять шаг в направлении антиградиента, т. е. перемещаться не на всю длину вектора, а на величину $h \cdot \nabla F$, где h – некоторое положительное число, значение которого зависит от характера задачи и от значений координат в точке, откуда делается шаг в направлении антиградиента. По своему смыслу h – масштабный множитель, но в соответствии с принятой терминологией будем называть его *длиной шага*, или просто *шагом*.

Выбор длины шага h^k на каждой итерации должен обеспечить убывание функции при перемещении из одной точки градиентного спуска в другую

$$F(X^{k+1}) < F(X^k).$$

При выборе шага надо учитывать следующие противоречивые обстоятельства:

- 1) если шаг h выбрать достаточно малым, то движение будет происходить практически по линии антиградиента (хорошо!), но при этом – очень медленная сходимость итерационного процесса (плохо...);
- 2) если h – большой, то возникает опасность не обеспечить сходимость процесса, что графически проиллюстрировано выше (рис. 3.12).

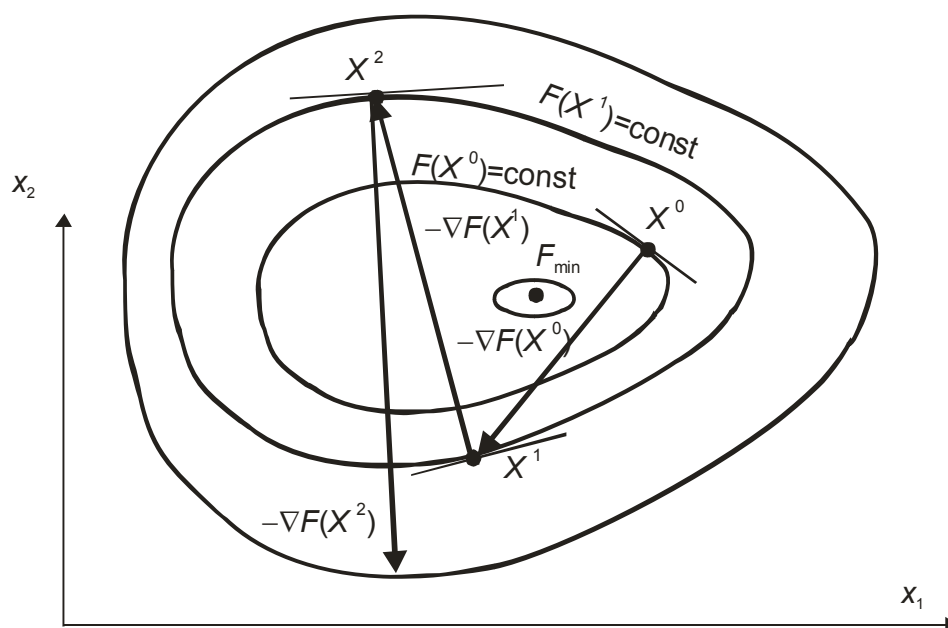


Рис. 3.12. Расходящийся итерационный процесс при неудачном выборе шага

Критерий выбора шага спуска h

Надо двигаться такими шагами, чтобы прийти к минимуму целевой функции за наименьшее число итераций!

Для конкретной задачи шаг h принимают подбором, либо, если это возможно, на каждом шаге спуска оценивают его максимальное значение с последующим дроблением, пока не будет достигнуто убывания функции на этом направлении. Выбранный шаг h позволяет переместиться в направлении антиградиента из точки $X^0(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)$ в точку $X^1(x_1^1, x_2^1, \dots, x_n^1)$ (см. рис. 3.11, б), координаты которой вычисляются:

$$x_1^1 = x_1^0 - h \cdot \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_1}; \quad x_2^1 = x_2^0 - h \cdot \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_2}; \quad \dots \quad x_n^1 = x_n^0 - h \cdot \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_n}.$$

Алгоритм градиентного метода в матричной форме приведен на рис. 3.13. Развернутый алгоритм градиентного спуска для целевой функции двух переменных представлен на рис. 3.14.

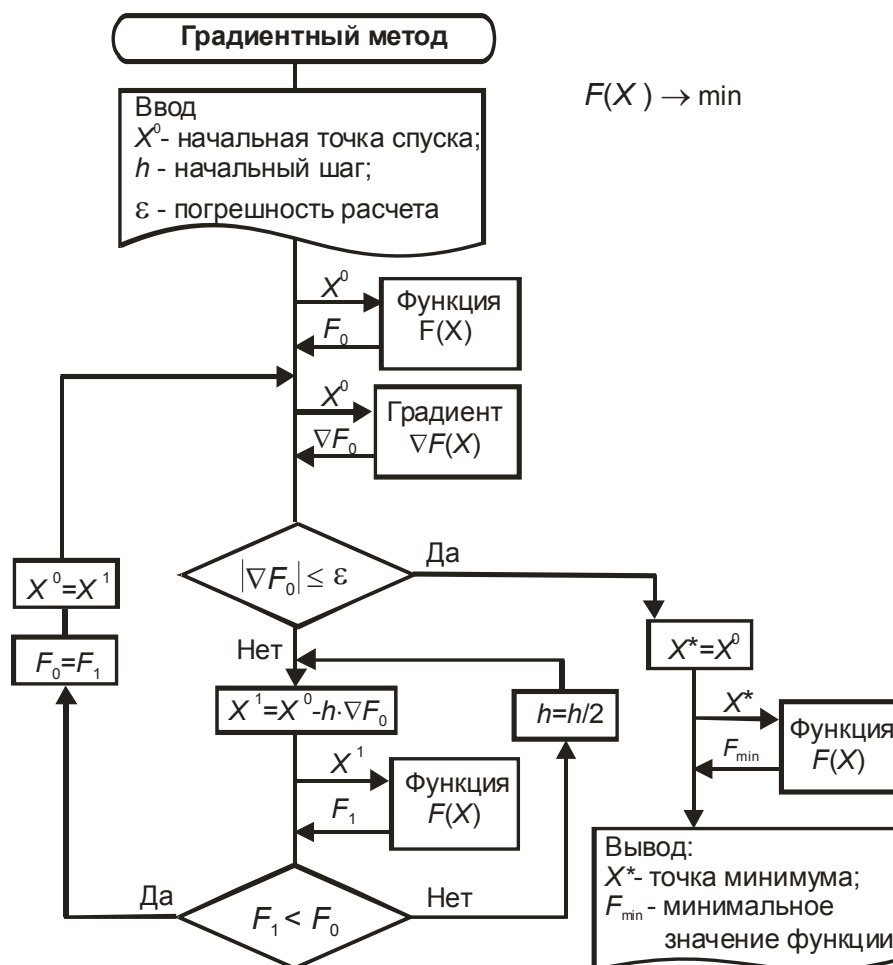


Рис. 3.13. Алгоритм градиентного метода в общем виде

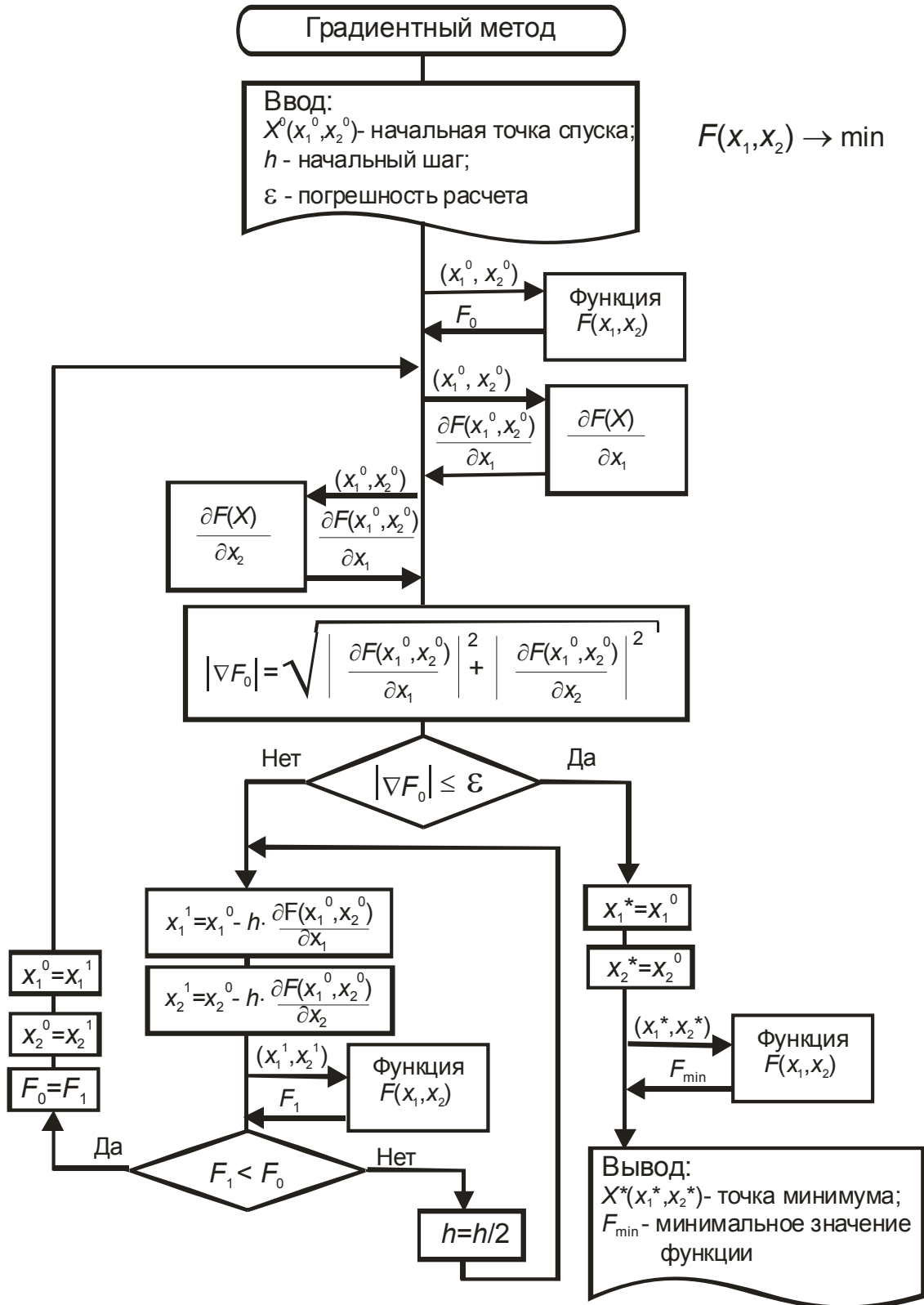


Рис. 3.14. Развернутый алгоритм градиентного метода на примере функции двух переменных

Пример 3.15. Для целевой функции $F = (x_1 - 2)^2 + 3 \cdot (x_2 - 1)^2$ найти минимальное значение градиентным методом, выбрав в качестве начальной точки спуска $X^0(0; 0)$. За критерий останова принять $\|\nabla F\| \leq \varepsilon$, где $\varepsilon = 0,25$. Начальный шаг спуска $h = 1$.

Решение

$$\text{Градиент } \nabla F = \left(\frac{\partial F}{\partial x_1}; \frac{\partial F}{\partial x_2} \right) = (2(x_1 - 2); 6(x_2 - 1)).$$

Итерация 1

Начальная точка спуска $X^0(0; 0)$.

Значение функции в начальной точке

$$F_0 = F(X^0) = F(0; 0) = (0 - 2)^2 + 3 \cdot (0 - 1)^2 = 7.$$

Значение градиента в начальной точке

$$\nabla F(X^0) = \nabla F(0; 0) = (2 \cdot (0 - 2); 6 \cdot (0 - 1)) = (-4; -6).$$

Модуль градиента

$$\|\nabla F(X^0)\| = \sqrt{(-4)^2 + (-6)^2} = \sqrt{52} > \varepsilon.$$

1.1. $h = 1$

Координаты новой точки, полученной при перемещении из X^0 в направлении антиградиента с шагом $h = 1$

$$x_1^1 = x_1^0 - h \cdot \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_1} = 0 - 1 \cdot (-4) = 4;$$

$$x_2^1 = x_2^0 - h \cdot \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_2} = 0 - 1 \cdot (-6) = 6;$$

$$X^1(4; 6).$$

Значение функции в точке $X^1(4; 6)$ $F_1 = 79$. Т. к. $F_1 = 79 > F_0 = 7$, уменьшаем шаг $h = h / 2 = 1 / 2$ и пересчитываем X^1 .

1.2. $h = 0,5$

$$x_1^1 = 0 - 0,5 \cdot (-4) = 2;$$

$$x_2^1 = 0 - 0,5 \cdot (-6) = 3.$$

Значение функции $F_1 = F(X^1) = F(2; 3) = 12 > (F_0 = 7)$. Снова уменьшаем шаг $h = 0,5 / 2 = 0,25$ и пересчитываем X^1 .

1.3. $h = 0,25$

$$x_1^1 = 0 - 0,25 \cdot (-4) = 1;$$

$$x_2^1 = 0 - 0,25 \cdot (-6) = 1,5.$$

$$F_1 = F(X^1) = F(1; 1,5) = 1,75 < (F_0 = 7).$$

Итерация 2

Переприсваиваем: $X^0 = X^1 = (1; 1,5)$; $F_0 = F_1 = 1,75$; $h = 0,25$.

$$\nabla F(X^0) = \nabla F(1; 1,5) = (2 \cdot (1 - 2); 6 \cdot (1,5 - 1)) = (-2; 3).$$

Модуль градиента

$$\|\nabla F(X^0)\| = \sqrt{(-2)^2 + 3^2} = 3,606 > \varepsilon.$$

Координаты новой точки X^1 :

$$x_1^1 = 1 - 0,25 \cdot (-2) = 1,5;$$

$$x_2^1 = 1,5 - 0,25 \cdot 3 = 0,75.$$

$$F_1 = F(X^1) = F(1,5; 0,75) = 0,438 < (F_0 = 1,75).$$

Итерация 3

Переприсваиваем:

$$X^0 = X^1 = (1,5; 0,75); \quad F_0 = F_1 = 0,438; \quad h = 0,25.$$

$$\nabla F(X^0) = \nabla F(1,5; 0,75) = (-1; -1,5).$$

Модуль градиента

$$\|\nabla F(X^0)\| = \sqrt{1,5^2 + 0,75^2} = 1,677 > \varepsilon.$$

Координаты новой точки X^1 :

$$x_1^1 = 1,5 - 0,25 \cdot (-1) = 1,75;$$

$$x_2^1 = 0,75 - 0,25 \cdot (-1,5) = 1,125.$$

$$F_1 = F(X^1) = F(1,75; 1,125) = 0,109 < (F_0 = 0,438).$$

Итерация 4

Переприсваиваем:

$$X^0 = X^1 = (1,75; 1,125); \quad F_0 = F_1 = 0,109; \quad h = 0,25.$$

$$\nabla F(X^0) = \nabla F(1,75; 1,125) = (-0,5; 0,75).$$

Модуль градиента

$$\|\nabla F(X^0)\| = \sqrt{(-0,5)^2 + 0,75^2} = 0,901 > \varepsilon.$$

Координаты новой точки X^1 :

$$x_1^1 = 1,75 - 0,25 \cdot (-0,5) = 1,875;$$

$$x_2^1 = 1,125 - 0,25 \cdot (0,75) = 0,938.$$

$$F_1 = F(X^1) = F(1,875; 0,938) = 0,0273 < (F_0 = 0,109).$$

Итерация 5

Переприсваиваем:

$$X^0 = X^1 = (1,875; 0,938); \quad F_0 = F_1 = 0,0273; \quad h = 0,25.$$

$$\nabla F(X^0) = \nabla F(1,875; 0,938) = (-0,25; -0,375).$$

Модуль градиента

$$\|\nabla F(X^0)\| = \sqrt{(-0,25)^2 + (-0,375)^2} = 0,451 > \varepsilon.$$

Координаты новой точки X^1 :

$$x_1^1 = 1,875 - 0,25 \cdot (-0,25) = 1,938;$$

$$x_2^1 = 0,938 - 0,25 \cdot (-0,375) = 1,0131.$$

$$F_1 = F(X^1) = F(1,938; 1,031) = 0,00384 < (F_0 = 0,0273).$$

Итерация 6

Переприсваиваем:

$$X^0 = X^1 = (1,938; 1,031); \quad F_0 = F_1 = 0,00384; \quad h = 0,25.$$

$$\nabla F(X^0) = \nabla F(1,938; 1,031) = (-0,124; 0,186).$$

Модуль градиента

$$\|\nabla F(X^0)\| = \sqrt{(-0,124)^2 + 0,186^2} = 0,224 < \varepsilon.$$

Расчет прекращаем. Оптимальное решение

$$x_1^* = 1,938 - 0,25 \cdot (-0,124) = 1,969;$$

$$x_2^1 = 1,031 - 0,25 \cdot 0,186 = 0,969.$$

$$X^* = (1,969; 0,969).$$

Соответствующее ему минимальное значение целевой функции

$$F_{\min} = 0,00384.$$

3.6.2. Метод наискорейшего спуска

На каждом этапе спуска определяют вектор-градиент $\nabla F(X)$ функции $F(X)$ и двигаются в направлении антиградиента до точки, в которой целевая функция принимает минимальное значение на данном направлении. В найденной точке вновь определяется градиент и движение совершается по прямой, соответствующей направлению нового антиградиента до точки минимума на новом направлении.

Таким образом, на каждом шаге метода наискорейшего спуска из некоторой точки X^k решается *задача одномерной минимизации* целевой функции по h :

$$\varphi(h) = F(X^k - h \cdot \nabla F(X^k)) \rightarrow \min$$

при изменении h , в результате чего находится оптимальный шаг h^* на данном направлении.

При отклонении h от оптимального h^* в одну и другую сторону (например, на величину Δh) значение целевой функции на направлении вектора-антиградиента $-\nabla F(X^k)$ увеличивается:

$$F(X^j) > F(X^k - h^* \cdot \nabla F(X^k)),$$

где

$$X^j = X^k - (h^* \pm \Delta h) \cdot \nabla F(X^k).$$

Графическая иллюстрация метода наискорейшего спуска приведена на рис. 3.15.

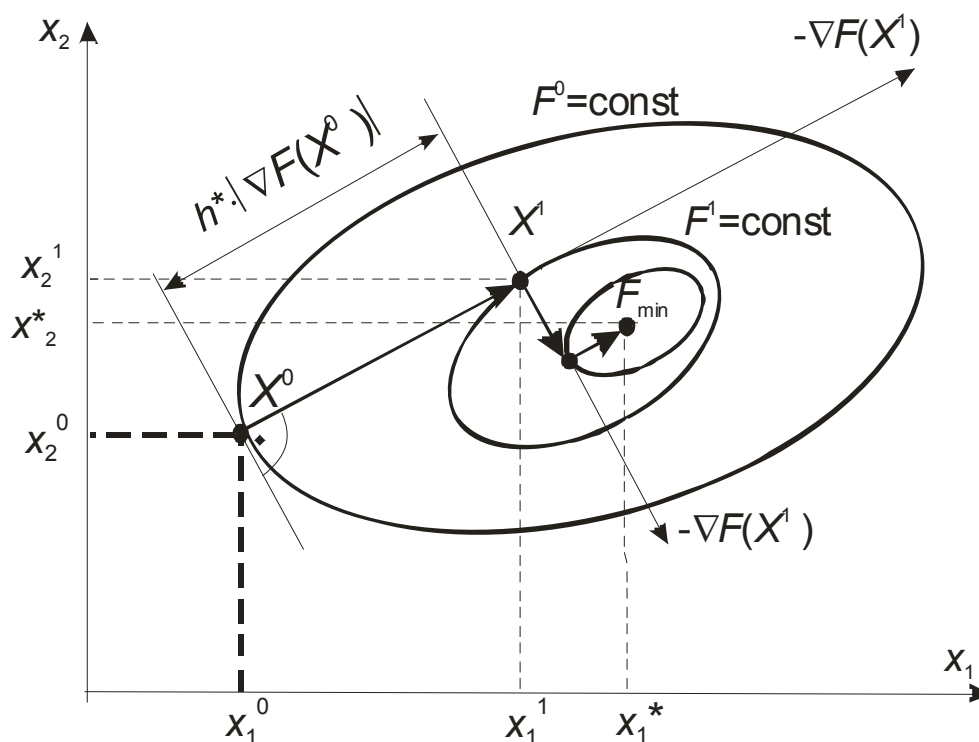


Рис. 3.15. Графическая иллюстрация метода наискорейшего спуска

Общий алгоритм метода представлен на рис. 3.16.

Способы определения оптимального шага:

- 1) графический (рис. 3.15);
- 2) путем решения задачи одномерной минимизации на каждом направлении спуска:
 - а) аналитически;
 - б) численно;
- 3) расчетом скалярного произведения векторов-градиентов в соседних точках спуска X^k и X^{k+1} (см. рис. 3.17).

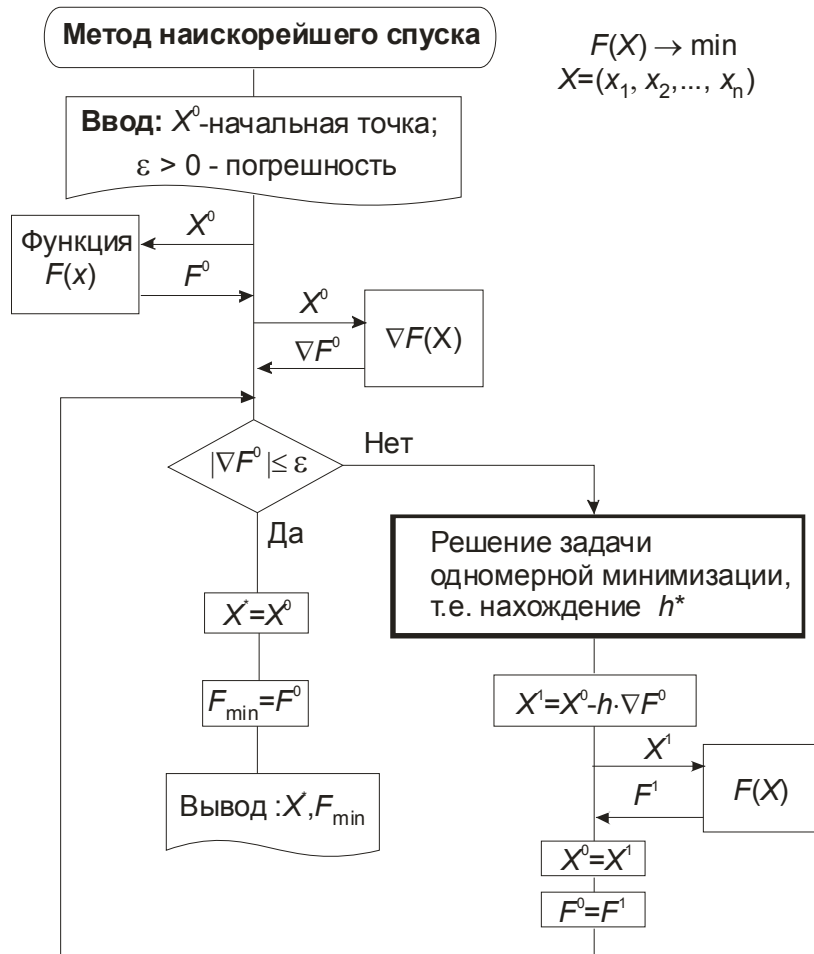


Рис. 3.16. Общий алгоритм метода наискорейшего спуска

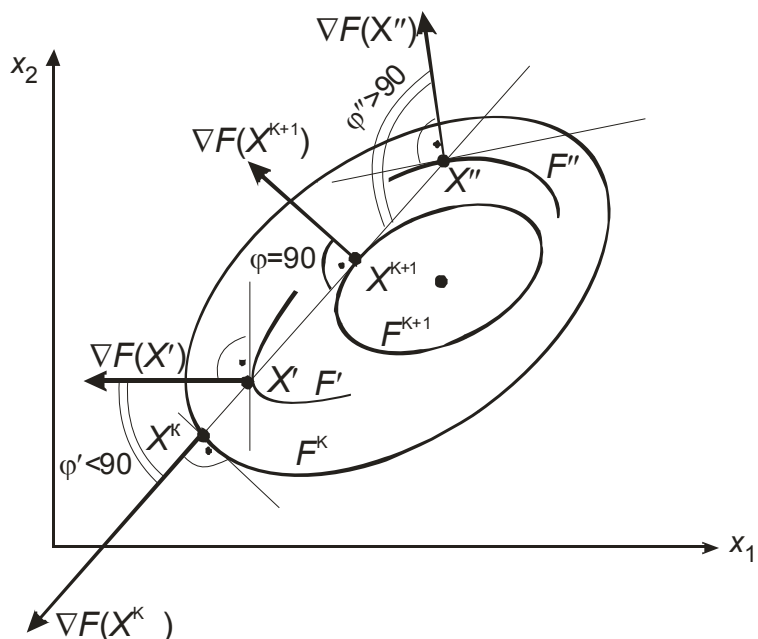


Рис. 3.17. Графическая иллюстрация выбора оптимального шага при спуске из точки X^k методом наискорейшего спуска

Расчет оптимального шага спуска

Наиболее просто определять оптимальный на выбранном направлении шаг h^* вычислением скалярного произведения векторов-градиентов в соседних точках спуска X^k и X^{k+1} :

$$S = (\nabla F(X^k), \nabla F(X^{k+1})).$$

$$X' : F^k > F' > F^{k+1}; \quad S = (\nabla F(X^k), \nabla F(X')) > 0 \quad (\varphi < 90^\circ) \Rightarrow \text{надо } h \uparrow;$$

$$X'' : F^k > F'' > F^{k+1}; \quad S = (\nabla F(X^k), \nabla F(X'')) < 0 \quad (\varphi > 90^\circ) \Rightarrow \text{надо } h \downarrow;$$

$$X^{k+1} : \quad S = (\nabla F(X^k), \nabla F(X^{k+1})) = 0 \quad (\varphi = 90^\circ) \Rightarrow h = h^*.$$

Для h^* выполняется $|S| = 0$. При численном определении h^* необходимо выполнить условие $|S| \leq \varepsilon$, где ε – наперед заданная погрешность расчета.

Расчет S проводится по известным в курсе линейной алгебры формулам:

$$S = \left(\frac{\partial F(X^k)}{\partial x_1} \cdot \frac{\partial F(X^{k+1})}{\partial x_1} + \frac{\partial F(X^k)}{\partial x_2} \cdot \frac{\partial F(X^{k+1})}{\partial x_2} + \dots + \frac{\partial F(X^k)}{\partial x_n} \cdot \frac{\partial F(X^{k+1})}{\partial x_n} \right)$$

либо

$$S = |\nabla F(X^k)| \cdot |\nabla F(X^{k+1})| \cdot \cos \varphi,$$

где

$$|\nabla F(X^k)| = \sqrt{\left(\frac{\partial F(X^k)}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial F(X^k)}{\partial x_2}\right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial F(X^k)}{\partial x_n}\right)^2};$$

$$|\nabla F(X^{k+1})| = \sqrt{\left(\frac{\partial F(X^{k+1})}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial F(X^{k+1})}{\partial x_2}\right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial F(X^{k+1})}{\partial x_n}\right)^2};$$

φ – угол между векторами $\nabla F(X^k)$ и $\nabla F(X^{k+1})$ (рис. 3.17).

Блок-схема алгоритма определения h^* на основе расчета скалярного произведения векторов-градиентов $\nabla F(X^k)$ и $\nabla F(X^{k+1})$ приведена на рис. 3.18.

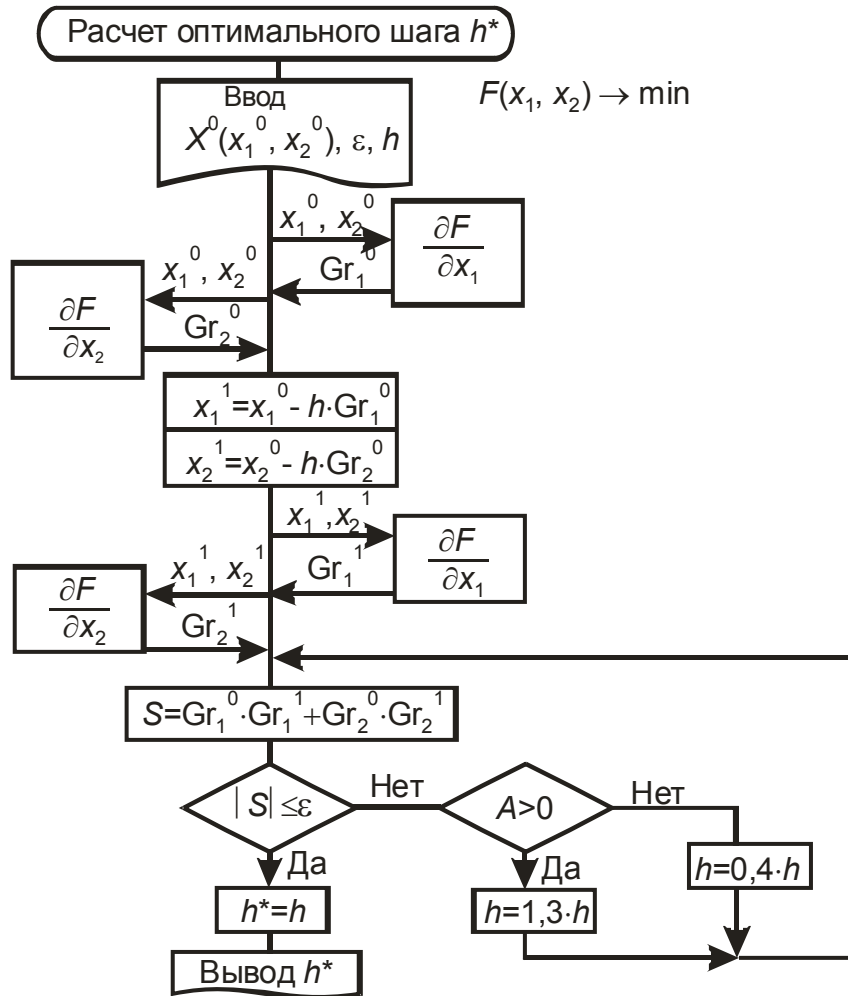


Рис. 3.18. Расчет оптимального шага (метод наискорейшего спуска)

Пример 3.13. Для функции $F = (x_1 - 2)^2 + 3 \cdot (x_2 - 1)^2$ аналитическим путем найти оптимальные значения h^* на двух шагах метода наискорейшего спуска из точки $X^0(0; 0)$.

Решение

Градиент $\nabla F(X) = (2 \cdot (x_1 - 2); 6 \cdot (x_2 - 1))$.

Итерация 1

$$F(X^0) = F(0; 0) = 7; \quad \nabla F(X^0) = (-4; -6);$$

$$x_1^1 = x_1^0 - h \cdot \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_1} = 0 - h \cdot (-4) = 4h;$$

$$x_2^1 = x_2^0 - h \cdot \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_2} = 0 - h \cdot (-6) = 6h.$$

Ищем минимум функции

$$\begin{aligned}\varphi(h) &= F(x_1^1; x_2^1) = F(4 \cdot h; 6 \cdot h) = \\ &= (4 \cdot h - 2)^2 + 3 \cdot (6 \cdot h - 1)^2 = 124 \cdot h^2 - 52 \cdot h + 7\end{aligned}$$

по h классическим методом минимизации.

Для этого определяем производную $\varphi'(x)$ и приравниваем ее нулю:

$$\varphi'(x) = 248 \cdot h - 52 = 0; \quad h^* = 0,2097.$$

Положительный знак второй производной $\varphi''(x) = 248 > 0$ свидетельствует о наличии минимума функции $\varphi(h)$ при $h^* = 0,2097$.

Координаты точки, в которую переместились из $X^0(0;0)$ в результате наискорейшего спуска с оптимальным шагом $h^* = 0,2097$:

$$x_1^1 = 4 \cdot h^* = 4 \cdot 0,2097 = 0,8387;$$

$$x_2^1 = 6 \cdot h^* = 6 \cdot 0,2097 = 1,2582.$$

$$X^1 = (0,8387, 1,2582).$$

Значение функции $F(X^1) = 1,5486$.

Итерация 2

$$X^1 = (0,8387; 1,2582);$$

$$F(X^1) = 1,5486;$$

$$\nabla F(X^1) = (-2,323; 1,549);$$

$$x_1^2 = 0,8387 + 2,323 \cdot h;$$

$$x_2^2 = 1,258 - 1,549 \cdot h.$$

$$\begin{aligned}\varphi(h) &= F(x_1^2; x_2^2) = (0,8387 + 2,323 \cdot h - 2)^2 + \\ &+ 3 \cdot (1,258 - 1,549 \cdot h - 1)^2 = 12,59 \cdot h^2 - 7,792 \cdot h + 1,548;\end{aligned}$$

$$\varphi'(x) = 25,19 \cdot h - 7,792 = 0; \quad h^* = 0,3094.$$

Положительный знак второй производной $\varphi''(x) = 25,19 > 0$ свидетельствует о наличии минимума функции $\varphi(h)$ при $h^* = 0,3094$.

В результате наискорейшего спуска из точки $X^1 = (0,8387; 1,258)$ оптимальным шагом $h^* = 0,3094$ переместились в точку $X^2 = (1,557; 0,7789)$.

Значение функции $F(X^2) = 0,3429$.

Пример 3.14. Для функции из примера 3.13 на двух итерациях метода наискорейшего спуска из точки $X^0(0;0)$ найти оптимальный шаг h^* вычислением скалярного произведения векторов-градиентов

в соседних точках спуска. Начальный шаг спуска принять $h=1$. Погрешность расчета скалярного произведения $\varepsilon = 0,1$.

Решение

Градиент $\nabla F(X) = (2(x_1 - 2); 6(x_2 - 1))$.

Итерация 1. Исходная точка $X^0(0; 0)$.

Градиент в точке $X^0(0; 0)$ равен

$$\nabla F(X^0) = \nabla F(0; 0) = (-4; -6).$$

Итерация 1.1. $h=1$:

а) координаты точки X^1 , в которую переместимся из X^0 , двигаясь вдоль антиградиента $(-\nabla F(X^0))$ с шагом $h=1$:

$$x_1^1 = x_1^0 - h \cdot \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_1} = 0 - 1 \cdot (-4) = 4;$$

$$x_2^1 = x_2^0 - h \cdot \frac{\partial F(X^0)}{\partial x_2} = 0 - 1 \cdot (-6) = 6;$$

б) градиент в точке $X^1 = (4; 6)$

$$\nabla F(X^1) = \nabla F(4; 6) = (4; 30);$$

в) скалярное произведение векторов $\nabla F(X^0)$ и $\nabla F(X^1)$

$$S = (\nabla F(X^0); \nabla F(X^1)) = ((-4) \cdot 4 + (-6) \cdot 30) = -196 < 0;$$

$$|S| = 196 > \varepsilon.$$

Так как $S < 0$, уменьшаем шаг $h = 0,4 \cdot 1 = 0,4$ и повторяем пункты а), б), в) с новым значением шага.

Итерация 1.2. $h = 0,4$:

а) координаты точки X^1 , в которую переместимся из X^0 , двигаясь вдоль антиградиента $(-\nabla F(X^0))$ с шагом $h = 0,4$:

$$x_1^1 = 0 - 0,4 \cdot (-4) = 1,6;$$

$$x_2^1 = 0 - 0,4 \cdot (-6) = 2,4.$$

б) градиент в точке $X^1 = (1,6; 2,4)$

$$\nabla F(X^1) = \nabla F(1,6, 2,4) = (-0,8; 8,4);$$

в) скалярное произведение векторов $\nabla F(X^0)$ и $\nabla F(X^1)$

$$S = (\nabla F(X^0), \nabla F(X^1)) = ((-4) \cdot (-0,8) + (-6) \cdot 8,4) = -47,2 < 0.$$

Так как $S > \varepsilon$ и $S < 0$, уменьшаем шаг $h = 0,4 \cdot 0 = 0,16$ и повторяем пункты а), б), в) с новым значением h . Дальнейший расчет сводим в табл. 3.1.

Таблица 3.1

№ итер.	h	X^1	$\nabla F(X^1)$	S	$ S $
1.3	$h=0,16$	(0,640; 0,960)	(-2,72; -0,24)	$12,3 > 0$	$> \varepsilon$
1.4	$h=1,3 \cdot 0,16=0,208$	(0,832; 1,248)	(-2,336; 1,488)	$0,416 > 0$	$> \varepsilon$
1.5	$h=1,3 \cdot 0,208=0,270$	(1,08; 1,62)	(-1,84; 3,72)	$-15,0 < 0$	$> \varepsilon$
1.6	$h=0,4 \cdot 0,27=0,108$	(0,432; 0,648)	(-3,136; -2,112)	$25,2 > 0$	$> \varepsilon$
1.7	$h=1,3 \cdot 0,108=0,1404$	(0,562; 0,842)	(-2,877; -0,946)	$17,2 > 0$	$> \varepsilon$
1.8	$h=1,3 \cdot 0,1404=0,1825$	(0,730; 1,095)	(-2,54; 0,57)	$6,74 > 0$	$> \varepsilon$
1.9	$h=1,3 \cdot 1,1825=0,2373$	(0,949; 1,424)	(-2,102; 2,543)	$-6,85 < 0$	$> \varepsilon$
1.10	$h=0,4 \cdot 0,2373=0,0949$	(0,380; 0,569)	(-3,241; -2,584)	$28,5 > 0$	$> \varepsilon$
1.11	$h=1,3 \cdot 0,0949=0,1234$	(0,494; 0,740)	(-3,013; -1,558)	$21,4 > 0$	$> \varepsilon$
1.12	$h=1,3 \cdot 0,1234=0,1604$	(0,642; 0,962)	(-2,717; -0,226)	$12,2 > 0$	$> \varepsilon$
1.13	$h=1,3 \cdot 0,1604=0,2085$	(0,834; 1,251)	(-2,332; 1,506)	$0,295 > 0$	$> \varepsilon$
1.14	$h=0,2097$ (Пример 1)	(0,839; 1,258)	(-2,322; 1,549)	$0,0072$	$< \varepsilon$

Итерация 2. Исходная точка $X^1(0,839; 1,258)$.

Градиент в точке X^1

$$\nabla F(X^1) = \nabla F(0,839; 1,258) = (-2,322; 1,549).$$

Итерация 2.1. $h = 0,2097$:

а) координаты точки X^2 , в которую переместимся из X^1 , двигаясь вдоль антиградиента $(-\nabla F(X^1))$ с шагом $h = 0,2097$:

$$x_1^2 = x_1^1 - h \cdot \frac{\partial F(X^1)}{\partial x_1} = 0,839 - 0,2097 \cdot (-2,322) = 1,326;$$

$$x_2^2 = x_2^1 - h \cdot \frac{\partial F(X^1)}{\partial x_2} = 1,258 - 0,2097 \cdot 1,549 = 0,933;$$

б) градиент в точке $X^1(1,326; 0,933)$

$$\nabla F(X^2) = \nabla F(1,326; 0,933) = (-1,348; -0,402);$$

в) скалярное произведение векторов $\nabla F(X^1)$ и $\nabla F(X^2)$

$$S = (\nabla F(X^1), \nabla F(X^2)) = ((-2,322) \cdot (-1,348) + 1,549 \cdot (-0,402)) = 2,507 > 0;$$

$$|S| = 2,507 > \varepsilon.$$

Так как $S > 0$, увеличиваем шаг $h = 1,3 \cdot 0,2097 = 0,2726$ и повторяем пункты а), б), в).

Итерация 2.2. $h = 0,2726$:

а) координаты точки X^2 , в которую переместимся из X^1 , двигаясь вдоль антиградиента $(-\nabla F(X^1))$ с шагом $h = 0,2726$:

$$x_1^2 = 0,839 - 0,2726 \cdot (-2,322) = 1,472;$$

$$x_2^2 = 1,258 - 0,2726 \cdot 1,549 = 0,8357;$$

б) градиент в точке $X^2(1,472; 0,8357)$

$$\nabla F(X^2) = \nabla F(1,472; 0,8357) = (-1,056; 0,9858);$$

в) скалярное произведение векторов $\nabla F(X^1)$ и $\nabla F(X^2)$

$$S = (\nabla F(X^1), \nabla F(X^2)) = ((-2,322) \cdot (-1,056) + 1,549 \cdot (-0,9858)) = 0,9250.$$

Т. к. $S > 0$ и $|S| > \varepsilon$, снова увеличиваем шаг $h = 1,3 \cdot 0,2726 = 0,3544$ и повторяем пункты а), б), в).

Дальнейший расчет сводим в табл. 3.2.

Таблица 3.2

№ итер.	h	X^2	$\nabla F(X^2)$	S	$ S $
2.3	$h=0,3544$	(1,662; 0,709)	(-0,676; -1,746)	-1,13 < 0	> ε
2.4	$h=0,4 \cdot 0,3544=0,1418$	(1,168; 1,038)	(-1,664; 0,228)	4,22 > 0	> ε
2.5	$h=1,3 \cdot 0,1418=0,1843$	(1,267; 0,973)	(-1,466; -0,162)	3,15 > 0	> ε
2.6	$h=1,3 \cdot 0,1843=0,2396$	(1,395; 0,887)	(-1,21; -0,678)	1,76 > 0	> ε
2.7	$h=1,3 \cdot 0,2396=0,3115$	(1,562; 0,775)	(-0,876; -1,35)	-0,06	< ε
2.8	$h=0,3094$ (Пример 1)	(1,557; 0,779)	(-0,886; -1,326)	0,003	< ε

3.6.3. Метод координатного спуска

Суть метода координатного спуска заключается в минимизации многопараметрической функции $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ сначала по одному параметру x_1 , затем по второму x_2 и т. д. до последнего параметра x_n .

На *первом* этапе решения задачи *фиксируются значения всех параметров, кроме первого*, и определяется оптимальное значение первого параметра, т. е. решается задача одномерной минимизации

$$F = F(x_1(\text{var}), x_{2f}^0, \dots, x_{nf}^0) \rightarrow \min$$

при изменении первого параметра от его минимального до максимального значения. Найденное оптимальное значение первого параметра обозначим $x_1^{\text{опт*}}$.

Далее ищется минимум функции $F = F(x_{1f}^{\text{опт*}}, x_2(\text{var}), x_{3f}^0, \dots, x_{nf}^0)$ при изменении только второго параметра x_2 . При этом первый параметр фиксируется при найденном выше оптимальном значении $x_{1f}^{\text{опт*}} = x_1^{\text{опт*}}$.

Цикл оптимизации заканчивается после определения минимума функции $F = F(x_{1f}^{\text{опт}^*}, x_{2f}^{\text{опт}^*}, \dots, x_{(n-1)f}^{\text{опт}^*}, \dots, x_n(\text{var}))$ при изменении параметра x_n , что соответствует установлению его оптимального значения $x_n^{\text{опт}^*}$.

Обычно один цикл поиска не позволяет найти минимальное значение функции $F(X)$. Поэтому необходимо повторение указанного цикла.

В процессе выполнения второго цикла итераций координатного спуска определяются оптимальные значения оптимизируемых параметров во втором приближении: опт $x_1^{\text{опт}^{**}}, x_2^{\text{опт}^{**}}, \dots, x_n^{\text{опт}^{**}}$ и т. д.

Критерием останова алгоритма является условие отличия «оптимальных» значений одноименных переменных на двух последних итерациях на величину наперед заданной погрешности

$$\left| x_i^{\text{опт}^k} - x_i^{\text{опт}^{(k-1)}} \right| \leq \varepsilon_i,$$

где i изменяется от 1 до n ;

k – номер итерации.

Алгоритм координатного спуска сводит многомерную задачу к последовательности одномерных задач, которые решаются методами одномерной минимизации.

На рис. 3.19 показана графическая иллюстрация метода координатного спуска на примере функции двух переменных $F(x_1, x_2)$.

Из рисунка видно, что количество шагов на пути поиска минимума методом координатного спуска может в значительной степени зависеть от выбора начальной точки и координаты, которую фиксируем первой.

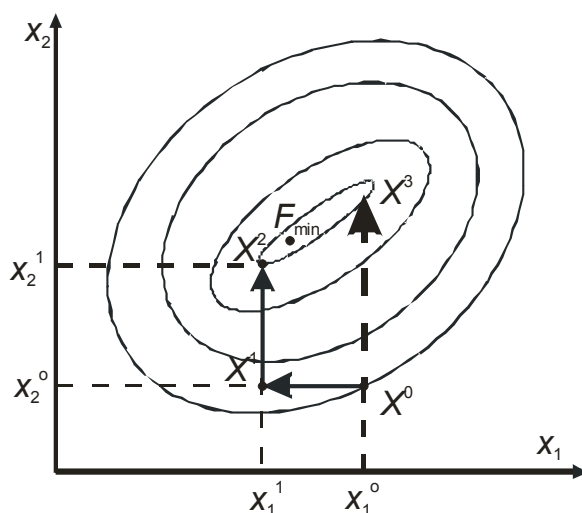


Рис. 3.19. Графическая иллюстрация метода координатного спуска

На рис. 3.20 и 3.21 приведены алгоритмы поиска минимума функции двух переменных методом координатного спуска.

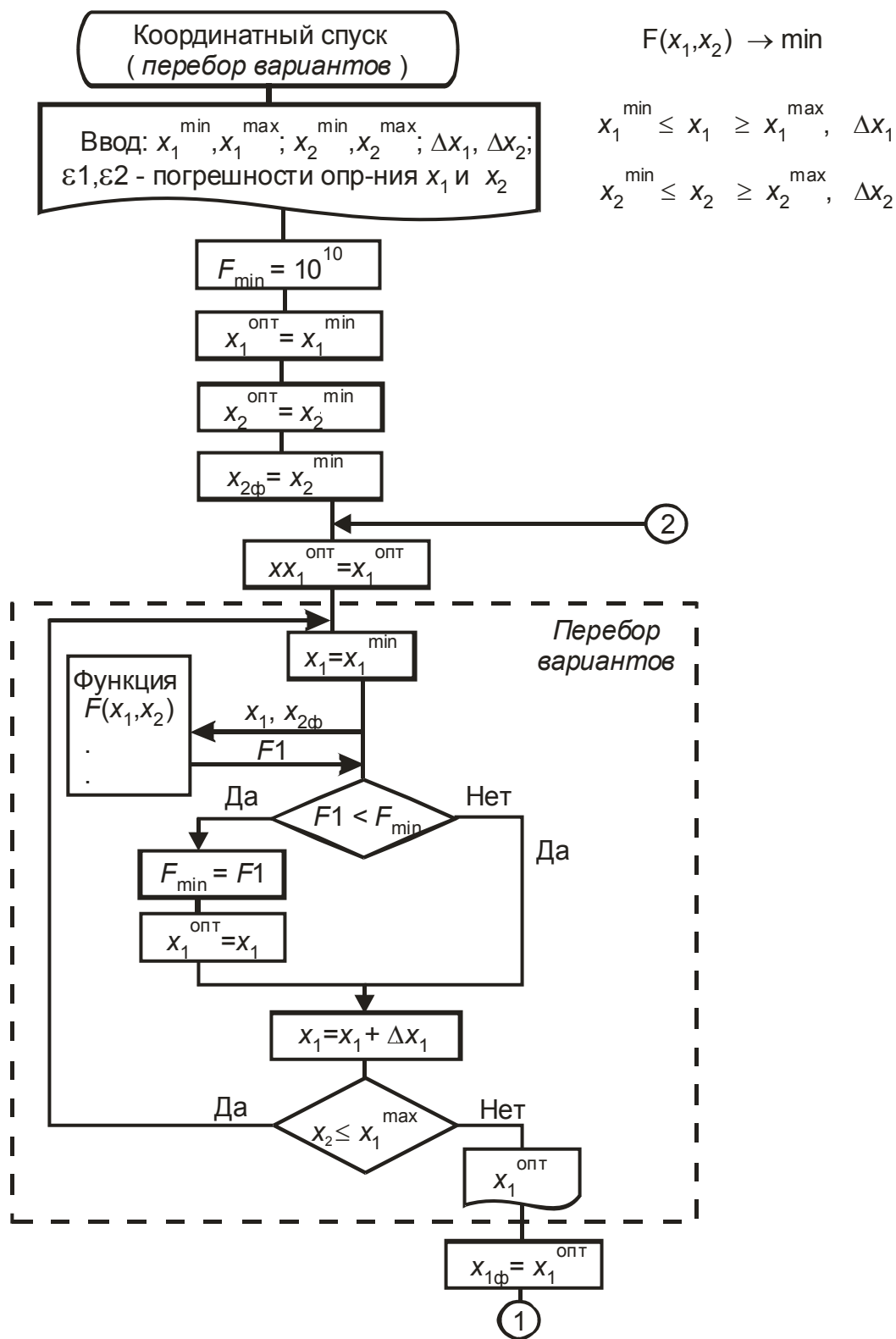


Рис. 3.21. Алгоритм метода координатного спуска (одномерная минимизация – перебор) (начало)

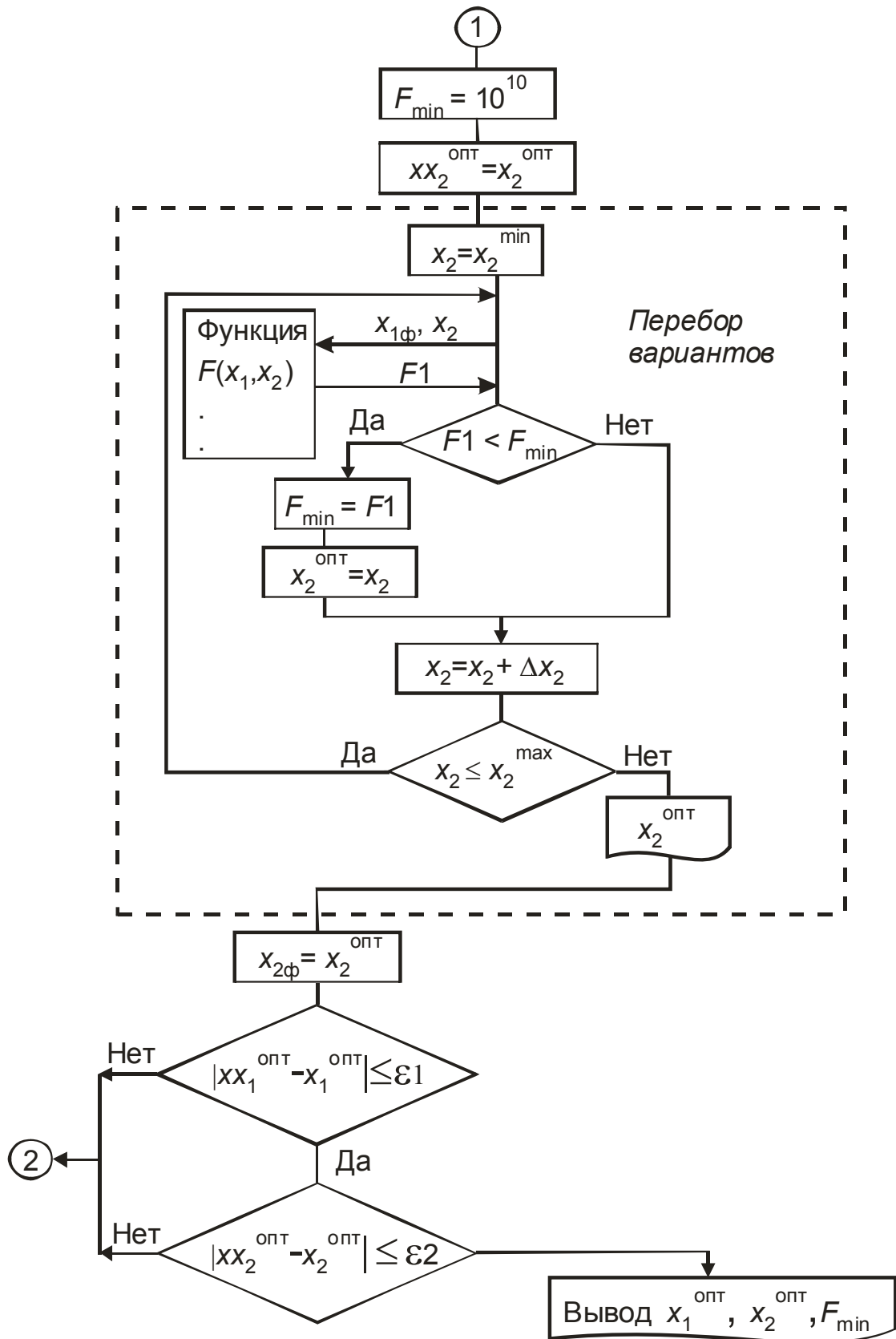


Рис. 3.21. Алгоритм метода координатного спуска (окончание)

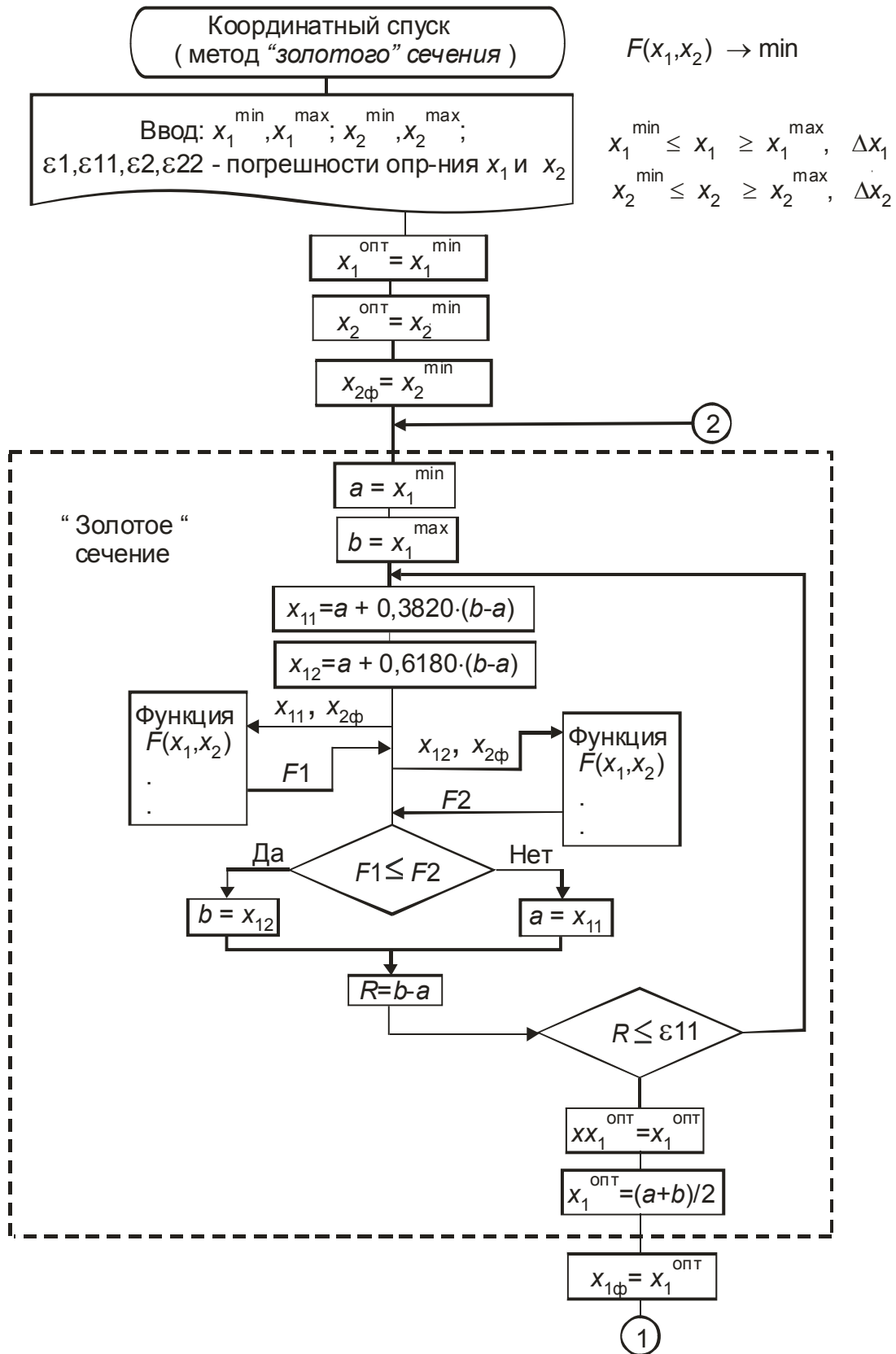


Рис. 3.21. Алгоритм метода координатного спуска (одномерная минимизация – метод «золотого» сечения) (начало)

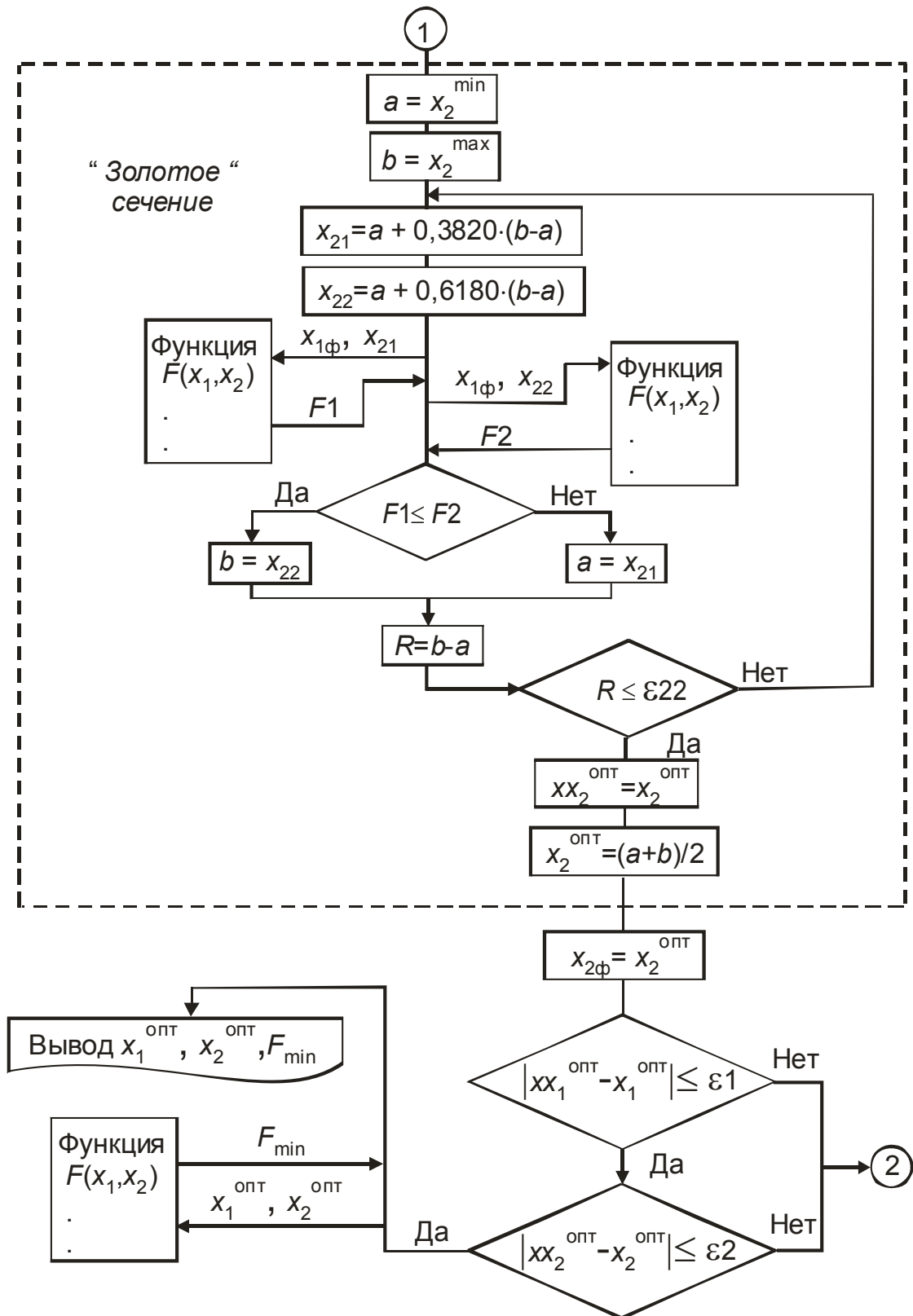


Рис. 3.21. Алгоритм метода координатного спуска (окончание)