

Міністерство освіти і науки України
ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «ОДЕСЬКА ПОЛІТЕХНІКА»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до лабораторних робіт по курсу
«ОПТИМІЗАЦІЯ ОБ'ЄКТІВ ХІМІЧНИХ ТЕХНОЛОГІЙ»
для здобувачів вищої освіти за спеціальністю
161 – Хімічні технології та інженерія

Затверджено на засіданні кафедри ТНРЕ
Протокол № 11, від 24.05.2021 р.

Одеса: ОП, 2021

Методичні вказівки до лабораторних робіт по курсу «Оптимізація об'єктів хімічних технологій» для здобувачів вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія / Уклад. В.В. Брем, Ю.М. Єпутатов, О.В. Макаров, О.А. Борщ ; Держ. ун-т "Одес. політехніка". – Одеса, 2021. – 54 с.

Укладачі: Брем В.В., к.х.н., доцент,
Єпутатов Ю.М., к.х.н., доцент,
Макаров О.В., ст. викладач,
Борщ О.А., ст. викладач

В.В. Брем, Ю.М. Єпутатов, О.В. Макаров, О.А. Борщ. 161 – Хімічні технології та інженерія. Методичні вказівки до лабораторних робіт по курсу «Оптимізація об'єктів хімічних технологій». В методичних вказівках наведені короткі теоретичні відомості за темами робіт, пояснення роботи та інтерфейсу прикладних програм, приклади програмних модулів, а також надано рекомендації щодо ходу виконання лабораторних за окремими індивідуальними завданнями. Методичні вказівки призначено для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія.

ЗМІСТ

1 Лабораторна робота №1. Дослідження стійкості реактора.....	4
2 Лабораторна робота №2. Рішення задач оптимізації з використанням аналітичних методів	18
3 Лабораторна робота №3. Методи одномірного пошуку для вирішення завдань оптимізації.....	25
4 Лабораторна робота №4. Безградієнтні методи розв'язання задач оптимізації	31
5 Лабораторна робота №5. Симплексний метод розв'язування задач оптимізації	38
6 Лабораторна робота №6. Градієнтні методи рішення задач оптимізації	45
7 Лабораторна робота №7. Використання методів лінійного програмування для розв'язання оптимізаційних задач.....	51
Література, рекомендована при підготовці до лабораторних робіт.....	54

1 Лабораторна робота №1. Дослідження стійкості реактора

МЕТА РОБОТИ:

- при заданих значеннях параметрів процесу провести аналіз стійкості реактора ідеального змішування;
- визначити число і характер стаціонарних режимів;
- дослідити статичні характеристики по каналам: температура – температура входу, температура – параметр тепловідведення, температура – адіабатичний розігрів;
- визначити умови існування єдиного низько- або високотемпературного режиму.

1 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Не будь-який стан хімічної системи, розрахований за математичною моделлю, реалізується в практичних умовах. Причиною цього є те, що жоден реальний реактор не працює в строго стаціонарному режимі. Флуктуації складу вихідної суміші, коливання зовнішніх факторів та інші малі випадкові відхилення безперервно виводять процес зі стаціонарного стану. Очевидно, що процес може протікати нормально тільки в тому випадку, якщо малі зовнішні флуктуації призводять до малих відхилень режиму процесу від стаціонарного; в іншому випадку будь-слабке неконтрольоване відхилення призведе до віддалення, що зростає, від заданого стаціонарного стану, тобто до зриву процесу.

Якщо система, виведена будь-яким малим зовнішнім фактором зі стаціонарного стану, після припинення його дії повертається в первісний стан, то даний стаціонарний стан називається стійким.

На практиці реалізуються лише стійкі стани. Дослідження питань стійкості буде розглянуто на прикладі реактора ідеального змішування (РІЗ) – найпростішої з систем, яка досліджується в теорії хімічних реакторів. У режимі ідеального змішування значення всіх змінних однакові по всьому об'єму реактора. Відповідно до цього стаціонарний режим реактора такого типу описується алгебраїчними, а нестаціонарний – звичайними диференціальними рівняннями.

При протіканні екзотермічної реакції в РІЗ можливе існування декількох стаціонарних режимів, одні з яких є стійкими, інші – нестійкими. Число стаціонарних режимів та їх характер визначається сукупністю значень параметрів процесу.

2 МЕТОДИКА ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Аналіз стійкості реактора ідеального змішування зручно проводити з використанням діаграми інтенсивності тепловиділення і тепловідведення. Для її побудови і подальшого аналізу необхідно виконати наступні етапи:

- 1) привести наявні параметри до безрозмірного вигляду;

2) виконати необхідні розрахунки, побудувати діаграму «теповиділення – тепловідведення» для номінального режиму і визначити число і характер стаціонарних режимів;

3) побудувати лінії тепловиділення і тепловідведення при варіюванні наступних параметрів: температури входу, параметра тепловідведення і адіабатичного розігріву, і визначити статичні характеристики реактора ідеального змішування по каналах;

4) визначити умови існування єдиного низько- або високотемпературного режиму;

5) знайти умови, при яких проміжний режим може бути стійким і оцінити реалістичність цих умов.

2.1. Приведення моделі РІЗ до безрозмірного вигляду

Особливістю моделі реактора ідеального змішування (РІЗ) є те, що концентрація і температура однакові по всьому об'єму реактора і дорівнюють відповідним значенням на виході ($C = C_{\text{вих}}$, $T = T_{\text{вих}}$).

Для спрощення приймемо, що $Q_{\text{вх}} = Q_{\text{вих}} = Q$. Тоді модель РІЗ набуде вигляду:

матеріальний баланс

$$Q \cdot (C_{\text{вх}} - C_{\text{вих}}) - V \cdot W = V \frac{\partial C}{\partial t} \quad (1.1)$$

енергетичний баланс

$$Q \cdot C_p \cdot \rho \cdot (T_{\text{вх}} - T_{\text{вих}}) + V \cdot W \cdot (-\Delta H) - \alpha \cdot S \cdot (T - T_x) = V \cdot C_a \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.2)$$

рівняння кінетики (для простої реакції)

$$W = k \cdot f(C), \quad (1.3)$$

де V – об'єм реактора; S – поверхня теплообміну; W – швидкість хімічного перетворення; T_x – температура холодоагенту; Q – об'ємна витрата; C_p – теплоємність реакційної суміші; ρ – густина реакційної суміші; α – коефіцієнт теплопередачі; C_a – усереднена об'ємна теплоємність; k – константа швидкості реакції, що визначається за рівнянням Арреніуса $k = K_0 \exp(-E/(RT))$; K_0 – предекспонента; E – енергія активації; R – газова постійна; індекси: вх. – вхід, вих. – вихід.

Поведінка об'єкта визначається сукупністю значень параметрів, що входять в математичний опис. Проведемо класифікацію параметрів моделі РІЗ.

Вхідні параметри:

– технологічні – $T_{\text{вх}}$, $C_{\text{вх}}$, $Q_{\text{вх}}$, T_x ;

– конструктивні – V , S ;

– теплофізичні – α , C_p , ρ , C_a ;

– параметри, що характеризують реакцію – $(-\Delta H)$, E , K_0 .

Вихідні параметри:

– технологічні: $T_{\text{вих}}$, C

– час: t .

Для знаходження всього трьох вихідних параметрів необхідно задати 13 вхідних параметрів. Для спрощення дослідження моделі і скорочення кількості параметрів застосовують запис рівнянь моделі в безрозмірній формі. Вводяться ряд безрозмірних параметрів (табл. 1.1).

Таблиця 1.1 – Переведення розмірних параметрів в безрозмірні

Безрозмірні	Розмірні	Прироцнення
Ступінь перетворення $X=(C_0-C)/C_0$	Концентрація $C=(1-X)C_0$	$dC=-C_0dX$
Час $t^*=t/\tau$	Час $t=\tau \cdot t^*$	$dt=\tau \cdot dt^*$
Температура $\theta=(T-T_0)/(bT_0)$	Температура $T=T_0(1+b\theta)$	$dT=bT_0d\theta$
Швидкість реакції $\tilde{W}=W \cdot \tau / C_0$	Швидкість реакції $W=\tilde{W} \cdot C_0 / \tau$	
Константа швидкості реакції $\tilde{K}=K \cdot \tau / C_0^{n-1}$	Константа швидкості реакції $K=\tilde{K} \cdot C_0^{-(n-1)} / \tau$	

Після підстановки безрозмірних параметрів і перетворень отримуємо модель РІЗ в безрозмірному вигляді:

матеріальний баланс

$$\partial X / \partial t^* = X_{ex} - X + \tilde{K} f(X) \quad (1.4)$$

енергетичний баланс

$$\beta \partial \theta / \partial t^* = \theta_{ex} - \theta + \Delta \theta_{ad} \tilde{K} f(X) - \gamma (\theta - \theta_x) \quad (1.5)$$

рівняння кінетики

$$\tilde{W} = \tilde{K} f(X), \quad (1.6)$$

де $\beta = C_a / (C_p \rho)$ – відношення усередненої теплоємності апарату до теплоємності реакційної суміші ("безрозмірна теплоємність");

$\Delta T_{ad} = (-\Delta H) C_0 / (C_p \rho)$ – адіабатичний розігрів, тобто величина, яка характеризує на скільки градусів розігріється реакційна суміш при повному ступені перетворення;

$\Delta \theta_{ad} = \Delta T_{ad} / (b T_0)$ – адіабатичний розігрів в безрозмірній формі;

$\gamma = \alpha F / (Q C_p \rho)$ – безрозмірний параметр тепловідведення;

$b = R T_0 / E$ – критерій Арреніуса;

\tilde{K} – безрозмірна константа швидкості реакції при опорній температурі;

K – константа швидкості реакції при опорній температурі, (1/с);

X – ступінь перетворення;

T_0 – опорна температура, (К);

τ – час перебування (контакту);

C_0 – концентрація на вході;

n – порядок реакції.

Підрахуємо кількість параметрів в безрозмірній моделі.

а) Вихідні параметри:

– технологічні – θ, X ;

– час – $t' t'$.

б) Вхідні параметри:

– технологічні – $X_{вх}, \theta_{вх}, \theta_x$.

в) Теплофізичні – β, γ .

г) Параметри, що характеризують реакцію – $\tilde{K}, b, \Delta\theta_{ад}$.

У безрозмірній моделі 8 параметрів. Таким чином, число параметрів за рахунок зникнення конструктивних скоротилося. Це є важливою перевагою безрозмірної моделі РІЗ.

2.2. Побудова Q-T-діаграми та дослідження стійкості стаціонарних режимів РІЗ

Спочатку розглянемо залежність швидкості реакції, що протікає в РІЗ на прикладі незворотної єдиної реакції 1-го порядку. Швидкість реакції в розмірному вигляді виражається наступною залежністю:

$$W = KC = K_0 \exp(-E/(RT)) C. \quad (1.7)$$

Значення концентрації C в реакторі залежить від величини концентрації на вході C_0 і температури в реакторі T . З рівняння матеріального балансу для стаціонарного режиму слід, що:

$$C = C_0 / (1 + K\tau) = C_0 / (1 + K_0 \exp(-E/(RT)) \tau), \quad (1.8)$$

де $\tau = V/Q$ – час контакту, с. Підставивши (1.8) в (1.7), остаточно отримаємо:

$$W = K_0 \exp(-E/(RT)) C_0 / (1 + K_0 \exp(-E/(RT)) \tau). \quad (1.9)$$

Графік залежності швидкості реакції від температури (1.9) представлений на рисунку 1.1.

При малих значеннях температури T другий доданок в знаменнику дуже малий в порівнянні з одиницею. Тоді:

$$W = K_0 \exp(-E/(RT)) C_0. \quad (1.10)$$

У цій області з підвищенням температури швидкість реакції зростає за законом Арреніуса (нижня гілка графіка). При високих температурах, навпаки, другий доданок в знаменнику формули (1.9) стає багато більше одиниці. Тоді:

$$W = C_0 / \tau. \quad (1.11)$$

Фізичний сенс залежності (1.11) досить ясний. При високих температурах реакція протікає настільки швидко, що реагує практично вся речовина, що надходить в апарат. В цьому режимі швидкість реакції W практично не залежить від температури (верхня гілка графіка).

Аналогічний вигляд має ця залежність і в безрозмірній формі.

Для побудови Q-T-діаграми розглянемо рівняння енергетичного балансу в безрозмірній формі (1.5). У стаціонарному режимі накопичення тепла дорівнює нулю.

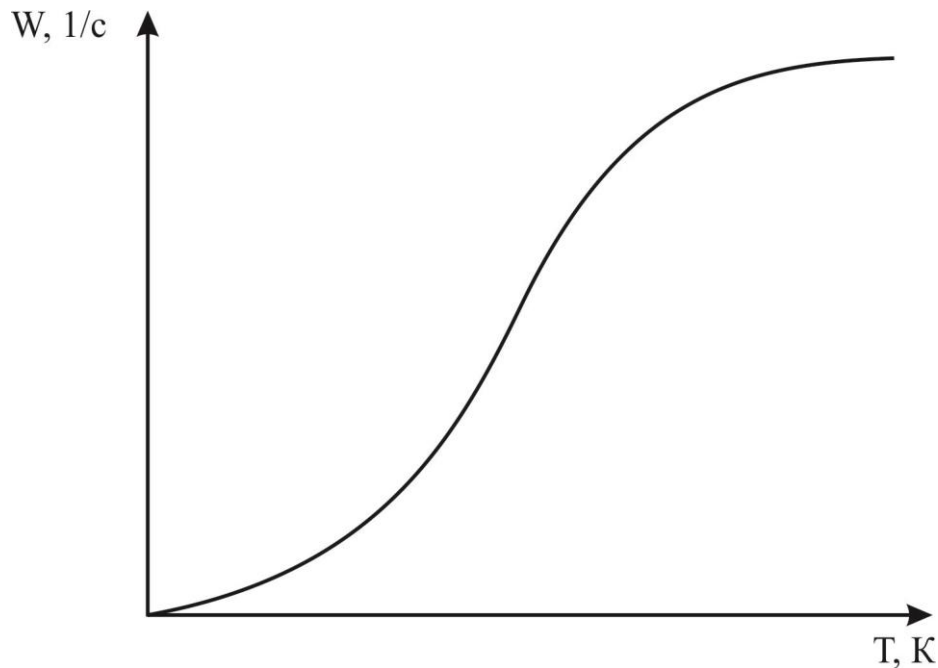


Рис. 1.1 – Графік залежності швидкості реакції від температури що протікає в РІЗ на прикладі незворотної єдиної реакції 1-го порядку

Запишемо рівняння енергетичного балансу в наступному вигляді:

$$\beta \frac{d\theta}{d\tilde{x}} = q_P - q_T,$$

$$\Delta\theta_{ad} \tilde{K} f(X) = -\theta_{ex} + \theta + \gamma(\theta - \theta_x), \quad (1.12)$$

де q_P – виділення тепла, тобто кількість тепла, що виділяється при протіканні хімічної реакції за одиницю часу, q_T – відведення тепла, тобто кількість тепла, що відводиться за одиницю часу через стінку холодильника з потоком. У стаціонарному режимі виділення і відведення тепла дорівнюють між собою: $q_P = q_T$.

Перетворимо вираз для розрахунку величини тепловідведення q_T :

$$q_T = -\theta_{ex} + \theta + \gamma(\theta - \theta_x) = -(\theta_{ex} + \gamma\theta_x) + \theta(1 + \gamma)$$

Остаточно:

$$q_T = -a + \theta(1 + \gamma), \quad (1.13)$$

де $a = (\theta_{ex} + \gamma\theta_x)$.

Вираз для розрахунку величини тепловиділення q_P :

$$q_P = \Delta\theta_{ad} \tilde{K} f(X) = \Delta\theta_{ad} \tilde{K} (1 - X) = \Delta\theta_{ad} \tilde{K} / (1 + \tilde{K}). \quad (1.14)$$

Характер залежностей (1.13) і (1.14) від температури наступний. Вираз (1.13) являє собою рівняння прямої лінії, причому q_T зростає зі збільшенням θ . У рівнянні (1.14) $\Delta\theta_{ad}$ – коефіцієнт, що не залежить від температури, таким чином залежність q_P від θ має такий же вигляд, як функція $W = f(T)$ (рівняння 1.9), відрізняючись лише масштабом (див. рис. 1.2)

Лінії залежностей q_P і q_T від температури перетинаються в трьох точках 1, 2 і 3. У цих точках при температурах θ_1 , θ_2 , θ_3 процес стаціонарний, тому що дотримується умова стаціонарності $q_P = q_T$ або $d\theta/dt = 0$.

Як видно з рисунку 1.2 в даній ситуації при одних і тих же значеннях вхідних параметрів можливі три різних стаціонарних режими, які не тільки

забезпечують різні значення вихідних параметрів, а й відрізняються по стійкості.

Розглянемо спочатку стаціонарний режим 3, який відповідає режиму роботи при температурі θ_3 .

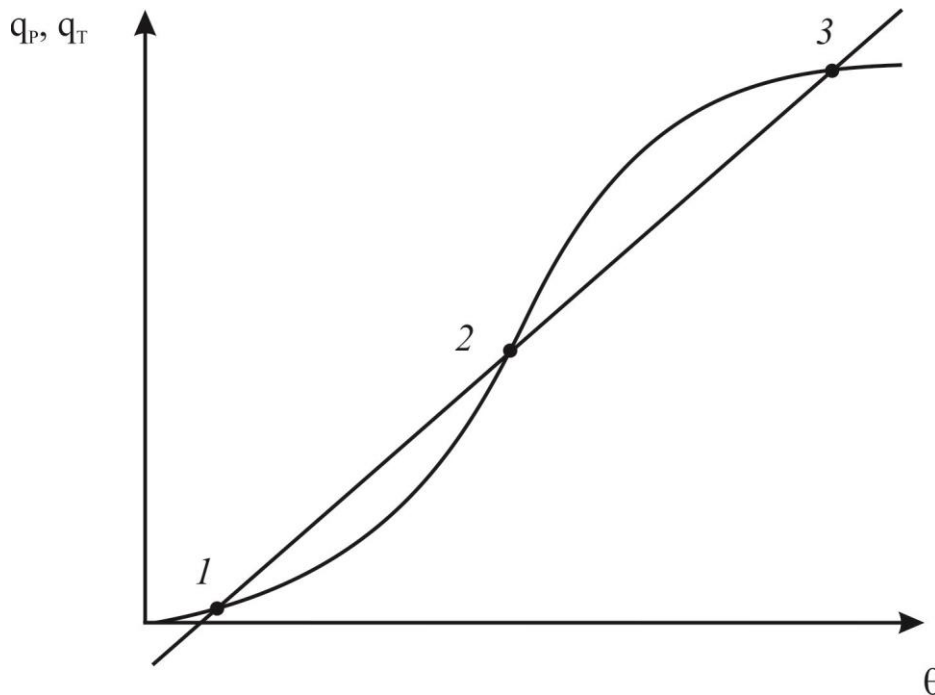


Рис. 1.2 – Лінії залежностей тепловиділення q_P і тепловідведення q_T від безрозмірної температури θ .

Оскільки швидкості виділення і відведення тепла дорівнюють один одному, то режим залишається стаціонарним поки температура θ не зміниться. Припустимо, що в результаті випадкової флуктуації змінюється значення θ_3 і станеться зміщення на величину $\delta\theta$. При цьому за рахунок прискорення швидкості реакції зростає швидкість виділення тепла. Це зростання відбувається по кривій, що відповідає кривій тепловиділення. Одночасно, за рахунок збільшення різниці температур між температурами в реакторі і теплоносія зростає швидкість відводу тепла. Це зростання відбувається по лінії відводу тепла.

У точці 3 лінія тепловідведення проходить з великим кутом нахилу, ніж лінія тепловиділення. Тому при температурі $\theta_3 + \delta\theta$ швидкість відводу тепла буде вищою, ніж швидкість його виділення. У цих умовах, після зняття малого відхилення $\delta\theta$ реактор почне охолоджуватися. Охолодження триватиме до тих пір, поки температура в реакторі не стане рівною θ_3 . При цій температурі швидкості відводу і виділення тепла знову зрівняються, і режим знову стане стаціонарним. Навпаки, якщо в результаті флуктуацій по температурі ($\theta = \theta_3 - \delta\theta$) реактор почне охолоджуватися, то після зняття збурень реактор знову почне нагріватися до досягнення в ньому температури θ_3 , тому що швидкість виділення тепла при цих умовах перевищує швидкість тепловідведення.

Таким чином, стаціонарний режим в точці 3 повертається до вихідного стану після зняття зовнішніх збурень, тобто режим є стійким.

*Здатність системи (реактора) повертатися до вихідного стаціонарного стану після зняття збурень називається **стійкістю**.* Інакше кажучи, вихідний стаціонарний режим стійкий, якщо після усунення джерел порушення режиму будь-які малі відхилення з плином часу прагнуть до нуля. Якщо ж значення відхилень нарастають в часі, то вихідний стаціонарний режим нестійкий.

При температурі θ_1 , яка відповідає стаціонарному режиму 1, з точки зору стійкості картина повністю аналогічна розглянутому вище режиму в точці 3, тому що і в цьому випадку лінія тепловідведення йде крутіше, ніж лінія тепловиділення і вихідний стаціонарний режим стійкий.

Тепер розглянемо режим в точці 2. Тут нахил лінії відводу тепла менше, ніж лінії тепловиділення. Але так само, як і в точках 1 і 3, $q_p = q_T$, і якщо немає збурень, режим буде стаціонарним. Нехай відбулося випадкове відхилення, і температура θ_2 підвищилася на величину $\delta\theta$. При температурі $\theta = \theta_2 + \delta\theta$ швидкість виділення тепла стає більше, ніж швидкість відводу тепла. І тому після зняття збурення реактор буде не охолоджуватися, а нагріватися, віддаляючись від початкового стану. Нагрівання триватиме до тих пір, поки знову швидкість тепловиділення не стане рівною швидкості тепловідводу, тобто реактор досягне нового стаціонарного стану при температурі θ_3 . Аналогічно, при негативних збуреннях реактор буде мимовільно охолоджуватися до тих пір, поки не досягне стійкого стаціонарного стану при температурі θ_1 .

Проведений аналіз показав, що з трьох можливих в даних умовах стаціонарних режимів тільки два: 1 – при низькій температурі (і, відповідно, малої швидкості реакції) і 3 – при високій температурі (і великій швидкості реакції) є стійкими, а третій при проміжних значеннях температури і швидкості реакції (точка 2) – нестійкий.

Використовуючи формули (1.13) і (1.14) необхідно розрахувати значення q_p і q_T для різних θ .

2.3. Вплив вхідних параметрів на стаціонарні режими. Побудова статичних характеристик РІЗ

Розглянемо вплив зміни основних параметрів на вході в РІЗ на стаціонарні режими. Швидкість відводу тепла є функцією наступних параметрів:

$$q_T = f(\theta_{вх}, \theta_x, \gamma). \quad (1.15)$$

Оскільки рівняння залежності швидкості тепловідведення від параметрів (1.13) являє собою рівняння прямої лінії, то при зміні параметрів, що входять в коефіцієнт **a** ($\theta_{вх}$ і θ_x) лінія тепловідведення буде переміщатися паралельно самій собі.

Розглянемо вплив температури входу на стаціонарні режими. При збільшенні $\theta_{вх}$ лінія тепловідведення буде зміщуватися вправо. При цьому

умови існування стаціонарних режимів будуть іншими. На рис. 1.3 показані лінії відводу тепла, побудовані при різних значеннях θ .

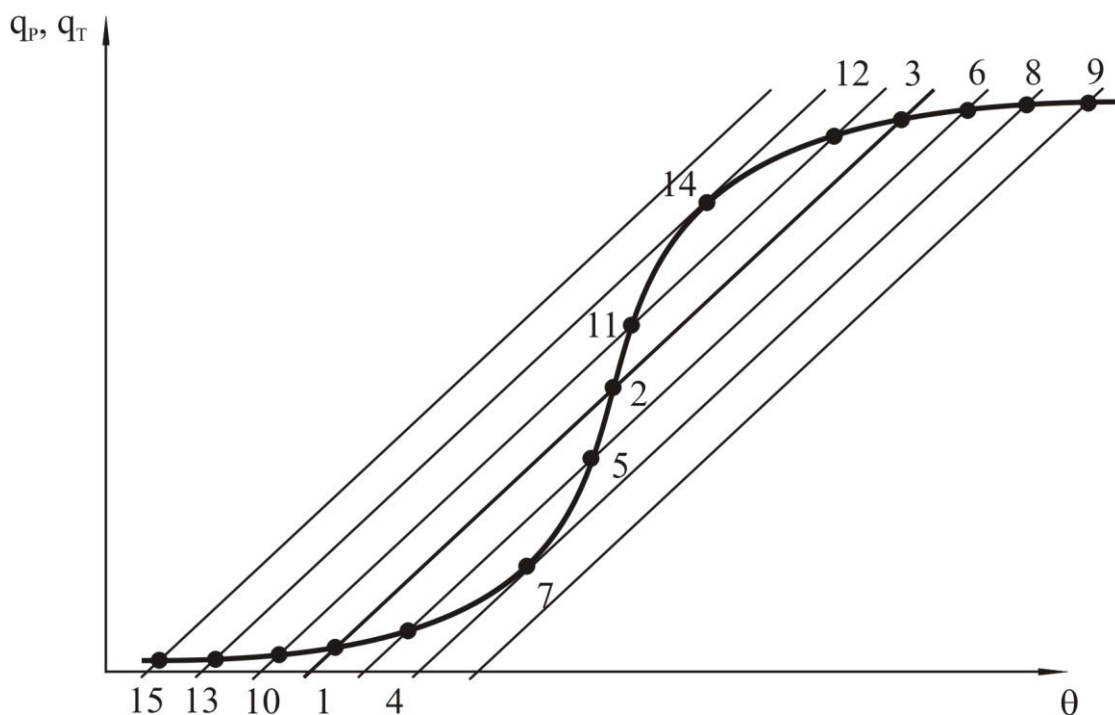


Рис. 1.3 – Лінії залежностей тепловиділення q_p і тепловідведення q_T при варіюванні параметра $\theta_{вх}$ від безрозмірної температури θ

Стаціонарні режими, отримані при базовому значенні $\theta_{вх}$, позначені цифрами 1, 2, 3. При збільшенні $\theta_{вх}$ лінія тепловідведення зміщується вправо. При цьому число стаціонарних режимів залишається колишнім (позначені 4, 5, 6). При подальшому збільшенні $\theta_{вх}$ число стаціонарних режимів може змінитися. Для деякого значення $\theta_{вх}$ отримуємо тільки два стаціонарних режими – точки 7 і 8, причому стаціонарний режим в точці 7 нестійкий. При ще більших значеннях $\theta_{вх}$ лінія тепловідведення лежить нижче лінії тепловиділення практично у всій області, за винятком високих значень θ . В даному випадку має місце тільки один стаціонарний режим – точка 9. Аналогічна картина спостерігається і при зменшенні значення $\theta_{вх}$.

Розглянемо докладніше стаціонарні режими в точках 7 і 14. Найменша зміна температури θ призводить до того, що реактор практично миттєво переходить на високотемпературний режим (з точки 7 в точку 8 на верхній гілці графіка) або, навпаки, на низькотемпературний режим (з точки 14 в точку 13 на нижній гілці).

Аналіз роботи реактора зручно проводити з використанням **статичних характеристик**, які показують зміну вихідних величин (в даному випадку – θ) в стаціонарному режимі при зміні параметрів на вході.

Кількісною мірою зміни вихідних величин при зміні вхідних параметрів служить **параметрична чутливість** – ліміт відносини зміни вихідної величини до відповідної зміни вхідної:

$$P = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta \theta}{\Delta A}, \quad (1.16)$$

де A – вхідний параметр. Вираз (1.16) є ніщо інше, як:

$$P = d\theta/dA \quad (1.17)$$

На практиці зазвичай використовують наступний наближений вираз:

$$P \cong \Delta\theta/\Delta A \quad (1.18)$$

Статична характеристика при зміні $\theta_{\text{вх}}$ приведена на рис. 1.4. Для її побудови використовуються тільки точки стаціонарних режимів, отриманих при побудові Q-T-діаграми при зміні температури входу. Для кожного значення температури входу вибираються точки, відповідні стаціонарним режимам і переносяться на графік статичної характеристики.

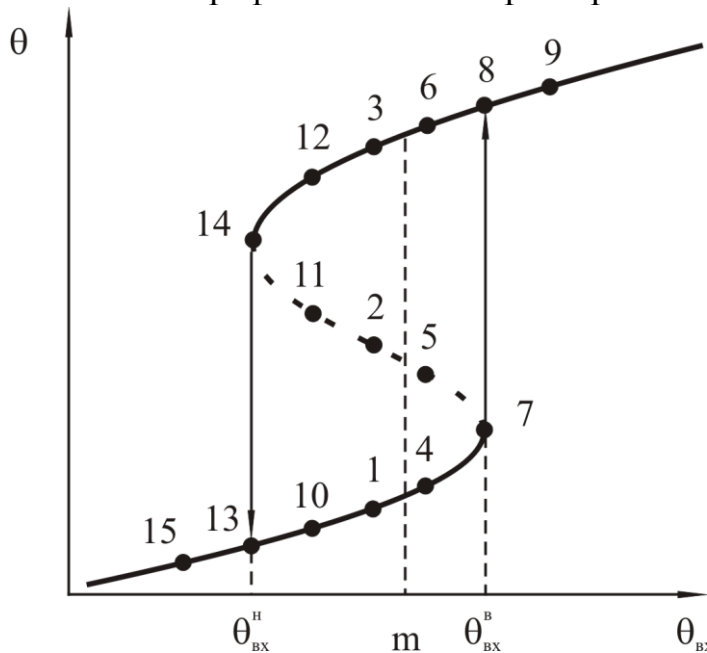


Рис. 1. 4 – Статична характеристика при зміні $\theta_{\text{вх}}$

Позначимо за m – основний робочий режим. Розглянемо інтервал $\theta_{\text{вх}}^{\text{H}} - \theta_{\text{вх}}^{\text{B}}$. У цьому діапазоні температур можливо існування трьох режимів. У разі, коли $\theta_{\text{вх}} < \theta_{\text{вх}}^{\text{H}}$ або $\theta_{\text{вх}} > \theta_{\text{вх}}^{\text{B}}$ в реакторі буде тільки один стійкий режим (низько-, або високо- температурний). З характеристики також видно, що далеко від точок 7 і 14, які мають назву точок зриву, величини параметричної чутливості невеликі. При наближенні до цих точок величина параметричної чутливості різко зростає, а потім відбувається стрибкоподібний перехід на інший режим – зрив. У точках зриву величина P нескінченно велика.

В ході нормальної експлуатації реактора завжди мають місце невеликі коливання вхідних параметрів. У зв'язку з цим виникає завдання визначення запасу стійкості – сукупності допустимих відхилень параметрів процесу. Практично запас стійкості являє собою інтервал від заданого режиму до границі стійких стаціонарних станів. Так, наприклад, для режиму m запас стійкості по температурі входу становить: $\Delta\theta_{\text{вх}} = \theta_{\text{вх}}^7 - \theta_{\text{вх}}^m$.

Для забезпечення стійкої і безпечної роботи реактора необхідно виконання наступного обмеження

$$\Delta\theta_{\text{вх}} > \delta\theta_{\text{вх}},$$

де $\delta\theta_{\text{вх}}$ – можливий інтервал зміни $\theta_{\text{вх}}$ в процесі експлуатації.

Розглянемо вплив параметра γ на стаціонарні режими в РІЗ.

З рівняння (1.13) випливає, що параметр γ визначає нахил лінії відводу тепла. Зі збільшенням величини γ кут нахилу буде зростати, а лінія тепловідведення буде повертатися навколо деякої точки (рис. 1.5).

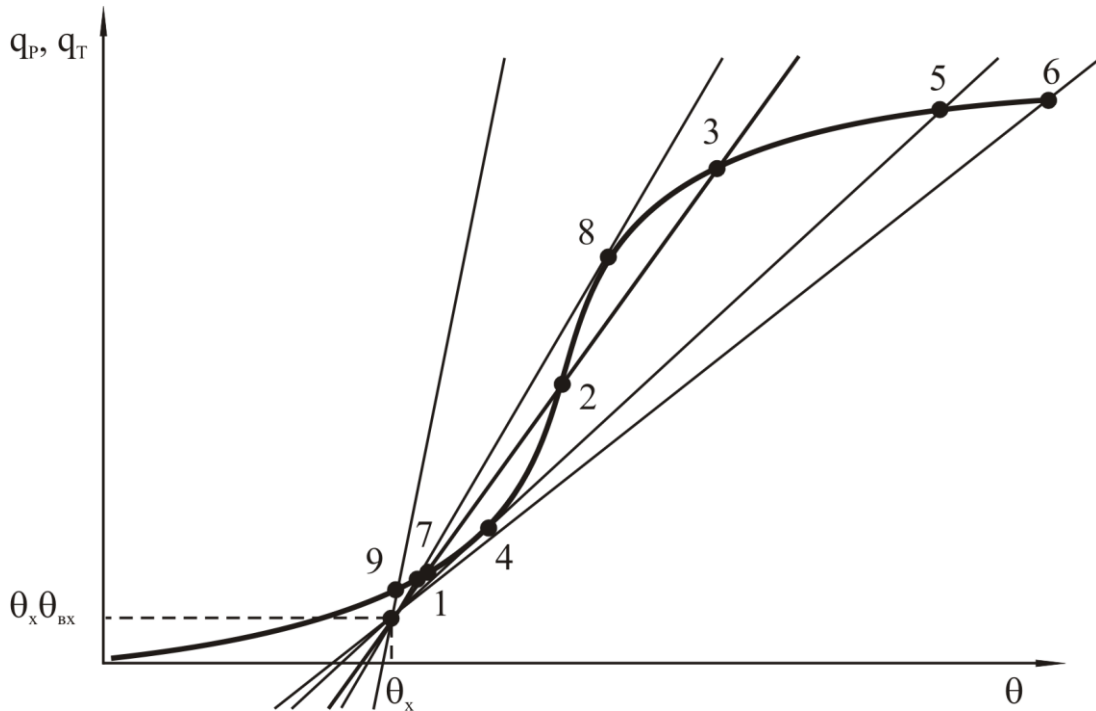


Рис. 1.5 – Лінії залежностей тепловиділення q_p і тепловідведення q_T при варіюванні параметра γ від безрозмірної температури θ .

Визначимо координати цієї точки. Для цього розглянемо два випадки: $\gamma_1=0$ і $\gamma_2=1$. В цьому випадку, величина тепловідведення буде дорівнювати: $q_{T1} = \theta - \theta_{\text{вх}}$ і $q_{T1} = 2\theta - \theta_{\text{вх}} - \theta_x$.

Оскільки ця точка – "центр обертання" – є спільною для обох випадків, то в ній:

$$q_{T1} = q_{T2}$$

Тоді:

$$\theta - \theta_{\text{вх}} = 2\theta - \theta_{\text{вх}} - \theta_x.$$

Звідси: $\theta = \theta_x$ – абсциса центру обертання.

Ордината даної точки

$$q_{T1} = \theta_x - \theta_{\text{вх}}.$$

Статична характеристика РІЗ по каналу θ – γ приведена на рис. 1.6.

При малих значеннях γ існує єдиний високотемпературний режим – область А. При збільшенні γ спостерігається перехід в область існування трьох режимів – область В. При великих значеннях γ буде існувати єдиний низькотемпературний режим – область С. При певних значеннях параметра γ

можливі "зриви" з високо-температурного режиму на низькотемпературний – точка 7 і навпаки – точка 4.

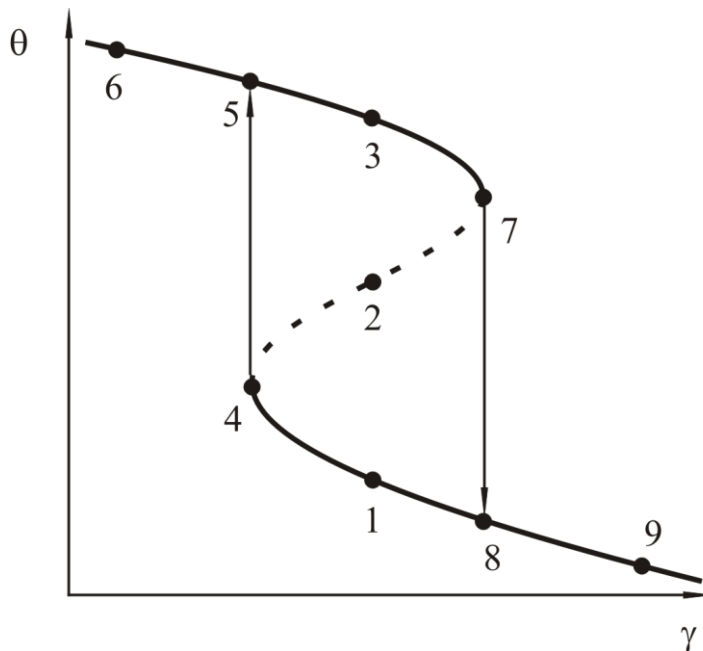


Рис. 1.6 – Статична характеристика РІЗ по каналу θ – γ

Порівнявши статичні характеристики $\theta = f(\theta_{\text{вх}})$ і $\theta = f(\gamma)$ можна помітити, що вони є дзеркальним відображенням один одного.

Розглянемо вплив величини адиабатичного розігріву $\Delta\theta_{\text{ад}}$ на характер стаціонарних режимів в РІЗ. Величина адиабатичного розігріву

$$\Delta\theta_{\text{ад}} = \Delta T_{\text{ад}} / (bT_0) = (-\Delta H) C_0 / (C_p \cdot \rho \cdot b \cdot T_0)$$

для однієї і тієї ж реакції є функцією тільки концентрації на вході в реактор – C_0 .

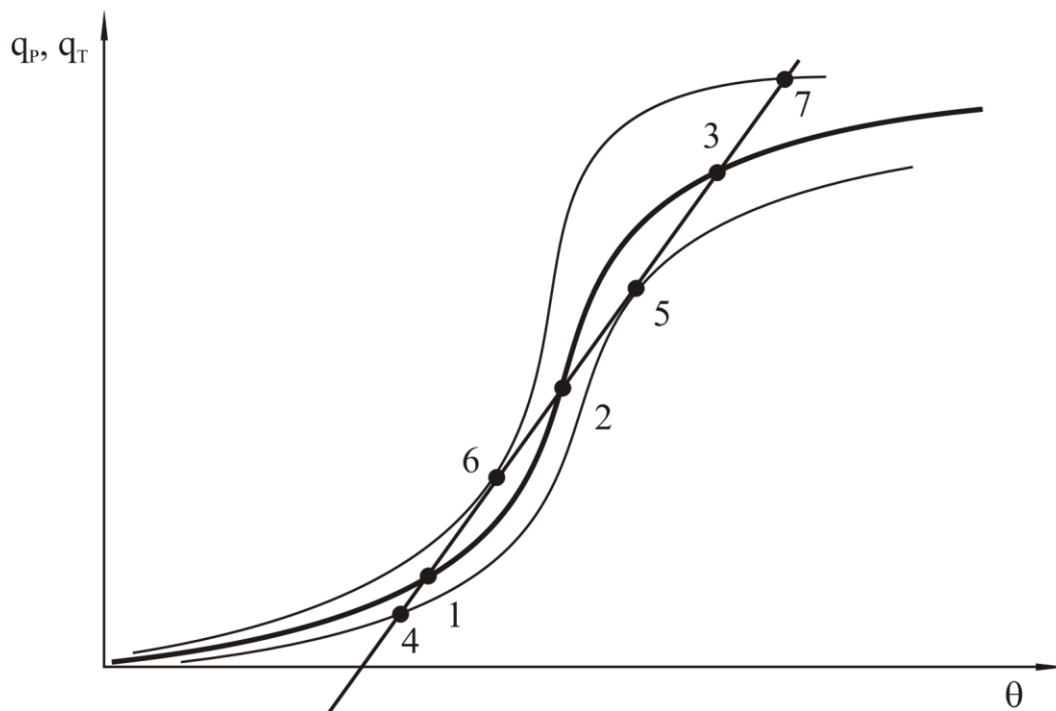


Рис. 1.7 – Лінії залежностей тепловиділення q_p і тепловідведення q_T при варіюванні параметра $\Delta\theta_{\text{ад}}$ від безрозмірної температури θ .

При зміні $\Delta\theta_{ад}$ змінюється положення лінії тепловиділення – q_p (рис. 1.7). Зі зменшенням величини адиабатичного розігріву графік залежності $q_p=f(\theta)$ зменшується по висоті і зміщується вправо. У точці 5 відбувається зрив на низькотемпературний режим. При збільшенні $\Delta\theta_{ад}$ картина змінюється. Графік залежності зміщується вліво, збільшуючись по висоті, і в точці 7 переходить стрибкоподібний перехід на високотемпературний режим.

Статична характеристика по каналу $\theta-\Delta\theta_{ад}$ (рис. 1.8) має такий же вигляд, як і статична характеристика по каналу $\theta - \theta_{вх}$. Аналогічним чином будуються статичні характеристики при варіюванні інших параметрів.

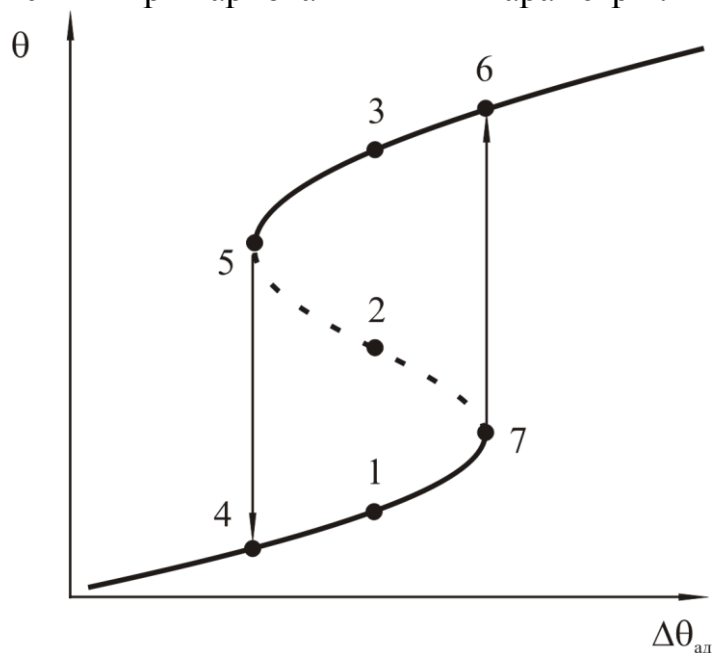


Рис. 1.8 – Статична характеристика по каналу $\theta-\Delta\theta_{ад}$

Необхідно відзначити наступне. Вище були розглянуті випадки, коли можливе існування в реакторі декількох стаціонарних режимів. У тому випадку, якщо існує єдиний стаціонарний режим, то вид статичних характеристик змінюється.

Побудова статичних характеристик проводиться наступним чином. Вибирається вихідний стаціонарний режим. Потім при варіюванні одного з вхідних параметрів визначаються нові стаціонарні режими. Статичні характеристики будуються, як правило, в координатах $\Delta\theta_{вих} = f(\Delta a_{вх})$, де $a_{вх}$ – параметр на вході.

Як приклад, на рисунку 1.9 наведено статична характеристика по каналу $\Delta\theta = f(\Delta\theta_{вх})$.

Дослідження статичних характеристик в будь-якому реакторі необхідно: по-перше, для передбачення поведінки об'єкту при зміні умов на вході, по-друге, для вибору каналу управління, тобто такого параметра, яким можна варіювати, щоб здійснювати процес в заданих умовах при можливих флуктуаціях вхідних параметрів.

При виборі каналу управління необхідно, щоб:

- 1) Зміна параметру на вході помітно впливало на вихідні параметри.

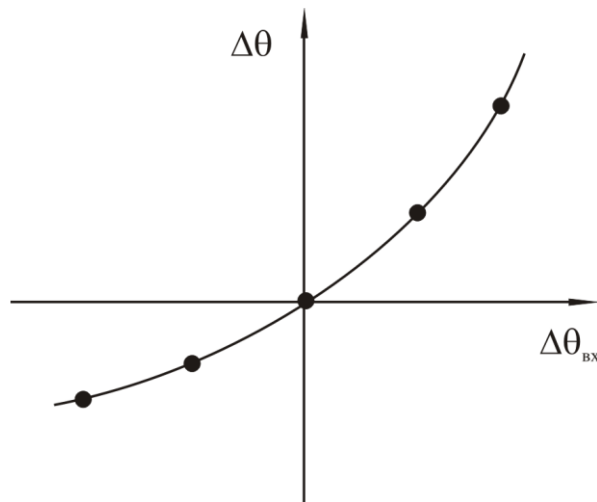


Рис. 1.9 – Статична характеристика по каналу $\Delta\theta = f(\Delta\theta_{\text{вх}})$.

2) Обраний канал управління повинен бути найменш інерційним, тобто час, протягом якого стан на виході відреагує на зміну вхідного параметра, має бути мінімально можливим.

Для побудови статистичних характеристик слід провести необхідні розрахунки і побудувати:

- лінії тепловиділення (або тепловідведення) при варіюванні досліджуваного параметра на Q-T-діаграмі;
- для отримання стаціонарних режимів побудувати статистичну характеристику по даному параметру в координатах θ -а (а – досліджуваний параметр).

3 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1) За вихідними даними визначити наступні безрозмірні параметри b , \tilde{K} , γ , $\theta_{\text{вх}}$, θ_x , $\Delta\theta_{\text{ад}}$.

2) Використовуючи прикладну програму QT.EXE, розрахувати дані, необхідні для побудови графіків:

- діаграми тепловиділення-тепловідвід для базового режиму;
- діаграми тепловиділення-тепловідвід при варіюванні температури входу, параметра тепловідведення і адіабатичного розігріву.

3) Побудувати статичні характеристики по каналах:

- температура в реакторі – температура входу;
- температура в реакторі – параметр тепловідведення;
- температура в реакторі – адіабатичний розігрів.

4 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Вихідні дані, необхідні для розрахунків, наведені в табл. 1.2. Номер варіанта відповідає порядковому номеру прізвища студента по журналу. Розмірність величин: C_0 – моль/м³; $(-\Delta H)$ – кДж/моль; E – кДж/моль; K_{323} – 1/с; F – м²; α – Вт/(м² К); $T_{\text{вх}}$ – К; T_x – К; Q – м³/с. Загальні дані для всіх варіантів: $V_p = 5$ м³; $T_{\text{оп}} = 273$ К; $C_p = 5000$ Дж/(кг К); $\rho = 1,676$ кг/м³.

Таблиця 1.2 – Індивідуальні завдання до лабораторної роботи №1

ВИХІДНІ ДАНІ ВАРІАНТІВ РОЗРАХУНКУ												
№ вар.	Параметри процесу									Діапазон варіювання		
	C_0	$(-\Delta H)$	E	K_{323}	F	α	$T_{\text{вх}}$	$T_{\text{х}}$	Q	$\Delta\theta_{\text{вх}}$	$\Delta\gamma$	$\Delta(\Delta\theta_{\text{ад}})$
1	5,5	179,8	84,2	0,0155	6,0	41,9	287	295	0,1	-4 / +2	-0,2/+0,5	-4 / +6
2	7,1	104,8	103,5	0,023	2,5	50,3	282	291	0,05	-3 / +2	-0,2/+0,3	-6 / +5
3	4,5	142,9	126,1	0,027	1,0	62,9	285	288	0,025	-4 / +3	-0,2/+0,5	-5 / +5
4	3,5	160,9	151,7	1,226	6,0	41,9	281	286	0,1	-6 / +3	-0,2/+0,4	-4 / +6
5	3,7	122,3	174,7	3,68	2,5	50,3	282	284	0,05	-6 / +2	-0,2/+0,5	-6 / +6
6	2,5	178,0	189,4	4,0	1,0	62,9	274	283	0,025	-4 / +4	-0,2/+0,6	-6 / +5
7	4,0	92,6	206,6	6,44	1,5	41,9	279	282	0,025	-5 / +3	-0,2/+0,5	-5 / +5
8	6,2	199,5	84,2	0,0155	16	21,0	274	295	0,1	-4 / +4	-0,3/+0,5	-8 / +6
9	6,8	142,0	103,5	0,023	5,0	33,5	283	291	0,05	-5 / +3	-0,3/+0,5	-6 / +6
10	5,8	132,0	126,1	0,027	8,0	10,5	283	288	0,025	-5 / +2	-0,3/+0,5	-6 / +6
11	3,9	172,6	151,7	1,226	10	33,5	277	286	0,1	-4 / +3	-0,2/+0,5	-6 / +6
12	2,4	220,8	174,7	3,68	12	14,0	276	284	0,05	-4 / +2	-0,2/+0,4	-4 / +6
13	3,1	161,3	189,4	4,0	5,0	16,8	275	283	0,025	-6 / +3	-0,3/+0,5	-6 / +6
14	4,2	115,2	206,6	6,44	10	8,4	281	282	0,025	-7 / +2	-0,2/+0,5	-6 / +6
15	5,8	189,2	84,2	0,0155	11	26,7	279	295	0,1	-3 / +4	-0,2/+0,4	-5 / +5
16	6,9	122,0	103,5	0,023	3,8	38,6	282	291	0,05	-4 / +5	-0,2/+0,5	-4 / +6
17	5,3	136,3	126,1	0,027	4,5	16,3	284	288	0,025	-5 / +3	-0,3/+0,4	-6 / +6
18	3,7	166,1	151,7	1,226	9,0	32,6	278	286	0,1	-4 / +4	-0,2/+0,5	-5 / +5
19	3,2	148,5	174,7	3,68	7,3	20,0	275	284	0,05	-5 / +2	-0,2/+0,3	-4 / +4
20	2,8	171,1	189,4	4,0	3,9	18,8	274	283	0,025	-4 / +3	-0,1 / +0,4	-7 / +6
21	4,1	106,4	206,6	6,44	5,8	12,6	280	282	0,05	-4 / +4	-0,2/+0,4	-6 / +6
22	6,1	191,7	84,2	0,0155	14	22,5	275	293	0,025	-3 / +3	-0,2/+0,5	-7 / +7

5 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі лабораторної роботи формулюється мета роботи, наводяться отримані безрозмірні параметри, діаграма тепловиділення – тепловідвід для базового варіанту і при варіюванні вхідних параметрів, статичні характеристики по дослідженим каналам управління.

6 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

- 1) Характер залежності швидкості реакції від температури на прикладі реакції першого порядку.
- 2) Модель реактора ідеального змішування і її основні особливості.
- 3) Рівняння енергетичного балансу РІЗ в безрозмірній формі.
- 4) Побудова діаграми тепловиділення – тепловідвід, умови існування стаціонарного режиму.
- 5) Стійкість, основні поняття. Умова стійкості, межі і запас стійкості.
- 6) Визначення числа і характеру стаціонарних режимів (на підставі діаграми тепловиділення – тепловідвід).
- 7) Статичні характеристики, їх застосування, метод побудови. Параметрична чутливість.
- 8) Довести, що при зміні температури входу і інших незмінних параметрах лінії відводу тепла паралельні одна одній.
- 9) Визначити координати «центру обертання при зміні параметра тепловідведення».

2 Лабораторна робота №2. Рішення задач оптимізації з використанням аналітичних методів

МЕТА РОБОТИ:

- визначити оптимальний час перебування і максимальну концентрацію цільового продукту В для двох послідовних реакцій першого порядку $A \rightarrow B \rightarrow D$ в реакторі ідеального витіснення;
- отримати вирази для визначення оптимального часу перебування і максимальної концентрації цільового продукту В для тих же реакцій в реакторі ідеального змішування;
- порівняти показники, які досягаються в РІЗ і РІВ;
- для оборотної екзотермічної реакції $A \leftrightarrow B$ побудувати оптимальний температурний режим для заданих значень параметрів.

1 ОПИС МЕТОДИКИ РОЗРАХУНКІВ

Аналітичні методи, засновані на класичних методах математичного аналізу, використовуються в задачах, у яких цільова функція має аналітичний вираз, а число змінних невелике. Завдання оптимізації формулюється в такий спосіб. Існує процес, відома його математична модель і встановлено критерій оптимальності R у вигляді функції

$$R = R(X, U), \quad (2.1)$$

де X – вектор вхідних параметрів, U – вектор управляючих параметрів. Задані обмеження: $X_{\min} \leq X_{\text{доп}} \leq X_{\max}$; $U_{\min} \leq U_{\text{доп}} \leq U_{\max}$. При заданих обмеженнях необхідно знайти такі значення U , при яких R досягає екстремуму.

Необхідна умова існування екстремуму функції однієї змінної формулюється так: в точках екстремуму похідна $dR(U)/dU$ або дорівнює нулю, або не існує. Достатня умова існування екстремуму: якщо друга похідна менше нуля, то в даній точці існує максимум, якщо друга похідна більше нуля, то в даній точці існує мінімум. Якщо друга похідна дорівнює нулю, то необхідно досліджувати похідні вищих порядків. Необхідною умовою існування екстремуму функції багатьох змінних є рівність нулю часткових похідних першого порядку по всім змінним.

1.1 Визначення оптимального часу перебування для двох послідовних реакцій в РІВ

Для двох послідовних реакцій $A \rightarrow B \rightarrow D$ необхідно визначити оптимальний час перебування $t_{\text{опт}}$, при якому вихід цільового продукту B сягатиме максимуму.

Нехай a – початкова концентрація компонента A . В початковий момент часу концентрації компонентів B і D дорівнюють нулю, тобто при $t = 0$:

$$C_B = C_D = 0.$$

Критерії оптимізації: вихід цільового продукту – $R = C_B/a$. Управляючий параметр: час перебування – t .

Нехай обидві реакції протікають по першому порядку. Швидкості реакцій описуються наступними виразами:

$$W_1 = K_1 C_A, \quad (2.2)$$

$$W_2 = K_2 C_B. \quad (2.3)$$

Зміна концентрації компонента B від часу:

$$dC_B/dt = W_1 - W_2 \quad (2.4)$$

З (2.2) знайдемо вираз для поточної концентрації C_A . Перетворимо (2.2):

$$-dC_A/dt = K_1 C_A,$$

$$dC_A/C_A = -K_1 dt.$$

Проінтегрувавши, отримаємо:

$$\ln(C_A/a) = -K_1 t$$

або

$$C_A = a \exp(-K_1 t). \quad (2.5)$$

Підставимо (2.5) і (2.3) в (2.4), отримаємо:

$$dC_B/dt = K_1 a \exp(-K_1 t) - K_2 C_B$$

або

$$dC_B/dt + K_2 C_B = K_1 a \exp(-K_1 t) \quad (2.6)$$

Вирішивши отримане рівняння, знайдемо вираз для визначення поточної концентрації компонента B :

$$C_B = a \cdot \frac{K_1}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}) \quad (2.7)$$

Вихід цільового продукту

$$R = C_B/a = \frac{K_1}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}) \quad (2.8)$$

Досліджуємо екстремум отриманої цільової функції (2.8). Умови існування максимуму

$$\begin{aligned} dR/dt &= 0, \\ d^2R/dt^2 &< 0. \end{aligned}$$

Знайдемо першу похідну і прирівняємо її до нуля:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{K_1}{K_2 - K_1} (-K_1 \cdot e^{-K_1 t} + K_2 \cdot e^{-K_2 t}) \right) = 0 \quad (2.9)$$

Вирішивши отримане рівняння, визначимо оптимальний час перебування:

$$t_{opt} = \frac{1}{K_2 - K_1} \ln(K_2/K_1) \quad (2.10)$$

Для перевірки виконання достатньої умови існування максимуму обчислюємо другу похідну:

$$\frac{d^2R}{dt^2} = \frac{d^2}{dt^2} \left(\frac{K_1}{K_2 - K_1} (-K_1 \cdot e^{-K_1 \cdot t} - K_2 \cdot e^{-K_2 \cdot t}) \right) < 0 \quad (2.11)$$

Так як друга похідна менше за 0, то в даній точці існує максимум цільової функції R. Підставивши (2.10) в (2.7), отримаємо вираз для визначення максимальної концентрації компонента B:

$$C_{B\ onm} = a \cdot \left(\frac{K_1}{K_2} \right) \frac{K_2}{K_2 - K_1} \quad (2.12)$$

Вихідні дані для розрахунків беруться з таблиці 2.1. Необхідно обчислити для заданих значень параметрів оптимальний час перебування і максимальну концентрацію цільового продукту B для двох послідовних реакцій першого порядку $A \rightarrow B \rightarrow D$ в реакторі ідеального витіснення.

1.2 Визначення оптимального часу перебування для двох послідовних реакцій в ПІЗ.

Для аналогічних попередньому прикладу умов протікання реакцій матеріальний баланс по компонентах A і B у реакторі ідеального змішування має вигляд:

$$\begin{aligned} Q(C_{Ao} - C_A) - V K_1 C_A &= 0, \\ -Q C_B + V(K_1 C_A - K_2 C_B) &= 0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Розділивши обидва рівняння на витрати реагентів Q, отримаємо:

$$\begin{aligned} C_{Ao} - C_A - t K_1 C_A &= 0, \\ -C_B + t(K_1 C_A - K_2 C_B) &= 0, \end{aligned} \quad (2.14)$$

де $t = V / Q$ – середній час перебування реагентів в реакторі.

На підставі рівнянь (2.14) слід записати вираз для критерію оптимальності, прийнявши в якості останнього вихід цільового продукту В. Управляючим параметром є середній час перебування реагентів в реакторі.

Використовуючи необхідну умову існування екстремуму, продиференціювавши отриманий вираз по часу перебування і прирівнявши його до нуля необхідно отримати вираз для визначення оптимального часу перебування. Вихідні дані для розрахунків беруться аналогічно до попереднього прикладу (табл. 2.1). Необхідно обчислити для заданих значень параметрів оптимальний час перебування і максимальну концентрацію цільового продукту В для двох послідовних реакцій першого порядку $A \rightarrow B \rightarrow D$ в реакторі ідеального змішування і порівняти аналогічні показники, які досягаються в РІЗ і РІВ.

1.3 Визначення оптимального температурного режиму для оборотної екзотермічної реакції

Під оптимальним температурним режимом процесу розуміються температурні умови, при яких забезпечується максимальна продуктивність за цільовим продуктом в даному реакторі. Такий оптимум може бути забезпечений як при $T = \text{const}$, так і при зміні температури:

- в часі для реактора періодичної дії;
- по довжині для реактора ідеального витіснення;
- від апарату до апарату для каскаду проточних реакторів ідеального змішування.

Розглянемо оборотну екзотермічну реакцію виду $A \leftrightarrow B$, причому енергія активації прямої реакції E_1 менше енергії активації зворотної реакції E_2 . В якості критерію оптимальності для таких реакцій зазвичай використовується швидкість хімічного перетворення. Тоді цільова функція набуде вигляду:

$$R = W = K_{01} \exp(-E_1/(RT)) C_A - K_{02} \exp(-E_2/(RT)) C_B. \quad (2.15)$$

В якості управляючого параметра вибирається температура, оскільки концентрації C_A і C_B не належать до входів даної системи і залежать від умов протікання реакцій. Але при різних значеннях концентрацій вплив температури може бути різним. Тому дана задача вирішується в наступній постановці: оптимальна температура визначається при фіксованих значеннях C_A і C_B , тобто концентрації речовин виступають в якості обмежень типу рівності. Для оборотної екзотермічної реакції при $E_2 > E_1$ зі зростанням температури від $T_{\text{поч}}$ спочатку більш істотним буде зростання швидкості прямої реакції, тому що зворотна ще занадто повільна. При подальшому підвищенні температури зворотна реакція, що має велику енергію активації, починає "наганяти" пряму. При цьому складі існує температура $T_{\text{рівн.}}$, при якій суміш знаходиться в рівновазі ($W=0$), потім хід реакції зміщується вліво. На інтервалі $T_{\text{поч.}} - T_{\text{рівн.}}$ є температура, при якій швидкість реакції максимальна. Це і є $T_{\text{опт.}}$. Продиференціювавши (2.15) по T і прирівнявши похідну нулю, отримаємо:

$$dW/dT = d[K_{01} \exp(-E_1/(RT)) C_A - K_{02} \exp(-E_2/(RT)) C_B] / dT = 0 \quad (2.16)$$

Перетворивши (2.16) отримаємо формулу для визначення оптимальної температури:

$$T_{opt} = (E_2 - E_1) / [R \ln(K_{02} E_2 C_B) / (K_{01} E_1 C_A)] \quad (2.17)$$

З рівняння (2.17) випливає, що чим вище C_A і чим менше C_B , тим вище T_{opt} ; по мірі зростання ступеня перетворення величина T_{opt} зменшується. При $C_B \rightarrow 0$ за формулою (2.8) $T_{opt} \rightarrow \infty$. Тому на початковій ділянці реактора слід встановлювати максимально допустиму температуру T_{max} , а з моменту, коли знайдена з рівняння (2.17) T_{opt} порівнюється з T_{max} , зміна температури повинна визначатися цим рівнянням.

Для того, щоб визначити оптимальний профіль температур в реакторі і знайти максимальну швидкість утворення цільового продукту, потрібно знати склад вихідної суміші на вході в апарат і залежність швидкості реакції від температури. На підставі цих даних можна обчислити швидкість реакції як функцію температури при різних фіксованих значеннях ступеня перетворення. Представивши отримані результати графічно в координатах $W=f(T)$, для кожного значення ступеня перетворення визначається температура, при якій швидкість реакції максимальна. На підставі отриманих даних будується графік $X=f(T)$, який і являє собою оптимальний температурний режим. Для розрахунку швидкості реакції можна користуватися наступною формулою:

$$W = K_1 C_{A0} (1 - X - X/K_C), \quad (2.18)$$

де $K_1 = K_{01} \exp(-E_1/RT)$ – константа швидкості прямої реакції;
 $K_C = \exp(E_2/T - F)$ – константа рівноваги; F - коефіцієнт;
 C_{A0} – початкова концентрація компонента А, моль/м³;
 X – ступінь перетворення.

Розрахунки проводяться для 6–8 значень ступеня перетворення в діапазоні $X = 0,1-0,9$. Число точок по температурі повинно бути не менше 8–10. Початкова концентрація компонента $C_{A0} = 1$.

2 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1) Визначити оптимальний час перебування і максимальну концентрацію цільового продукту В для двох послідовних реакцій першого порядку $A \rightarrow B \rightarrow D$ в реакторі ідеального витіснення, використовуючи формули (2.10) і (2.12).

2) З рівнянь матеріального балансу (2.14) отримати вирази для визначення оптимального часу перебування і максимальної концентрації цільового продукту В і обчислити їх значення для тих же реакцій в реакторі ідеального змішування. Порівняти показники, досягаються в РІЗ і РІВ.

3) Для оборотної екзотермічної реакції $A \leftrightarrow B$ при заданих значеннях параметрів розрахувати залежність швидкості реакції як функцію температури при різних фіксованих значеннях ступеня перетворення, використовуючи програму OTR.EXE. З графіку в координатах $W=f(T)$ визначити умови, при якій швидкість реакції максимальна. На підставі отриманих даних побудувати оптимальний температурний режим в координатах $X=f(T)$.

3 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Вихідні дані, необхідні для розрахунків, наведені в таблиці 2.1 (для п.1.1 і 1.2) і в таблиці 2.2 (для п.1.3). Номер варіанта відповідає порядковому номеру прізвища студента по журналу.

Таблиця 2.1 – Індивідуальні завдання до лабораторної роботи №2 (п.1.1., п.1.2.)

№	Група 1		Група 2	
	K ₁	K ₂	K ₁	K ₂
1	0,1	0,05	0,3	0,16
2	0,5	0,07	0,5	0,07
3	0,2	0,08	0,25	0,09
4	0,15	0,06	0,4	0,07
5	0,3	0,09	0,15	0,09
6	0,4	0,16	0,2	0,11
7	0,5	0,11	0,5	0,19
8	0,25	0,07	0,35	0,14
9	0,1	0,13	0,15	0,08
10	0,35	0,09	0,4	0,13
11	0,15	0,12	0,3	0,06
12	0,25	0,15	0,1	0,07
13	0,3	0,13	0,20	0,06
14	0,5	0,09	0,5	0,16
15	0,2	0,14	0,35	0,11
16	0,35	0,18	0,15	0,05
17	0,1	0,2	0,1	0,09
18	0,15	0,19	0,25	0,17
19	0,3	0,2	0,4	0,18
20	0,5	0,05	0,5	0,13
21	0,16	0,12	0,32	0,08
22	0,25	0,14	0,12	0,07
23	0,32	0,13	0,18	0,05
24	0,5	0,11	0,48	0,14
25	0,22	0,14	0,34	0,12

Таблиця 2.2 – Індивідуальні завдання до лабораторної роботи №2 (п.1.3.)

№	K ₀₁ · 10 ⁻⁷	E ₁ · 10 ⁻⁴	E ₂ · 10 ⁻³	F · 10 ⁻¹	Температура, °C
1	2	3	4	5	6
1	0,0078	3,30	9,50	1,91	150 – 280
2	2,9	3,80	8,00	2,20	25 – 95
3	0,06	3,38	8,40	1,87	100 – 220
4	0,015	2,64	9,35	1,91	160 – 260
5	3,2	4,66	9,09	2,233	35 – 175
6	0,007	3,42	10,15	1,66	250 – 350

Продовження таблиці 2.2

1	2	3	4	5	6
7	0,0009	3,00	8,90	1,80	100 – 250
8	2,7	4,56	9,50	2,046	70 – 175
9	0,2	4,10	10,00	2,01	150 – 220
10	3,0	4,856	9,06	2,746	25 – 95
11	0,0064	2,83	9,60	1,78	150 – 300
12	0,9	3,64	7,65	1,92	70 – 140
13	3,5	4,36	9,40	2,246	70 – 175
14	0,003	3,05	10,95	1,72	250 – 400
15	2,9	3,80	6,70	1,90	25 – 95
16	0,05	2,80	8,60	1,90	95 – 205
17	0,21	3,75	10,40	2,45	90 – 180
18	0,017	2,94	8,35	1,81	100 – 200
19	0,24	3,38	10,10	1,93	130 – 230
20	0,035	3,62	9,10	1,91	60 – 130
21	0,0064	2,83	9,60	1,78	160 – 280
22	0,9	3,64	7,65	1,92	80 – 170
23	3,5	4,36	9,40	2,246	60 – 180
24	0,003	3,05	10,95	1,72	230 – 380
25	2,9	3,80	6,70	1,90	20 – 110

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі лабораторної роботи формулюється мета роботи, наводяться результати розрахунків по визначенню оптимального часу перебування і максимальної концентрації цільового продукту В для двох послідовних реакцій першого порядку $A \rightarrow B \rightarrow D$ в реакторах ідеального витіснення та ідеального змішування і їх порівняння, описуються розрахунки по визначенню максимальних значень швидкості хімічного перетворення, наводяться графіки залежностей $W=f(T)$ і $X=f(T)$.

5 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

- 1) Класифікація методів вирішення завдань оптимізації.
- 2) Критерій оптимальності. Цільова функція. Вимоги, що пред'являються до критерію оптимальності.
- 3) Види критеріїв оптимальності.
- 4) Умови існування екстремуму функції.
- 5) Основні особливості моделей РІВ і РІЗ.
- 6) Визначення оптимального часу перебування в РІВ.
- 7) Визначення оптимального часу перебування в РІЗ.
- 8) Оптимальний температурний режим для оборотної екзотермічної реакції.
- 9) Умови вибору управляючих параметрів.

3 Лабораторна робота №3. Методи одномірного пошуку для вирішення завдань оптимізації

МЕТА РОБОТИ:

- скласти блок-схему і програму для визначення екстремуму функції методом сканування;
- визначити точки екстремуму цільової функції з використанням складеної програми за методом сканування і прикладних програм по методам "локалізації екстремуму" і "золотого перетину";
- зіставити ефективність використовуваних методів.

1 ОПИС МЕТОДИКИ РОЗРАХУНКІВ

Для всіх методів постановка задачі наступна: визначити положення екстремуму (мінімуму) на інтервалі $[A, B]$.

1.1 Метод сканування

Алгоритм методу наступний. Інтервал пошуку $[A, B]$ розбивається на N рівних ділянок, кожна з яких дорівнює кроку пошуку h . Далі послідовно визначаються значення цільової функції у всіх точках розбиття, включаючи точки A і B , і запам'ятовується мінімальне (максимальне) значення цільової функції (рис. 3.1). Таким чином, екстремальне значення функції може бути знайдено з точністю до величини кроку пошуку.

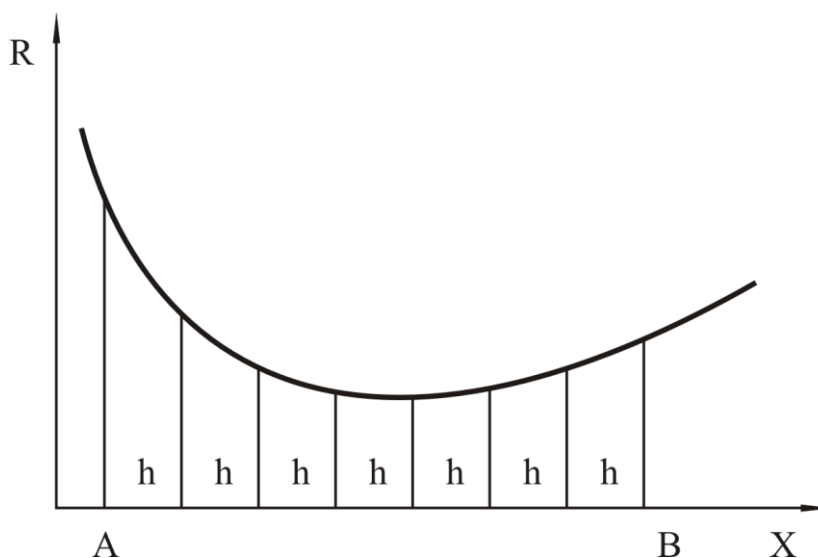


Рис. 3.1 – Графічне зображення методу сканування

1.2 Метод локалізації екстремуму

Інтервал пошуку $[A, B]$ розбивається на 4 рівні частини і в точках розбиття і на границях інтервалу обчислюється значення цільової функції – в точках 0, 1, 2, 3 і 4 (всього 5 значень, рис. 3.2). Локалізується положення екстремуму (мінімуму) на інтервалі в два рази меншому, наприклад $[1; 3]$, ніж попередній $[0; 4]$. Отриманий інтервал знову розділяється на 4 рівні частини. На

цьому етапі і далі обчислюються значення цільової функції всього в двох нових точках 5 і 6.

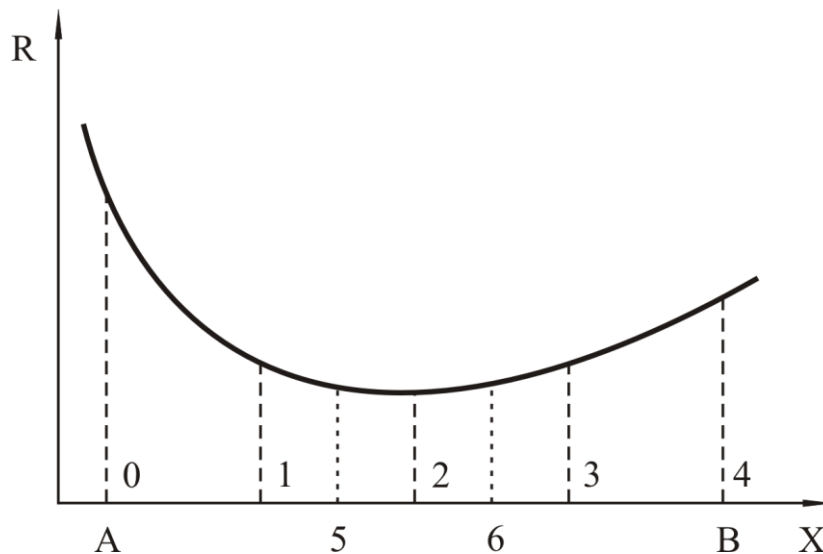


Рис. 3.2 – Графічне зображення методу локалізації екстремуму

Локалізація екстремуму триває до тих пір, доки не буде досягнута задана точність. Блок-схема програми "OPTIMIZE. Метод локалізації екстремуму", що реалізує даний метод, наведена на рис. 3.3.

1.3 Метод "золотого перетину"

В основі цього методу лежить закон геометричного відношення або "золотого перетину" (рис. 3.4). Нехай дано відрізок **a**, який розділений на дві нерівні частини **b** і **c** так, що виконується відношення:

$$\frac{a}{b} = \frac{b}{c} \quad \text{або} \quad a \cdot c = b^2 \quad (3.1)$$

Відповідно до цього відношення визначаються точки досліджуваного інтервалу, в яких необхідно проводити обчислення цільової функції.

Оскільки $c = a - b$, то підставивши вираз для **c** в (3.1) і ввівши нову змінну $k = \frac{b}{a}$, після перетворень отримаємо:

$$k^2 + k - 1 = 0 \quad (3.2)$$

Вирішивши (3.2), отримаємо наближене значення $k \approx 0,618$.

Порядок пошуку екстремуму методом "золотого перетину" наступний. На досліджуваному інтервалі визначаються дві точки X_1 і X_2 :

$$X_1 = A + (1-k) \cdot a,$$

$$X_2 = A + k \cdot a,$$

де **a** – довжина інтервалу [A; B]. У точках x_1 і x_2 розраховується цільова функція **R**. За знайденими значеннями $R(X_1)$ і $R(X_2)$ з урахуванням $R(A)$ і $R(B)$ визначається підінтервал, в якому локалізовано екстремум. В нашому випадку (див. рис. 3.4), оскільки, наприклад, $R(X_1) < R(X_2)$ – це підінтервал [A; X_2]. Далі всередині нового підінтервалу [A; X_2] знаходиться точка X_3 :

$$X_3 = A + (1-k) \cdot a,$$

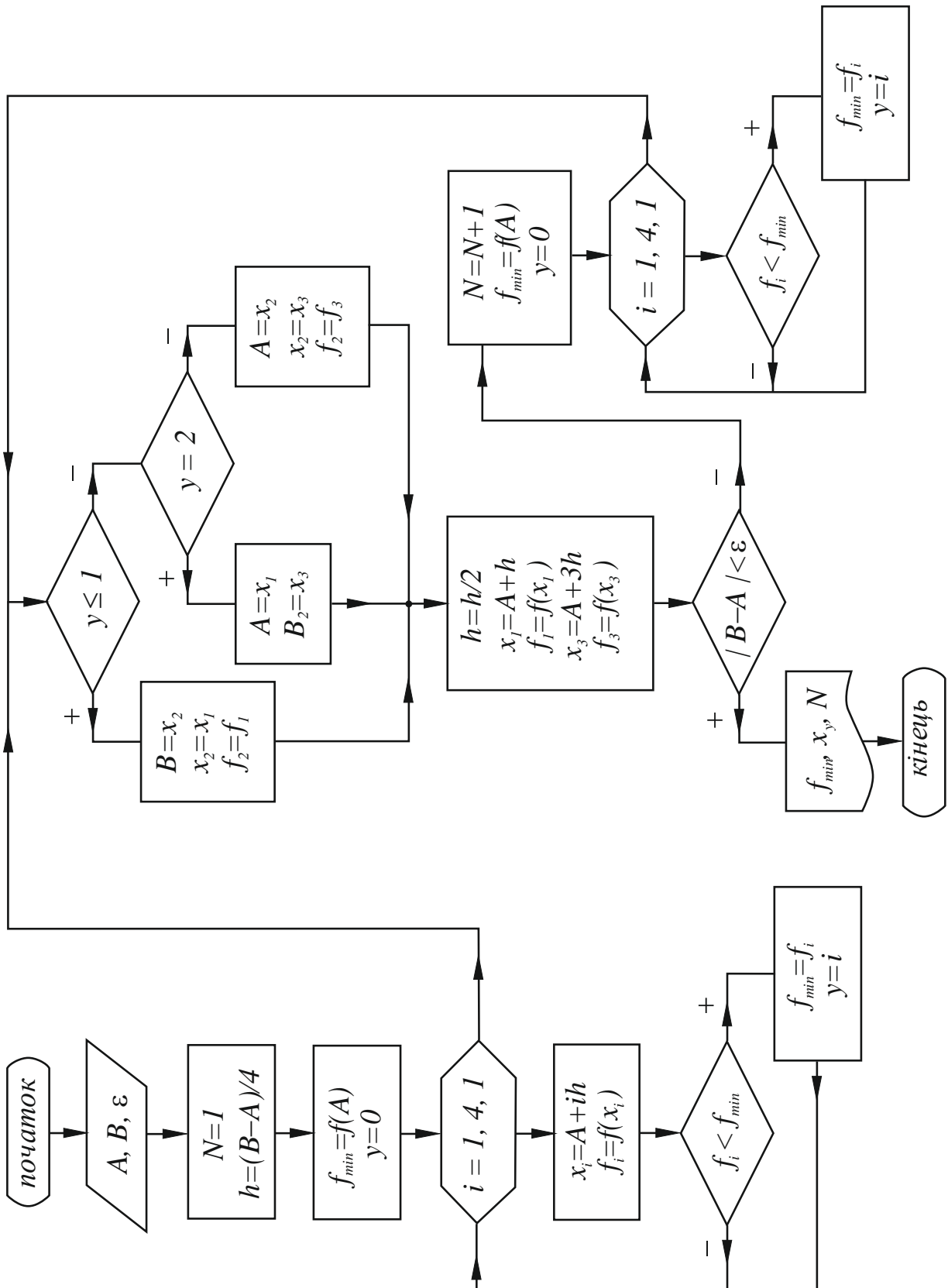


Рис. 3.3. Блок-схема методу локалізації екстремуму

де a – довжина підінтервалу $[A; X_2]$.

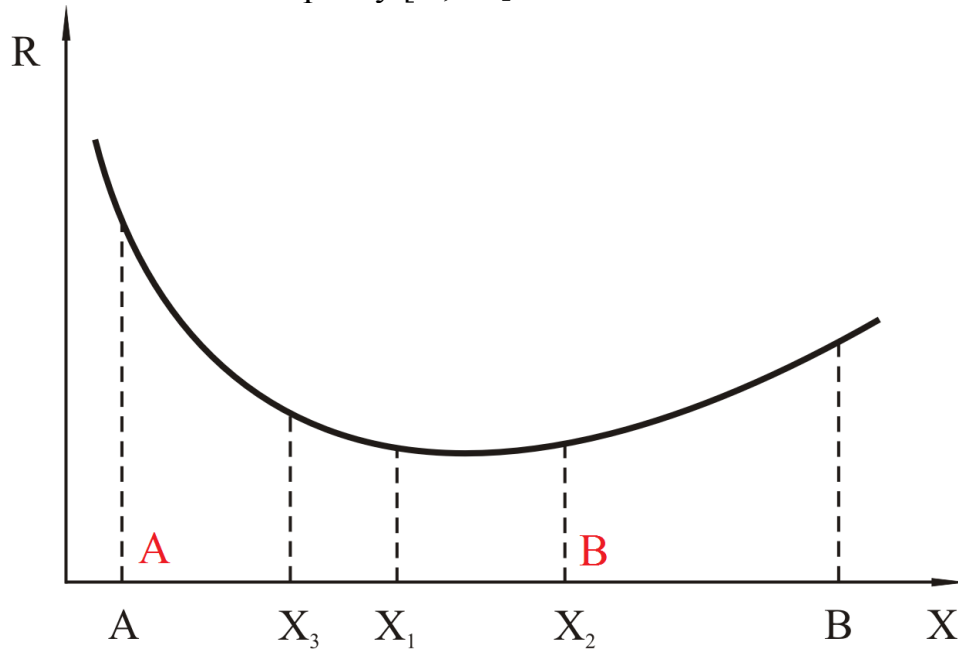


Рис. 3.4 – Графічне зображення методу золотого перетину

Далі обчислюється значення цільової функції $R(X_3)$ і порівнюються значення $R(X_3)$, $R(X_1)$. Знаходиться мінімальне значення (в даному випадку $R(X_1)$) і процедура триває, визначається аналогічно точка X_4 і т.д., поки не буде знайдено екстремум із заданою точністю. Блок-схема програми "ОПТИМІЗЕ. Метод золотого перетину", що реалізує даний метод, приведена на рис. 3.5.

2 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Робота виконується в такій послідовності:

- складають блок-схему і програму для визначення екстремуму (мінімуму) методом сканування;
- виконують розрахунки на ЕОМ по складеній програмі (метод сканування) і прикладним програмам "ОПТИМІЗЕ. Метод "локалізації екстремуму" і "ОПТИМІЗЕ. Метод "золотого перетину";
- дається оцінка порівняння ефективності методів.

3 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

У таблиці 3.1 наведені цільові функції і область допустимих змін досліджуваних незалежних змінних. Необхідна точність визначення координат точки екстремуму **0,001**.

Таблиця 3.1 – Індивідуальні завдання до лабораторної роботи №3

№ варіанту	Цільова функція $R(x)$	Діапазон варіювання змінних
1	$4,4x^3 - 9,2x^2 - 7,3x + 10,97$	0; 10
2	$0,4x^3 + 2,5x^2 - 14x + 2$	0; 10
3	$0,2x^4 - 1,5x^3 - 4x + 25$	0, 10

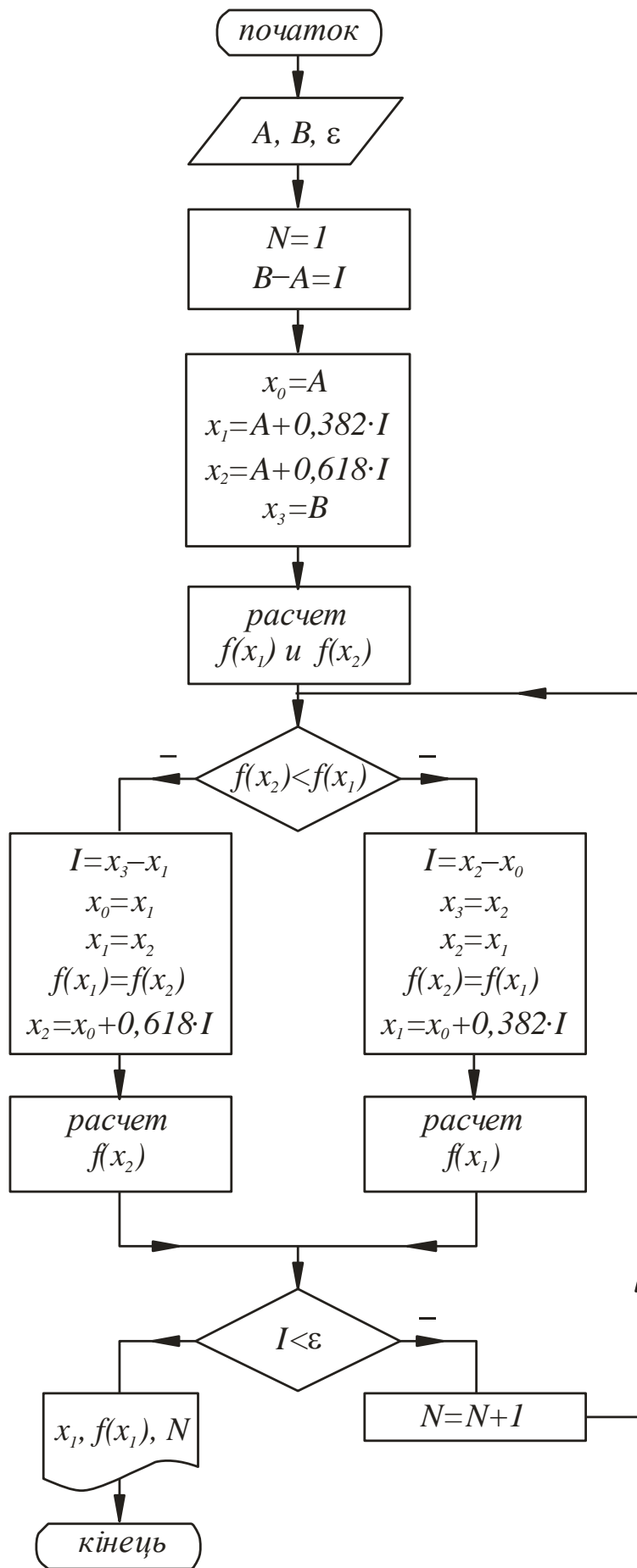


Рис. 3.5 – Блок-схема методу "золотого перетину"

Продовження таблиці 3.2

№ варіанту	Цільова функція R(x)	Діапазон варіювання змінних
4	$0,5x^4 - 8x^2 + 2x + 2$	0; 10
5	$0,2x^4 - 0,7x^3 - 6,5x + 8,2$	0; 10
6	$4x^4 - 9x^3 + 2x^2 - 8x + 2$	0, 10
7	$3x^3 - x^2 - 13x - 660$	0; 10
8	$x^3 - 0,39x^2 - 10,5x + 11$	0; 10
9	$x^3 - 1,473x^2 - 5,738x + 6,763$	0, 10
10	$0,8x^4 + 0,35x^2 - 8x + 0,8$	0; 10
11	$x^3 - 16x^2 + 25x + 44$	0; 10
12	$x^3 - 10x - 760$	0; 10
13	$1,6x^4 - 2,7x^2 + 11,3x - 160,6$	-10, 0
14	$3x^4 - 7x^2 + 13x - 65,3$	-10, 0
15	$x^4 - 2x^2 + 9x - 16,8$	-10, 0
16	$2x^4 - 5x^2 + 10x - 34,81$	-10, 0
17	$x^4 - 5x^2 + 14x - 1200$	-10, 0
18	$0,1x^3 + x^2 - 4x - 20$	-10, 5
19	$x^4 - 2x^2 + 5x - 3,2$	-10, 0
20	$4,2x^3 - 9,1x^2 - 7,2x + 12$	- 3, 9

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі лабораторної роботи описуються результати розрахунків, виконаних на ЕОМ. Наводиться блок-схема програми за методом сканування, лістинг програми та результати розрахунків, дається порівняльна оцінка ефективності методів одномірного пошуку.

5 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

- 1) Які існують методи одномірного пошуку?
- 2) Суть методів одномірного пошуку.
- 3) Метод сканування. Алгоритм розрахунку.
- 4) Блок-схема методу сканування.
- 5) Метод локалізації екстремуму. Алгоритм розрахунку.
- 6) Блок-схема методу локалізації екстремуму.
- 7) Метод "золотого перетину". Алгоритм розрахунку.
- 8) Блок-схема методу "золотого перетину".
- 9) Порівняльна характеристика методів одномірного пошуку.

4 Лабораторна робота №4. Безградієнтні методи розв'язання задач оптимізації

МЕТА РОБОТИ:

- визначити координати точки екстремуму цільової функції використанням методу покоординатного спуску і методу Хука-Дживса;
- довести, що знайдений екстремум є глобальним;
- зіставити ефективність використаних методів.

1 ОПИС МЕТОДИКИ РОЗРАХУНКІВ

При вирішенні конкретної задачі оптимізації перш за все необхідно вибрати математичний метод, який давав би кінцевий результат з найменшими витратами на обчислення або ж давав можливість отримати найбільший обсяг інформації про шукане рішення.

В даний час для вирішення завдань оптимізації розроблено велику кількість методів, які можна поділити на два класи: аналітичні та чисельні. Чисельні методи пошуку екстремуму функції використовуються в тих випадках, коли в точці екстремуму відсутні похідні або цільову функцію (R) складно або неможливо продиференціювати.

У практиці вирішення задач оптимізації для нелінійних цільових функцій широко використовуються методи нелінійного програмування. Ці методи можуть бути охарактеризовані як багатокрокові методи або методи послідовного поліпшення вихідного (або початкового) рішення, причому зазвичай заздалегідь не можна сказати, яка кількість кроків гарантує знаходження оптимуму із заданою точністю. Крім того, вибір величини кроку в значній мірі визначає ефективність того чи іншого методу.

Більшість методів нелінійного програмування використовує ідею руху в n-вимірному просторі в напрямку оптимуму. При цьому з деякого вихідного або проміжного стану $\bar{x}^{(k)}$ здійснюється перехід в наступний стан $\bar{x}^{(k+1)}$ зміною вектора на величину $\Delta\bar{x}^{(k)}$, яка називається кроком, тобто

$$\bar{x}^{(k+1)} = \bar{x}^{(k)} + \Delta\bar{x}^{(k)} \quad (4.1)$$

Очевидно, що для випадку пошуку оптимуму, що є мінімумом, для вдало обраного кроку повинна виконуватися умова:

$$R(\bar{x}^{(k+1)}) < R(\bar{x}^{(k)}) \quad (4.2)$$

В іншому випадку перехід в стан $\bar{x}^{(k+1)}$ недоцільний.

У значної частини методів крок, тобто його величина і напрямок, визначається як деяка функція стану $\bar{x}^{(k)}$.

$$\Delta\bar{x}^{(k)} = \Delta\bar{x}^{(k)}(\bar{x}^{(k)}) \quad (4.3)$$

Методи нелінійного програмування у відповідності зі способом визначення кроку можна розділити на три групи: градієнтні, безградієнтні і методи випадкового пошуку.

Нижче наведені 2 методи пошуку екстремуму цільової функції, які відносяться до групи безградієнтних методів: метод покоординатного спуску і метод Хука-Дживса.

1.1 Метод покоординатного спуску

При вирішенні завдань оптимізації методом покоординатного спуску пошук екстремуму цільової функції здійснюється по черговій зміні кожної незалежної змінної до досягнення часткового екстремуму цільової функції.

Кожна незалежна змінна при фіксованому значенні інших змінних варіюється до тих пір, поки на даному напрямку не буде знайдений екстремум цільової функції. Потім, зафіксувавши знайдені значення цільової функції і незалежної змінної, переходять до варіювання іншої незалежної змінної, де знову відшукується часткове значення екстремуму і т.д.

При виборі стратегії пошуку екстремуму по напрямку можна використовувати будь-який з методів пошуку екстремуму функції однієї змінної (метод одномірного сканування, метод локалізації екстремуму, метод «золотого перетину» і ін.).

Відповідно до (4.1) координати наступної точки визначаються за такими виразами:

$$\begin{aligned} x_i^{(k+1)} &= x_i^{(k)} + h_i, \\ x_j &= \text{const} \quad (j = 1, 2, 3, 4, 5, \dots, n), \end{aligned} \quad (4.4)$$

де n – число незалежних змінних; h_i – приріст i -ої незалежної змінної (крок).

В (4.4) величина кроку h може змінюватися як за величиною, так і за знаком. В разі наближення до точки екстремуму для поліпшення збіжності величину кроку рекомендується зменшувати.

Алгоритм пошуку точки екстремуму методом покоординатного спуску наступний:

- 1) Для завдання початкової точки розраховується цільова функція.
- 2) Вибирається одна з незалежних змінних і напрямок пошуку.
- 3) Для обраної змінної задається крок h і розраховується нове $(k+1)$ -е значення змінної по (4.4).
- 4) В отриманій точці знаходиться значення цільової функції.
- 5) В разі вдалого кроку (наприклад, при пошуку мінімуму повинна виконуватися умова (4.2)), новий крок робиться в тому ж напрямку.
- 6) У випадку невдалого кроку слід змінити знак h на протилежний або повернутися до останньої з вдалих точок.
- 7) Запам'ятовується значення цільової функції і незалежної змінної в даній точці.
- 8) Змінюється напрямок пошуку і аналогічним чином проводиться пошук локального екстремуму за іншою незалежною змінною.
- 9) Пошук триває до тих пір, поки точка екстремуму не буде визначена із заданою точністю.

Розглянемо функцію двох змінних. Її лінії постійного рівня представлені на рисунку 4.1, а мінімум лежить в точці (x_1^*, x_2^*) . З точки A ми проводимо

пошук мінімуму уздовж напрямку осі x_1 і, таким чином, знаходимо точку **B**, в якій дотична до лінії постійного рівня паралельна осі x_1 . Потім, зробивши пошук з точки **B** в напрямку осі x_2 , отримуємо точку **C**, провівши пошук паралельно осі x_1 , отримуємо точку **D**, і т.д. Таким чином, ми приходимо до оптимальної точки.

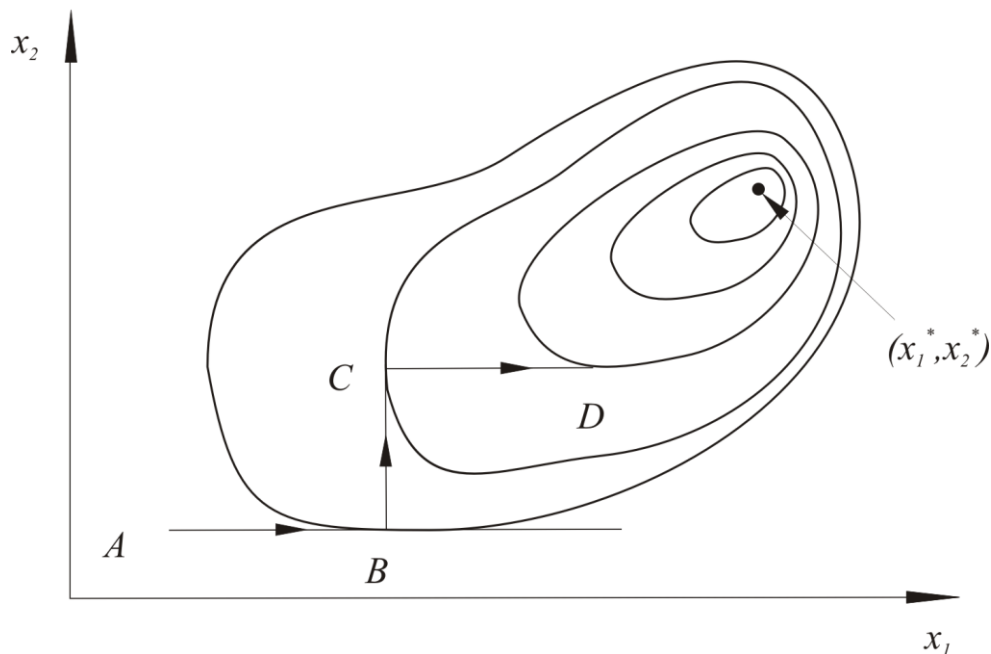


Рис. 4.1 – Графічне зображення пошуку екстремуму за методом покоординатного спуску

1.2 Метод Хука-Дживса

Даний метод пошуку точки екстремуму цільової функції є більш ефективним в порівнянні з методом покоординатного спуску. Пошук складається з послідовності кроків пошуку, який досліджує, навколо базисної точки, за яким у разі успіху слід виконати пошук за зразком.

Алгоритм методу наступний (рис. 4.2).

А. Вибирається початкова базисна точка \mathbf{b}_1 і крок \mathbf{h}_j для кожної змінної x_j , $j = 1, 2, \dots, n$. Можна використовувати і однаковий крок \mathbf{h} для всіх змінних, однак зазначена вище модифікація може виявитися корисною.

Б. Досліджувачий пошук проводиться з метою отримання відомостей про локальну поведінку цільової функції в околі базисної точки. Ці відомості в подальшому будуть використані для знаходження напрямку пошуку за зразком, за допомогою якого можна сподіватися досягти більшого зменшення значення функції.

1. Обчислюється значення цільової функції $R(\mathbf{b}_1)$ в базисної точці (\mathbf{b}_1) .

2. Кожну незалежну змінну по черзі змінюємо на величину кроку. Таким чином, обчислюється значення цільової функції $R(\mathbf{b}_1 + \mathbf{h}_1 \mathbf{e}_1)$, де \mathbf{e}_1 – одиничний вектор у напрямку осі x_1 . Якщо це призводить до зменшення значення цільової функції в разі пошуку мінімуму, то \mathbf{b}_1 змінюють на $\mathbf{b}_1 + \mathbf{h}_1 \mathbf{e}_1$. В іншому випадку обчислюється значення функції $R(\mathbf{b}_1 - \mathbf{h}_1 \mathbf{e}_1)$, і якщо її значення зменшилось, то \mathbf{b}_1 замінюють $\mathbf{b}_1 - \mathbf{h}_1 \mathbf{e}_1$. Якщо жоден з пророблених кроків не приводить до

зменшення значення цільової функції, то точка \mathbf{b}_1 залишається незмінною і розглядаються зміни в напрямку осі x_2 , тобто знаходять значення функції $R(\mathbf{b}_1 + \mathbf{h}_2 \mathbf{e}_2)$ і т.д. Коли будуть розглянуті всі n змінні, то отримуємо нову базисну точку \mathbf{b}_2 .

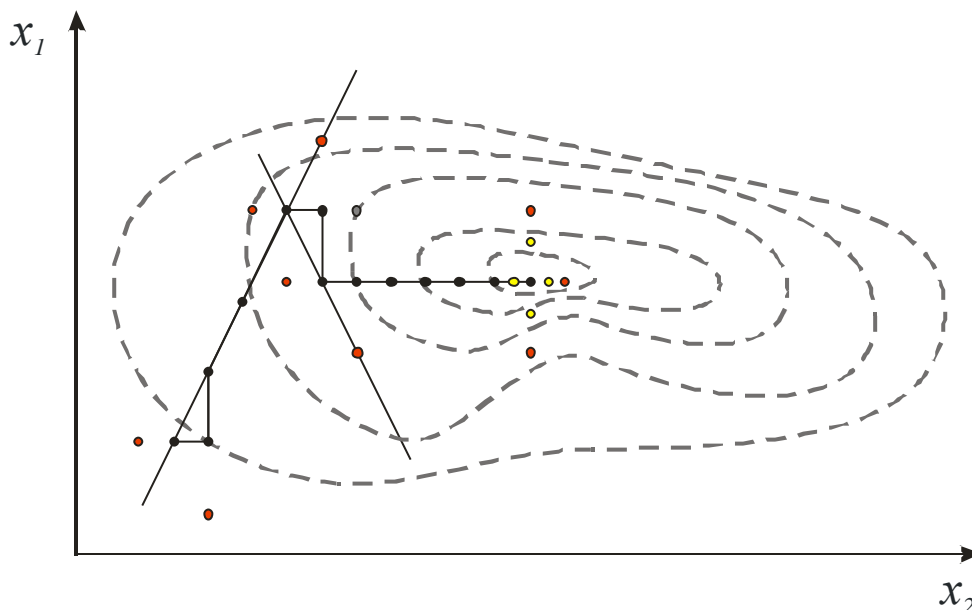


Рис. 4.2 – Графічне зображення пошуку екстремуму за методом Хука-Дживса

3. Якщо $\mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_1$, тобто зменшення функції не було досягнуто, то дослідження повторюється навколо тієї ж базисної точки \mathbf{b}_1 , але зі зменшеною величиною кроку. На практиці задовільним вважається зменшення величини кроку (кроків) в десять разів від початкової довжини.

4. Якщо $\mathbf{b}_2 \neq \mathbf{b}_1$, то проводиться пошук за зразком.

В. При пошуку за зразком використовується інформація, отримана в процесі дослідження, і мінімізація функції завершується пошуком у напрямку, який задається зразком. Ця процедура виконується таким чином:

1. Розумно рухатися від базисної точки \mathbf{b}_2 у напрямку $\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1$, оскільки пошук в цьому напрямку вже привів до зменшення значення цільової функції. Точка зразка може бути обчислена в такий спосіб:

$$\mathbf{P}_1 = \mathbf{b}_1 + 2(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1) \quad (4.5)$$

У загальному випадку:

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{b}_i + 2(\mathbf{b}_{i+1} - \mathbf{b}_i) \quad (4.6)$$

2. Проводиться дослідження в околицях точки \mathbf{P}_1 (\mathbf{P}_i).

3. Якщо найменше значення на кроці \mathbf{B}_2 менше значення в базисній точці \mathbf{b}_2 (в загальному випадку \mathbf{b}_{i+1}), то отримують нову базисну точку \mathbf{b}_3 (\mathbf{b}_{i+2}), після чого слід повторити крок **В1**. В іншому разі не проводиться пошук за зразком з точки \mathbf{b}_2 (\mathbf{b}_{i+1}), а замінюється базисна точка. В якості нової базисної точки вибирається та точка, в якій на попередньому кроці значення цільової функції було мінімальним. Потім виконується дослідження навколо нової базисної точки.

4. Процес пошуку завершується, коли довжина кроку (довжини кроків) стануть менше заданого малого значення.

Нижче наведена блок-схема даного методу (рис. 4.3), блок-схема етапу 3 приведена на рис. 4.4.

2 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Робота виконується в такій послідовності:

- в директорії LABS знаходять програму «OPTIMIZE.EXE. Безградієнтні методи» і виконують з її допомогою розрахунки на ЕОМ відповідно до своїх індивідуальних завдань, в результаті яких визначають координати точки екстремуму цільової функції;
- здійснюють перевірку: чи є знайдений екстремум глобальним, для чого розрахунки повторюються кілька разів з початкових точок з різними координатами.

Введення вихідних даних в програмі організовано в діалоговому режимі. В якості вихідних даних вводяться вид цільової функції, координати початкової точки, початковий крок, величина прирощення.

3 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

У табл. 4.1. наведені цільові функції і область допустимих змін досліджуваних незалежних змінних. Необхідна точність визначення координат точки екстремуму 0,001.

Таблиця 4.1 – Індивідуальні завдання до лабораторної роботи №4

№ варіанту	Цільова функція $R=R(x)$	Діапазон варіювання змінних
1	$(x_1-1)^2+(x_2-3)^4+4\cdot(x_3+5)^2$	-10; +10
2	$3\cdot(x_1-1)^4+2\cdot(x_2-2)^2+(x_3-3)^6$	-10; +10
3	$3\cdot(x_1-4)^2+5\cdot(x_2+3)^2+2,5\cdot(2\cdot x_3+5)^2$	-10; +10
4	$(x_1-7)^4+4\cdot(x_2-9)^2+3\cdot(x_3-1)^4$	-10; +10
5	$3\cdot(2\cdot x_1+1)^4+5\cdot(x_2+3)^2+4\cdot(x_3-4)^2$	-10; +10
6	$0,5\cdot(8\cdot x_1-32)^4+16\cdot(3\cdot x_2+0,9)^2+4\cdot(5\cdot x_3-1)^2$	-10; +10
7	$2,5\cdot(2\cdot x_1-1)^2+4,8\cdot(x_2+5)^2+1,4\cdot(x_3-2)^2$	-10; +10
8	$1,5\cdot(10\cdot x_1+2)^2+8\cdot(6\cdot x_2-12)^2+3\cdot(12\cdot x_3+6)^2$	-10; +10
9	$12\cdot(2\cdot x_1-2,8)^4+3\cdot(0,5\cdot x_2+4)^2+14\cdot(2,5\cdot x_3-10)^4$	-10; +10
10	$2\cdot(x_1-6)^4+4\cdot(x_2+5)^2+2\cdot(x_3-3)^4$	-10; +10
11	$(4\cdot x_1-2)^2+2,5\cdot(3\cdot x_2+4,2)^2+(4\cdot x_3-1,6)^2$	-10; +10
12	$2\cdot(x_1-3)^4+3\cdot(x_2-1)^4+(x_3-2)^4$	-10; +10
13	$10\cdot(3\cdot x_1-18)^2+2\cdot(12\cdot x_2+18)^2+11\cdot(5\cdot x_3-10)^2$	-10; +10
14	$3\cdot(x_1-5)^4+5\cdot(x_2+1)^2+4\cdot(x_3-4)^4$	-10; +10
15	$(4\cdot x_1-1)^2+4,5\cdot(2\cdot x_2+3,2)^2+(5\cdot x_3-1,5)^2$	-10; +10

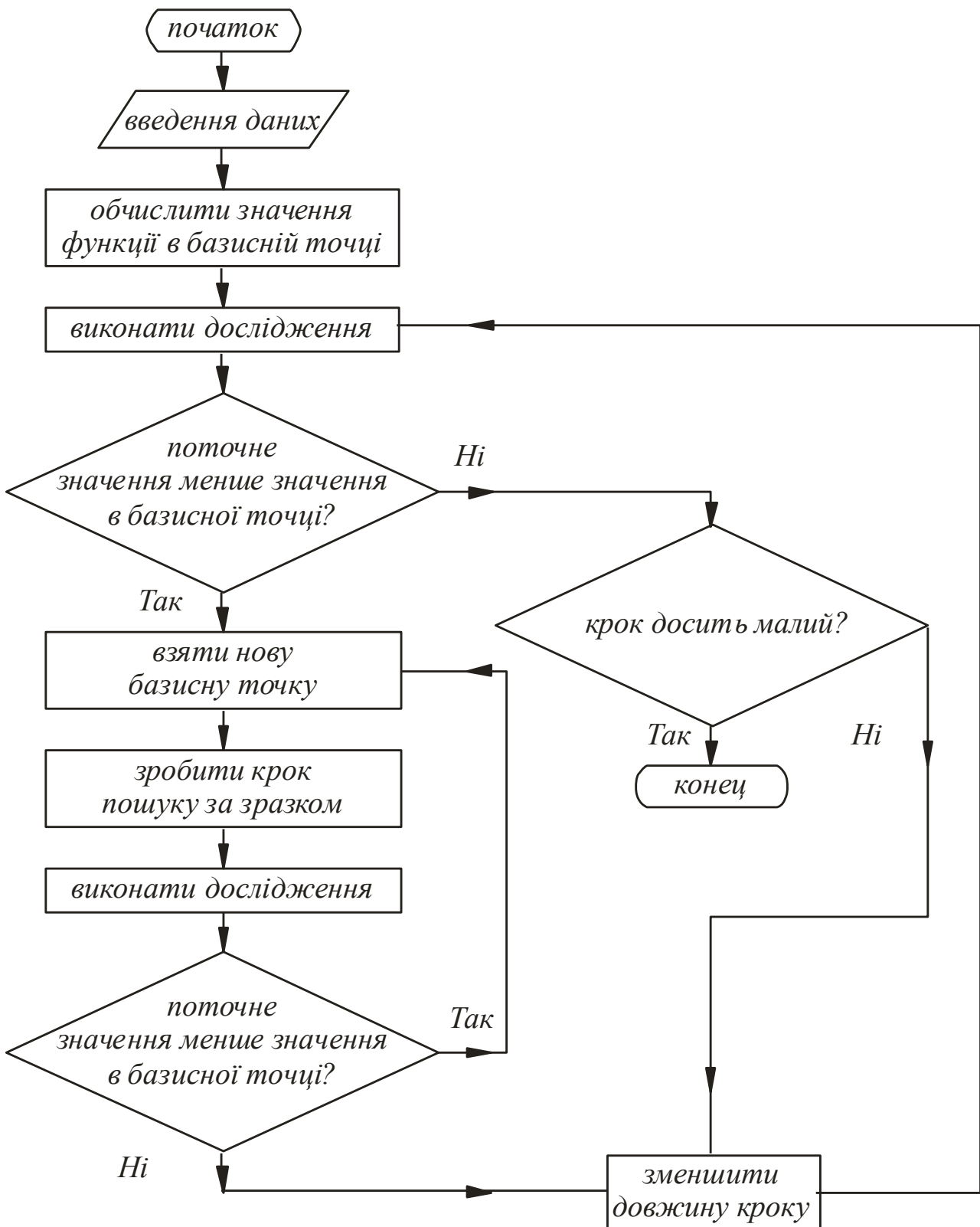


Рис. 4.3 Блок-схема методу Хука-Дживса

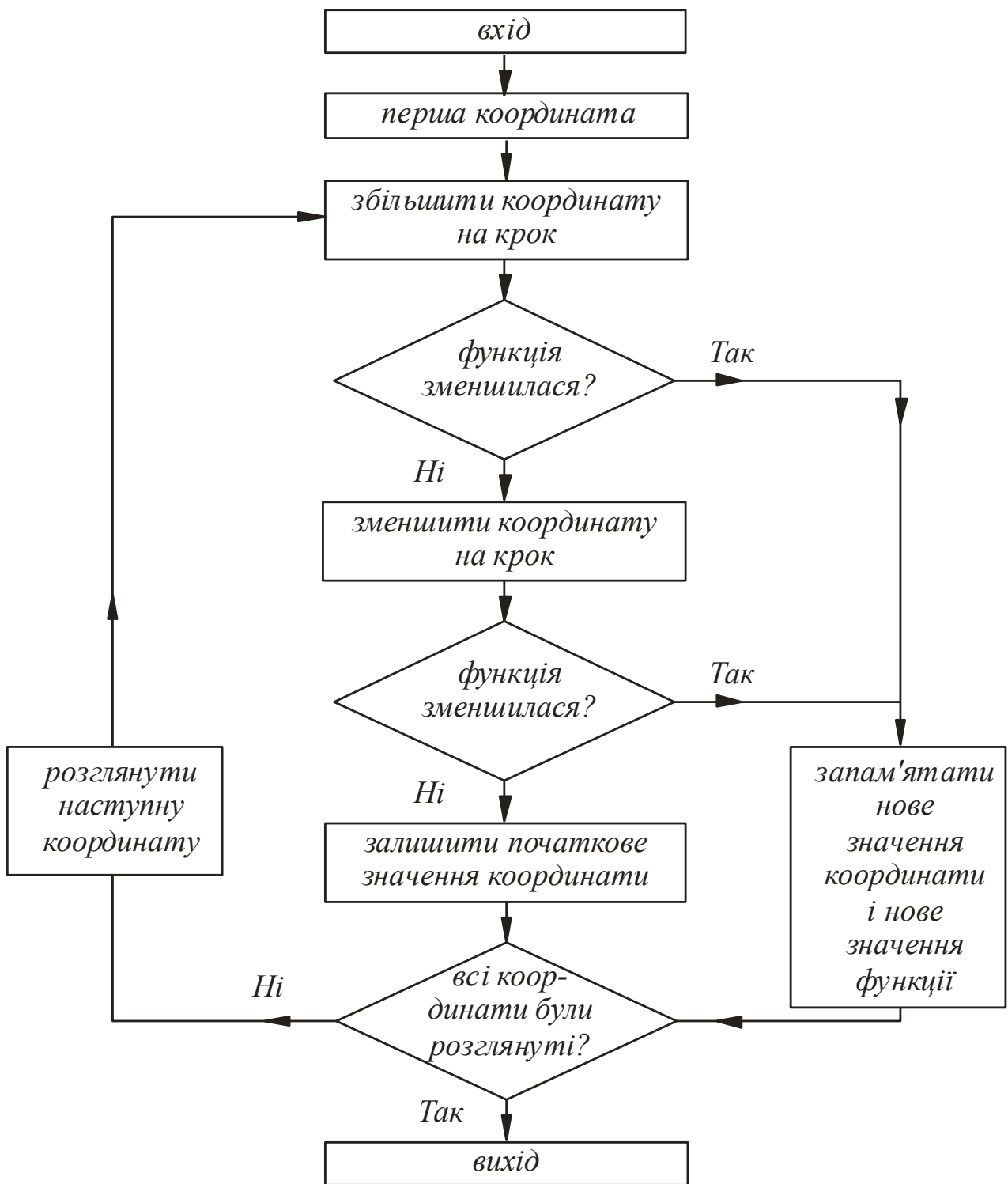


Рис. 4.4 Блок-схема етапу «Виконати дослідження»

Продовження таблиці 4.1

16	$(x_1-7)^2+(x_2-2)^4+5\cdot(x_3+4)^2$	-10; +10
17	$4\cdot(x_1-4)^4+4\cdot(x_2-6)^4+(x_3-1)^6$	-10; +10
18	$2\cdot(x_1-2)^2+2\cdot(x_2+1)^2+1,5\cdot(2\cdot x_3-6)^2$	-10; +10
19	$(x_1-5)^4+5\cdot(x_2-7)^2+3\cdot(x_3-2)^4$	-10; +10
20	$4\cdot(2\cdot x_1+3)^4+3\cdot(x_2+2)^2+2\cdot(x_3-5)^2$	-10; +10

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі з лабораторної роботи описуються результати розрахунків, виконаних на ЕОМ, наводяться докази знаходження глобального екстремуму.

5 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

- 1) Класифікація методів вирішення завдань оптимізації.
- 2) Загальна ідея методів нелінійного програмування.
- 3) Метод покоординатного спуску, алгоритм розрахунку.
- 4) Скласти блок-схему методу покоординатного спуску.
- 5) Метод Хука-Дживса, алгоритм розрахунку.
- 6) Загальна блок-схема методу Хука-Дживса.
- 7) Блок-схема пошуку в базисної точці.
- 8) Як довести, що знайдений екстремум є глобальним?
- 9) Основні переваги і недоліки методів покоординатного спуску і Хука-Дживса.
- 10) Чи може в методі покоординатного спуску впливати на результат (значення оптимуму) і на ефективність пошуку порядок чергування змінних.

5 Лабораторна робота №5. Симплексний метод розв'язування задач оптимізації

МЕТА РОБОТИ:

- скласти підпрограму для розрахунку цільової функції;
- визначити точки екстремуму цільової функції з використанням прикладних програм, що реалізують симплексний метод і метод Нелдера-Міда;
- порівняти ефективність використовуваних методів.

1 ОПИС МЕТОДИКИ РОЗРАХУНКІВ

1.1 Симплексний метод

Основна ідея цього методу полягає в тому, що за відомими значеннями цільової функції в вершинах випуклого багатогранника, який називається симплексом, знаходиться напрямок, в якому потрібно зробити наступний крок, щоб отримати максимальне зменшення (збільшення) значення цільової функції. При цьому під *симплексом* в n-вимірному просторі розуміється випуклий багатогранник, який має n+1 вершину. Прикладом симплекса в двовірному просторі, тобто на площині, є трикутник. У тривимірному просторі – тетраедр.

Симплекс має наступну властивість: проти будь-якої з його вершин S_j розташована тільки одна грань, на якій можна побудувати новий симплекс, що відрізняється від попереднього розташуванням нової вершини \tilde{S}_j , тоді як інші вершини обох симплексів збігаються. Вершина нового симплекса, взагалі кажучи, може перебувати і по іншу сторону грані від вершини S_j . Ця властивість симплекса і зумовила можливість його застосування при вирішенні задач оптимізації.

1.2 Алгоритм симплексного методу

Нехай вершинам вихідного симплекса S_i ($i=1,2, \dots, n+1$) відповідають координати $U^{(i)}=(U_1^{(i)}, U_2^{(i)}, \dots, U_n^{(i)})$ ($i=1,2, \dots, n$). Найбільше значення цільової функції відповідає вершині S_j . Визначимо координати вершини \tilde{S}_j нового симплекса.

Вершина \tilde{S}_j розташовується симетрично вершині S_j щодо середини грані, яка знаходиться проти вершини S_j . Координати центру цієї грані $U^{(A)}$ визначаються за формулою:

$$\bar{U}^{(A)} = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n+1} \bar{U}^{(i)}, \quad (5.1)$$

причому підсумовування ведеться тільки за тими векторами \bar{U}_i , які відповідають вершинам S_i , що створюють цю грань.

Вектор \bar{L} , що характеризує відстань від вершини S_j до центру протилежної грані, буде дорівнювати:

$$\bar{L} = \bar{U}^{(A)} - \bar{U}^{(j)}. \quad (5.2)$$

Координати вершини \tilde{S}_j визначаються за формулою

$$\tilde{U}^{(j)} = \bar{U}^{(A)} + \bar{L} = 2 \cdot \bar{U}^{(A)} - \bar{U}^{(j)}. \quad (5.3)$$

Підставивши у вираз (5.3) для $\bar{U}^{(A)}$ з (5.1), отримаємо:

$$\tilde{U}^{(j)} = \frac{2}{n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n+1} \bar{U}^{(i)} - \left(1 + \frac{2}{n}\right) \cdot \bar{U}^{(j)}. \quad (5.4)$$

Формула (5.4) визначає координати вершини \tilde{S}_j нового симплекса.

При необхідності зменшити розміри симплекса (в разі зациклення в околі точки оптимуму) замість формули (5.2) можна користуватися таким виразом:

$$\tilde{U}^{(j)} = \bar{U}^{(A)} + \frac{1}{2} \cdot \bar{L} = \frac{3}{2} \cdot \bar{U}^{(A)} - \frac{1}{2} \bar{U}^{(j)} \quad (5.5)$$

Найбільш ефективно симплексний метод сходиться при використанні правильних симплексів: рівностороннього трикутника або тетраедра, утвореного рівносторонніми трикутниками. У цьому випадку напрямок пошуку збігається з напрямком градієнта (якщо симплекс досить малий).

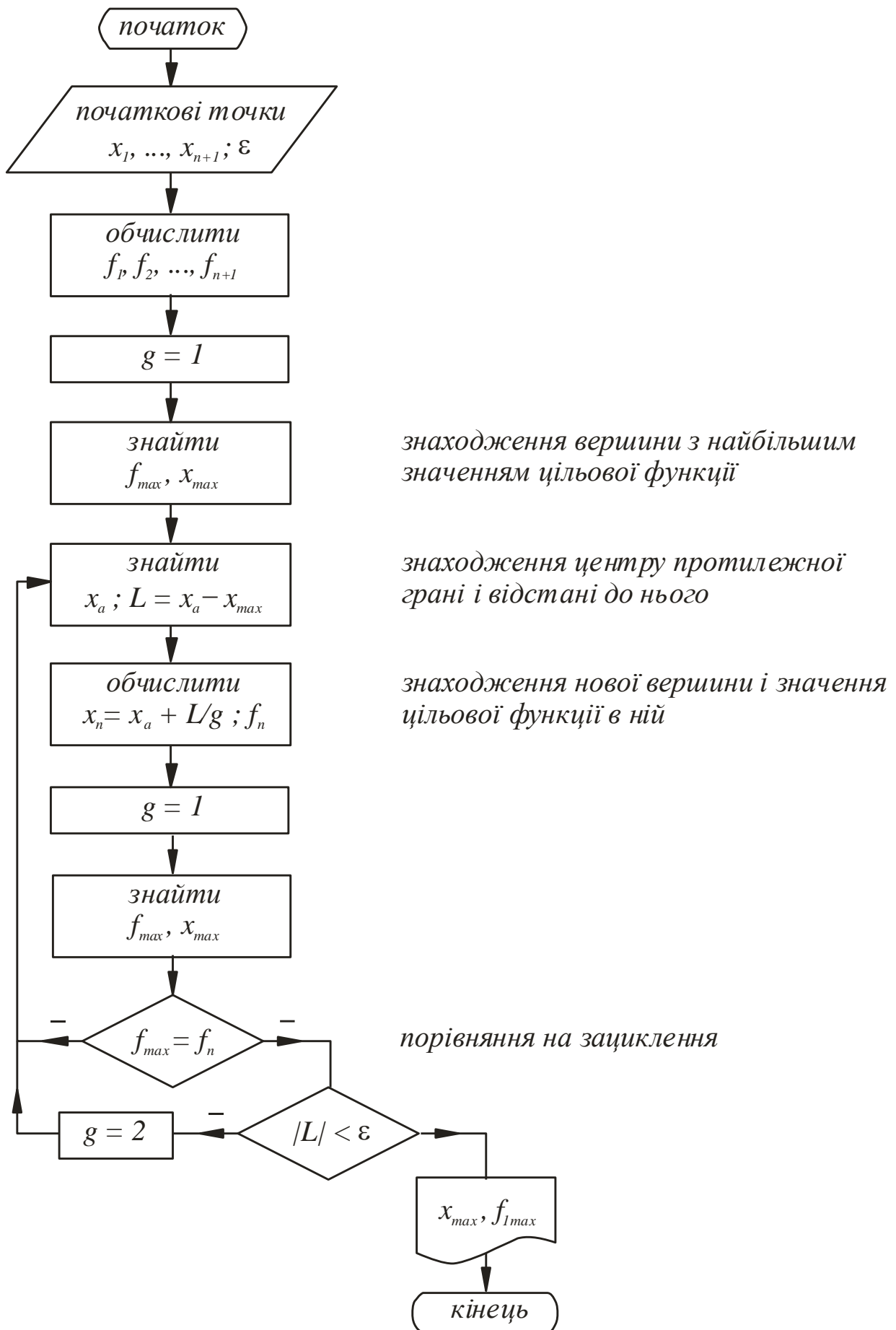


Рис. 5.1. Блок-схема симплексного методу

Симплексний метод має ще одну важливу перевагу: при збільшенні розмірності задачі обчислювальні витрати зростають незначно, тому що на кожному кроці вважається тільки одне значення цільової функції. Блок-схема методу приведена на рис. 5.1.

1.3 Метод Нелдера-Міда

В даному методі симплекс рухається за допомогою трьох операцій: відображення, розтягування і стиснення. Значення цих операцій стане зрозумілим при розгляді кроків процедури.

А. Знайдемо значення функції в вершинах симплекса.

$$f_1 = f(x_1); f_2 = f(x_2); \dots; f_{n+1} = f(x_{n+1})$$

Б. Знайдемо найбільше значення функції f_h , наступне за найбільшим значенням функції f_g , найменше значення функції f_l і відповідні їм точки x_h, x_g , і x_l .

В. Знайдемо центр ваги всіх точок, за винятком точки x_h .

$$x_0 = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq h}}^{n+1} x_i$$

Обчислимо $f(x_0) = f_0$.

Г. При пошуку мінімуму слід почати переміщення від точки x_h . Відбивши точку x_h щодо точки x_0 , отримаємо точку x_r і знайдемо $f(x_r) = f_r$.

Операція відображення ілюструється рис. 5.2. Якщо $\alpha > 0$ – коефіцієнт відбиття, то положення точки x_r визначається наступним чином:

$$x_r = (1 + \alpha) x_0 - \alpha \cdot x_h.$$

Д. Порівняємо значення функцій f_r і f_l .

1. Якщо $f_r < f_l$, то отримаємо найменше значення функції. Напрямок з точки x_0 в точку x_r найзручніший для переміщення. Тоді ми виконуємо розтягнення в цьому напрямку і знаходимо точку x_e і значення функції $f_e = f(x_e)$. Рисунок 5.3 ілюструє операцію розтягування симплекса. Коефіцієнт розтягнення $\gamma > 1$ можна знайти з наступних співвідношень:

$$x_e - x_0 = \gamma(x_r - x_0),$$

тобто $x_e = \gamma x_r + (1 - \gamma)x_0,$

де $\gamma = |x_e - x_0| / |x_r - x_0|$.

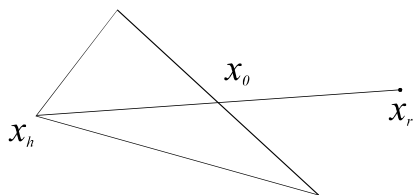


Рис. 5.2

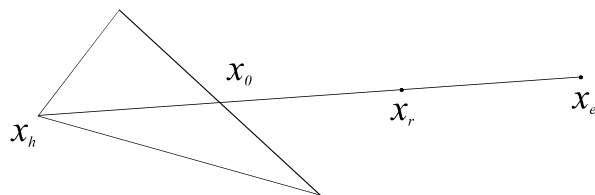


Рис. 5.3

а) Якщо $f_e < f_l$, то замінюємо точку x_h на точку x_e і перевіряємо $(n+1)$ -у точку симплекса на збіжність до мінімуму (див. крок 3). Якщо збіжність досягнута, то процес зупиняється; в іншому випадку повертаємося на крок Б.

б) Якщо $f_e > f_l$, то відкидаємо точку f_e . Очевидно, ми перемістилися занадто далеко від точки x_0 до точки x_r . Тому слід замінити точку x_h на точку x_r , в якій було отримано поліпшення (крок Д1), перевірити збіжність і, якщо вона не досягнута, повернутися на крок В.

2. Якщо $f_r > f_l$, але $f_r < f_g$, то x_r є кращою точкою в порівнянні з іншими двома точками симплекса і ми замінюємо точку x_h на точку x_r і, якщо збіжність не досягнута, повертаємося на крок Б, тобто виконуємо пункт 1б, описаний вище.

3. Якщо $f_r > f_l$, але $f_r > f_g$, то перейдемо на крок Е.

Е. Порівняємо значення функцій f_r і f_h .

1. Якщо $f_r > f_h$, то переходимо безпосередньо до кроку стиснення Е2. Якщо $f_r < f_h$, то замінюємо точку x_h на точку x_r і значення функції f_h на значення функції f_r . Запам'ятовуємо значення $f_r > f_g$ з кроку Д2, наведеного вище. Потім переходимо на крок Е2.

2. У цьому випадку $f_r > f_h$, тому ясно, що ми перемістилися занадто далеко від точки x_h до точки x_0 . Спробуємо виправити це, знайшовши точку x_c (а потім f_c) за допомогою кроку стискання, показаного на рис. 5.4.

Якщо $f_r > f_h$, то відразу переходимо до кроку стиснення і знаходимо точку x_c зі співвідношення

$$x_c - x_0 = \beta(x_h - x_0),$$

де $\beta (0 < \beta < 1)$ – коефіцієнт стиснення. Тоді $x_c = \beta x_h + (1 - \beta) x_0$.

Якщо $f_r < f_h$, то спочатку замінимо точку x_h на точку x_r , потім зробимо стиснення. Тоді точку x_c знайдемо із співвідношення (рис. 5.5).

$$x_c - x_0 = \beta(x_r - x_0), \text{ тобто}$$

$$x_c = \beta x_r + (1 - \beta) x_0$$

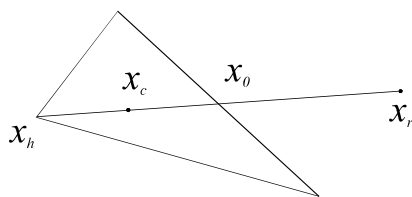


Рис. 5.4

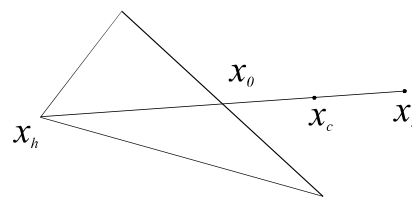


Рис. 5.5

Ж. Порівняємо значення функцій f_c і f_h .

1. Якщо $f_c < f_h$, то замінюємо точку x_h на x_c , і якщо збіжність не досягнута, то повертаємося на крок Б.

2. Якщо $f_c > f_h$, то очевидно, що всі наші спроби знайти значення менше f_h закінчилися невдачею, тому ми переходимо на крок 3.

3. На цьому кроці ми зменшуємо розмірність симплекса діленням навпіл відстані від кожної точки симплекса до x_l -точки, що визначає найменше значення функції.

Таким чином, точка x_i замінюється на точку $x_{i+1}/2(x_i - x_l)$, тобто замінюємо точку x_i точкою $1/2(x_i + x_l)$.

Потім обчислюємо f_i для $i=1,2, \dots, (n+1)$, перевіряємо збіжність і, якщо вона не досягнута, повертаємося на крок **В**.

I. Перевірка збіжності заснована на тому, щоб стандартне відхилення $(n+1)$ -го значення функції було менше деякого заданого малого значення ε . В цьому випадку обчислюється

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^{n+1} \frac{(f_i - \bar{f})^2}{n+1}, \text{ де } \bar{f} = \sum_{i=1}^{n+1} \frac{f_i}{n+1}.$$

Якщо $\sigma < \varepsilon$, то всі значення функції дуже близькі один до одного і тому вони, можливо, лежать поблизу точки мінімуму функції x_l .

Кроки цієї процедури представлені у вигляді блок-схеми на рис. 5.6.

2 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Робота виконується в такій послідовності:

- складають підпрограму для розрахунку обраної цільової функції;
- виконують розрахунки на ЕОМ за програмою "SIMPL_M.BAS" (реалізує симплексний метод) і за програмою "NED_MID.BAS" (реалізує метод Нелдера-Міда), що знаходяться в директорії LABS, в результаті яких визначають значення мінімуму цільової функції;
- дається оцінка порівняння ефективності методів.

2.1 Складання підпрограми для розрахунку цільової функції

Розрахунок цільової функції виконується процедурою-підпрограмою, яку потрібно скласти на мові QuickBASIC. Як приклад наводиться текст процедури розрахунку наступної цільової функції:

$$Z = 100 \cdot (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2.$$

Для програми "SIMPL_M.BAS":

```
REM Function
```

```
Fun1:
```

```
Z = 100 * (x(2) - x(1) ^ 2) ^ 2 + (1 - x(1)) ^ 2
```

```
RETURN
```

Для програми "NED_MID.BAS":

```
2340 END
```

```
5000 Z = 100 * (X(2) - X(1) ^ 2) ^ 2 + (1 - X(1)) ^ 2
```

```
5060 TEV = TEV + 1
```

```
5100 RETURN
```

2.2. Робота з головними програмами "SIMPL_M.BAS" і "NED_MID.BAS"

Введення вихідних даних в цих програмах організовано в діалоговому режимі. Тому для запуску необхідно в директорії LABS\LANG\QBX\BIN знайти і запустити головний файл *qbx.exe*, після чого відкрити файл "SIMPL_M.BAS" або "NED_MID.BAS". Перебуваючи в режимі редагування скласти і записати підпрограму для розрахунку цільової функції. Комбінацією клавіш *Shift+F5* запустити змінену програму в роботу.

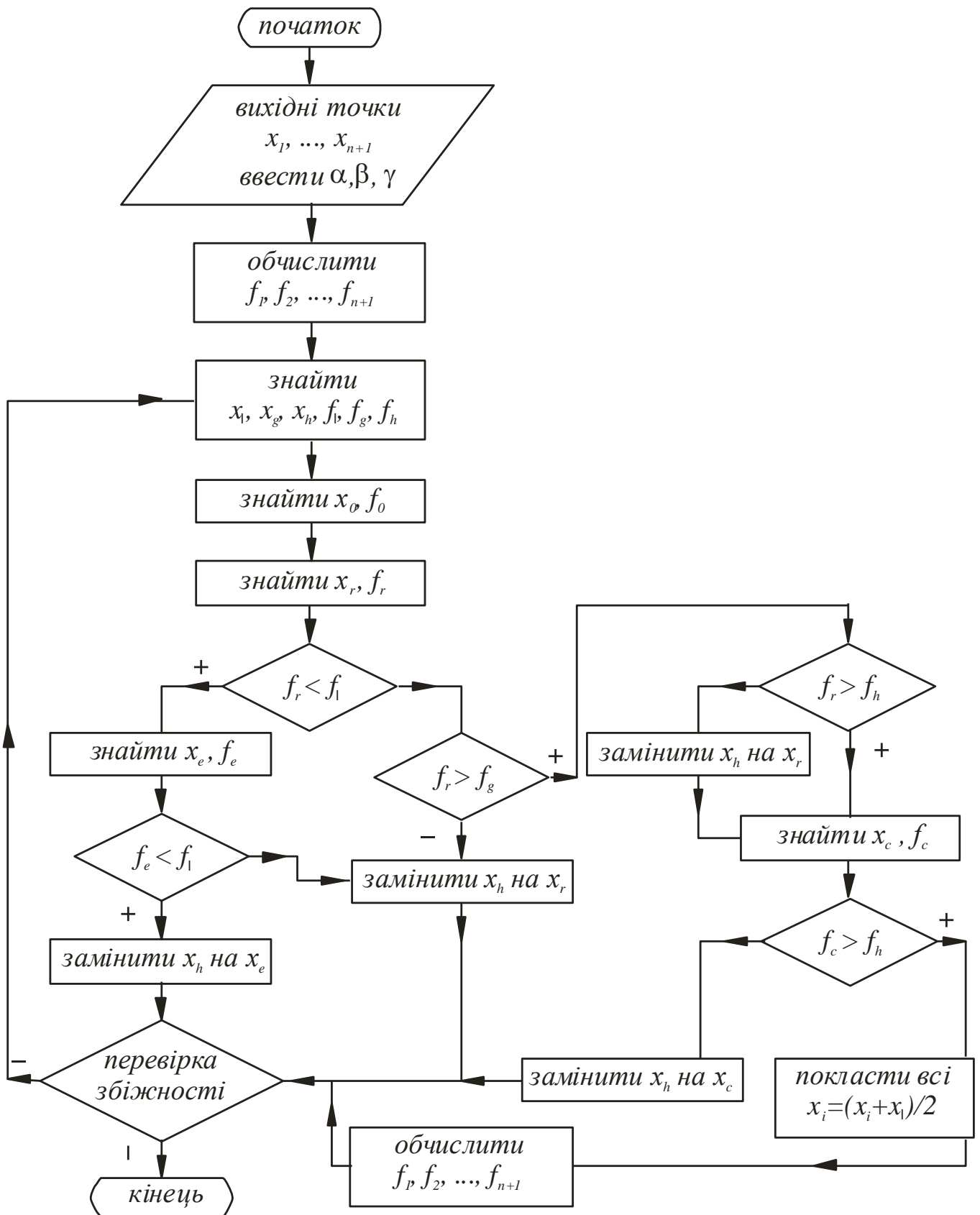


Рис. 5.6. Блок-схема методу Нелдера-Міда

В якості вихідних даних для програми "SIMPL_M.BAS" необхідно задати: число змінних, точність обчислень, координати $n+1$ вершини симплекса. Для програми "NED_MID.BAS" задаються: початкове наближення, довжина кроку, вводяться значення ALFA, BETA, GAMMA (через кому). Рекомендується брати ALFA = 1, BETA = 0.5, GAMMA = 2.

3 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Цільові функції і область зміни параметрів наведені в табл. 4.1. Номер варіанта відповідає порядковому номеру прізвища студента по журналу.

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі лабораторної роботи формулюється мета роботи, описуються результати розрахунків, виконаних на ЕОМ. В протокол включаються лістинг підпрограм і результати розрахунків, блок-схема програми, що реалізує симплексний метод і метод Нелдера-Міда.

5 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

- 1) Класифікація методів вирішення завдань оптимізації.
- 2) Загальна ідея методів нелінійного програмування.
- 3) Симплексний метод, алгоритм розрахунку.
- 4) Блок-схема симплексного методу.
- 5) Метод Нелдера-Міда, алгоритм розрахунку.
- 6) Фізичний зміст операції відображення, розтягування і стиснення.
- 7) Порівняння методу Нелдера-Міда і симплексного методу.
- 8) Ознака зациклення симплексного пошуку, умова закінчення пошуку.

6 Лабораторна робота №6. Градієнтні методи рішення задач оптимізації

МЕТА РОБОТИ:

- визначити координати точки екстремуму цільової функції з використанням методу градієнта і найшвидшого спуску;
- довести, що знайдений екстремум є глобальним;
- зіставити ефективність використаних методів.

1 ОПИС МЕТОДИКИ РОЗРАХУНКІВ

Серед методів, що застосовуються для вирішення завдань оптимізації методами нелінійного програмування, значне місце займають методи пошуку рішення, засновані на аналізі похідних функції що оптимізується.

Передбачається надалі, що аналізуються тільки функції $R(X)$, що безперервно диференціюються.

В градієнтних методах використовується наступна властивість градієнта цільової функції: вектор градієнта по напрямку збігається з напрямком найшвидшого зростання цільової функції. Тому рух до точки екстремуму проводиться по напрямку градієнта цільової функції (при пошуку максимуму), а в разі пошуку мінімуму – в протилежному напрямку. Напрямок градієнта

перпендикулярний в будь-якій точці лінії постійного рівня, оскільки вздовж цієї лінії функція постійна (див. рис. 6.1).

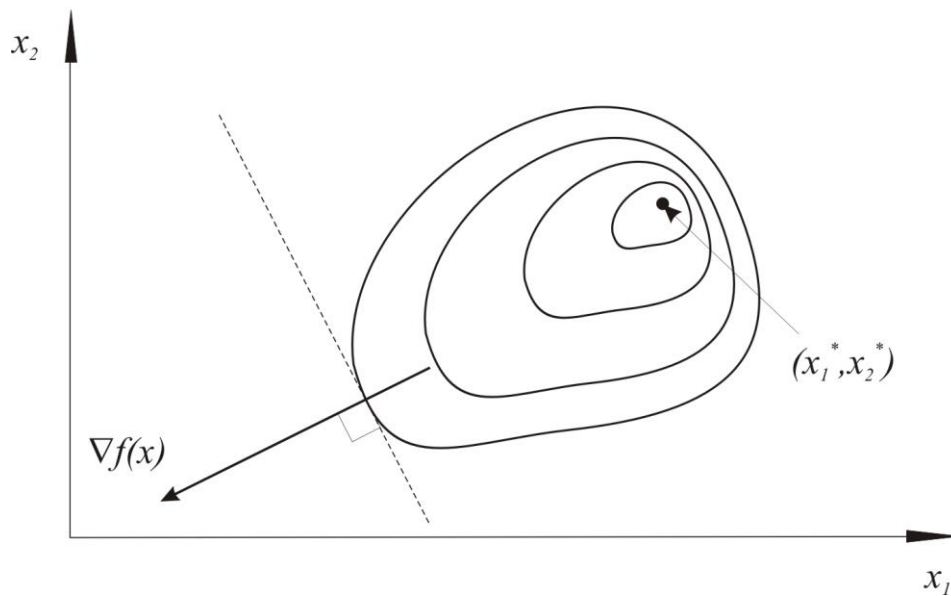


Рис. 6.2 – Графічне зображення пошуку екстремуму за методом градієнту

1.1. Метод градієнту

Пошук екстремуму по методу градієнту здійснюється в два етапи. На першому знаходяться значення часткових похідних по всім незалежним змінним, і визначається напрямок градієнта в даній точці. На другому етапі здійснюється крок в обраному напрямку.

Для визначення напрямку градієнта необхідно знайти значення часткових похідних по незалежним змінним. Якщо відомо аналітичний вид цільової функції $R(X)$ і він досить простий, то обчислення похідних $\partial R / \partial X_j$ найчастіше не складає особливих труднощів. В іншому випадку для знаходження похідних $\partial R / \partial X_j$ використовується чисельний метод, при якому для обчислення похідної проводиться допоміжна серія розрахунків.

Нижче розглянуто випадок, коли цільова функція залежить від двох незалежних змінних (рис. 6.2).

Близько обраної точки K з координатами (x_1^k, x_2^k) ставляться дві допоміжні точки: K' на відстані e_1 уздовж осі x_1 і K'' на відстані e_2 уздовж осі x_2 . Тут e_1 і e_2 – досить малі прирісти незалежних змінних. У цих точках K' з координатами $(x_1^k + e_1, x_2^k)$ і K'' з координатами $(x_1^k, x_2^k + e_2)$ розраховуються значення цільової функції. Так само розраховується значення цільової функції в початковій точці K .

Часткові похідні цільової функції по незалежним змінним знаходяться за такими формулами:

$$\frac{\partial R}{\partial x_1} \approx \frac{R(x_1^k + e_1; x_2^k) - R(x_1^k; x_2^k)}{e_1} \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial R}{\partial x_2} \approx \frac{R(x_1^k; x_2^k + e_2) - R(x_1^k; x_2^k)}{e_2} \quad (6.2)$$

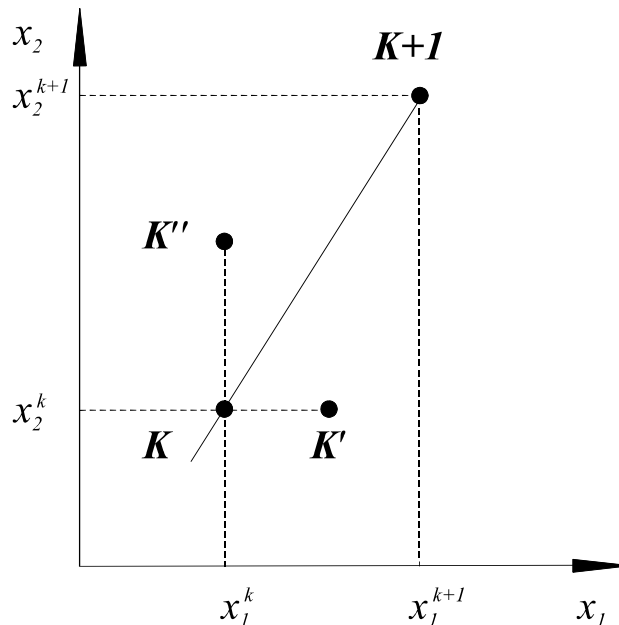


Рис. 6.2 – Визначення значення часткових похідних по незалежним змінним і напрямку градієнта за допомогою чисельного методу

У даній роботі величина приросту Δx_j^k визначається наступним чином:

$$\Delta x_j^k = \frac{dR}{dx_j} h, \quad (6.3)$$

де h – крок пошуку.

Величина приросту Δx_j^k незалежної змінної при постійному значенні h змінюється автоматично відповідно до зміни абсолютної величини градієнта, що є перевагою даного алгоритму.

Координати $(k+1)$ -ої точки визначаються наступним чином:

$$x_j^{k+1} = x_j^k \pm \frac{dR}{dx_j} h. \quad (6.4)$$

В (6.4) при пошуку максимуму цільової функції ставитися знак «+», а при пошуку мінімуму – знак «-».

У знайдений $(k+1)$ -ій точці розраховується значення цільової функції. У разі вдалого кроку знаходиться нове значення градієнту і робиться новий крок і т.д. У разі невдалого кроку в точці K знову визначають значення градієнту, наприклад, при змінених значеннях h або e .

Пошук продовжують до тих пір, доки не буде визначена точка екстремуму із заданою точністю. Критерієм закінчення пошуку оптимуму є досягнення такої точки, при русі з якої по будь-якому напрямку подальшого зменшення функції не відбувається. На практиці, як ознака оптимуму, часто застосовується умова:

$$\sum_{j=1}^n \frac{\partial R}{\partial U_j} < \delta$$

Блок-схема методу градієнту наведена на рис. 6.3.

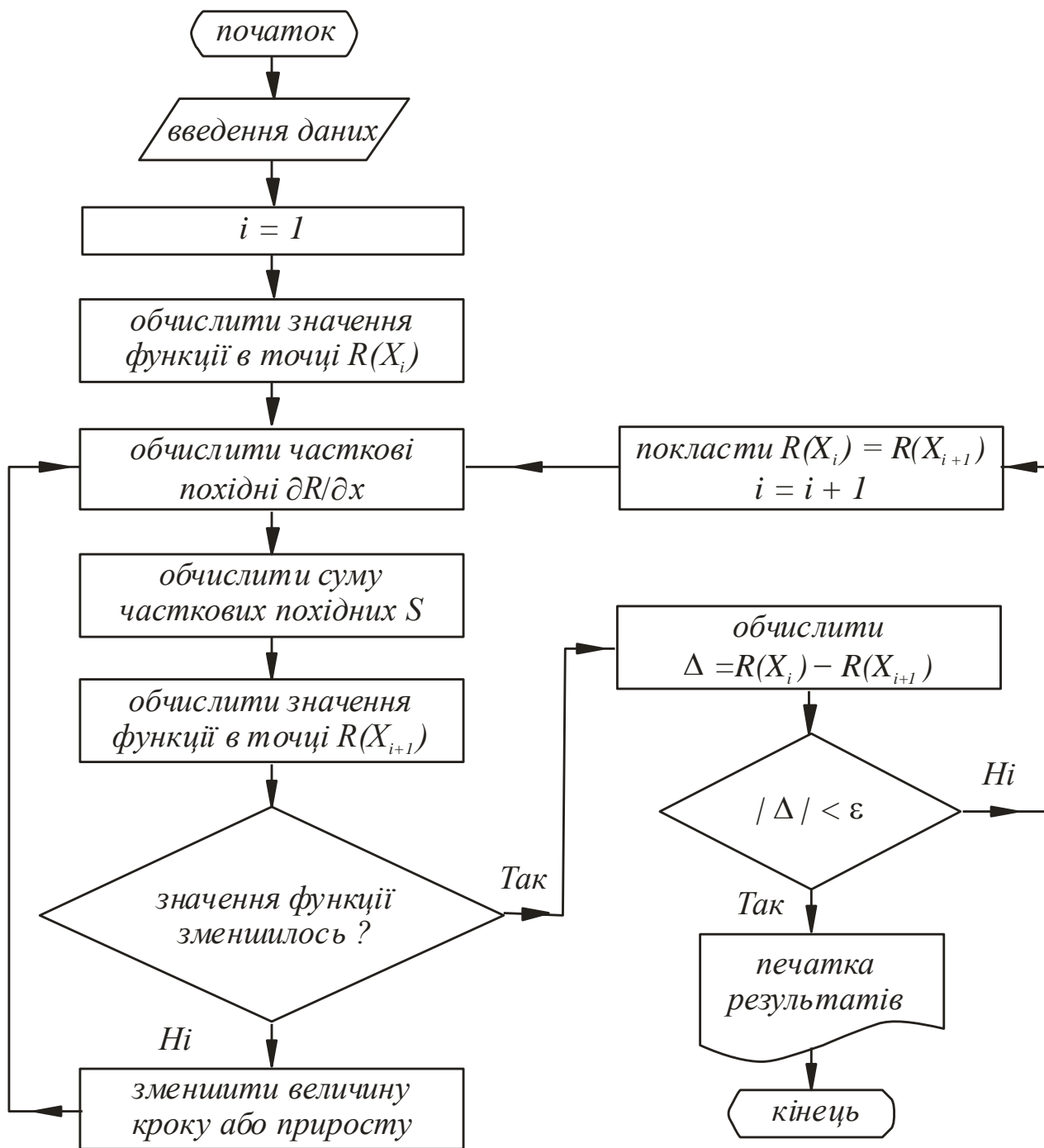


Рис. 6.3. Блок-схема методу градієнта

1.2 Метод найшвидшого спуску

Метод найшвидшого спуску, який об'єднує основні ідеї методів релаксації і градієнту, полягає в наступному. У вихідній точці визначається градієнт функції, що оптимізується, і тим самим напрямком її найшвидшого зменшення. Потім уздовж цього напрямку робиться не один крок, як в методі

градієнта, а триває рух до знаходження приватного екстремуму вздовж цього напрямку.

Потім в точці екстремуму знову визначають градієнт, і здійснюється рух в новому обраному напрямку до часткового екстремуму і т.д. до тих пір, поки не буде знайдено абсолютний екстремум.

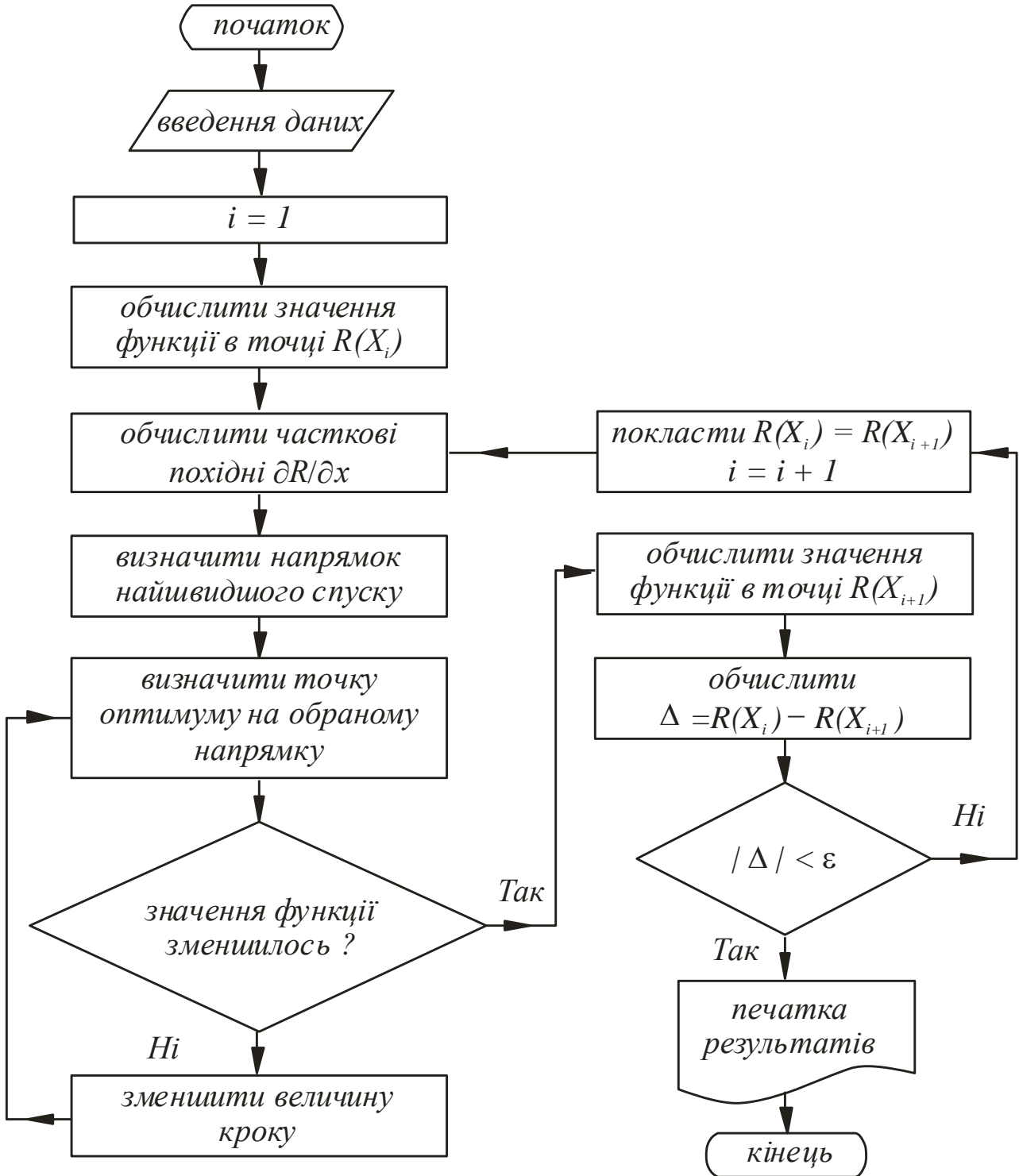


Рис. 6.4. Блок-схема методу найшвидшого спуску

Порівняння методів градієнта, релаксації і найшвидшого спуску дозволяє помітити, що в методі найшвидшого спуску поєднуються переваги методів градієнта і релаксації. Метод найшвидшого спуску дозволяє знайти екстремум при мінімальному обсязі обчислень. Метод особливо вигідно використовувати в тому випадку, коли градієнт функції змінюється не різко. Очевидно, що поблизу екстремуму метод найшвидшого спуску вироджується в метод градієнта. Як критерій закінчення пошуку можна використовувати ті ж критерії, що й в методі градієнта.

Блок-схема методу найшвидшого спуску приведена на рис. 6.4.

2 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Робота виконується в такій послідовності:

- в директорії LABS знаходять програму «OPTIMIZE.EXE. Градієнтні методи» (див. лабораторну роботу №4) і виконують з її допомогою розрахунки на ЕОМ відповідно до свого індивідуального завдання, в результаті яких визначають координати точки екстремуму цільової функції;
- здійснюють перевірку: чи є знайдений екстремум глобальним, для чого розрахунки повторюються кілька разів з початкових точок з різними координатами.

Введення вихідних даних в програмі організовано в діалоговому режимі. Як вихідні дані задаються: вид цільової функції, координати початкової точки, початковий крок, величина приросту.

3 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Вид цільової функції і область допустимих змін незалежних змінних обирається відповідно до варіанта завдання до лабораторної роботи №4 (див. табл. 4.1). Необхідна точність визначення координат точки екстремуму 0,001.

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі з лабораторної роботи описуються результати розрахунків, виконаних на ЕОМ, наводяться блок-схеми методів і докази знаходження глобального екстремуму.

5 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

- 1) Класифікація методів вирішення завдань оптимізації.
- 2) Загальна ідея методів нелінійного програмування.
- 3) Метод градієнта, алгоритм розрахунку і блок-схема методу градієнта.
- 4) Метод найшвидшого спуску, алгоритм розрахунку і блок-схема методу, область найвищої ефективності методу.
- 5) У чому полягають основні відмінності методів градієнта і найшвидшого спуску? Які умови закінчення пошуку в цих методах?
- 6) Методи пошуку екстремуму функції однієї змінної.
- 7) Довести, що знайдений екстремум є глобальним.

7 Лабораторна робота №7. Використання методів лінійного програмування для розв'язання оптимізаційних задач

МЕТА РОБОТИ:

– визначити екстремум цільової функції з використанням симплекс-методу Данцига.

1 ОПИС МЕТОДИКИ РОЗРАХУНКІВ

Лінійне програмування є математичний апарат, розроблений для вирішення оптимізаційних задач з лінійним виразом для критерію оптимальності та лінійними обмеженнями на область варіювання змінних.

Математично задача лінійного програмування формулюється таким чином: є ряд змінних x_1, x_2, \dots, x_n . Потрібно знайти такі ненегативні значення цих змінних, які б задовольняли системі лінійних рівнянь (обмеженням):

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &\geq b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &\geq b_2 \\ \dots &\dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n &\geq b_m \end{aligned} \quad (7.1)$$

і, крім того, лінійна функція досягала екстремуму

$$R = C_1x_1 + C_2x_2 + \dots + C_nx_n. \quad (7.2)$$

В системі (7.1) можуть бути як рівності, так і нерівності. Для вирішення таких завдань використовується симплекс-метод Данцига

Нехай система обмежень (7.1) записана у вигляді рівності. Вважаючи, що ранг матриці коефіцієнтів менше числа невідомих, виразимо r невідомих системи через інші:

$$\begin{aligned} x_1 &= a'_{1,r+1}x_{r+1} + a'_{1,r+2}x_{r+2} + \dots + a'_{1,n}x_n + b'_1 \\ x_2 &= a'_{2,r+1}x_{r+1} + a'_{2,r+2}x_{r+2} + \dots + a'_{2,n}x_n + b'_2 \\ \dots &\dots \\ x_r &= a'_{r,r+1}x_{r+1} + a'_{r,r+2}x_{r+2} + \dots + a'_{r,n}x_n + b'_r \end{aligned} \quad (7.3)$$

Невідомі x_1, x_2, \dots, x_n називаються *базисними*, інші змінні – *вільні*.

Оскільки вільним невідомим можна надавати будь-які ненегативні значення ($x_{r+1} \geq 0$), то вільні члени b'_1, b'_2, \dots, b'_r повинні бути позитивними, оскільки в іншому випадку (тобто якщо $b'_j < 0$ при $x_{r+1}=0, x_{r+2}=0, \dots, x_n=0$) отримаємо $x_j < 0$ ($j = 1, 2, \dots, r$).

Поклавши все вільні невідомі рівними 0 ($x_{r+1}=0, x_{r+2}=0, \dots, x_n=0$) отримаємо:

$$x_1 = b'_1; x_2 = b'_2, \dots, x_r = b'_r. \quad (7.4)$$

При цьому вектор $(b'_1, b'_2, \dots, b'_r, 0, 0, \dots, 0)$ називається *базисним вектором*.

Отримане рішення (7.4) системи (7.1) є допустимим ($x_1 > 0; x_2 > 0; \dots, x_r > 0$) і називається *базисним* (відповідає першому базису).

Підставивши в лінійну форму критерію оптимальності (7.2) замість базисних змінних їх вирази через вільні змінні, отримаємо

$$R = C'_0 + C'_{r+1}x_{r+1} + C'_{r+2}x_{r+2} + \dots + C'_n x_n. \quad (7.5)$$

Причому для першого базисного рішення ($x_{r+i}=0$)

$$R = C'_0 \quad (7.6)$$

Далі переходимо до іншого базисного рішення з таким розрахунком, щоб при цьому значення лінійної форми R не збільшувалося (в разі пошуку мінімуму). Цей перехід здійснюється наступним чином: *замінюється одна з базисних змінних іншою, яка раніше була небазисною (вільною) і т.д.* Цей процес повторюється до тих пір, поки R не досягне екстремального значення.

2 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Робота виконується в такій послідовності:

- визначається ранг матриці коефіцієнтів;
- відшукується перше базисне рішення;
- аналізується цільова функція і знаходиться друге базисне рішення;
- замінюється одна з базисних змінних на небазисну і визначається новий вид цільової функції;
- відшукується чергове базисне рішення і критерій оптимальності і т.д.

3 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Визначити оптимальні значення змінних, при яких цільова функція досягає екстремуму і дотримуються наступні обмеження:

Таблиця 7.1 – Індивідуальні завдання до лабораторної роботи №7

№ вар.	Цільова функція	Обмеження
1	$R = x_4 - x_5$ <i>Min</i>	$x_1 = 1 - x_4 + 2 \cdot x_5$; $x_2 = 2 + 2 \cdot x_4 - x_5$; $x_3 = 6 - 3 \cdot x_4 - x_5$
2	$R = 6 - 2 \cdot x_4 + 2 \cdot x_5$ <i>Min</i>	$2 \cdot x_2 + 4 \cdot x_4 + 6 \cdot x_5 - 12 = 0$; $2 \cdot x_3 - 2 \cdot x_4 - 6 \cdot x_5 - 4 = 0$; $2 \cdot x_1 + 2 \cdot x_4 + 2 \cdot x_5 - 4 = 0$
3	$R = x_1 - x_2$ <i>Min</i>	$x_3 = 2 + x_1 - x_2$; $x_4 = 5 + x_1 - 2 \cdot x_2$
4	$R = 3 \cdot x_5 + 2 \cdot x_4 + 3$ <i>Max</i>	$x_1 = 6 - x_4 + 2 \cdot x_5$; $x_2 = 4 - 2 \cdot x_4 - x_5$; $x_3 = 8 - x_4 + 3 \cdot x_5$
5	$R = x_5 - x_4 + 3$ <i>Min</i>	$3 \cdot x_5 + x_1 + 2 \cdot x_2 = 6$; $x_3 - x_4 - 3 \cdot x_5 = 4$; $x_4 + x_5 + x_1 = 4$

Продовження таблиці 7.1

6	$R = -x_5 + x_4$ <i>Min</i>	$3 - 3 \cdot x_4 - x_5 - x_3 = 0;$ $1 - x_4 + 2 \cdot x_5 - x_1 = 0;$ $2 + 2 \cdot x_4 - x_5 - x_2 = 0$
7	$R = x_1 + 0,5 \cdot x_2 + x_3$ <i>Max</i>	$2 \cdot x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 3;$ $3 \cdot x_1 - x_2 + x_3 + x_5 = 4;$ $2 \cdot x_1 - 2 \cdot x_2 - x_3 + x_6 = 2$

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі з лабораторної роботи формулюється мета роботи, описуються результати розрахунків по визначенню екстремуму цільової функції.

5 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

- 1) Класифікація методів вирішення задач оптимізації.
- 2) Загальна ідея методів лінійного програмування.
- 3) Симплекс-метод Данцига, алгоритм розрахунку.

Література, рекомендована при підготовці до лабораторних робіт

Основна

1. Л.Р. Ладієва. Оптимізація технологічних процесів.: Навчальний посібник. – К.: НМЦ ВО, 2003. – 209 с.
2. Жалдак М.І. Основи теорії і методів оптимізації: Навчальний посібник/ Жалдак М.І., Триус Ю.В. Черкаси: Брама –Україна, 2005. – 608 с.
3. Загальна хімічна технологія: підручник / В.Т. Яворський, Т.В. Перекупко, З.О. Знак, Л.В. Савчук. Третє видання, доповнене та доопрацьоване. Львів: Видавництво Національного університету «Львівська політехніка», 2014. – 540 с.
4. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс: Пер. с англ. – М.: Радио и связь, 1988. – 128 с.: ил.

Допоміжня

5. Васильков Ю.В., Василькова Н.Н. Компьютерные технологии вычислений в математическом моделировании: Учебное пособие. – М.: Финансы и статистика, 2002. – 256 с.: ил.
6. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии. – М.: Химия, 1975. – 378 с.
7. Царева З.Н., Орлова Е.И. Теоретические основы химической технологии. – Киев: Вища школа, 1986. – 271 с.
8. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1982. – 288с.
9. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М.: Химия, 1985. – 202 с.
10. Островский Г.М., Бережинский Т.А. Оптимизация химико-технологических процессов. Теория и практика. – М.: Химия, 1984. – 240 с.