

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

**МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ В ПРИМЕРАХ
В ПАКЕТЕ MATHCAD 15**

Часть II

Учебное пособие

 **УНИВЕРСИТЕТ ИТМО**

Санкт-Петербург

2015

УДК 536.71+512.11

ББК 22.1

Р 34

Методы оптимизации в примерах в пакете MathCad 15. Ч. II:
Учеб. пособие / С.В. Рыков, И.В. Кудрявцева, С.А. Рыков, В.А. Рыков. – СПб.: Университет ИТМО, 2015. – 178 с.
ISBN 978-5-9906483-1-9

Пособие содержит сведения об аналитических методах многомерной оптимизации. Снабжено большим количеством примеров решения оптимизационных задач, рассмотренных как аналитически при построчной реализации, так и с использованием пакета MathCad 15. При этом реализация в пакете MathCad 15 имеет, как правило, более одного варианта исполнения.

Предназначено для самостоятельной работы студентов всех направлений очной и заочной форм обучения.

Рецензенты: кафедра химии и биотехнологии Санкт-Петербургского государственного торгово-экономического университета (зав. кафедрой доктор техн. наук, доц. Ю.Г. Базарнова); кандидат техн. наук, проф. И.К. Пименов (Санкт-Петербургский государственный морской технический университет)

Рекомендовано к печати Советом факультета холодильной, криогенной техники и кондиционирования, протокол № 3 от 25.11.2015 г.



Университет ИТМО – ведущий вуз России в области информационных и фотонных технологий, один из немногих российских вузов, получивших в 2009 году статус национального исследовательского университета. С 2013 года Университет ИТМО – участник программы повышения конкурентоспособности российских университетов среди ведущих мировых научно-образовательных центров, известной как проект «5 – 100». Цель Университета ИТМО – становление исследовательского университета мирового уровня, предпринимательского по типу, ориентированного на интернационализацию всех направлений деятельности.

© Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, 2015

© Рыков С.В., Кудрявцева И.В., Рыков С.А., Рыков В.А., 2015

ВВЕДЕНИЕ

Цель настоящего пособия – оказать студентам конкретную помощь в развитии умения решать задачи курсов «Компьютерное моделирование в теплофизике» и «Методы оптимизации». Каждый из разделов пособия содержит теоретические положения, подробное решение соответствующих задач как аналитически, так и с использованием пакета MathCad 15.

Первая часть пособия посвящена изложению основных терминов и определений, используемых при решении оптимизационных задач. Материал излагается с учетом терминологии и обозначений, предусмотренных программой вуза.

При пользовании пособием рекомендуется следующий порядок работы. Сначала следует повторить теоретическую часть, которая изложена в начале каждого раздела пособия. Затем ознакомиться с пояснениями и решениями задач, содержащимися в пособии. И только после этого перейти к выполнению контрольных упражнений, помещенных в конце каждого раздела пособия.

1. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

1.1. Общая постановка задачи

Постановка задачи поиска минимума функции содержит:

- целевую функцию $f(x)$, где $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, определенную на n -мерном евклидовом пространстве R^n . Её значения характеризуют степень достижения цели, для которой поставлена или решается задача.

- множество допустимых решений $X \subseteq R^n$, среди элементов которого осуществляется поиск.

Необходимо найти вектор x^* из множества допустимых значений решений, которому соответствует минимальное значение целевой функции на этом множестве:

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x).$$

Замечание 1.1.

1. Задача поиска максимума функции $f(x)$ сводится к задаче поиска минимума путем замены знака перед функцией на противоположный:

$$f(x^*) = \max_{x \in X} f(x) = -\min_{x \in X} [-f(x)].$$

2. Задача поиска минимума и максимума целевой функции $f(x)$ называется задачей поиска экстремума:

$$f(x^*) = \text{extr}_{x \in X} f(x).$$

3. Если множество допустимых решений X задается ограничениями (условиями), накладываемыми на вектор x , то решается задача поиска **условного экстремума**. Если $X = R^n$, т. е. ограничения (условия) на вектор x отсутствуют, решается задача поиска **безусловного экстремума**.

4. Решением задачи поиска экстремума является пара $(x, f(x^*))$, включающая точку x^* и значение в ней целевой функции.

5. Множество точек минимума (максимума) целевой функции $f(x)$ на множестве X обозначим X^* . Оно может содержать конечное число точек (в том числе одну), бесконечное число точек или быть пустым.

Определение 1.1. Точка $x^* \in X$ называется точкой глобального (абсолютного) минимума функции $f(x)$ на множестве X , если функция достигает в точке своего наименьшего значения, т. е.

$$f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in X.$$

Определение 1.2. Точка $x^* \in X$ называется точкой локального (относительного) минимума функции $f(x)$ на множестве X , если существует $\varepsilon > 0$, такое, что если $x^* \in X$ и $\|x - x^*\| < \varepsilon$, то $f(x^*) \leq f(x)$.

Здесь $\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$ - евклидова норма вектора x .

Замечание 1.2.

1. В определении 1.1 точка x^* сравнивается по величине функции со всеми точками из множества допустимых решений X , а в определении 1.2 – только с принадлежащими ее ε -окрестности.

2. Если в определениях 1.1 и 1.2 знак неравенства « \leq » заменить на « \geq », то получатся определения глобального (абсолютного) и локального (относительного) максимумов.

3. Глобальный экстремум всегда является одновременно локальным, но не наоборот.

Определение 1.3. Поверхностью уровня функции $f(x)$ называется множество точек, в которых функция принимает постоянное значение, т. е. $f(x) = const$. Если $n = 2$, поверхность уровня изображается линией уровня на плоскости R^n .

1.2. Градиент функции

Градиентом $\nabla f(x)$ непрерывно дифференцируемой функции $f(x)$ в точке x называется вектор-столбец, элементами которого являются частные производные первого порядка, вычисленные в данной точке:

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Градиент функции направлен по нормали к поверхности функции, то есть перпендикулярно к касательной плоскости, проведенной в точке x , в сторону наибольшего возрастания функции в данной точке.

Вместе с градиентом можно определить вектор антиградиента, равный по модулю вектору градиента, противоположный по направлению. Он направлен в сторону наибольшего убывания функции в данной точке.

1.3. Матрица Гессе

Матрицей Гессе $H(x)$ дважды непрерывно дифференцируемой функции $f(x)$ в точке x называется матрица частных производных второго порядка, вычисленных в данной точке:

$$H(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \dots & h_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \dots & h_{nn} \end{pmatrix},$$

где $h_{ij} = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j}$, $i, j = 1, \dots, n$

Матрица Гессе является симметричной матрицей размером $(n \times n)$.

1.4. Приращение функции

С помощью градиента и матрицы Гессе, используя разложение в ряд Тейлора, приращение функции $f(x)$ в точке x можно записать в форме:

$$\Delta f(x) = f(x + \Delta x) - f(x) = \nabla f(x)^T \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^T H(x) \Delta x + o(\|\Delta x\|^2), \quad (1.1)$$

где $o(\|\Delta x\|^2)$ - сумма всех членов разложения, имеющих порядок выше второго; $\Delta x^T \cdot H(x) \cdot \Delta x$ - квадратичная форма.

1.5. Квадратичная форма

Квадратичная форма $\Delta x^T H(x) \Delta x$ (а также соответствующая ей матрица Гессе $H(x)$) называется:

- **положительно определенной** ($H(x) > 0$), если для любого не нулевого Δx выполняется неравенство $\Delta x^T H(x) \Delta x > 0$;
- **отрицательно определенной** ($H(x) < 0$), если для любого не нулевого Δx выполняется неравенство $\Delta x^T H(x) \Delta x < 0$;

- **положительно полуопределенной** ($H(x) \geq 0$), если для любого Δx выполняется неравенство $\Delta x^T H(x) \Delta x \geq 0$ и имеется отличный от нуля вектор Δx , для которого $\Delta x^T H(x) \Delta x = 0$;
- **отрицательно полуопределенной** ($H(x) < 0$), если для любого Δx выполняется неравенство $\Delta x^T H(x) \Delta x \leq 0$ и имеется отличный от нуля вектор Δx , для которого $\Delta x^T H(x) \Delta x = 0$;
- **неопределенной** ($H(x) < 0$ или > 0), если существуют такие векторы Δx , $\Delta \tilde{x}$, для которых выполняется неравенство $\Delta x^T H(x) \Delta x > 0$, $\Delta \tilde{x}^T H(x) \Delta \tilde{x} > 0$;
- **тождественно равной нулю** ($H(x) = 0$) если для любого Δx выполняется неравенство $\Delta x^T H(x) \Delta x = 0$.

1.6. Выпуклое множество

Множество $X \subseteq R^n$ называется **выпуклым**, если оно содержит всякий отрезок, концы которого принадлежат X , то есть если для любых $x^1, x^2 \in X$ и $0 \leq \lambda \leq 1$ справедливо $\lambda \cdot x^1 + (1 - \lambda)x^2 \in X$.

Иными словами, выпуклыми являются множества, которые не содержат «вмятин», «дырок» и состоят из одного куска. Примерами выпуклых множеств служат также само пространство R^n , отрезок, прямая, шар.

1.7. Выпуклые функции

1. Функция $f(x)$, определенная на выпуклом множестве X , называется **выпуклой**, если:

$$f(\lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2) \leq \lambda f(x^1) + (1 - \lambda)f(x^2), \quad \forall x^1, x^2 \in X, \quad 0 \leq \lambda \leq 1.$$

Функция $f(x)$ называется **выпуклой**, если она целиком лежит не выше отрезка, соединяющего две ее произвольные точки.

Если матрица Гессе $H(x) \geq 0 \quad \forall x \in R^n$, то функция **выпуклая**.

2. Функция $f(x)$, определенная на выпуклом множестве X , называется **строго выпуклой**, если:

$$f(\lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2) < \lambda f(x^1) + (1 - \lambda)f(x^2),$$

$$\forall x^1, x^2 \in X, \quad x^1 \neq x^2, \quad 0 \leq \lambda \leq 1.$$

Функция $f(x)$ называется **строго выпуклой**, если она целиком лежит ниже отрезка, соединяющего две ее произвольные, но не совпадающие точки.

Если функция **строго выпуклая**, то она одновременно **выпуклая**.

Если матрица Гессе $H(x) > 0 \quad \forall x \in R^n$, то функция **строго выпуклая**.

3. Функция $f(x)$, определенная на выпуклом множестве X , называется **сильно выпуклой** с константой $l > 0$, если:

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) < \lambda f(x^1) + (1-\lambda)f(x^2) - \frac{1}{2}\lambda(1-\lambda)\|x^1 - x^2\|^2$$
$$\forall x^1, x^2 \in X, x^1 \neq x^2, 0 \leq \lambda \leq 1.$$

Если функция **сильно выпуклая**, то она одновременно **строго выпуклая** и **выпуклая**.

Если матрица Гессе $H(x) \geq l \cdot E \quad \forall x \in R^n$, где E - единичная матрица, то функция **сильно выпуклая**.

1.8. Минимум функции

1. Если $f(x)$ **выпуклая** функция на выпуклом множестве X , то всякая точка локального минимума является точкой его **глобального минимума** на X .

2. Если **выпуклая** функция достигает своего минимума в двух различных точках, то она достигает **минимума** во всех точках отрезка, соединяющего эти две точки.

3. Если $f(x)$ **строго выпуклая** функция на выпуклом множестве X , то она может достигать своего глобального минимума на X не более чем в одной точке.

1.9. Условие Липшица

Функция $f(x)$ удовлетворяет **условию Липшица** на отрезке $[a, b]$, если существует такое число $L > 0$ (константа Липшица), что

$$|f(x') - f(x'')| \leq L \cdot |x' - x''| \quad (1.2)$$

для всех x' и x'' , принадлежащих $[a, b]$.

1. Если неравенства (1.2) выполняется с константой L , то оно справедливо для бесконечного множества констант, больших L . Как правило, представляет интерес минимальная константа Липшица.

2. Из условия (1.2) следует непрерывность функции $f(x)$ на отрезке $[a, b]$. Если кроме того функция имеет на $[a, b]$ непрерывную производную, то константа Липшица $L = \max_{x \in [a, b]} |f'(x)|$.

3. Условие (1.2) означает, что модуль углового коэффициента любой хорды графика функции $f(x)$ не превосходит L .

1.10. Угловые и главные миноры матрицы Гессе

Определение 1.4. Рассмотрим определитель матрицы Гессе $H(x^*)$, вычисленный в стационарной точке x^* :

$$\det H(x^*) = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \dots & h_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ h_{n1} & h_{n2} & \dots & h_{nn} \end{vmatrix}.$$

1. Определители вида

$$\Delta_1 = h_{11}, \Delta_2 = \begin{vmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{vmatrix}, \dots, \Delta_n = \begin{vmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \dots & h_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ h_{n1} & h_{n2} & \dots & h_{nn} \end{vmatrix}$$

называются **угловыми минорами**.

2. Определители m -го порядка ($m \leq n$), получающиеся из определителя матрицы $H(x^*)$ вычеркиванием каких-либо $(n-m)$ строк и $(n-m)$ столбцов с одними и теми же номерами, называются **главными минорами**.

1.11. Собственные значения матрицы Гессе

Определение 1.5. Собственные значения $\lambda_i, i = 1, 2, \dots, n$, матрицы $H(x^*)$ размера $(n \times n)$ находятся как корни характеристического уравнения (алгебраического уравнения n -й степени):

$$|H(x^*) - \lambda E| = \begin{vmatrix} h_{11} - \lambda & h_{12} & \dots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} - \lambda & \dots & h_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ h_{n1} & h_{n2} & \dots & h_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Собственные значения вещественной симметричной матрицы $H(x^*)$ вещественны.

1.12. Практические примеры

Пример 1.1. Выбрать выпуклые множества среди изображенных на рис. 1.1.

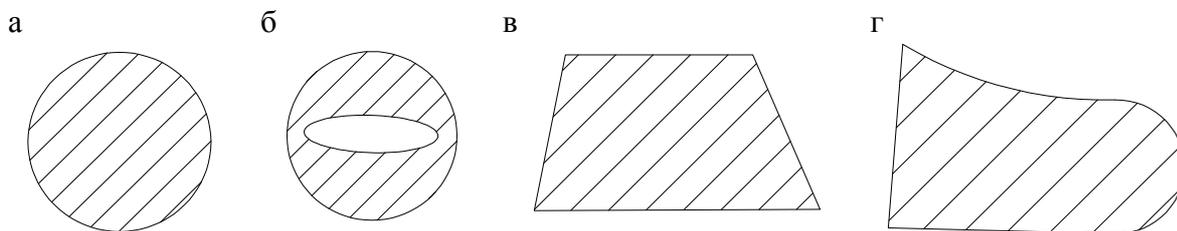


Рис. 1.1. Виды множеств

Ответ: на рис. 1.1 а, в множества выпуклые, так как удовлетворяют определению в параграфе «Выпуклое множество».

Пример 1.2. Классифицировать квадратичную форму и матрицу Гессе $H = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$.

Решение.

Вычислить квадратичную форму:

$$\Delta x^T H \Delta x = (\Delta x_1 \quad \Delta x_2) \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{pmatrix} = 2\Delta x_1^2 + 2\Delta x_2^2.$$

Очевидно, $\Delta x^T H \Delta x > 0$ для любого не нулевого $\Delta x = \begin{pmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{pmatrix}$, т. е. од-

новременно Δx_1 и Δx_2 не равны нулю.

Листинг программы в пакете MathCad 15 приведен в прил. А – рис. А 1.

При выполнении примера студент должен знать следующие разделы MathCad 15:

- Ввод переменных, переменных с нижним индексом, сопроводительного текста.

- Размещение переменных в сопроводительном тексте.
- Просмотр результатов расчета.
- Определение однострочной функции и ее вызов.
- Символьное вычисление функции.
- Операции с матрицами.
- Дискретный аргумент.

Пример 1.3. Для функции $f(x) = x_1^2 + x_2^2$ необходимо:

- вычислить градиент в точках:

$$x^0 = (0; 1)^T, \quad x^1 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^T, \quad x^2 = (1; 0)^T, \quad x^3 = (0; -1)^T;$$

- найти матрицу Гессе для каждой точки;
 - построить на графике линию уровня и нанести градиенты в этих точках.

Решение.

1. Общее выражение для градиента функции в точке x равно $\nabla f(x) = (2x_1; 2x_2)^T$.

2. Значения градиентов функции в расчетных точках равны:

$$\nabla f(x^0) = (0; 2)^T, \quad \nabla f(x^1) = (\sqrt{2}; \sqrt{2})^T, \quad \nabla f(x^2) = (2; 0)^T, \quad \nabla f(x^3) = (0; -2)^T.$$

3. Матрица Гессе в общем виде имеет вид:

$$H(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} f(x) & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} f(x) \\ \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_1} f(x) & \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} f(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix},$$

не зависит от переменных и постоянна во всех расчетных точках.

Листинг программы и график в пакете MathCad 15 приведен в прил. А – рис. А 2.

При выполнении примера студент должен знать следующие разделы MathCad 15:

- Ввод переменных, переменных с нижним индексом, сопроводительного текста.
- Размещение переменных в сопроводительном тексте.
- Просмотр результатов расчета и редактирование числа выводимых десятичных знаков.
- Определение однострочной функции и ее вызов.

- Векторизация.
- Доступ к элементам массива, в том числе блочного массива.
- Символьное преобразование уравнений.
- Символьное вычисление производных и градиента функции.
- Дискретный аргумент.
- Построение и редактирование двумерных графиков. Нанесение на один график нескольких кривых.

Для получения графика в виде, приведенном в листинге программы, необходимо настроить вкладки диалогового окна (вызывается двойным щелчком мышки на графике) **Formatting Currently Selected X-Y Plot** как показано на рис. 1.2 – 1.5 и откорректировать на графике диапазоны выводимых значений, как показано на рис. 1.6.

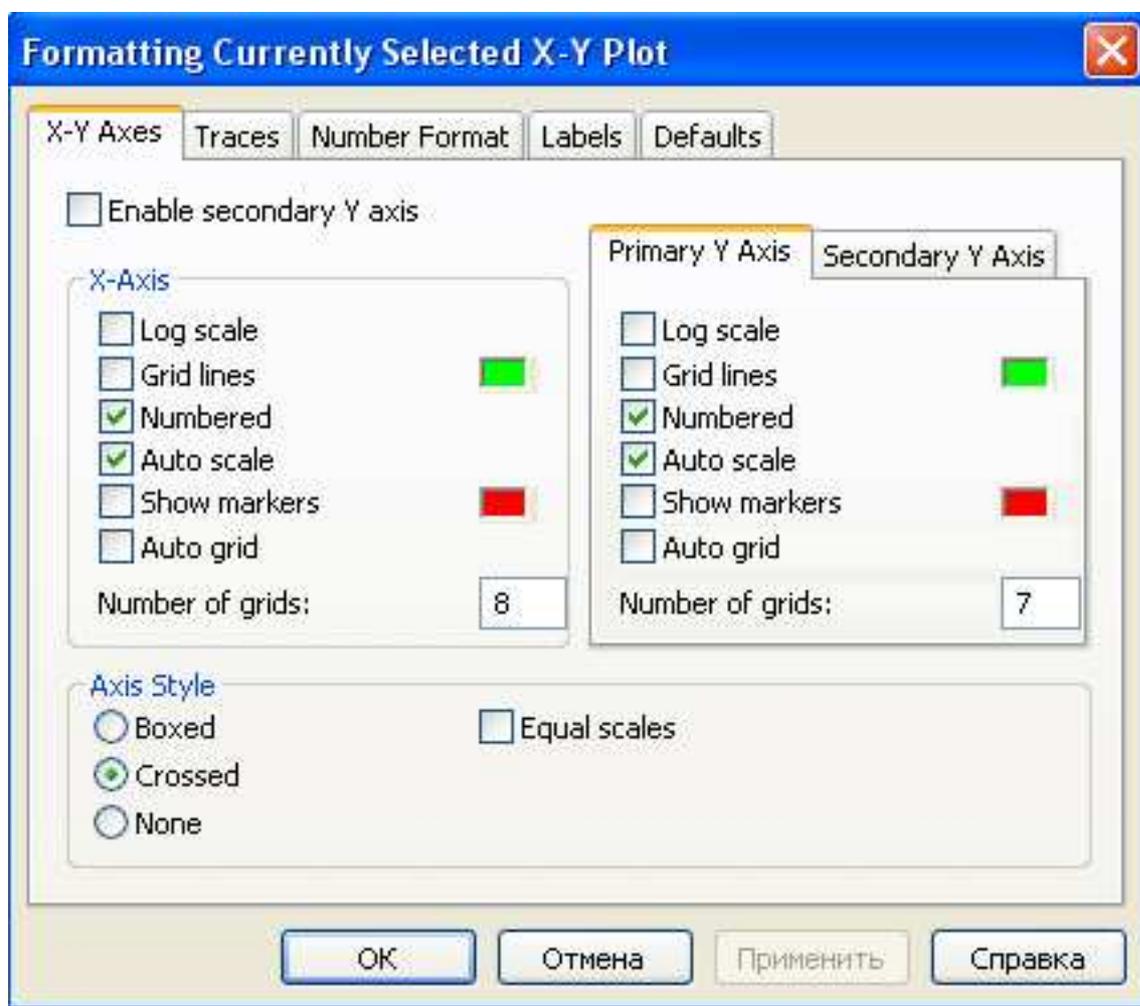


Рис. 1.2. Настройка вкладки X-Y Axes (пример 1.3)

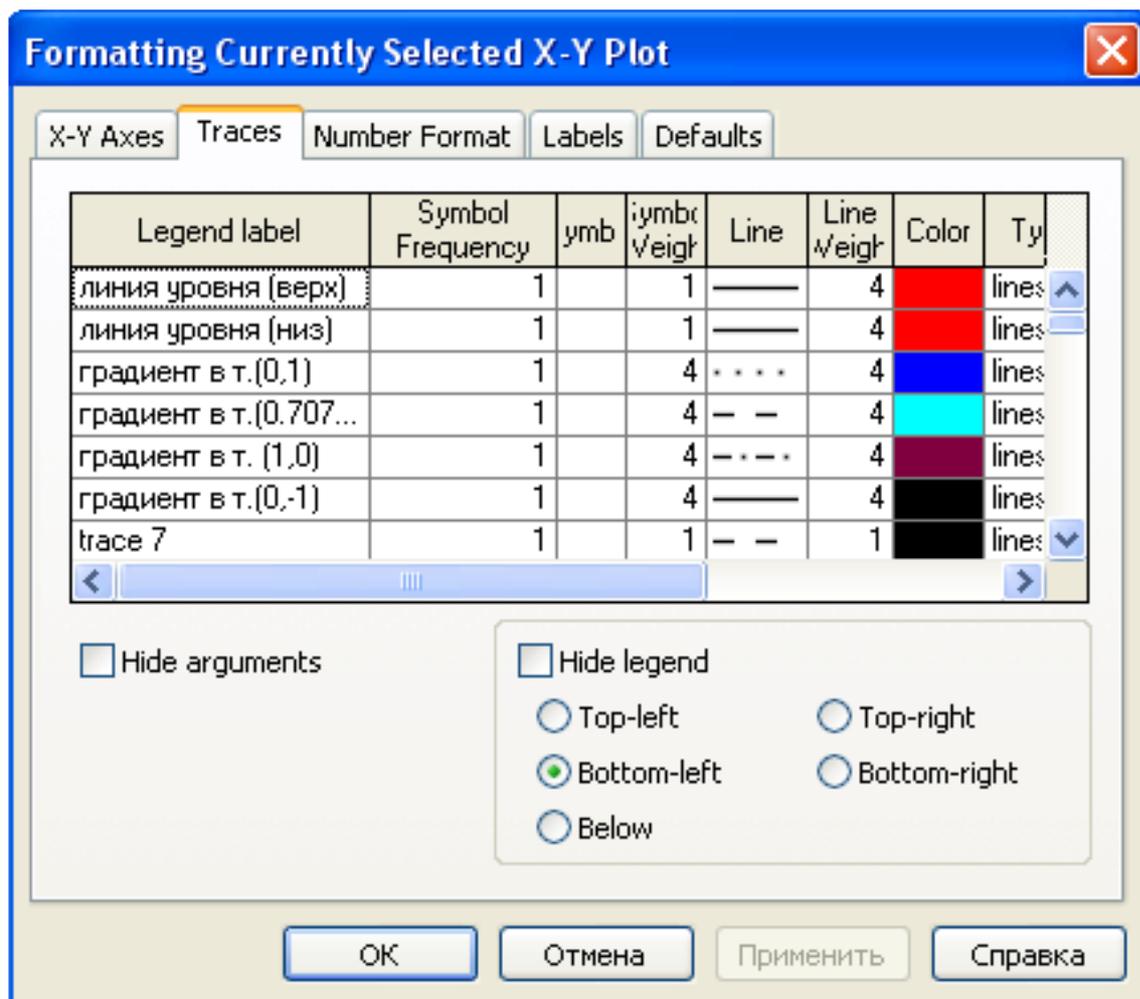


Рис. 1.3. Настройка вкладки Traces (пример 1.3)

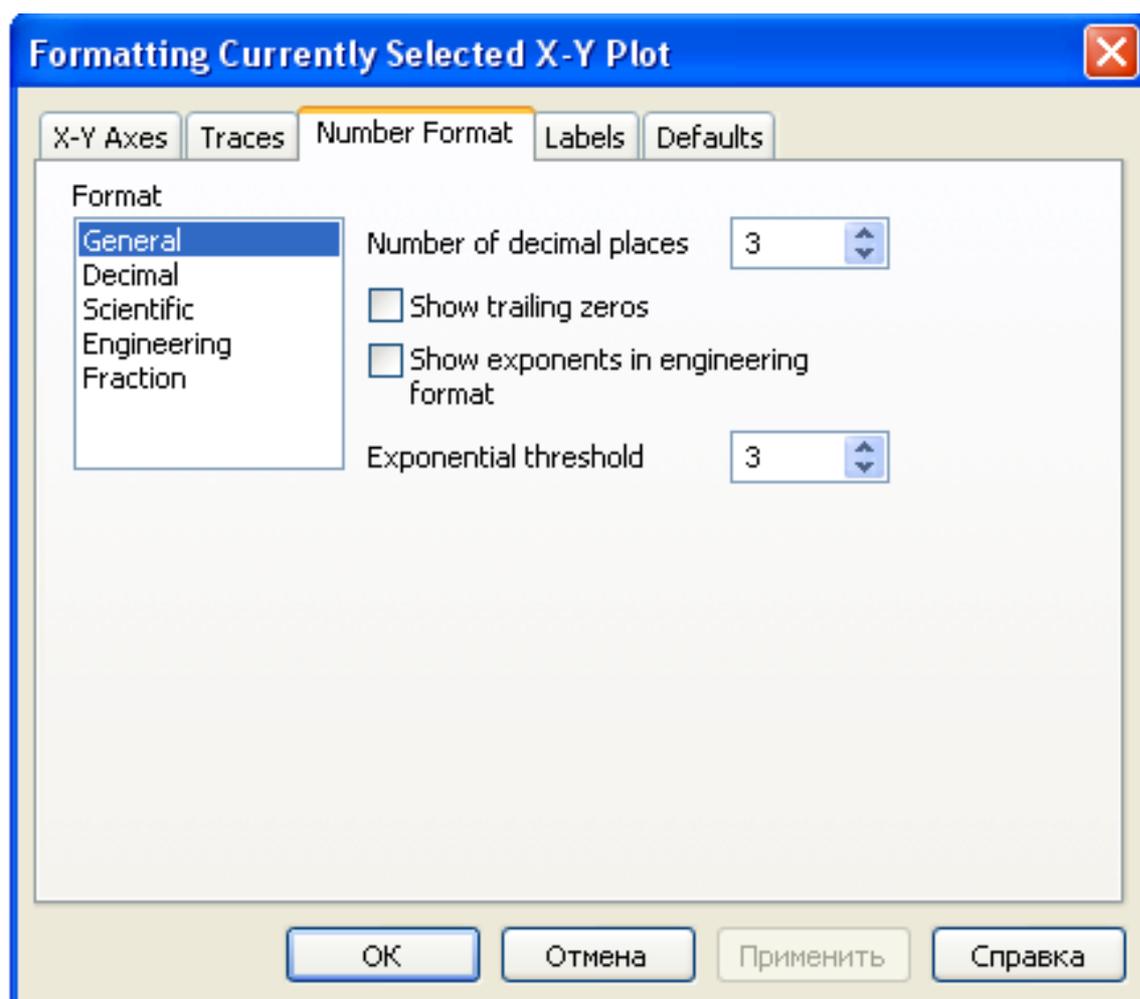


Рис. 1.4. Настройка вкладки Number Format (пример 1.3)

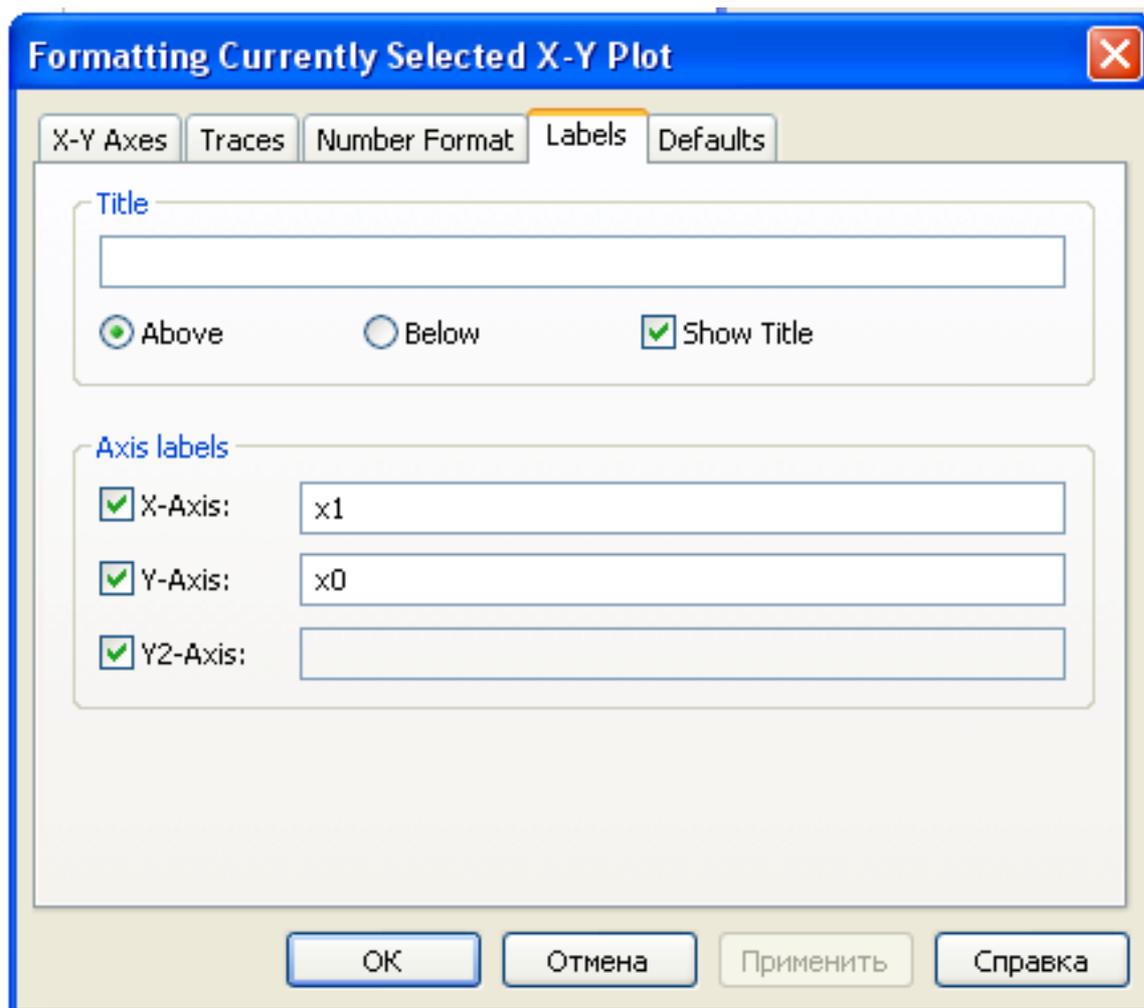


Рис. 1.5. Настройка вкладки Labels (пример 1.3)

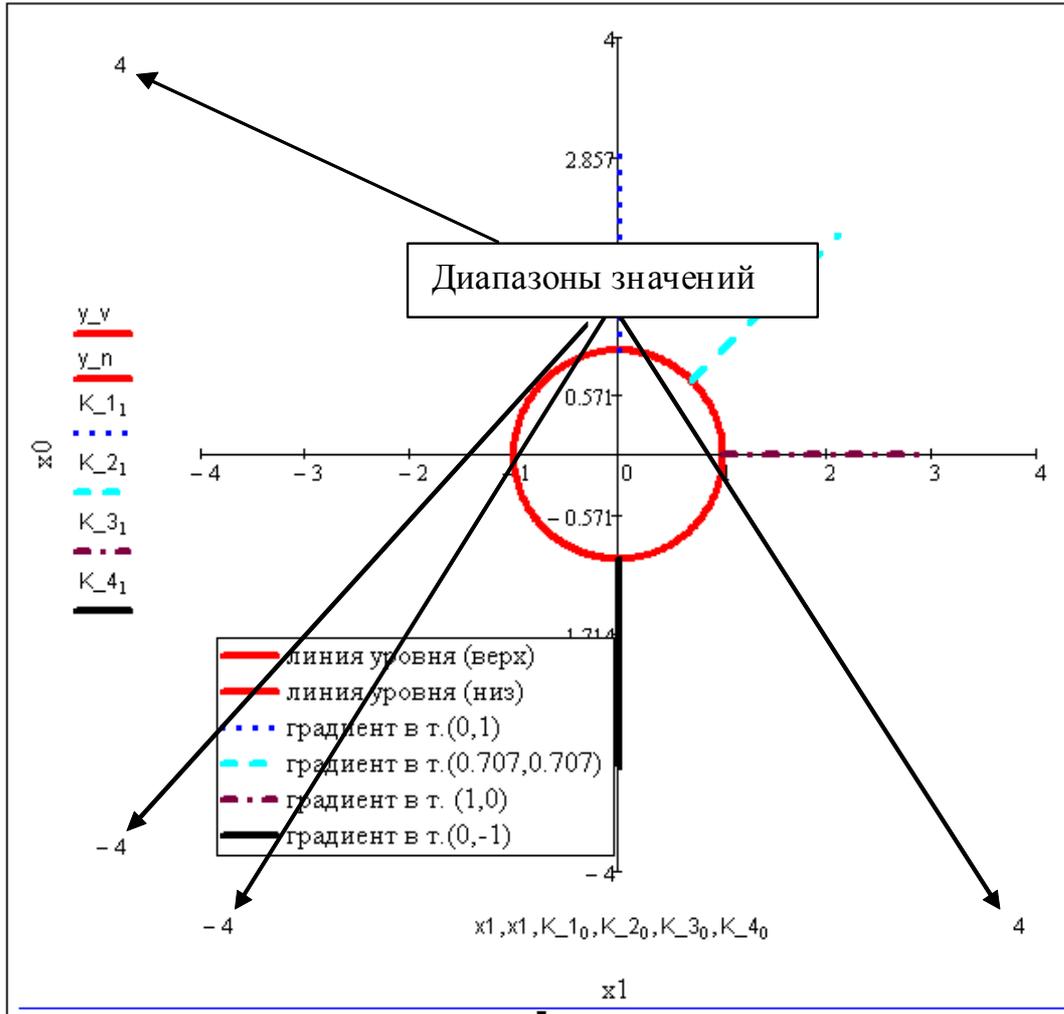


Рис. 1.6. Редактирование диапазонов выводимых значений на графике (пример 1.3)

Пример 1.4. Для функции $f(x) = x_1^2 + x_2^4$ необходимо:

- вычислить градиент в точках:

$$x^0 = (0; 0)^T, \quad x^1 = (1; 1)^T, \quad x^2 = (1, 3; -0, 746)^T;$$

- найти матрицу Гессе в расчетных точках;

- построить на графике линию уровня и нанести градиенты в расчетных точках.

Решение.

1. Общее выражение для градиента функции в любой расчетной точке равно $\nabla f(x) = (2x_1; 4x_2^3)$.

2. Значения градиентов функции в расчетных точках равны:

$$\nabla f(x^0) = (0; 0)^T, \quad \nabla f(x^1) = (2; 4)^T, \quad \nabla f(x^2) = (2, 6; -1, 662)^T.$$

3. Матрица Гессе в общем случае имеет вид:

$$H(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} f(x) & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} f(x) \\ \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_1} f(x) & \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} f(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 12x_2^2 \end{pmatrix}.$$

4. Значения матриц Гессе в расчетных точках:

$$H(x^0) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad H(x^1) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 12 \end{pmatrix}, \quad H(x^1) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 6,681 \end{pmatrix}.$$

Листинг программы и график в пакете MathCad 15 приведен в прил. А – рис. А 3.

При выполнении примера студент должен знать следующие разделы MathCad 15:

- Ввод переменных, переменных с нижним индексом, сопроводительного текста.
- Размещение переменных в сопроводительном тексте.
- Просмотр результатов расчета и редактирование числа выводимых десятичных знаков.
- Определение однострочной функции и ее вызов.
- Векторизация.
- Доступ к элементам массива, в том числе блочного массива.
- Символьное преобразование уравнений.
- Символьное вычисление производных и градиента функции.
- Дискретный аргумент.
- Построение и редактирование двумерных графиков. Нанесение на один график нескольких кривых (см. пример 1.2).

Пример 1.5. Проверить, удовлетворяют ли условию Липшица следующие функции: а) $f(x) = 2x$ на интервале $[0; 1]$, б) $f(x) = \sin(x)$ на интервале $[0; \pi]$, в) $f(x) = \sqrt{x}$ на интервале $[0; 1]$.

Решение.

По определению для того, чтобы функция удовлетворяла условию Липшица необходимо, чтобы функция $f(x)$ и ее производная $f'(x)$ были непрерывны на интервале $[a; b]$, а константа Липшица $L = \max_{x \in [a, b]} |f'(x)|$.

а) функция $f(x) = 2x$ и ее производная $f'(x) = 2$ непрерывны на интервале $[0; 1]$.

Константа Липшица $L = \max_{x \in [0,1]} |f'(x)| = 2$.

Вывод. Функция $f(x) = 2x$ удовлетворяет условию Липшица на интервале $[0; 1]$.

б) функция $f(x) = \sin(x)$ и ее производная $f'(x) = \cos(x)$ непрерывны на интервале $[0; \pi]$.

Константа Липшица $L = \max_{x \in [0,1]} |f'(x)| = 1$.

Вывод. Функция $f(x) = \sin(x)$ удовлетворяет условию Липшица на интервале $[0; \pi]$.

в) функция $f(x) = \sqrt{x}$ и ее производная $f'(x) = \frac{1}{2 \cdot \sqrt{x}}$ непрерывны на интервале $[0; 1]$.

Константа Липшица $L = \max_{x \in [0,1]} |f'(x)| = \infty$ (в точке $x = 0$).

Вывод. Функция $f(x) = \sqrt{x}$ не удовлетворяет условию Липшица на интервале $[0; 1]$.

Листинг программы в пакете MathCad 15 приведен в прил. А – рис. А 4.

При выполнении примера студент должен знать следующие разделы MathCad 15:

- Ввод переменных, переменных с нижним индексом, сопроводительного текста.
- Размещение переменных в сопроводительном тексте.
- Выравнивание текста и формул.
- Просмотр результатов расчета и редактирование числа выводимых десятичных знаков.
- Определение однострочной функции и ее вызов.
- Векторизация.
- Доступ к элементам массива.
- Символьное преобразование уравнений.
- Символьное вычисление производных.
- Дискретный аргумент.
- Вычисление пределов.
- Построение и редактирование двумерных графиков. Нанесение на один график нескольких кривых (см. пример 1.2).

1.13. Задачи для самостоятельного решения

1. Проверить знакоопределенность матрицы Гессе целевой функции $f(x) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1x_2$ в точке $(0; 0)^T$.

Ответ. Матрица Гессе и соответствующая квадратичная форма неопределенные.

2. Проверить знакоопределенность матрицы Гессе целевой функции $f(x) = \frac{x_1^2}{4} + x_2^2$. Исследовать функцию на выпуклость.

Ответ. Матрица Гессе положительно определенная. Функция является сильно выпуклой, так как $H(x) \geq l \cdot E$ при $0 < l < \frac{1}{2}$.

3. Проверить знакоопределенность матрицы Гессе целевой функции $f(x) = x_1^2 + 4x_2^2 - 4x_1x_2$. Исследовать ее выпуклость.

Ответ. Матрица Гессе положительно определенная. Функция является выпуклой.

4. Найти матрицу Гессе функции $f(x) = x_1^2 - x_2^2$. Классифицировать квадратичную форму и матрицу Гессе.

Ответ. Матрица Гессе $H = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$, квадратичная форма и матрица Гессе неопределенные.

5. Классифицировать квадратичную форму и матрицу Гессе $H = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$.

Ответ. Квадратичная форма и матрица Гессе положительно полуопределена.

2. АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ПОИСКА БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА

2.1. Постановка задачи

Функция $f(x)$ непрерывна и дважды дифференцируема на множестве $X = R^n$. Требуется найти экстремум, т. е. определить точки $x^* \in R^n$ ее локальных минимумов и максимумов:

$$f(x^*) = \max_{x \in R^n} f(x); \quad f(x^*) = \min_{x \in R^n} f(x). \quad (2.1)$$

Точки x^* локальных экстремумов находятся с помощью необходимых условий первого и второго порядка и достаточных условий безусловного локального экстремума. Порядок условий определяется порядком используемых производных. Затем вычисляются значения функции $f(x^*)$ в найденных точках x^* локального экстремума.

2.1.1. Необходимые условия безусловного экстремума первого порядка

Если $x^* \in R^n$ является точкой локального минимума (максимума) функции $f(x)$ на множестве R^n и $f(x)$ дифференцируема в точке x^* , то градиент функции $f(x)$ в точке x^* равен нулю, т. е.:

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad (2.2)$$

или

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.3)$$

Точки x^* , удовлетворяющие условию (2.2) или (2.3), называются **стационарными**.

2.1.2. Необходимые условия второго порядка

Если x^* есть точка локального минимума (максимума) функции $f(x)$ на множестве R^n . Тогда матрица Гессе функции $f(x)$, вычисленная в точке x^* , является **положительно полуопределенной (отрицательно полуопределенной)**, т. е.:

$$H(x^*) \geq 0 \quad (2.4)$$

или

$$H(x^*) \leq 0. \quad (2.5)$$

2.1.3. Достаточные условия второго порядка

Если x^* является точкой локального минимума (максимума) функции $f(x)$ на множестве R^n , тогда матрица Гессе функции $f(x)$, вычисленная в точке x^* , является **положительно определенной (отрицательно определенной)**, т. е.:

$$H(x^*) > 0 \quad (2.6)$$

или

$$H(x^*) < 0. \quad (2.7)$$

2.2. Критерии проверки условий экстремума

1. Достаточные условия экстремума с использованием угловых миноров. Критерий Сильвестра.

1.1. Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была положительно определенной ($H(x^*) > 0$) и точка x^* являлась точкой локального **минимума**, необходимо и достаточно, чтобы знаки определителей угловых миноров были строго положительны:

$$\Delta_1 > 0, \Delta_2 > 0, \dots, \Delta_n > 0.$$

1.2. Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была отрицательно определенной ($H(x^*) < 0$) и точка x^* являлась точкой локального **максимума**, необходимо и достаточно, чтобы знаки определителей угловых миноров чередовались, начиная с отрицательного:

$$\Delta_1 < 0, \Delta_2 > 0, \dots, (-1)^n \Delta_n > 0.$$

2. Необходимые условия второго порядка с использованием главных миноров.

2.1. Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была положительно полуопределенной ($H(x^*) \geq 0$) и точка x^* являлась точкой локального **минимума**, необходимо и достаточно, чтобы определители всех главных миноров матрицы Гессе были неотрицательны.

2.2. Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была отрицательно полуопределенной ($H(x^*) \leq 0$) и точка x^* являлась точкой локального **максимума**, необходимо и достаточно, чтобы определители всех главных миноров матрицы Гессе были неположительны.

3. Достаточные условия экстремума с использованием собственных значений.

3.1. Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была положительно определенной ($H(x^*) > 0$) и точка x^* являлась точкой локального **минимума**, необходимо и достаточно, чтобы знаки собственных значений матрицы Гессе были строго положительны:

$$\lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0, \dots, \lambda_n > 0.$$

3.2. Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была отрицательно определенной ($H(x^*) < 0$) и точка x^* являлась точкой локального **максимума**, необходимо и достаточно, чтобы знаки собственных значений матрицы Гессе были строго отрицательны:

$$\lambda_1 < 0, \lambda_2 < 0, \dots, \lambda_n < 0.$$

4. Необходимые условия второго порядка с использованием собственных значений.

4.1. Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была положительно полуопределенной ($H(x^*) \geq 0$) и точка x^* являлась точкой локального **минимума**, необходимо и достаточно, чтобы собственные значения матрицы Гессе были не отрицательны:

$$\lambda_1 \geq 0, \lambda_2 \geq 0, \dots, \lambda_n \geq 0.$$

4.2. Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была отрицательно полуопределенной ($H(x^*) \leq 0$) и точка x^* являлась точкой локального **максимума**, необходимо и достаточно, чтобы собственные значения матрицы Гессе были не положительны:

$$\lambda_1 \leq 0, \lambda_2 \leq 0, \dots, \lambda_n \leq 0.$$

2.2.1. Дополнительные исследования стационарных точек

При выполнении необходимых условий второго порядка рекомендуется проводить дополнительные исследования для подтверждения того, что стационарная точка является точкой экстремума.

Возможные варианты дополнительных исследований:

1. Доказать, что исследуемая функция выпуклая на выпуклом множестве. В этом случае стационарная точка будет одновременно локальным и глобальным минимумом,

2. Графически показать, что стационарная точка является точкой экстремума.

3. Рассчитать значения функции в малой окрестности стационарной точки и сравнить их со значением функции в этой точке. Если все рассчитанные значения функции в локальной области больше значения функции в стационарной точке, то эта точка – точка локального минимума. Если наоборот – точка локального максимума.

2.2.2. Алгоритм решения задачи

Шаг 1. Записать необходимые условия экстремума первого порядка в форме (2.2) или (2.3) и найти стационарные точки x^* .

Шаг 2. В найденных стационарных точках x^* проверить выполнение достаточных (2.6) или (2.7), а если они не выполняются, то необходимых (2.4) или (2.5) условий второго порядка.

Шаг 3. Вычислить значение $f(x^*)$ в точках экстремума.

Данный алгоритм отображен в виде схемы на рис. 2.1. Продолжение исследований, которые требуются в ряде случаев (см. табл. 2.1) при решении практических задач, как правило, не проводятся за исключением небольшого числа модельных задач.

Если требуется определить глобальные экстремумы, то они находятся в результате сравнения значений функций в точках локальных минимумов и максимумов с учетом ограничений на функции.

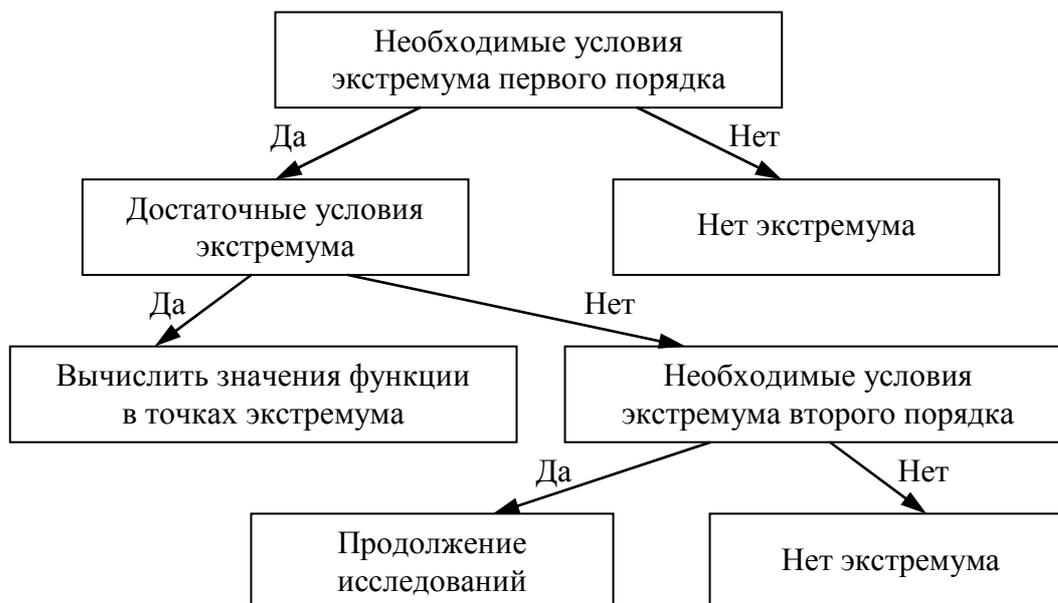


Рис. 2.1. Алгоритм поиска безусловного экстремума

Таблица 2.1

**Критерии проверки условий второго порядка при поиске
безусловного экстремума**

№ п/п	Условие первого порядка $\nabla f(x^*)$	$H(x^*)$	Условия второго порядка	Первый способ	Второй способ. Собственные значения	Тип точки x^*
1	0	>0	Достаточные	Угловые миноры $\Delta_1 > 0,$ $\Delta_2 > 0,$... $\Delta_n > 0$	$\lambda_1 > 0,$ $\lambda_2 > 0,$... $\lambda_n > 0$	Локальный минимум
2	0	<0	Достаточные	Угловые миноры $\Delta_1 < 0,$ $\Delta_2 > 0,$... $(-1)^n \Delta_n > 0$	$\lambda_1 < 0,$ $\lambda_2 < 0,$... $\lambda_n < 0$	Локальный максимум
3	0	≥ 0	Необходимые	Главные миноры $\Delta_{z1} \geq 0,$ $\Delta_{z2} \geq 0,$... $\Delta_{z,n} \geq 0$	$\lambda_1 \geq 0,$ $\lambda_2 \geq 0,$... $\lambda_n \geq 0$	Может быть локальный минимум. Требуется дополнительное исследование
4	0	≤ 0	Необходимые	Главные миноры $\Delta_{z1} \leq 0,$ $\Delta_{z2} \geq 0,$... $(-1)^n \Delta_{z,n} \leq 0$	$\lambda_1 \leq 0,$ $\lambda_2 \leq 0,$... $\lambda_n \leq 0$	Может быть локальный максимум. Требуется дополнительное исследование
5	0	$=0$	Необходимые	Матрица Гессе состоит из нулевых элементов	$\lambda_1 = 0,$ $\lambda_2 = 0,$... $\lambda_n = 0$	Требуется дополнительное исследование
6	0	$>, < 0$	Необходимые	не выполняются п. 1-5	Разные знаки λ_i	Нет экстремума

2.3. Практические примеры

Пример 2.1. Проверить, является ли точка $x^* = (0 \ 0 \ 0)^T$ точкой безусловного экстремума функции:

$$f(x) = x_1^2 + 2x_2^2 - 3x_3^2 - 6x_1x_2 + 8x_1x_3 - 4x_2x_3.$$

Рассчитать:

- матрицу Гессе функции в стационарных точках;
- стационарные точки;
- все угловые миноры определителя матрицы Гессе в стационарной точке;
- все главные миноры определителя матрицы Гессе в стационарной точке;
- собственные значения матрицы Гессе в стационарной точке.

1. Матрица Гессе функции $H(x) = \begin{pmatrix} 2 & -6 & 8 \\ -6 & 4 & -4 \\ 8 & -4 & -6 \end{pmatrix}$.

2. Угловые миноры матрицы Гессе:

$$\Delta_1 = 2, \Delta_2 = \begin{pmatrix} 2 & -6 \\ -6 & 4 \end{pmatrix}, \Delta_3 = \begin{pmatrix} 2 & -6 & 8 \\ -6 & 4 & -4 \\ 8 & -4 & -6 \end{pmatrix}.$$

Значения определителей угловых миноров:

$$\Delta_1 = 2, |\Delta_2| = -28, |\Delta_3| = 264.$$

Вывод. Знаки определителей угловых миноров матрицы Гессе чередуются, начиная с положительного. Необходимые условия экстремума второго порядка не выполняются. Следовательно, исследуемая точка **не является** точкой локального экстремума. Дальнейшие исследования не обязательны, но проведем их в целях обучения.

3. Необходимые условия второго порядка с помощью главных миноров матрицы Гессе.

Главные миноры матрицы Гессе.

3.1. Главные миноры первого порядка:

$$\Delta_{2 \times 1_1} = (-6), \Delta_{2 \times 1_2} = (4), \Delta_{2 \times 1_3} = (2).$$

Значения определителей главных миноров первого порядка:

$$|\Delta_{2 \times 1_1}| = -6, |\Delta_{2 \times 1_2}| = 4, |\Delta_{2 \times 1_3}| = 2.$$

3.2. Главные миноры второго порядка:

$$\Delta_{z12_1} = \begin{pmatrix} 4 & -4 \\ -4 & -6 \end{pmatrix}, \Delta_{z12_2} = \begin{pmatrix} 2 & 8 \\ 8 & -6 \end{pmatrix}, \Delta_{z12_3} = \begin{pmatrix} 2 & -6 \\ -6 & 4 \end{pmatrix}.$$

Значения определителей главных миноров второго порядка:

$$|\Delta_{z12_1}| = -40, |\Delta_{z12_2}| = -76, |\Delta_{z12_3}| = -28.$$

3.3. Главный минор третьего порядка:

$$\Delta_{z13} = \begin{pmatrix} 2 & -6 & 8 \\ -6 & 4 & -4 \\ 8 & -4 & -6 \end{pmatrix}.$$

Значение определителя главного минора третьего порядка:

$$|\Delta_{z13}| = 264.$$

Вывод. Знаки определителей главных миноров матрицы Гессе чередуются. Достаточные условия экстремума второго порядка не выполняются. Следовательно, исследуемая точка **не является** точкой локального экстремума.

4. Достаточные условия второго порядка с помощью собственных значений матрицы Гессе.

Собственные значения матрицы Гессе.

Характеристическое уравнение (в общем виде) для собственных значений матрицы Гессе имеет вид:

$$|H - \lambda E| = 264 + 144\lambda - \lambda^3 = 0.$$

Собственные значения матрицы Гессе:

$$\lambda = (12,829 \quad -1,879 \quad -10,949)^T.$$

Вывод. Собственные значения матрицы Гессе знакопеременны. Необходимые условия экстремума второго порядка не выполняются. Следовательно, исследуемая точка **не является** точкой локального экстремума.

Общий вывод. Исследуемая точка $x^* = (0 \quad 0 \quad 0)^T$ не является точкой безусловного экстремума функции:

$$f(x) = x_1^2 + 2x_2^2 - 3x_3^2 - 6x_1x_2 + 8x_1x_3 - 4x_2x_3.$$

Листинг программы в пакете MathCad 15 приведен в прил. Б – рис. Б 1.

Листинг с описанием пользовательских функций для расчета главных миноров матрицы Гессе, использованных в программе, приведен в прил. Б – рис. Б 2.

При выполнении примера студент должен знать следующие разделы MathCad 15:

- Ввод переменных, переменных с нижним индексом, сопроводительного текста.
- Размещение переменных в сопроводительном тексте.
- Просмотр результатов расчета, редактирование числа выводимых десятичных знаков и формата вывода целых чисел.
- Определение однострочной функции и многострочной функций и их вызов.
- Загрузка файла с формулами в текст программы.
- Векторизация.
- Доступ к столбцам и элементам массива.
- Символьные операции с производными и матрицами.
- Матричные операции и функции.
- Дискретный аргумент.

Пример 2.2. Найти экстремум функции:

$$f(x) = x_1^3 + x_2^2 + x_3^2 + x_2x_3 - 3x_1 + 6x_2 + 2.$$

Рассчитать:

- стационарные точки;
 - матрицу Гессе функции в стационарных точках;
 - классифицировать стационарные точки, используя:
 - угловые миноры определителя матрицы Гессе в стационарных точках;
 - главные миноры определителя матрицы Гессе в стационарных точках;
 - собственные значения матрицы Гессе в стационарных точках.
1. Необходимые условия экстремума первого порядка:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_1} f(x) = 3x_1^2 - 3 = 0; \\ \frac{\partial}{\partial x_2} f(x) = 2x_2 + x_3 + 6 = 0; \\ \frac{\partial}{\partial x_3} f(x) = 2x_3 + x_2 = 0. \end{cases}$$

Решение системы уравнений дало две стационарные точки:

$$x1^* = (1 \quad -4 \quad 2)^T, \quad x2^* = (-1 \quad -4 \quad 2)^T.$$

2. Проверить выполнение достаточных и необходимых условий второго порядка в каждой стационарной точке, используя два метода (методы миноров и собственных значений).

2.1. Первая стационарная точка $x1^* = (1 \quad -4 \quad 2)^T$.

а) Первый способ. Проверить выполнение достаточных условий второго порядка, используя угловые миноры.

Матрица Гессе в точке $x1^*$ имеет вид:

$$H(x1^*) = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Угловые миноры имеют вид:

$$\Delta_1 = (6), \quad \Delta_2 = \begin{pmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \Delta_3 = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Определители угловых миноров равны:

$$|\Delta_1| = 6 > 0, \quad |\Delta_2| = 12 > 0, \quad |\Delta_3| = 18 > 0.$$

Так как все определители угловых миноров матрицы Гессе строго положительные, то по критерию Сильвестра стационарная точка $x1^* = (1 \quad -4 \quad 2)^T$ является точкой минимума.

б) Второй способ. Проверить выполнение достаточных условий второго порядка, используя собственные значения матрицы Гессе.

Собственные значения λ матрицы Гессе можно найти, решая характеристическое уравнение:

$$\begin{vmatrix} 6-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 2-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 2-\lambda \end{vmatrix} = (6-\lambda)[(2-\lambda)^2 - 1] = 0.$$

Собственные значения равны:

$$\lambda_1 = 6 > 0, \quad \lambda_2 = 3 > 0, \quad \lambda_3 = 1 > 0.$$

Собственные значения λ матрицы Гессе строго положительные, следовательно, стационарная точка $x1^* = (1 \ -4 \ 2)^T$ является точкой минимума.

2.2. Вторая стационарная точка $x2^* = (-1 \ -4 \ 2)^T$.

а) Первый способ. Проверить выполнение достаточных условий второго порядка, используя угловые миноры.

Матрица Гессе в точке $x2^*$ имеет вид:

$$H(x2^*) = \begin{pmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Угловые миноры имеют вид:

$$\Delta_1 = (-6), \Delta_2 = \begin{pmatrix} -6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \Delta_3 = \begin{pmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Определители угловых миноров равны:

$$|\Delta_1| = -6 < 0, |\Delta_2| = -12 < 0, |\Delta_3| = -18 < 0.$$

Так как все определители угловых миноров матрицы Гессе отрицательны, то критерий Сильвестра не выполняется.

б) Проверить необходимые условия второго порядка, используя главные миноры.

Главные миноры первого порядка ($m=1$) получаются из матрицы Гессе

$$H(x2^*) = \begin{pmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

в результате вычеркивания $n - m = 3 - 1 = 2$ -х строк и 2-х столбцов с одинаковыми номерами:

$$\Delta_{21_1} = (2), \Delta_{21_2} = (2), \Delta_{21_3} = (-6).$$

Определители главных миноров первого порядка равны:

$$|\Delta_{21_1}| = 2, |\Delta_{21_2}| = 2, |\Delta_{21_3}| = -6.$$

Главные миноры второго порядка ($m=2$) получаются из матрицы Гессе

$$H(x_2^*) = \begin{pmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

путем вычеркивания $n-m=3-2=1$ -й строки и 1-го столбца с одинаковыми номерами:

$$\Delta_{212-1} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \Delta_{212-2} = \begin{pmatrix} -6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \Delta_{212-3} = \begin{pmatrix} -6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Определители главных миноров первого порядка равны:

$$|\Delta_{212-1}| = 3, |\Delta_{212-2}| = -12, |\Delta_{212-3}| = -12.$$

Главные миноры третьего порядка ($m=3$) получаются из матрицы Гессе

$$H(x_2^*) = \begin{pmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

в результате вычеркивания $n-m=3-3=0$ -й строки и 0-го столбца:

$$\Delta_{213-1} = \begin{pmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Определитель главного минора первого порядка равен:

$$|\Delta_{213-1}| = -18.$$

Определители главных миноров матрицы Гессе знакопеременны, необходимые условия второго порядка не выполняются. Стационарная точка $x_2^* = (-1 \ -4 \ 2)^T$ не является точкой минимума.

в) Второй способ. Проверить выполнение достаточных условий второго порядка, используя собственные значения матрицы Гессе.

Собственные значения λ матрицы Гессе можно найти, решая характеристическое уравнение

$$\begin{vmatrix} -6-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 2-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 2-\lambda \end{vmatrix} = (-6-\lambda)[(2-\lambda)^2 - 1] = 0.$$

Собственные значения равны:

$$\lambda_1 = -6 < 0, \lambda_2 = 3 > 0, \lambda_3 = 1 > 0.$$

Собственные значения λ матрицы Гессе имеют разные знаки, следовательно, стационарная точка $x_2^* = (-1 \ -4 \ 2)^T$ не является точкой минимума.

Значение функции в точке $x_1^* \quad f(x_1^*) = -12$.

Листинг программы в пакете MathCad 15 приведен в прил. Б – рис. Б 3.

Листинг с описанием пользовательских функций для расчета главных миноров матрицы Гессе, использованных в программе приведен в прил. Б – рис. Б 2.

При выполнении примера студент должен знать следующие разделы MathCad 15:

- Ввод переменных, переменных с нижним индексом, сопроводительного текста.
- Размещение переменных в сопроводительном тексте.
- Просмотр результатов расчета, редактирование числа выводимых десятичных знаков и формата вывода целых чисел.
- Определение однострочной функции и многострочной функций и их вызов.
- Загрузка файла с формулами в текст программы.
- Векторизация.
- Доступ к столбцам и элементам массива.
- Блочные массивы и операции с ними.
- Символьный расчет градиента функции.
- Символьное решение уравнений (команда **solve**).
- Численное решение уравнений (команда **polyroots** и блок **Given–Find**).
- Символьные операции с производными и матрицами.
- Матричные операции и функции.
- Дискретный аргумент.

Пример 2.3. Найти экстремум функции:

$$f(x) = 4 \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2 - 4 \cdot x_1 \cdot x_2 + x_1.$$

Рассчитать:

- стационарные точки;
- матрицу Гессе функции в стационарных точках;

- классифицировать стационарные точки, используя:
 - угловые миноры определителя матрицы Гессе в стационарных точках;
 - главные миноры определителя матрицы Гессе в стационарных точках;
 - собственные значения матрицы Гессе в стационарных точках;
 - построить график функции и нанести стационарные точки.
1. Необходимые условия экстремума первого порядка:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_1} f(x) = 8x_1^2 - 4x_2 + 1 = 0, \\ \frac{\partial}{\partial x_2} f(x) = 6x_2 - 4x_1 = 0. \end{cases}$$

Решение системы уравнений дало одну стационарную точку:

$$x1^* = (-0,188 \quad -0,125)^T.$$

2. Проверить выполнение достаточных и необходимых условий второго порядка в стационарной точке, используя два метода (методы миноров и собственных значений).

2.1. Проверить достаточные условия.

а) Первый способ. Проверить выполнение достаточных условий второго порядка, используя угловые миноры.

Матрица Гессе в точке $x1^*$ имеет вид:

$$H(x1^*) = \begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Угловые миноры имеют вид:

$$\Delta_1 = (8), \quad \Delta_2 = \begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Определители угловых миноров равны:

$$|\Delta_1| = 8 > 0, \quad |\Delta_2| = 0.$$

Все определители угловых миноров матрицы Гессе неотрицательны, не строго положительны. Достаточные условия экстремума не выполняются в стационарной точке $x1^* = (-0,188 \quad -0,125)^T$. Требуется дополнительные исследования.

б) Второй способ. Проверить выполнение достаточных условий второго порядка, используя собственные значения матрицы Гессе.

Собственные значения λ матрицы Гессе можно найти, решая характеристическое уравнение:

$$\begin{vmatrix} 8-\lambda & 0 \\ 0 & -\lambda \end{vmatrix} = -8\lambda + \lambda^2 = 0.$$

Собственные значения равны:

$$\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 8 > 0.$$

Собственные значения λ матрицы Гессе не строго положительные, неотрицательные. Достаточные условия экстремума не выполняются в стационарной точке $x1^* = (-0,188 \quad -0,125)^T$, но выполняются необходимые условия второго порядка. Следовательно, стационарная точка может быть точкой локального минимума. Требуется дополнительное исследование.

2.2. Проверить необходимые условия второго порядка с помощью главных миноров матрицы Гессе.

Главные миноры первого порядка ($m=1$) получаются из матрицы Гессе

$$H(x1^*) = \begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

в результате вычеркивания $n-m=2-1=1$ -й строки и 1-го столбца с одинаковыми номерами:

$$\Delta_{21-1} = (0), \Delta_{21-2} = (8).$$

Определители главных миноров первого порядка равны:

$$|\Delta_{21-1}| = 0, |\Delta_{21-2}| = 8.$$

Главные миноры второго порядка ($m=2$) получаются из матрицы Гессе

$$H(x1^*) = \begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

в результате вычеркивания $n-m=2-2=0$ -й строки и 0-го столбца с одинаковыми номерами:

$$\Delta_{22-1} = \begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Определители главных миноров первого порядка равны:

$$|\Delta_{2 \times 2_1}| = 0.$$

Определители главных миноров матрицы Гессе не отрицательны, необходимые условия второго порядка не выполняются. Необходимые условия экстремума выполняются в стационарной точке $x_1^* = (-0.188 \ -0.125)^T$. Стационарная точка может быть точкой локального минимума. Требуется дополнительные исследования.

2.3. Дополнительные исследования стационарной точки.

Матрица Гессе положительно полуопределена (матрица Гессе постоянна на всем выпуклом множестве R^n (не зависит от переменных)). Следовательно, функция $f(x)$ является выпуклой функцией и имеет одну точку глобального минимума. Учитывая сказанное, стационарная точка $x_1^* = (-0,188 \ -0,125)^T$ является точкой как локального, так и глобального минимума.

Общий вывод. Исследуемая точка $x_1^* = (-0,188 \ -0,125)^T$ является точкой глобального минимума функции $f(x) = 4x_1^2 + 3x_2^2 - 4x_1x_2 + x_1$.

Листинг программы в пакете MathCad 15 приведен в прил. Б – рис. Б 4.

Листинг с описанием пользовательских функций для расчета главных миноров матрицы Гессе, использованных в программе приведен в прил. Б – рис. Б 2.

При выполнении примера студент должен знать следующие разделы MathCad 15:

- Ввод переменных, переменных с нижним индексом, сопроводительного текста.
- Размещение переменных в сопроводительном тексте.
- Просмотр результатов расчета, редактирование числа выводимых десятичных знаков и формата вывода целых чисел.
- Определение однострочной функции и многострочной функций и их вызов.
- Загрузка файла с формулами в текст программы.
- Векторизация.
- Доступ к столбцам и элементам массива.
- Символьный расчет градиента функции.
- Символьное решение уравнений (команда **solve**).
- Решение системы линейных уравнений с помощью матриц.

- Численное решение уравнений (команда **polyroots**, блок **Given-Find**).

- Блочные массивы и операции с ними.
- Вычисление единичной матрицы командой **identity()**.
- Символьные функции **coeff**, **series**.
- Символьные операции с производными и матрицами.
- Матричные операции и функции.
- Дискретный аргумент.
- Построение и редактирование трехмерных графиков. Нанесение на график точек.

Для получения графика в виде, приведенном на листинге программы, необходимо настроить вкладки диалогового окна (вызывается двойным щелчком мышки на графике) **3D Plot Format**.

Настройка первого графика, изображенного на рис. Б 4, приведена на рис. 2.2–2.13. Настройка второго графика, изображенного на рис. Б 4, приведена на рис. 2.14–2.15, остальные вкладки настраиваются по аналогии с настройками первого графика.

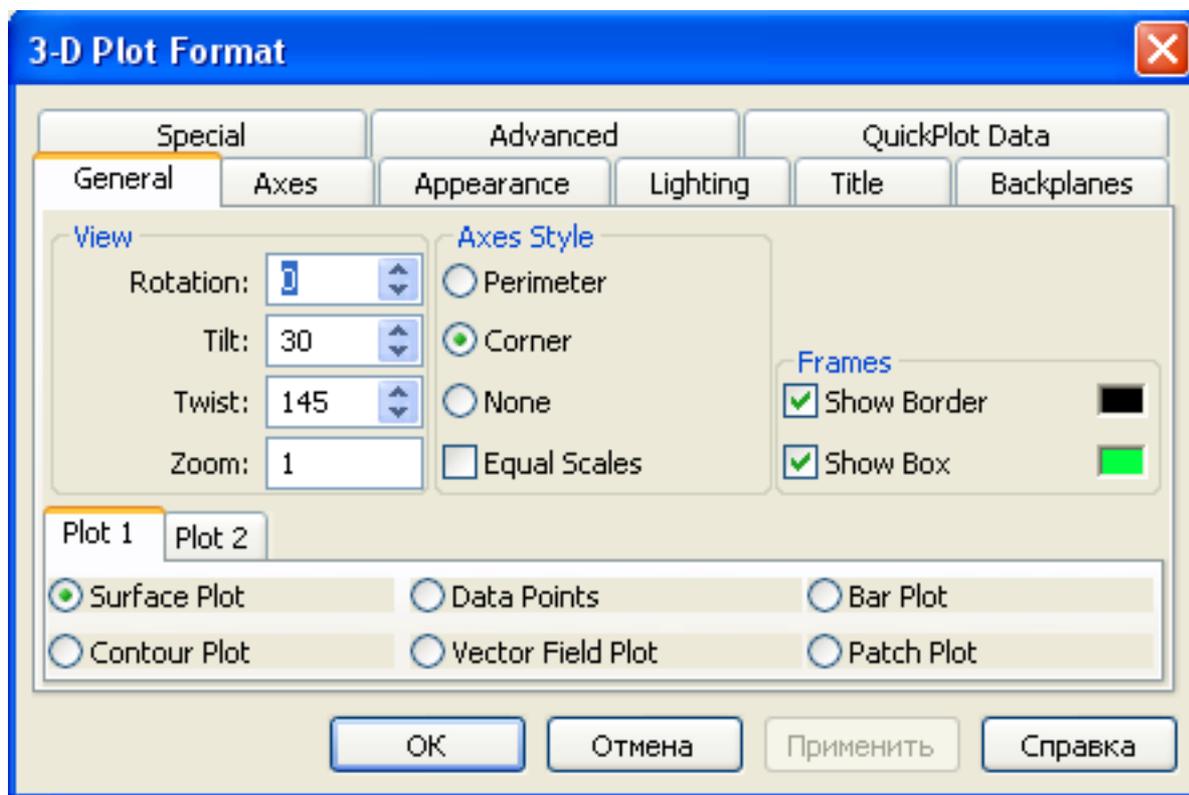


Рис. 2.2. Настройка вкладки General, вкладка Plot 1 (пример 2.3)

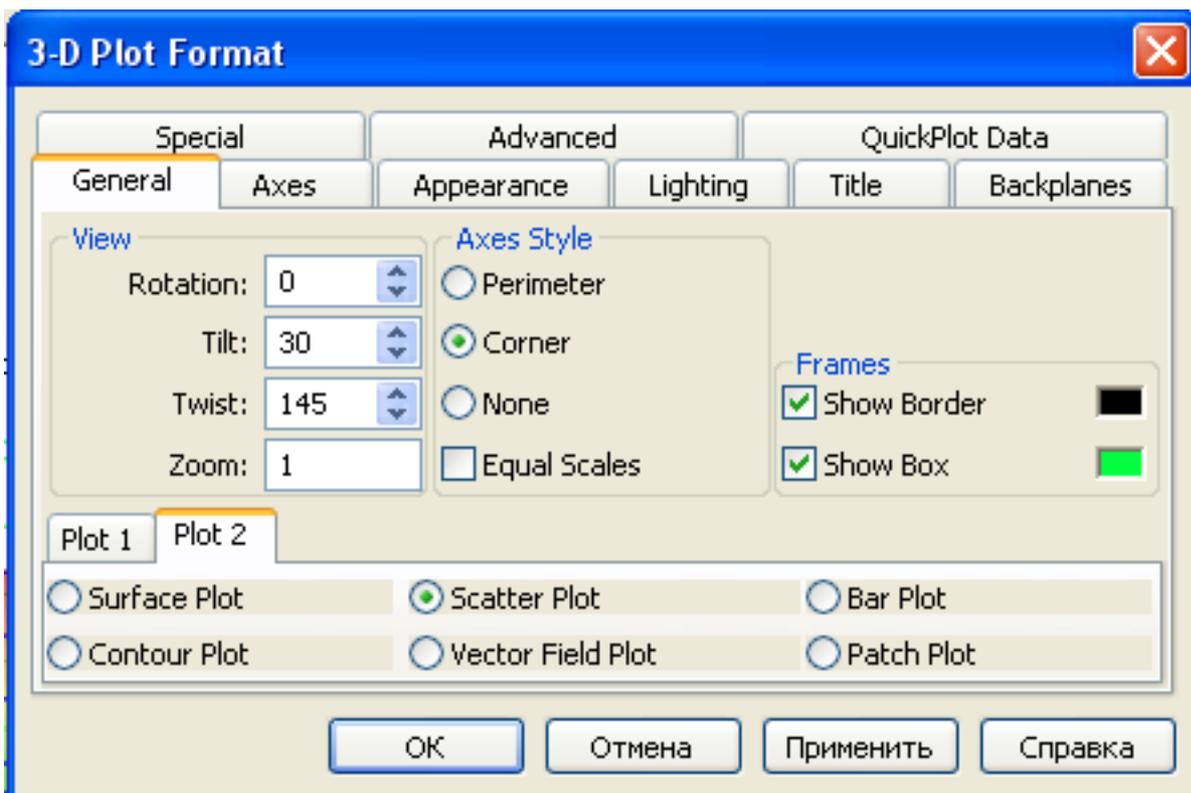


Рис. 2.3. Настройка вкладки General, вкладка Plot 2 (пример 2.3)

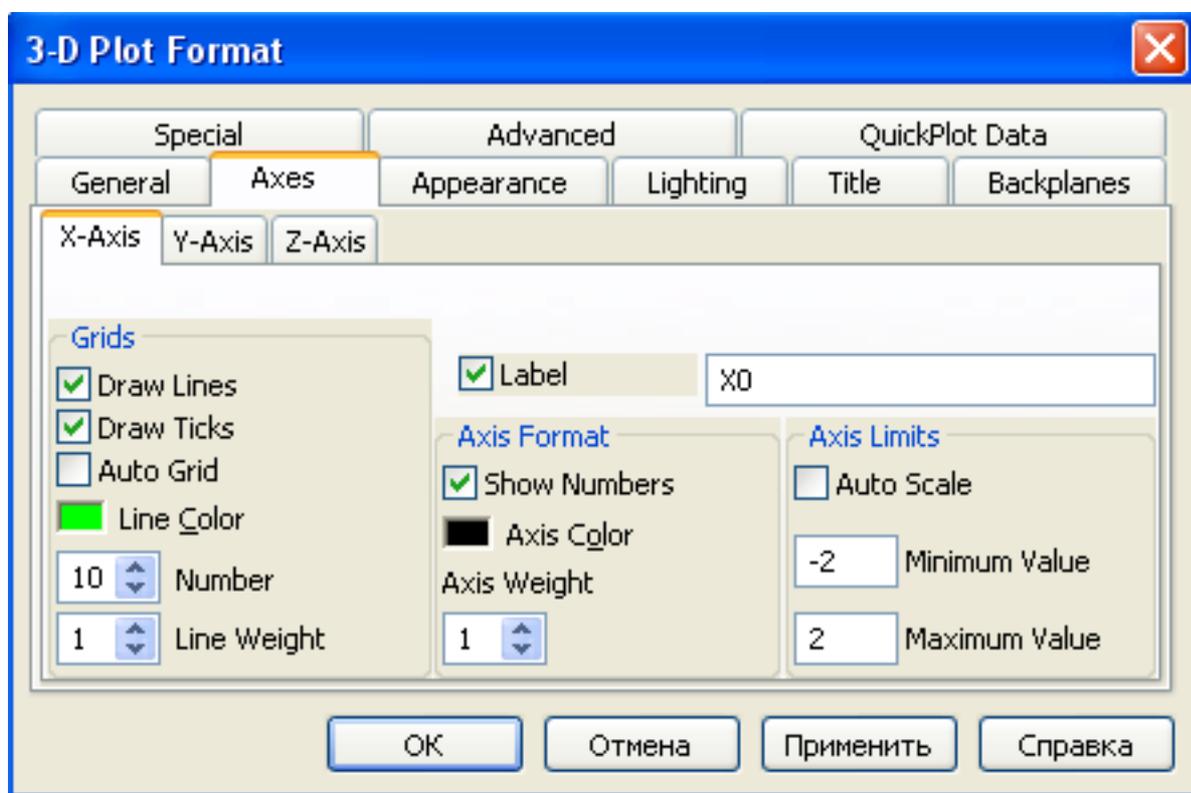


Рис. 2.4. Настройка вкладки Axis, вкладка X-Axis (пример 2.3)

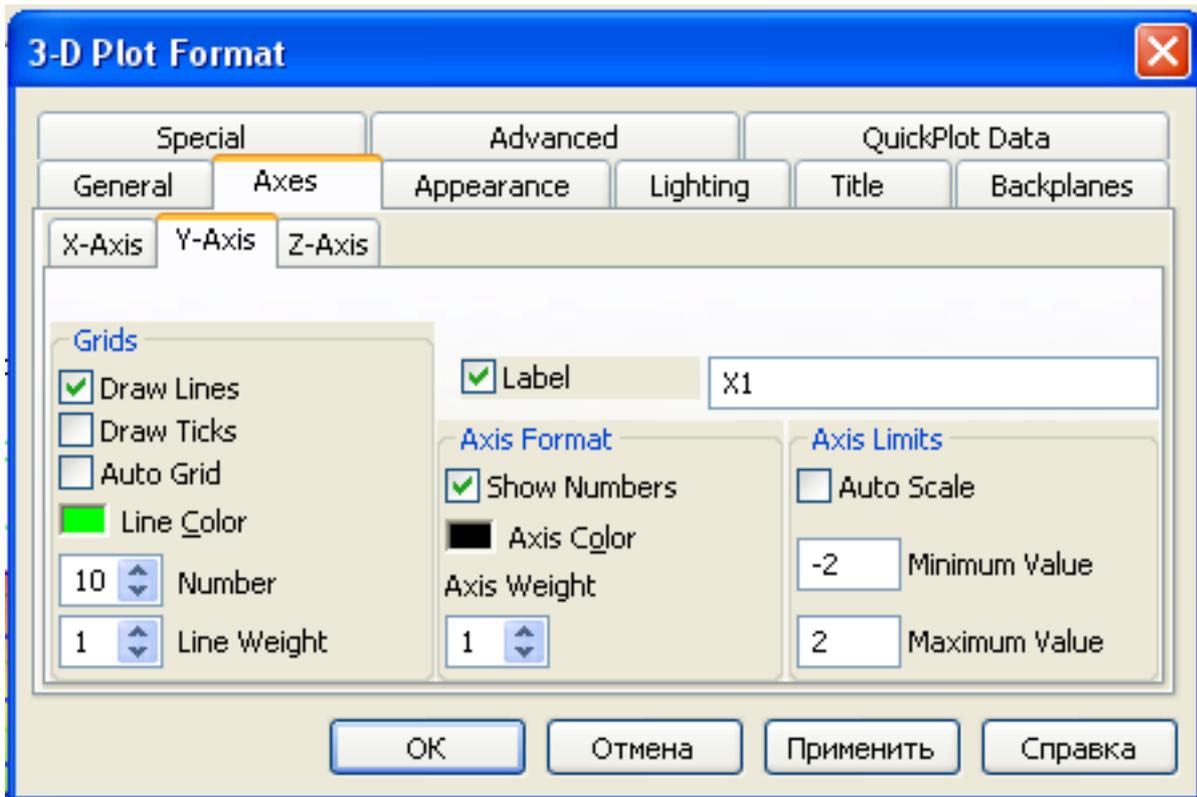


Рис. 2.5. Настройка вкладки Axis, вкладка Y-Axis (пример 2.3)

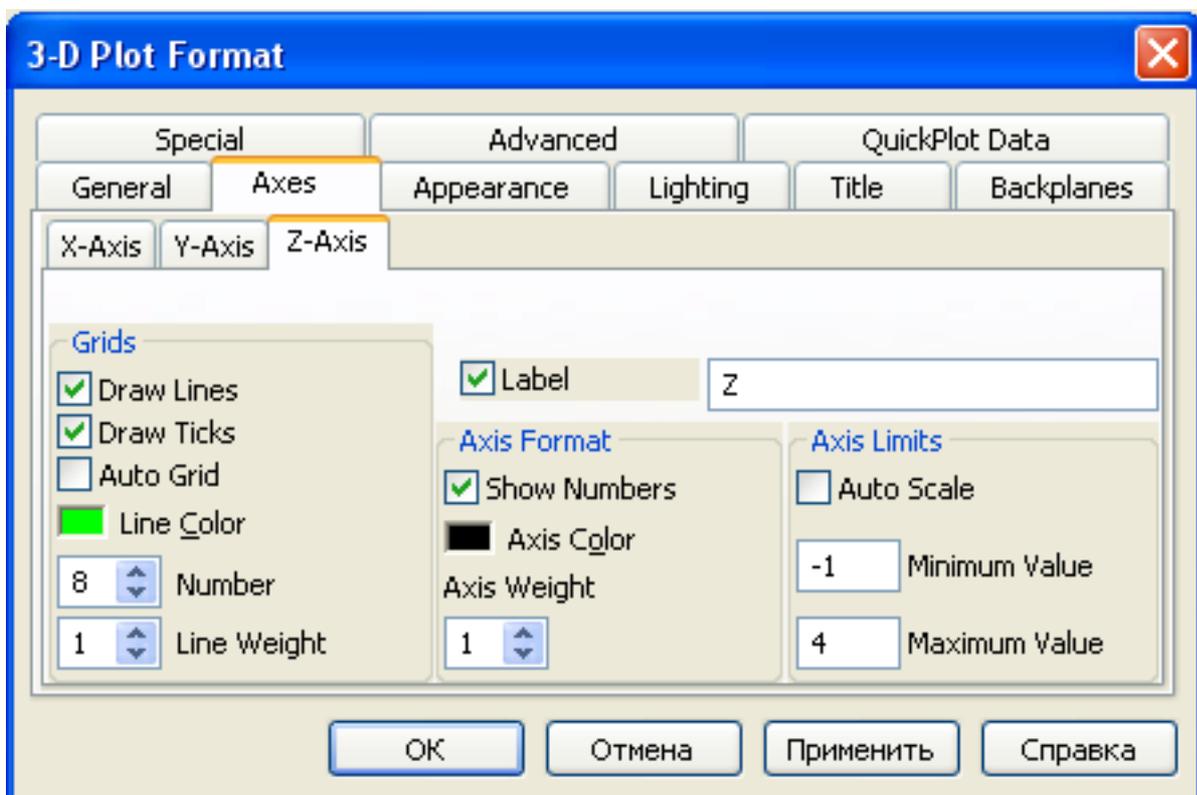


Рис. 2.6. Настройка вкладки Axis, вкладка Z-Axis (пример 2.3)

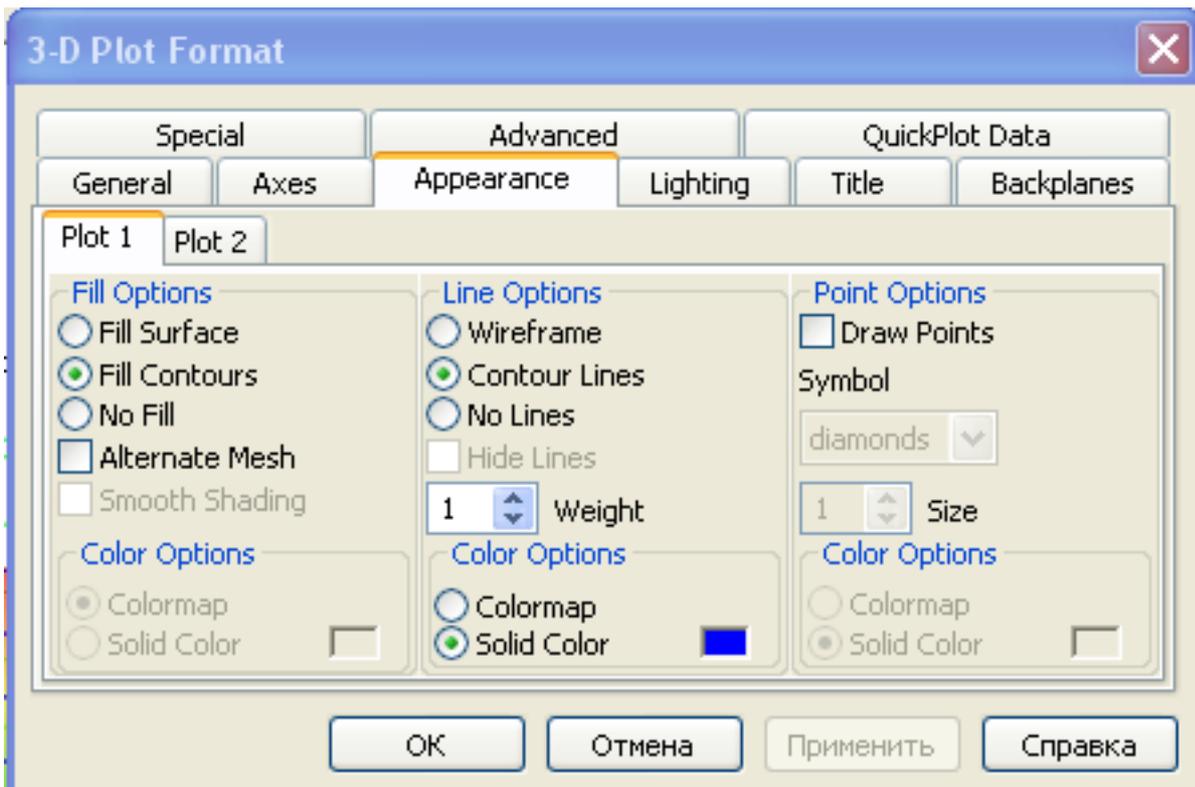


Рис. 2.7. Настройка вкладки Appearance, вкладка Plot 1 (пример 2.3)

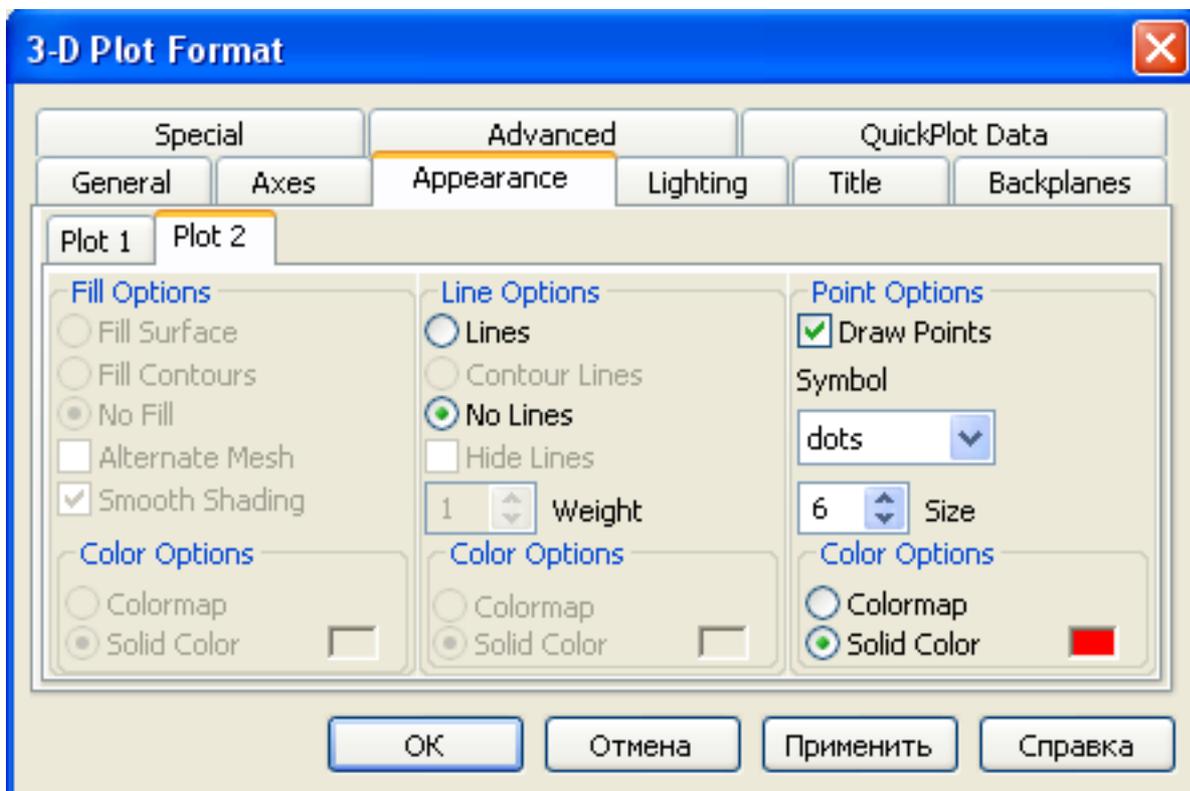


Рис. 2.8. Настройка вкладки Appearance, вкладка Plot 2 (пример 2.3)

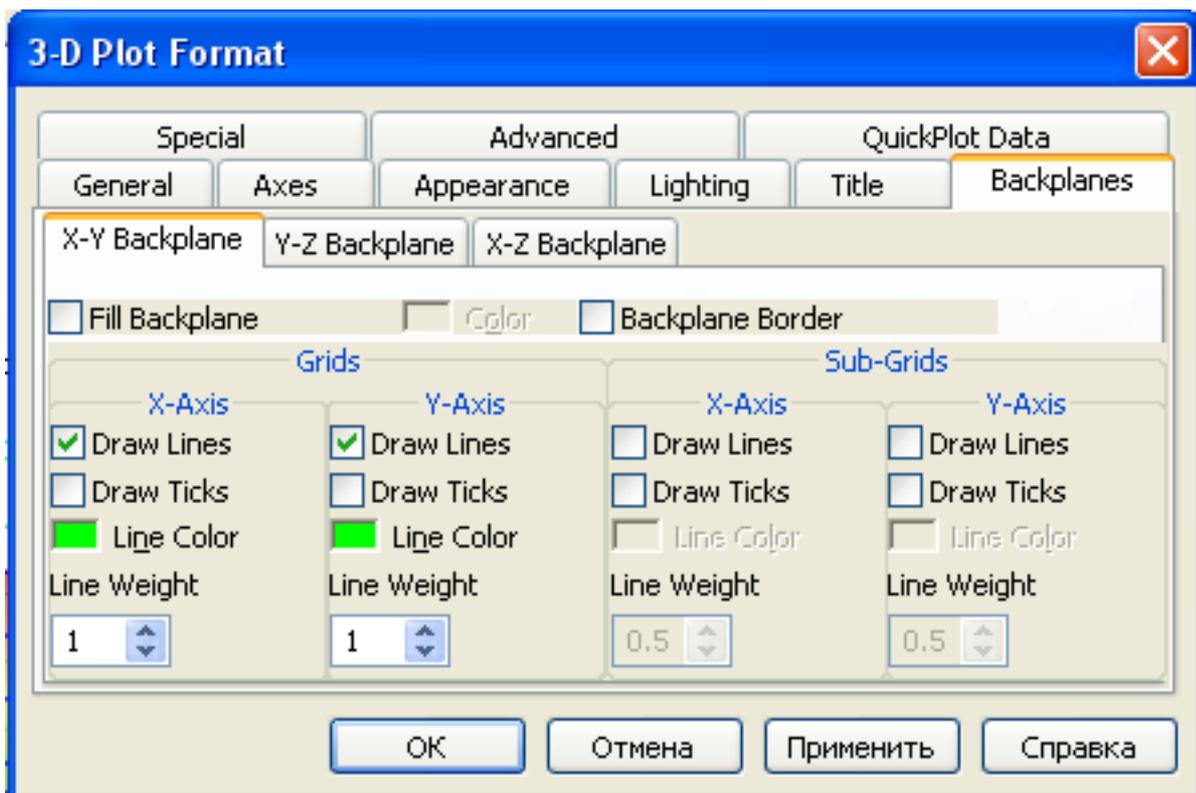


Рис. 2.9. Настройка вкладки Backplanes, вкладка X-Y Backplane (пример 2.3)

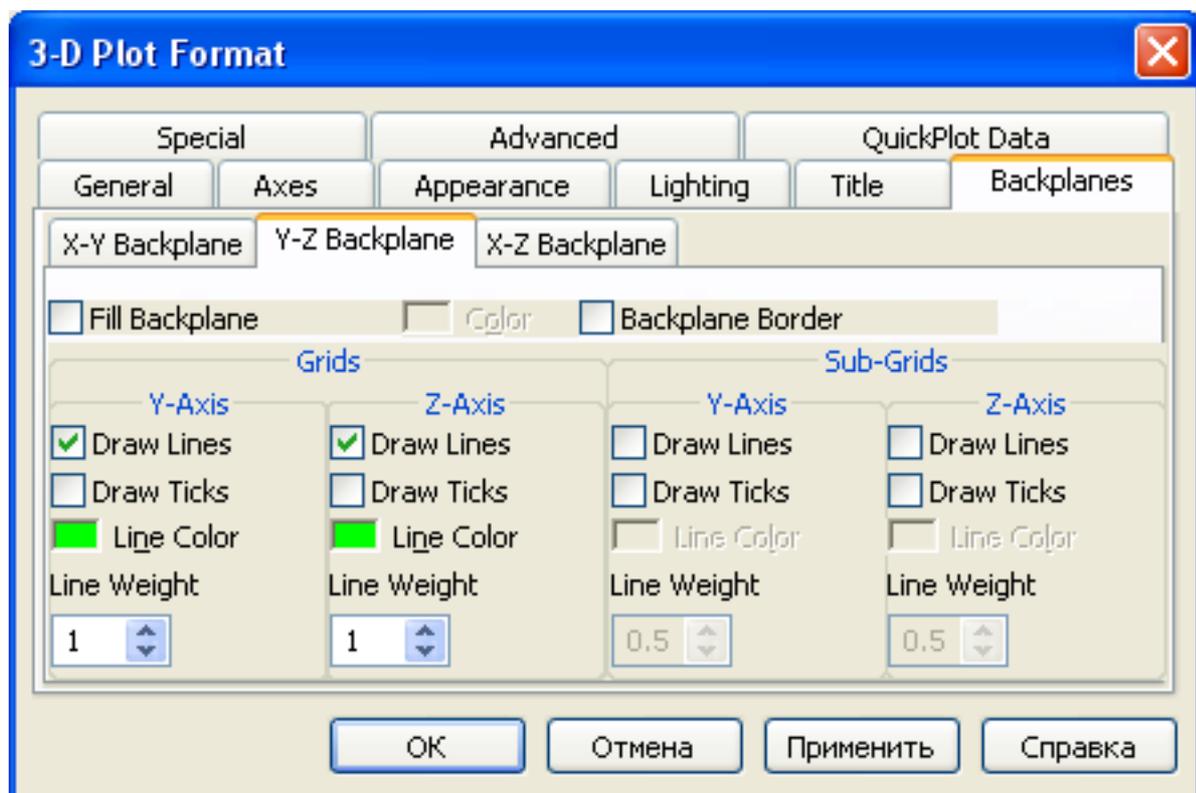


Рис. 2.10. Настройка вкладки Backplanes, вкладка Y-Z Backplane (пример 2.3)

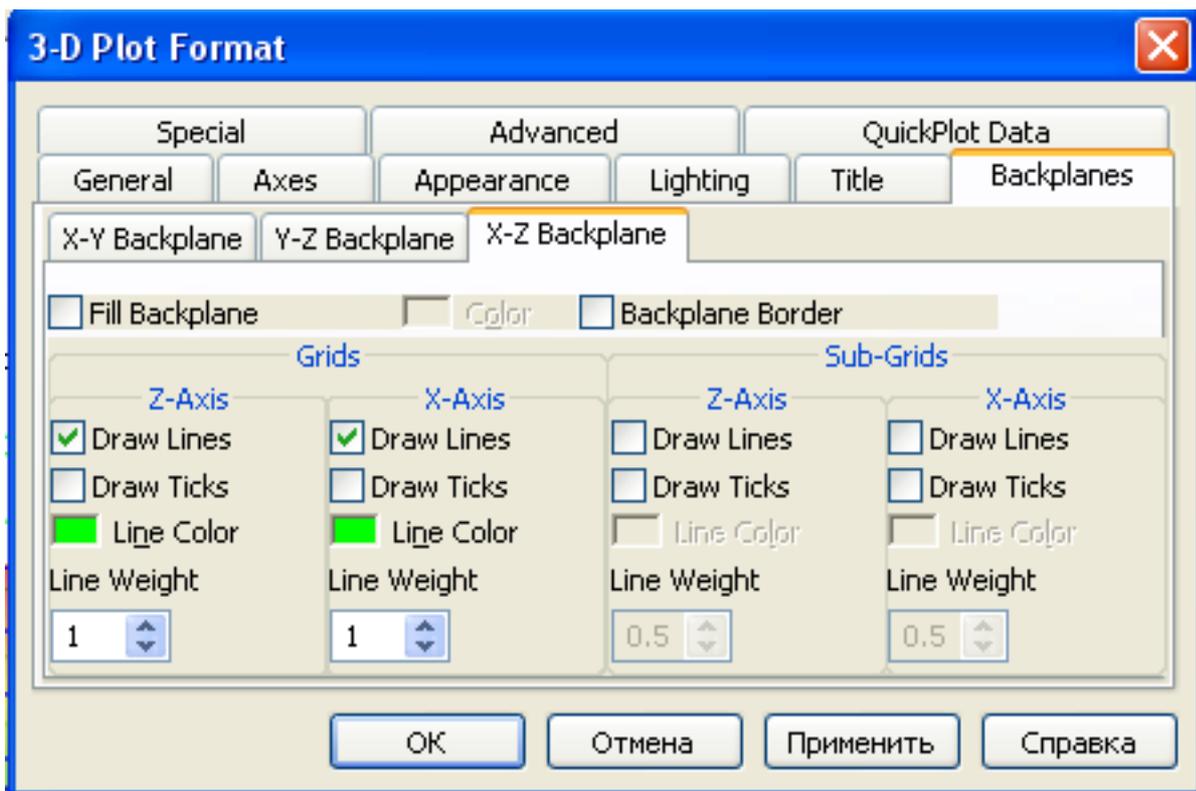


Рис. 2.11. Настройка вкладки Backplanes, вкладка X-Z Backplane (пример 2.3)

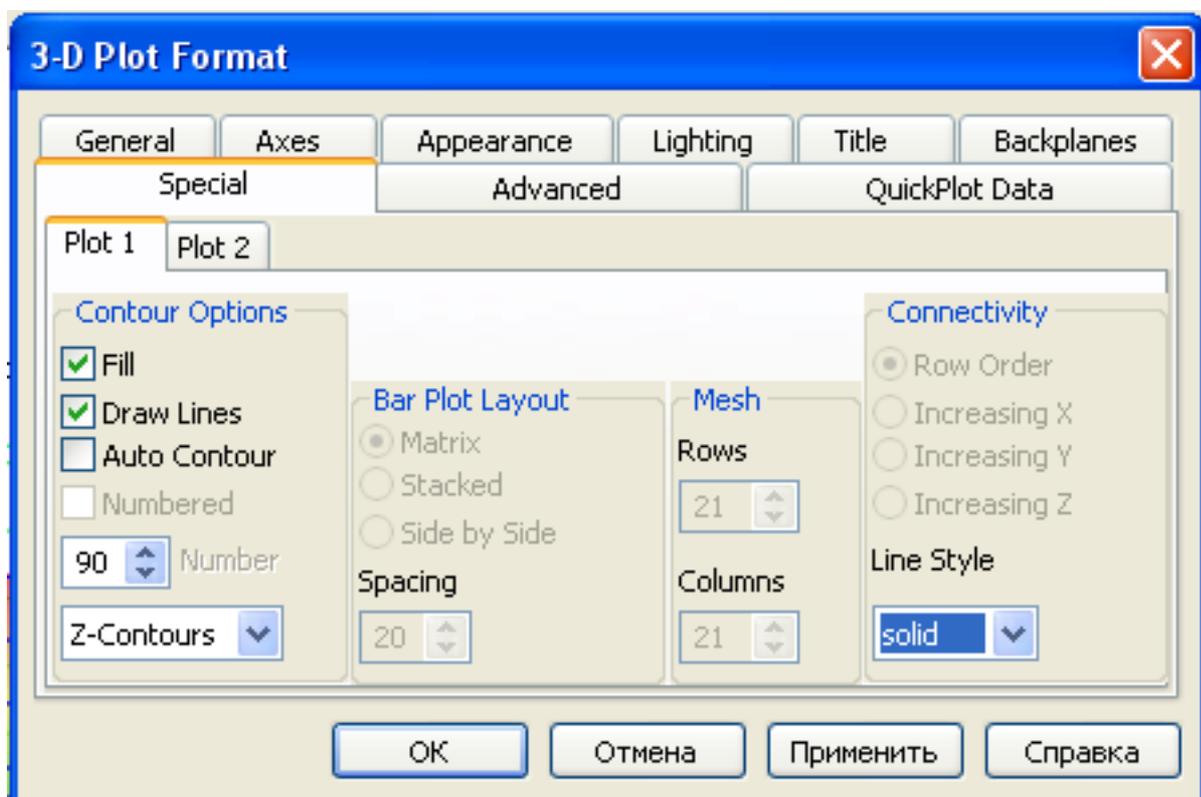


Рис. 2.12. Настройка вкладки Special, вкладка Plot 1 (пример 2.3)

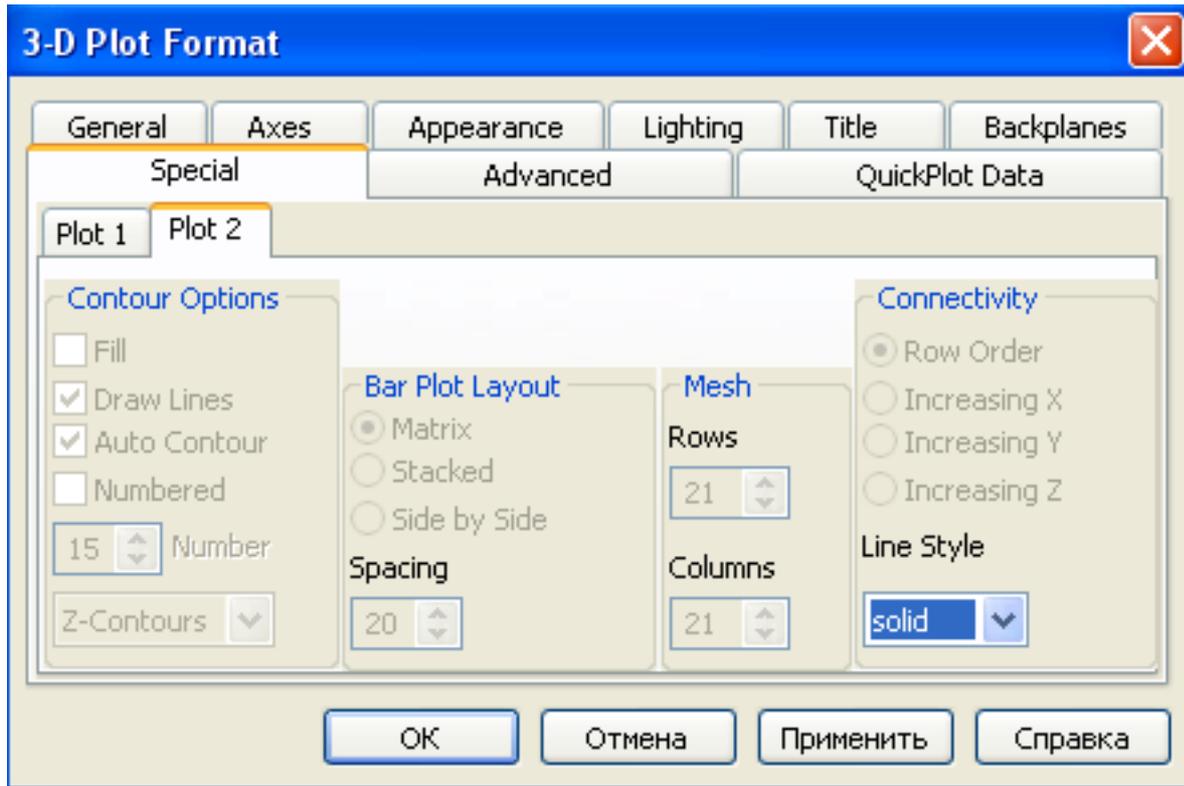


Рис. 2.13. Настройка вкладки Special, вкладка Plot 2 (пример 2.3)

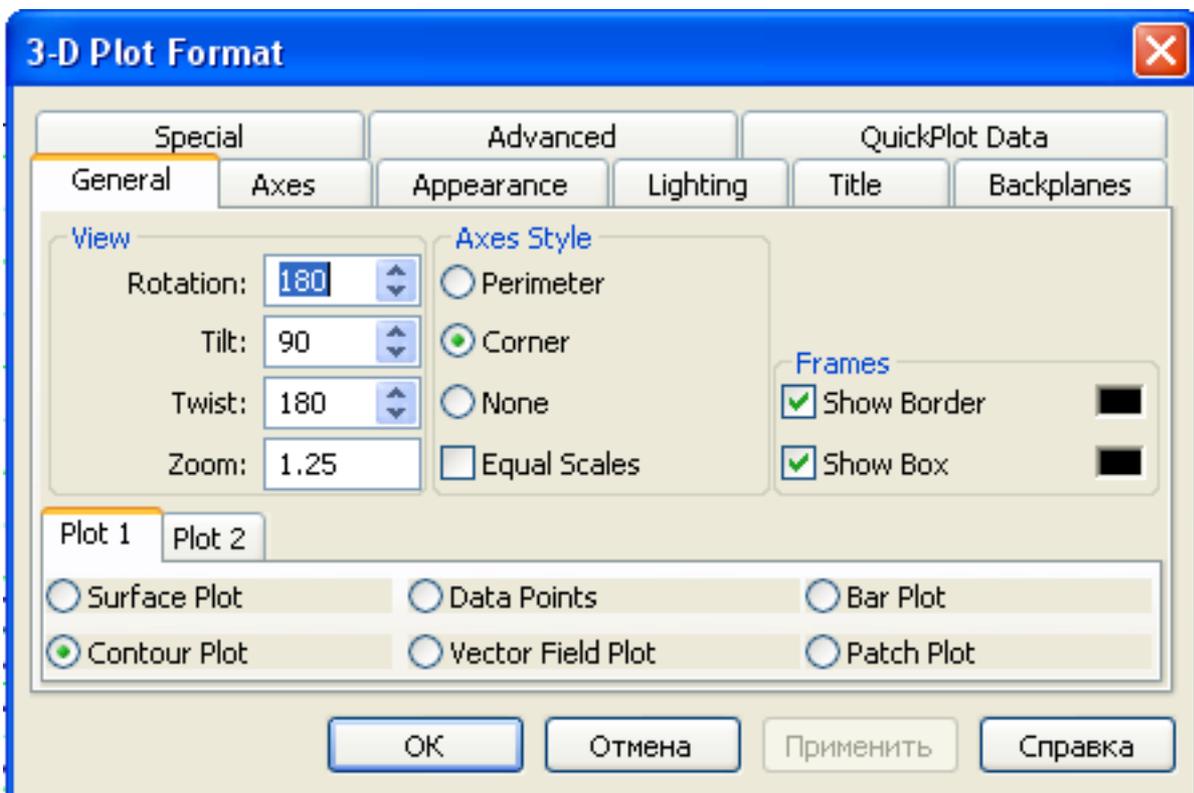


Рис. 2.14. Настройка вкладки General, вкладка Plot 1 (пример 2.3)

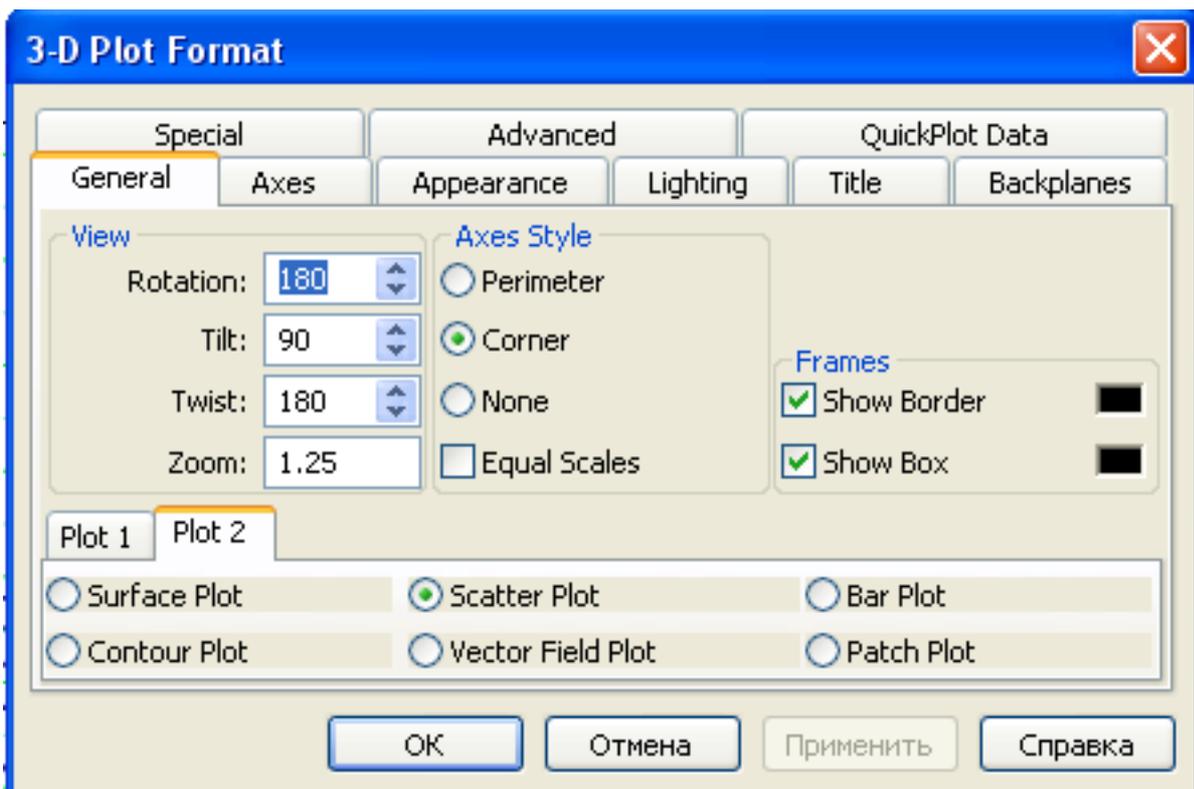


Рис. 2.15. Настройка вкладки General, вкладка Plot 2 (пример 2.3)

Пример 2.4. Найти минимум функции Розенброка:

$$f(x) = 4x_1^2 + 3x_2^2 - 4x_1x_2 + x_1,$$

используя функции MathCad, двумя способами, с помощью блока Given–MinErr и функции Minimize.

Построить график функции и нанести точку минимума.

Листинг программы в пакете MathCad 15 приведен в прил. Б – рис. Б 5.

При выполнении примера студент должен знать следующие разделы MathCad 15:

- Ввод переменных, переменных с нижним индексом, сопроводительного текста.
- Размещение переменных в сопроводительном тексте.
- Просмотр результатов расчета, редактирование числа выводимых десятичных знаков и формата вывода целых чисел.
- Определение однострочной функции и ее вызов.
- Доступ элементам массива.
- Блочные массивы и операции с ними.
- Численное решение уравнений (команда **Minimize** и блок **Given–MinErr**). Настройку метода расчета корней уравнения в блоке **Given–MinErr** см. на рис. 2.16.

- Численные операции с производными и матрицами.
- Матричные операции.
- Дискретный аргумент.
- Для получения графика в виде, приведенном на листинге программы, необходимо настроить вкладки диалогового окна (вызывается двойным щелчком мышки на графике) **3D Plot Format**. Прodelать самостоятельно (см. пример 2.3). Следует отметить, что для получения вида поверхности, изображенного на графике (рис. Б 5) необходимо установить диапазон значений по оси z в интервале от - 10 до 60.

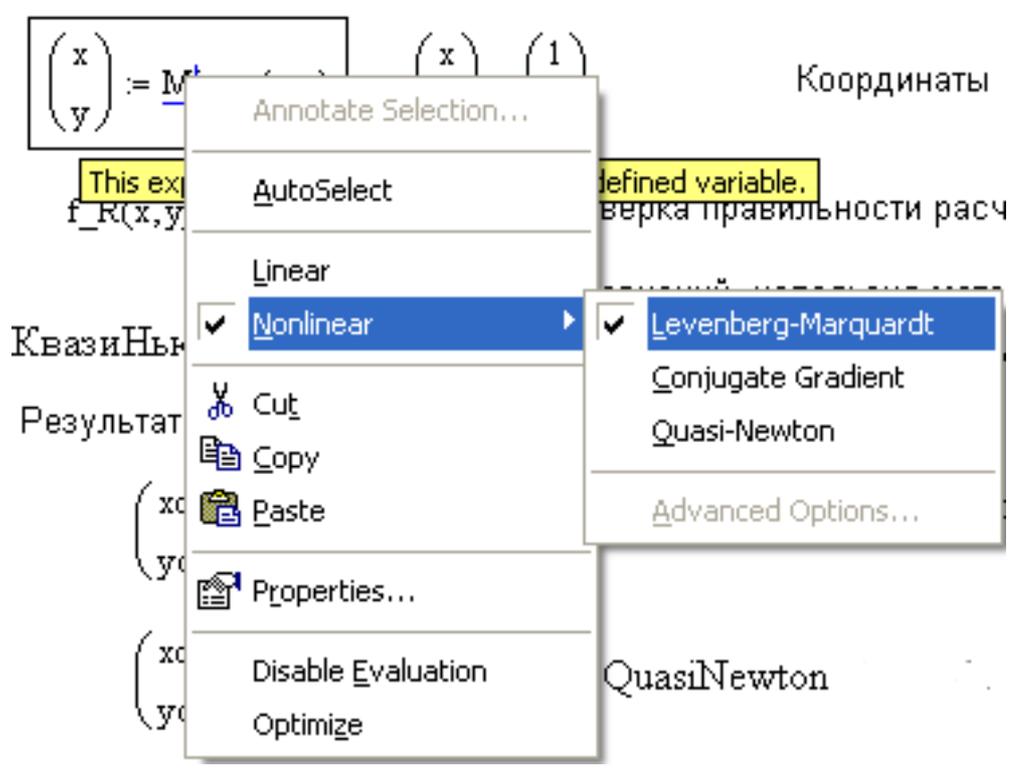


Рис. 2.16. Настройка метода нахождения корней уравнения в блоке Given–MinErr (пример 2.4)

Пример 2.5. Найти минимум функции Хаммельблау:

$$f(x, y) = (x^2 + y - 11)^2 + (x + y^2 - 7)^2,$$

используя функции MathCad: блок Given–MinErr и блок Given–Maximize.

Построить графики (поверхность и линии уровня) функции и нанести точку минимума.

Листинг программы в пакете MathCad 15 приведен в прил. Б – рис. Б 6.

При выполнении примера студент должен знать следующие разделы MathCad 15:

- Ввод переменных, переменных с нижним индексом, сопроводительного текста.
- Размещение переменных в сопроводительном тексте.
- Просмотр результатов расчета, редактирование числа выводимых десятичных знаков и формата вывода целых чисел.
- Определение однострочной функции и ее вызов.
- Доступ элементам массива.
- Блочные массивы и операции с ними.
- Численное решение уравнений (блок **Given–Minimize** и блок **Given–MinErr**).
- Численные и символьные операции с производными.
- Матричные операции.
- Блочные матрицы и их просмотр.
- Векторизация.
- Дискретный аргумент.
- Для получения графика в виде, приведенном на листинге программы, необходимо настроить вкладки диалогового окна (вызывается двойным щелчком мышки на графике) **3D Plot Formt**. Прodelать самостоятельно (см. пример 2.3).

2.4. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти безусловный экстремум целевой функции:

$$f(x) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1x_2$$

аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

2. Найти безусловный экстремум целевой функции $f(x) = x_1^2 + x_2^2$ аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. $x = (0 \ 0)^T$ является точкой локального минимума.

3. Найти безусловный экстремум целевой функции $f(x) = x_1^2 - x_2^2$ аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. $x = (0 \ 0)^T$ является точкой локального минимума.

4. Найти безусловный экстремум целевой функции $f(x) = x_1^2 + x_2^2$ аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. $x = (0 \ 0)^T$ не является точкой минимума или максимума, а является седловой точкой.

5. Найти безусловный экстремум целевой функции $f(x) = x_1^2 + x_2^4$ аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. $x = (0 \ 0)^T$ является точкой глобального минимума.

6. Найти безусловный экстремум целевой функции:

$$f(x) = (1 - x_1)^2 + 10(x_2 - x_1)^2$$

аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. $x = (1 \ 1)^T$ является точкой глобального минимума.

7. Найти безусловный экстремум целевой функции:

$$f(x) = -x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 - x_1 + x_1x_2 + 2x_3$$

аналитическим методом.

Ответ. $x = \left(-\frac{2}{3} \ -\frac{1}{3} \ 1\right)^T$ является точкой локального максимума.

8. Найти безусловный экстремум целевой функции:

$$f(x) = -x_1^2 - x_2^2 + 2x_1x_2 - 4x_3^2$$

аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. Бесконечное множество стационарных точек $x_1^* = x_2^*$, $x_3^* = 0$ является точками глобального максимума.

9. Найти безусловный экстремум целевой функции:

$$f(x) = 2x_1^3 + 4x_1x_2^2 - 10x_1x_2 + x_2^2$$

аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. В точке $x_1^* = (1 \ 1)^T$ находится локальный минимум, в точке $x_2^* = (0 \ 0)^T$ нет экстремума, так как не выполняются необходимые условия экстремума второго порядка.

10. Найти безусловный экстремум целевой функции:

$$f(x) = x_1^3 - x_1x_2 + x_2^2 - 2x_1 + 3x_2 - 4$$

аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. В точке $x_1^* = \left(\frac{1}{2} \quad -\frac{5}{4}\right)^T$ находится локальный минимум, в точке $x_1^* = \left(-\frac{1}{3} \quad -\frac{5}{3}\right)^T$ нет экстремума, так как не выполняются необходимые условия экстремума второго порядка.

11. Найти безусловный экстремум целевой функции:

$$f(x) = (x_1 - 1)^4 + (x_2 - 3)^2$$

аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. В точке $x_1^* = (1 \quad 3)^T$ выполняются необходимые условия экстремума второго порядка, т. е. $H(x_1^*) \geq 0$. Так как для любых $x \in R^2$ справедливо соотношение $f(x_1^*) = 0 \leq f(x)$, то точка x_1^* является точкой глобального минимума.

12. Найти безусловный экстремум целевой функции:

$$f(x) = (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. $x_1^* = (1 \quad 1)^T$ является точкой локального минимума.

13. Проверить является ли точка $x_1^* = (1 \quad 1)^T$ точкой безусловного минимума целевой функции $f(x) = (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 + 10(x_2 - 1)^2$ аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. $x_1^* = (1 \quad 1)^T$ является точкой безусловного минимума.

14. Найти безусловный экстремум целевой функции:

$$f(x) = 3x_1x_2 - x_1x_2^2 - x_1^2x_2$$

аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. $x_1^* = (1 \quad 1)^T$ является локальным минимумом, в точке $x_2^* = (0 \quad 0)^T$ нет экстремума.

15. Проверить, являются ли точки $x_1^* = (0 \ 0)^T$, $x_2^* = (1 \ 1)^T$, $x_3^* = (-1 \ -1)^T$ точками безусловного минимума целевой функции $f(x) = x_1^4 + x_2^4 - (x_1 + x_2)^2$ аналитическим методом, построить график функции и нанести на него расчетные точки.

Ответ. Точка $x_1^* = (0 \ 0)^T$ не является точкой безусловного локального минимума. Точки $x_2^* = (1 \ 1)^T$ и $x_3^* = (-1 \ -1)^T$ являются точками безусловного локального минимума.

16. Проверить, являются ли точки $x_1^* = (2 \ 0 \ 1)^T$, $x_2^* = (0 \ 0 \ 0)^T$ точками экстремума целевой функции:

$$f(x) = x_1^2 + 5x_2^2 + 3x_3^2 + 4x_1x_2 - 2x_2x_3 - 2x_1x_3$$

аналитическим методом.

Ответ. Точка $x_2^* = (0 \ 0 \ 0)^T$ является локальным и одновременно глобальным минимумом, не является точкой безусловного локального минимума. Точки $x_1^* = (1 \ 1)^T$ и $x_3^* = (-1 \ -1)^T$ являются точками безусловного локального минимума, так как $H(x_1^*) > 0$ и функция, следовательно, строго выпуклая и одновременно выпуклая. В точке $x_1^* = (2 \ 0 \ 1)^T$ нет экстремума, так как в ней не выполняются необходимые условия экстремума первого порядка.

3. АППРОКСИМАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ МЕТОДОМ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

3.1. Аппроксимация данных

Одно из практических применений методов решения оптимизационных задач это нахождение коэффициентов функции, аппроксимирующей экспериментальные данные. В результате проведения эксперимента по определению значений функции y от аргумента x получается дискретное множество значений этих величин. Так как в большинстве случаев зависимость, связывающая x и y , нам неизвестна, то мы не можем определить значения функции в точках отличных от экспериментальных. Получить значения в искомым точках мы можем только с помощью нового эксперимента, который может быть сложным и ресурсоемким. Для решения этой задачи необходимо получить функцию $f(x)$, которая имеет минимальные отклонения от реальной зависимости y от x . Это и является задачей аппроксимации. При проведении эксперимента измеряемые данные определяются с ошибками, которые могут быть вызваны дефектами оборудования, случайными факторами и т. д., поэтому аппроксимирующая функция $f(x)$ может и не проходить через экспериментальные точки. Таким образом, в конкретном случае задача аппроксимации сводится к нахождению приближенной зависимости $f(x)$, которая как можно лучше описывает данные y (см. рис 3.1). При этом расчетные значения $f(x_i)$ должны быть как можно ближе к опытным данным y_i .

3.2. Метод наименьших квадратов

В качестве характеристики того насколько хорошо функция $f(x)$ описывает экспериментальные данные в методе наименьших квадратов используется сумма квадратов разностей между расчетными значениями и экспериментальными:

$$F = \sum_{i=0}^n (f(x_i, C_0, C_1, \dots, C_m) - y_i)^2,$$

где x_i , y_i – экспериментальные данные; $f(x_i, C_0, C_1, \dots, C_m)$ – аппроксимирующая функция; C_0, C_1, \dots, C_m – неизвестные коэффициенты.

Так как функция F всегда положительна, то наилучшим вариантом будет тот, при котором она будет минимальной. Поэтому неизвестные коэффициенты C_i ($i = 0, 1, \dots, m$) находятся из условия минимума функ-

ции F . Для этого необходимо найти частные производные функции F по C_i и приравнять их нулю. После дифференцирования получается следующая система уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial C_1} = 0; \\ \frac{\partial F}{\partial C_2} = 0; \\ \dots; \\ \frac{\partial F}{\partial C_m} = 0. \end{cases}$$

В результате решения полученной системы уравнений находятся искомые коэффициенты C_i . Одним из способов решения систем линейных алгебраических уравнений является метод Гаусса.

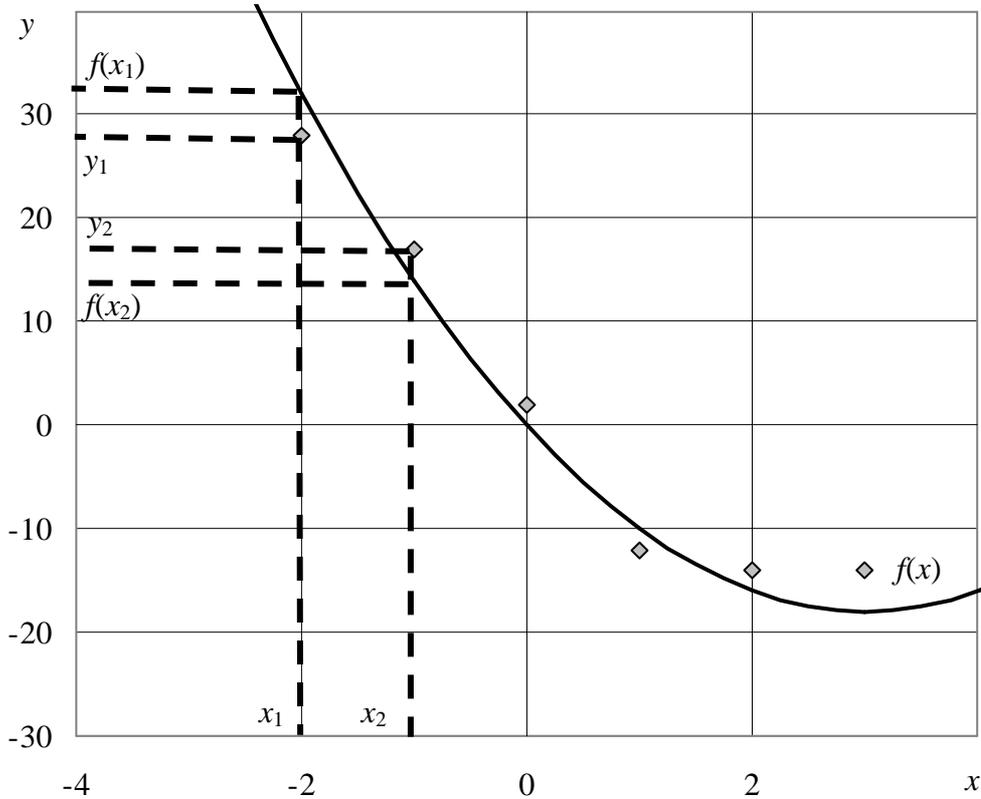


Рис. 3.1. Аппроксимация экспериментальных данных

3.3. Решение системы линейных алгебраических уравнений методом Гаусса

Метод Гаусса заключается в приведении системы уравнений:

$$\begin{cases} a_{0,0}x_0 + a_{0,1}x_1 + \dots + a_{0,n}x_n = b_0; \\ a_{1,0}x_0 + a_{1,1}x_1 + \dots + a_{1,n}x_n = b_1; \\ \dots \\ a_{n,0}x_0 + a_{n,1}x_1 + \dots + a_{n,n}x_n = b_n \end{cases}$$

к треугольному виду путем последовательного исключения неизвестных x . Сначала используя первое уравнение необходимо исключить неизвестную x_0 из остальных уравнений. Затем с помощью второго уравнения избавиться от неизвестной x_1 из всех уравнений кроме первого и т. д. Данный алгоритм называется прямым ходом метода Гаусса.

Обратный ход метода Гаусса заключается в нахождении неизвестных x_i из треугольной системы. Из последнего уравнения находится однозначное значение неизвестной x_n . Затем, подставляя значение x_n в предпоследнее уравнение, вычисляется переменная x_{n-1} и т. д.

3.3.1. Прямой ход метода Гаусса

Привести к треугольному виду систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} a_{0,0}x_0 + a_{0,1}x_1 + a_{0,2}x_2 = b_0; \\ a_{1,0}x_0 + a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 = b_1; \\ a_{2,0}x_0 + a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 = b_2. \end{cases}$$

1. Избавимся от неизвестной x_0 из второго уравнения.

1.1. Необходимо получить коэффициент у x_0 в первом уравнении равным $a_{1,0}$. Для этого умножаем первое уравнение на $a_{1,0}/a_{0,0}$:

$$\frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,0}x_0 + \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,1}x_1 + \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,2}x_2 = \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}b_0,$$

$$a_{1,0}x_0 + \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,1}x_1 + \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,2}x_2 = \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}b_0.$$

1.2. Вычтем полученное уравнение из второго:

$$\begin{aligned}
 a_{1,0}x_0 + a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 - a_{1,0}x_0 - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,1}x_1 - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,2}x_2 &= b_1 - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}b_0, \\
 \cancel{a_{1,0}x_0} + a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 - \cancel{a_{1,0}x_0} - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,1}x_1 - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,2}x_2 &= b_1 - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}b_0, \\
 \left(a_{1,1} - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,1} \right) x_1 + \left(a_{1,2} - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,2} \right) x_2 &= b_1 - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}b_0. \tag{3.1}
 \end{aligned}$$

Произведем замену:

$$c_{1,1} = a_{1,1} - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,1}, \quad c_{1,2} = a_{1,2} - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}a_{0,2}, \quad d_1 = b_1 - \frac{a_{1,0}}{a_{0,0}}b_0.$$

После замены уравнение (3.1) примет вид:

$$c_{1,1}x_1 + c_{1,2}x_2 = d_1.$$

2. Избавимся от неизвестной x_0 из третьего уравнения.

2.1. Умножим первое уравнение на $a_{2,0}/a_{0,0}$:

$$\begin{aligned}
 \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,0}x_0 + \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,1}x_1 + \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,2}x_2 &= \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}b_0, \\
 a_{2,0}x_0 + \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,1}x_1 + \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,2}x_2 &= \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}b_0.
 \end{aligned}$$

2.2. Вычтем полученное уравнение из третьего:

$$\begin{aligned}
 a_{2,0}x_0 + a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 - a_{2,0}x_0 - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,1}x_1 - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,2}x_2 &= b_2 - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}b_0, \\
 \cancel{a_{2,0}x_0} + a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 - \cancel{a_{2,0}x_0} - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,1}x_1 - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,2}x_2 &= b_2 - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}b_0, \\
 \left(a_{2,1} - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,1} \right) x_1 + \left(a_{2,2} - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,2} \right) x_2 &= b_2 - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}b_0. \tag{3.2}
 \end{aligned}$$

Произведем замену:

$$c_{2,1} = a_{2,1} - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,1}, \quad c_{2,2} = a_{2,2} - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}a_{0,2}, \quad d_2 = b_2 - \frac{a_{2,0}}{a_{0,0}}b_0.$$

После замены уравнение (3.2) примет вид:

$$c_{2,1}x_1 + c_{2,2}x_2 = d_2.$$

В результате преобразований система уравнений примет вид:

$$\begin{cases} a_{0,0}x_0 + a_{0,1}x_1 + a_{0,2}x_2 = b_0; \\ c_{1,1}x_1 + c_{1,2}x_2 = d_1; \\ c_{2,1}x_1 + c_{2,2}x_2 = d_2. \end{cases} \quad (3.3)$$

3. Избавимся от неизвестной x_1 из третьего уравнения.

3.1. Умножим второе уравнение системы (3.3) на $c_{2,1}/c_{1,1}$:

$$\frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}c_{1,1}x_1 + \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}c_{1,2}x_2 = \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}d_1,$$

$$c_{2,1}x_1 + \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}c_{1,2}x_2 = \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}d_1.$$

3.2. Вычтем полученное уравнение из третьего:

$$c_{2,1}x_1 + c_{2,2}x_2 - c_{2,1}x_1 - \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}c_{1,2}x_2 = d_2 - \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}d_1,$$

$$\cancel{c_{2,1}x_1} + c_{2,2}x_2 - \cancel{c_{2,1}x_1} - \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}c_{1,2}x_2 = d_2 - \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}d_1,$$

$$\left(c_{2,2} - \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}c_{1,2} \right) x_2 = d_2 - \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}d_1. \quad (3.4)$$

Произведем замену:

$$e_{2,2} = c_{2,2} - \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}c_{1,2}, \quad g_2 = d_2 - \frac{c_{2,1}}{c_{1,1}}d_1.$$

После замены уравнение (3.4) примет вид:

$$e_{2,2}x_2 = g_2.$$

В результате всех преобразований система уравнений примет вид:

$$\begin{cases} a_{0,0}x_0 + a_{0,1}x_1 + a_{0,2}x_2 = b_0; \\ c_{1,1}x_1 + c_{1,2}x_2 = d_1; \\ e_{2,2}x_2 = g_2. \end{cases} \quad (3.5)$$

3.3.2. Обратный ход метода Гаусса

1. Из третьего уравнения системы (3.5) найдем значение x_2 :

$$\begin{cases} a_{0,0}x_0 + a_{0,1}x_1 + a_{0,2}x_2 = b_0; \\ c_{1,1}x_1 + c_{1,2}x_2 = d_1; \\ x_2 = \frac{g_2}{e_{2,2}}. \end{cases}$$

2. Подставим значение x_2 во второе уравнение:

$$\begin{cases} a_{0,0}x_0 + a_{0,1}x_1 + a_{0,2}x_2 = b_0; \\ c_{1,1}x_1 + c_{1,2}\frac{g_2}{e_{2,2}} = d_1; \\ x_2 = \frac{g_2}{e_{2,2}}. \end{cases}$$

3. Из второго уравнения найдем значение неизвестной x_1 :

$$\begin{cases} a_{0,0}x_0 + a_{0,1}x_1 + a_{0,2}x_2 = b_0; \\ x_1 = \frac{d_1 - c_{1,2}g_2/e_{2,2}}{c_{1,1}}; \\ x_2 = \frac{g_2}{e_{2,2}}. \end{cases}$$

4. Подставим значения x_1 и x_2 в первое уравнение:

$$\begin{cases} a_{0,0}x_0 + a_{0,1}\frac{d_1 - c_{1,2}g_2/e_{2,2}}{c_{1,1}} + a_{0,2}\frac{g_2}{e_{2,2}} = b_0; \\ x_1 = \frac{d_1 - c_{1,2}g_2/e_{2,2}}{c_{1,1}}; \\ x_2 = \frac{g_2}{e_{2,2}}. \end{cases}$$

5. Из первого уравнения найдем значение неизвестной x_0 :

$$\begin{cases} x_0 = \frac{b_0 - a_{0,1}(d_1 - c_{1,2}g_2/e_{2,2})/c_{1,1} + a_{0,2}g_2/e_{2,2}}{a_{0,0}}; \\ x_1 = \frac{d_1 - c_{1,2}g_2/e_{2,2}}{c_{1,1}}; \\ x_2 = \frac{g_2}{e_{2,2}}. \end{cases}$$

Рассчитанные значения x являются коэффициентами искомой аппроксимирующей функции. Полученная зависимость $f(x)$ позволяет рассчитывать значения во всем диапазоне экспериментальных данных x .

3.4. Практические примеры

Пример 3.1. Определить методом наименьших квадратов коэффициенты функции, описывающей экспериментальные данные (табл. 3.1). В качестве аппроксимирующей функции использовать полином второй степени.

Таблица 3.1

Экспериментальные данные

k	0	1	2	3
x_k	1	2	3	4
y_k	10	12	14	17

1. Выражение аппроксимирующей функции:

$$f(x) = \sum_{i=0}^2 C_i x^i = C_0 x^0 + C_1 x^1 + C_2 x^2.$$

2. Минимизируемая функция от коэффициентов C_0 , C_1 , C_2 для метода наименьших квадратов:

$$\begin{aligned} F(C_0, C_1, C_2) = & \sum_{k=0}^3 \left(\sum_{i=0}^2 C_i x_k^i - y_k \right)^2 = (C_0 x_0^0 + C_1 x_0^1 + C_2 x_0^2 - y_0)^2 + \\ & + (C_0 x_1^0 + C_1 x_1^1 + C_2 x_1^2 - y_1)^2 + (C_0 x_2^0 + C_1 x_2^1 + C_2 x_2^2 - y_2)^2 + \\ & + (C_0 x_3^0 + C_1 x_3^1 + C_2 x_3^2 - y_3)^2. \end{aligned}$$

3. Общий вид частной производной по C_n ($n = 0 \dots 2$):

$$\frac{\partial F(C_0, C_1, C_2)}{\partial C_n} = \sum_{k=0}^3 \left(2 \left(\sum_{i=0}^2 C_i x_k^i - y_k \right) x_k^n \right).$$

4. Система линейных алгебраических уравнений в общем виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial F(C_0, C_1, C_2)}{\partial C_0} = \sum_{k=0}^3 \left(2 \left(\sum_{i=0}^2 C_i x_k^i - y_k \right) x_k^0 \right) = 0; \\ \frac{\partial F(C_0, C_1, C_2)}{\partial C_1} = \sum_{k=0}^3 \left(2 \left(\sum_{i=0}^2 C_i x_k^i - y_k \right) x_k^1 \right) = 0; \\ \frac{\partial F(C_0, C_1, C_2)}{\partial C_2} = \sum_{k=0}^3 \left(2 \left(\sum_{i=0}^2 C_i x_k^i - y_k \right) x_k^2 \right) = 0. \end{cases}$$

4.1. Упростим выражения для производной по C_0 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(C_0, C_1, C_2)}{\partial C_0} &= \sum_{k=0}^3 \left(2 \left(\sum_{i=0}^2 C_i x_k^i - y_k \right) x_k^0 \right) = 2(C_0 1^0 + C_1 1^1 + C_2 1^2 - 10)1^0 + \\ &+ 2(C_0 2^0 + C_1 2^1 + C_2 2^2 - 12)2^0 + 2(C_0 3^0 + C_1 3^1 + C_2 3^2 - 14)3^0 + \\ &+ 2(C_0 4^0 + C_1 4^1 + C_2 4^2 - 17)4^0 = \\ &= C_0 + C_1 + C_2 - 10 + C_0 + 2C_1 + 4C_2 - 12 + C_0 + 3C_1 + 9C_2 - 14 + \\ &+ C_0 + 4C_1 + 16C_2 - 17 = 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 - 53. \end{aligned}$$

4.2. Упростим выражения для производной по C_1 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(C_0, C_1, C_2)}{\partial C_1} &= \sum_{k=0}^3 \left(2 \left(\sum_{i=0}^2 C_i x_k^i - y_k \right) x_k^1 \right) = 2(C_0 1^0 + C_1 1^1 + C_2 1^2 - 10)1^1 + \\ &+ 2(C_0 2^0 + C_1 2^1 + C_2 2^2 - 12)2^1 + 2(C_0 3^0 + C_1 3^1 + C_2 3^2 - 14)3^1 + \\ &+ 2(C_0 4^0 + C_1 4^1 + C_2 4^2 - 17)4^1 = \\ &= C_0 + C_1 + C_2 - 10 + 2C_0 + 4C_1 + 8C_2 - 24 + 3C_0 + 9C_1 + 27C_2 - 42 + \\ &+ 4C_0 + 16C_1 + 64C_2 - 68 = 10C_0 + 30C_1 + 100C_2 - 144. \end{aligned}$$

4.3. Упростим выражения для производной по C_2 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(C_0, C_1, C_2)}{\partial C_2} &= \sum_{k=0}^3 \left(2 \left(\sum_{i=0}^2 C_i x_k^i - y_k \right) x_k^2 \right) = 2(C_0 1^0 + C_1 1^1 + C_2 1^2 - 10)1^2 + \\ &+ 2(C_0 2^0 + C_1 2^1 + C_2 2^2 - 12)2^2 + 2(C_0 3^0 + C_1 3^1 + C_2 3^2 - 14)3^2 + \\ &+ 2(C_0 4^0 + C_1 4^1 + C_2 4^2 - 17)4^2 = \\ &= C_0 + C_1 + C_2 - 10 + 4C_0 + 8C_1 + 16C_2 - 48 + 9C_0 + 27C_1 + 81C_2 - 126 + \\ &+ 16C_0 + 64C_1 + 256C_2 - 272 = 30C_0 + 100C_1 + 354C_2 - 456. \end{aligned}$$

4.4. Окончательный вид системы уравнений:

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ 10C_0 + 30C_1 + 100C_2 = 144; \\ 30C_0 + 100C_1 + 354C_2 = 456. \end{cases} \quad (3.6)$$

5. Решим полученную систему линейных алгебраических уравнений методом Гаусса.

5.1. Прямой ход метода Гаусса.

5.1.1. Умножаем первое уравнение на $10/4$ и вычитаем из второго уравнения:

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ 10C_0 + 30C_1 + 100C_2 - (4C_0 - 10C_1 - 30C_2) \frac{10}{4} = 144 - 53 \cdot \frac{10}{4}; \\ 30C_0 + 100C_1 + 354C_2 = 456. \end{cases}$$

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ \cancel{10C_0} - \cancel{10C_0} + 30C_1 - 25C_1 + 100C_2 - 75C_2 = 144 - 132,5; \\ 30C_0 + 100C_1 + 354C_2 = 456, \end{cases}$$

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ 5C_1 + 25C_2 = 11,5; \\ 30C_0 + 100C_1 + 354C_2 = 456. \end{cases}$$

5.1.2. Умножаем первое уравнение на $30/4$ и вычитаем из третьего уравнения:

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ 5C_1 + 25C_2 = 11,5; \\ 30C_0 + 100C_1 + 354C_2 - (4C_0 + 10C_1 + 30C_2) \frac{30}{4} = 456 \cdot \frac{30}{4}, \end{cases}$$

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ 5C_1 + 25C_2 = 11,5; \\ \cancel{30C_0} - \cancel{30C_0} + 100C_1 - 75C_1 + 354C_2 - 225C_2 = 456 - 397,5, \end{cases}$$

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ 5C_1 + 25C_2 = 11,5; \\ 25C_1 + 129C_2 = 58,5. \end{cases}$$

5.1.3. Умножаем второе уравнение на $25/5$ и вычитаем из третьего уравнения:

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ 5C_1 + 25C_2 = 11,5; \\ 25C_1 + 129C_2 - (5C_1 + 25C_2) \frac{25}{5} = 58,5 - 11,5 \cdot \frac{25}{5}, \end{cases}$$

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ 5C_1 + 25C_2 = 11,5; \\ \cancel{25C_1} - \cancel{25C_1} + 129C_2 - 125C_2 = 58,5 - 57,5, \end{cases}$$

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ 5C_1 + 25C_2 = 11,5; \\ 4C_2 = 1. \end{cases}$$

5.2. Обратный ход метода Гаусса.

5.2.1. Из третьего уравнения находим значение неизвестной C_2 :

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ 5C_1 + 25C_2 = 11,5; \\ C_2 = \frac{1}{4} = 0,25. \end{cases}$$

5.2.2. Подставляем переменную C_2 во второе уравнение и находим значение C_1 :

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ 5C_1 + 25 \cdot 0,25 = 11,5; \\ C_2 = 0,25, \end{cases}$$

$$\begin{cases} 4C_0 + 10C_1 + 30C_2 = 53; \\ C_1 = \frac{11,5 - 25 \cdot 0,25}{5} = 1,05; \\ C_2 = 0,25. \end{cases}$$

5.2.3. Подставляем переменные C_1 и C_2 в первое уравнение и находим значение C_0 :

$$\begin{cases} 4C_0 + 10 \cdot 1,05 + 30 \cdot 0,25 = 53; \\ C_1 = 1,05; \\ C_2 = 0,25, \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_0 = \frac{53 - 10 \cdot 1,05 - 30 \cdot 0,25}{4} = 8,75; \\ C_1 = 1,05; \\ C_2 = 0,25, \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_0 = 8,75; \\ C_1 = 1,05; \\ C_2 = 0,25. \end{cases}$$

6. Уравнение аппроксимирующей функции $f(x)$ принимает вид:

$$f(x) = 8,75x^0 + 1,05x^1 + 0,25x^2. \quad (3.6)$$

7. Оценим точность описания экспериментальных данных функцией (3.6) и построим следующие графики: а) график функции $f(x)$ и экспериментальных данных; б) абсолютных отклонений между функцией (3.6) и экспериментальными данными; в) относительных отклонений между функцией (3.6) и экспериментальными данными. Рассчитаем индекс детерминации.

7.1. График функции $f(x)$ с нанесенными на него экспериментальными данными представлен на рис. 3.2.

7.2. Абсолютные отклонения между аппроксимирующей функцией и экспериментальными данными вычисляются по формуле:

$$\Delta y = f(x) - y. \quad (3.7)$$

Значения абсолютной погрешности, рассчитанные по уравнению (3.7), представлены на рис. 3.3.

7.3. Относительные отклонения между аппроксимирующей функцией и экспериментальными данными вычисляются по формуле:

$$\delta y = \frac{f(x) - y}{f(x)} \cdot 100\%. \quad (3.8)$$

Значения относительной погрешности, рассчитанные по уравнению (3.8), представлены на рис. 3.4.

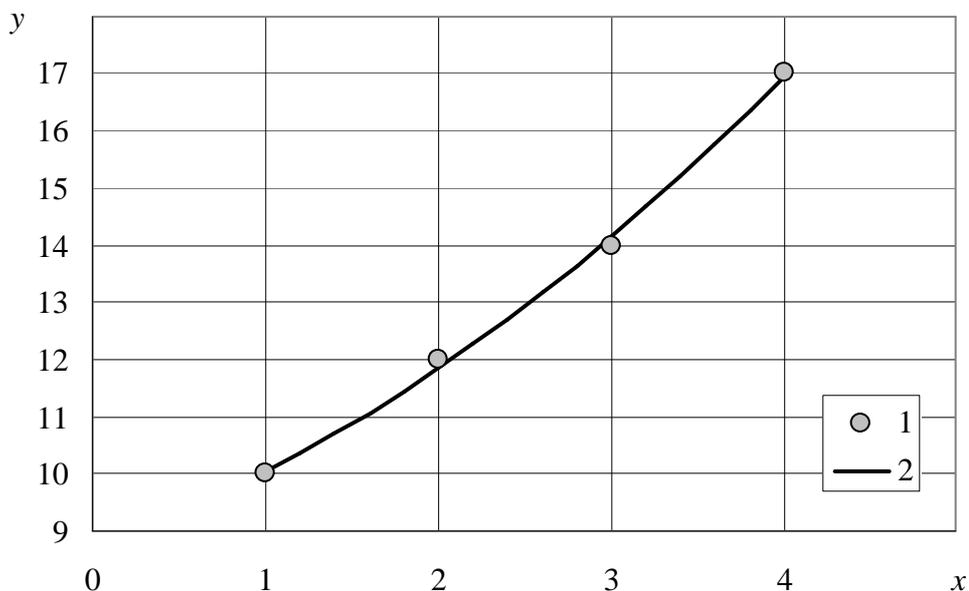


Рис. 3.2. Аппроксимация экспериментальных данных:
1 – экспериментальные данные; 2 – аппроксимирующая функция $f(x)$

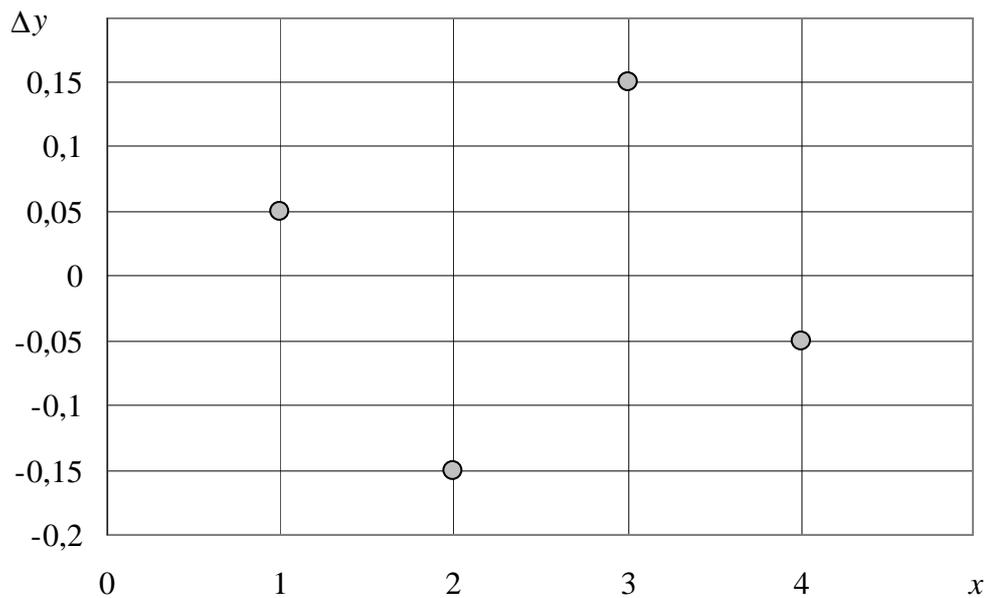


Рис. 3.3. Абсолютные отклонения между функцией $f(x)$ и экспериментальными данными

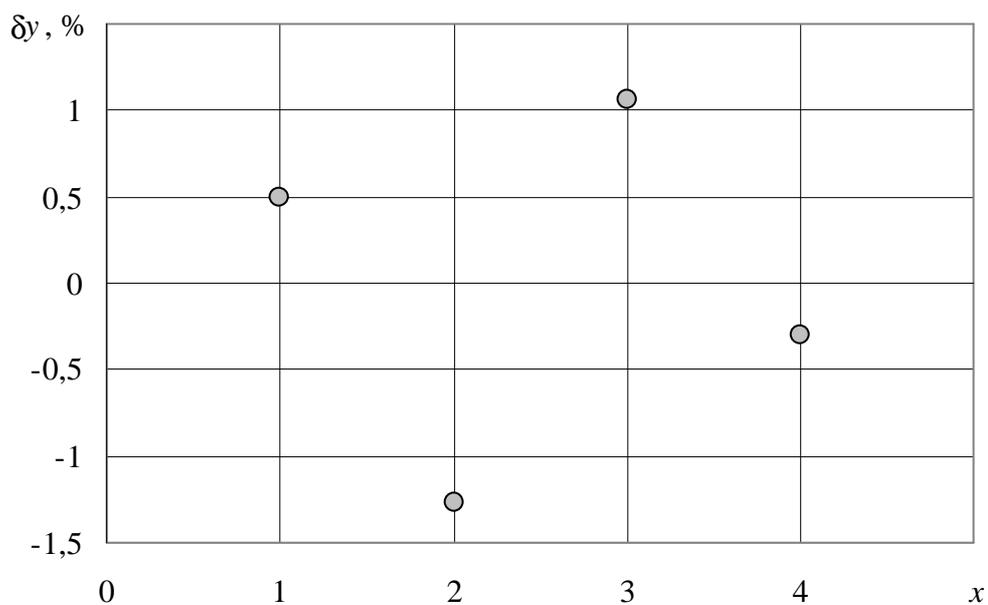


Рис. 3.4. Относительные отклонения между функцией $f(x)$ и экспериментальными данными

7.4. Индекс детерминации вычисляется по формуле:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=0}^k (y_i - f(x_i))^2}{\sum_{i=0}^k (y_i - \bar{y})^2} = 0,99813,$$

где \bar{y} – среднее арифметическое значений y .

Листинг программы в пакете MathCad 15 приведен в прил. В – рис. В 1.

Листинг функции с методом наименьших квадратов в пакете MathCad 15 приведен в прил. В – рис. В 2.

Листинг функции с методом Гаусса в пакете MathCad 15 приведен в прил. В – рис. В 3.

Пример 3.2. Использовали закваску, приготовленную на чистых культурах мезофильных лактококков, температура сквашивания 32 °С. За указанное время образовывался плотный сгусток с отделением прозрачной сыворотки, готовый к дальнейшей обработке. Динамика кислотонакопления при сквашивании смесей с различными соотношениями сухого обезжиренного молока (СОМ) и изолята соевого белка (ИСБ) приведена в табл. 3.2.

Необходимо найти: а) зависимости титруемой кислотности от продолжительности сквашивания для каждой серии эксперимента, используя полином третьей степени; б) зависимости титруемой кислотности от продолжительности сквашивания и соотношения СОМ и ИСБ для каждой серии эксперимента, используя полином третьей степени.

Таблица 3.2

Динамика кислотонакопления при сквашивании образцов опытных смесей

Соотношение СОМ и ИСБ n , %	Кислотность смеси ph , °Т	Титруемая кислотность ph , °Т при продолжительности сквашивания t , ч								
		1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0	4,5	5,0
75:25	12	15	17	21	24	30	36	43	49	54
50:50	10	13	14	17	19	23	29	34	39	39
25:75	8	10	13	16	18	23	28	30	31	31

1. Определение зависимости титруемой кислотности от продолжительности сквашивания.

1.1. Вид аппроксимирующей функции:

$$f(x) = \sum_{i=0}^3 C_i x^i = C_0 x^0 + C_1 x^1 + C_2 x^2 + C_3 x^3.$$

1.2. Определение коэффициентов C_i для разных соотношений СОМ и ИСБ методом наименьших квадратов (см. пример 3.1).

Соотношение СОМ и ИСБ 75:25:

$$f_{75:25}(x) = 12,333x^0 - 0,841x^1 + 2,927x^2 - 0,213x^3.$$

Соотношение СОМ и ИСБ 50:50:

$$f_{50:50}(x) = 10,641x^0 - 1,878x^1 + 3,066x^2 - 0,299x^3.$$

Соотношение СОМ и ИСБ 25:75:

$$f_{25:75}(x) = 8,23x^0 - 1,89x^1 + 3,859x^2 - 0,513x^3.$$

2. Определение зависимости титруемой кислотности от продолжительности сквашивания и соотношения СОМ и ИСБ.

2.1. В данном случае функция $f(x)$ зависит от двух переменных и имеет вид:

$$f(x, y) = C_0x^1y^2 + C_1x^0y^3 + C_2x^0y^2 + C_3x^0y^1 + C_4x^1y^1 + C_5x^2y^1 + C_6x^0y^0 + C_7x^1y^0 + C_8x^2y^0 + C_9x^2y^0 + C_{10}x^3y^0, \quad (3.9)$$

где x – продолжительность сквашивания; y – соотношение СОМ и ИСБ.

2.2. Алгоритм определения коэффициентов C_i функции двух переменных (3.9) аналогичен алгоритму для функции одной переменной (см. пример 3.1).

2.3. Построим график аппроксимирующей функции $f(x, y)$ и нанесем на него экспериментальные данные (рис. 3.5).

Из рис. 3.5 видно, что аппроксимирующая функция при соотношении СОМ и ИСБ 75:25 и 50:50 на интервале времени от нуля до единицы имеет минимум. В соответствии с теорией зависимость титруемой кислотности от времени не должна иметь точек экстремума на всем интервале. Попробуем максимально привести вид аппроксимирующей функции в соответствие с теорией. Для этого используем взвешенный метод наименьших квадратов.

2.4. Определение зависимости титруемой кислотности от продолжительности сквашивания и соотношения СОМ и ИСБ взвешенным методом наименьших квадратов.

2.4.1. Минимизируемая функция для взвешенного метода наименьших квадратов:

$$F(C) = \sum_{k=0}^9 (f(x_k, y_k) - z_k)^2 w_k,$$

где z – титруемая кислотность; w – вес точки.

Суть метода заключается в том, что в зависимости от веса точки она дает разный вклад в минимизируемую функцию. При нулевом весе точка не учитывается при аппроксимации. С увеличением веса увеличивается и вклад точки. Если необходимо, чтобы аппроксимирующая функция

прошла ближе к экспериментальной точке, то ее вес увеличивается. В случае, когда экспериментальная точка определена с большой погрешностью, то ее вес уменьшается или обнуляется. При равенстве весов всех точек единице реализуется обычный метод наименьших квадратов.

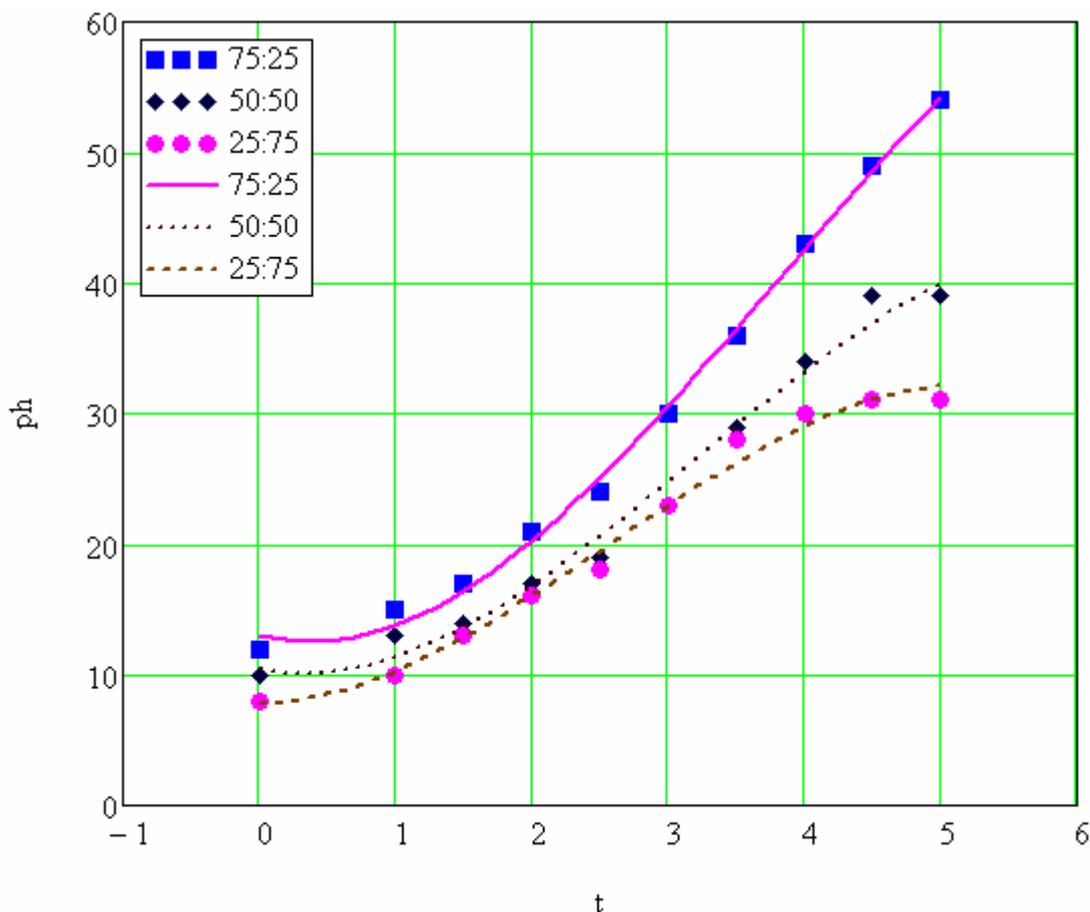


Рис. 3.5. Аппроксимация методом наименьших квадратов.
Точками обозначены экспериментальные данные,
линиями – аппроксимирующие функции

2.4.2. Построим график аппроксимирующей функции $f(x, y)$, полученной взвешенным методом наименьших квадратов, и нанесем на него экспериментальные данные (рис. 3.6).

Из рис. 3.6 видно, что с правильно подобранными весами удалось получить аппроксимирующую функцию $f(x, y)$ в виде максимально соответствующем теории.

Листинг программы в пакете MathCad 15 приведен в прил. В – рис. В 4.

Листинг функции с взвешенным методом наименьших квадратов в пакете MathCad 15 приведен в прил. В – рис. В 5.

Листинг функции с методом Гаусса в пакете MathCad 15 приведен в прил. В – рис. В 3.

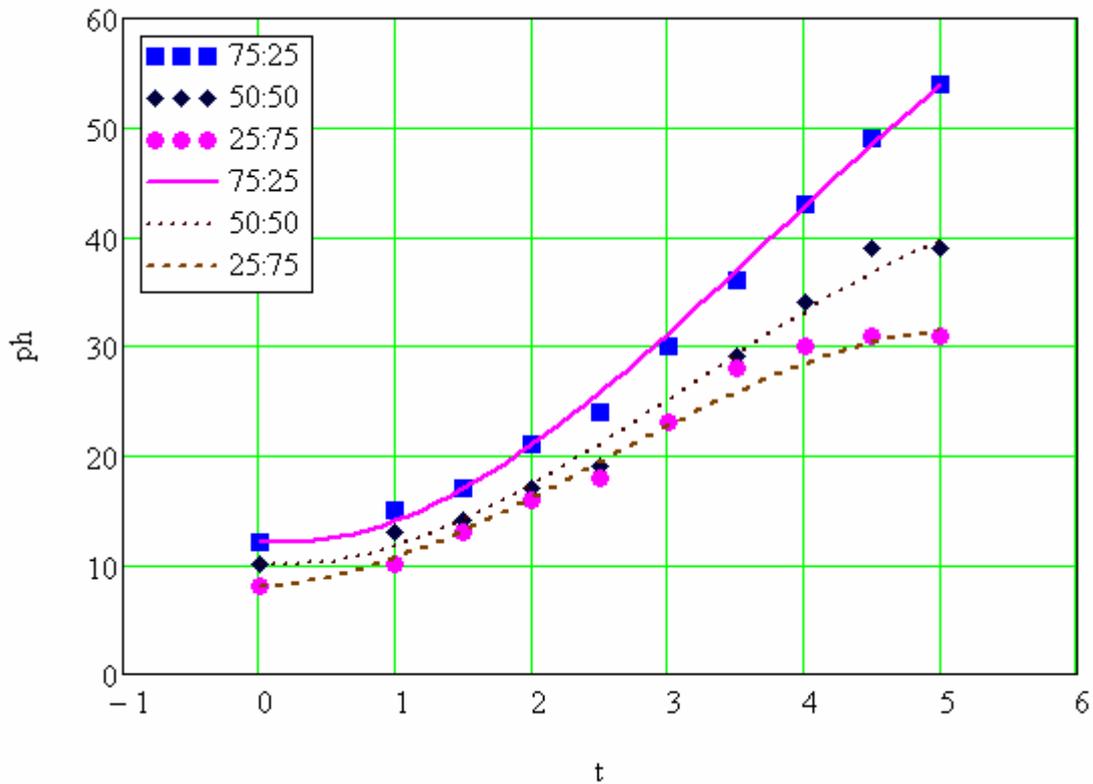


Рис. 3.6. Аппроксимация взвешенным методом наименьших квадратов. Точками обозначены экспериментальные данные, линиями – аппроксимирующие функции

Пример 3.3. Аппроксимировать экспериментальные данные о температуре и плотности хладона R218 на жидкостной ветви линии фазового равновесия уравнением:

$$T_s(\rho) = T_c \left(1 - x_0 |\Delta\rho|^{1/\beta} + c_1 |\Delta\rho|^\delta + c_2 |\Delta\rho|^{2/(2\beta)} + c_3 |\Delta\rho|^{\delta-\alpha/\beta} + \sum_{i=4}^5 c_i \Delta\rho^{s_i} \right),$$

где T_c – критическая температура; $\Delta\rho = \rho/\rho_c - 1$ – приведенная плотность; ρ – плотность; ρ_c – критическая плотность; $\delta = \gamma/\beta + 1$; α , β , γ и δ – критические индексы; c_i ($i = 1 \dots 5$) – коэффициенты уравнения.

Листинг программы в пакете MathCad 15 приведен в прил. В – рис. В 6.

Листинг функции с методом Гаусса в пакете MathCad 15 приведен в прил. В – рис. В 3.

3.5. Задачи для самостоятельного решения

1. Аппроксимировать экспериментальные данные x и y функцией вида:

$$f(x) = C_0x^0 + C_1x^1 + C_2x^2.$$

Значения x и y приведены в табл. 3.3.

Таблица 3.3

Экспериментальные данные для одномерной аппроксимации

№ варианта	Данные	i					
		1	2	3	4	5	6
1	x_i	4	6	8	10	12	14
	y_i	12	15	17	18	14	12
2	x_i	8	7	6	5	4	3
	y_i	3	8	12	12	9	8
3	x_i	2	4	5	7	9	11
	y_i	13	12	11	7	5	6
4	x_i	2	3	6	10	12	13
	y_i	12	14	17	20	25	32
5	x_i	4	5	6	8	10	11
	y_i	11	10	8	5	3	1
6	x_i	4	5	7	9	10	13
	y_i	13	14	17	20	25	33
7	x_i	12	15	17	19	20	21
	y_i	24	18	15	12	11	10
8	x_i	23	25	27	30	31	33
	y_i	15	16	12	15	19	20
9	x_i	1	3	4	9	11	12
	y_i	3	7	12	17	20	25
10	x_i	6	8	9	12	14	15
	y_i	14	12	9	5	2	1

2. Аппроксимировать экспериментальные данные x , y и z функцией вида:

$$f(x, y) = C_0x^0y^0 + C_1x^1y^0 + C_2x^1y^1 + C_3x^2y^0 + C_4x^0y^1 + C_5x^0y^2.$$

Значения x и y приведены в табл. 3.4.

Таблица 3.4

Экспериментальные данные для многомерной аппроксимации

№ варианта	Данные	<i>i</i>					
		1	2	3	4	5	6
1	x_i	4	6	8	10	12	14
	y_i	12	15	17	18	14	12
	z_i	7	9	10	11	12	13
2	x_i	8	7	6	5	4	3
	y_i	3	8	12	12	9	8
	z_i	5	6	7	8	9	10
3	x_i	2	4	5	7	9	11
	y_i	13	12	11	7	5	6
	z_i	10	9	8	7	6	5
4	x_i	2	3	6	10	12	13
	y_i	12	14	17	20	25	32
	z_i	6	5	4	3	2	1
5	x_i	4	5	6	8	10	11
	y_i	11	10	8	5	3	1
	z_i	15	14	13	12	11	10

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Васильков Ю.В., Василькова Н.Н.** Компьютерные технологии вычислений в математическом моделировании: Учеб. пособие. – М.: Финансы и статистика, 1999. – 256 с.
2. **Дьяконов В.П.** MathCAD 11/12/13 в математике: Справ. – М.: Горячая линия. – Телеком, 2007. – 958 с.
3. Использование MathCAD в теории матриц: Метод. указания / И.В. Кудрявцева, В.А. Рыков, С.А. Рыков, С.В. Рыков. – СПб.: СПбГУНиПТ, 2011. – 50 с.
4. Методы оптимизации в примерах в пакете MathCAD 15. Ч. I: Учеб. пособие / И.В. Кудрявцева, С.А. Рыков, С.В. Рыков, Е.Д. Скобов. – СПб.: НИУ ИТМО, ИХиБТ, 2014. – 166 с.
5. **Охорзин В.А.** Прикладная математика в системе MathCAD: Учеб. пособие. 2-е изд., испр. и доп. – СПб.: Лань, 2008. – 352 с.
6. **Пантелеев А.В., Летова Т.А.** Методы оптимизации в примерах и задачах: Учеб. пособие. 2-е изд., испр. – М.: Высш. шк., 2005. – 544 с.
7. Практикум по работе в математическом пакете MathCAD: Учеб. пособие / С.В. Рыков, И.В. Кудрявцева, С.А. Рыков, В.А. Рыков. – СПб.: Университет ИТМО, ИХиБТ, 2015. – 87 с.
8. Практические занятия в пакете MathCAD по исследованию систем линейных алгебраических уравнений: Учеб. пособие / В.А. Рыков, С.А. Рыков, И.В. Кудрявцева, С.В. Рыков. – СПб.: СПбГУНиПТ, 2009. – 107 с.
9. Расчет линии фазового равновесия диоксида углерода / И.В. Кудрявцева, В.И. Камоцкий, С.В. Рыков, В.А. Рыков // Научный журнал НИУ ИТМО. Серия: Процессы и аппараты пищевых производств. 2013. № 4. С. 11.
10. **Реклейтис Г., Рейвиндран А., Рэгстел К.** Оптимизация в технике. В 2 кн. Кн. 1. – М.: Мир, 1986. – 349 с.
11. **Рыков А.В., Кудрявцева И.В., Рыков С.В.** Уравнение линии насыщения, удовлетворяющее модифицированному правилу криволинейного диаметра // Научный журнал НИУ ИТМО. Серия: Холодильная техника и кондиционирование. 2013. № 2. С. 9.
12. **Рыков А.В., Кудрявцева И.В., Рыков С.В.** Уравнения линии насыщения и упругости хладона R218 // Вестник Международной академии холода. 2013. № 4. С. 54–57.
13. **Рыков С.В.** Фундаментальное уравнение состояния, учитывающее асимметрию жидкости // Научно-технический вестник Поволжья. 2014. № 1. С. 33–36.

14. **Рыков С.В., Камоцкий В.И., Рыков В.А.** Расчет паровой ветви линии насыщения перфторпропана в пакете MathCad // Научный журнал НИУ ИТМО. Серия: Процессы и аппараты пищевых производств. 2014. № 2. С. 23.

15. **Рыков С.В., Кудрявцева И.В.** Непараметрическое масштабное уравнение и феноменологическая теория критических явлений // Фундаментальные исследования. 2014. № 9 (8). С. 1687–1692.

16. **Рыков С.В., Кудрявцева И.В., Киселев С.В.** Расчет жидкостной ветви линии насыщения R218 в пакете MathCad // Научный журнал НИУ ИТМО. Серия: Холодильная техника и кондиционирование. 2014. № 1. С. 11.

17. **Рыков С.В.** Правило криволинейного диаметра и масштабное уравнение в переменных давление–температура // Вестник Международной академии холода. 2015. № 1. С. 65–68.

18. **Рыков С.В., Рябова Т.В.** Расчет линии фазового равновесия аммиака в пакете MathCad // Научный журнал НИУ ИТМО. Серия: Холодильная техника и кондиционирование. 2013. № 2. С. 8.

19. **Рыков С.В., Самолетов В.А., Рыков В.А.** Линия насыщения аммиака // Вестник Международной академии холода. 2008. № 4. С. 20–21.

20. Скейлинговые модели для описания термодинамических свойств вещества на линии насыщения: перспективы и ограничения / Е.Е. Устюжанин, В.В. Шишаков, П.В. Попов, В.А. Рыков, М.Л. Френкель // Вестник Московского энергетического института. 2011. № 6. С. 167–179.

21. Скейлинговые модели для описания термодинамических свойств на линии насыщения: характеристики и критерии / Е.Е. Устюжанин, И.М. Абдулагатов, П.В. Попов, В.В. Шишаков, В.А. Рыков // Ультразвук и термодинамические свойства вещества. 2009. № 36. С. 110–112.

22. Скейлинговые модели для описания термодинамических свойств на линии насыщения: проблемы и некоторые решения / Е.Е. Устюжанин, В.В. Шишаков, И.М. Абдулагатов, П.В. Попов, В.А. Рыков, М.Л. Френкель // Сверхкритические флюиды: Теория и практика. 2012. Т. 7. № 3. С. 30–55.

23. **Хаммельблау Д.** Прикладное нелинейное программирование. – М.: МИР, 1975. – 534 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

ЛИСТИНГИ ПРИМЕРОВ В MATHCAD 15

ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Пример 1.2. Классифицировать квадратичную форму $\Delta x^T \cdot H \cdot \Delta x$ и матрицу Гессе $H := \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$.

Исходные данные

$H := \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ - матрица Гессе

Выражение для квадратичной формы в общем виде

$$KB_F(\Delta x_1, \Delta x_2) := \begin{pmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{pmatrix}^T \cdot H \cdot \begin{pmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{pmatrix} \rightarrow 2 \cdot \Delta x_1^2 + 2 \cdot \Delta x_2^2$$

Ход решения

Рассчитать квадратичную форму для всех возможных вариантов изменения приращений $\Delta x_1, \Delta x_2$ по осям (ноль, положительное и отрицательное).

$\Delta x_1 := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ $\Delta x_2 := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ - возможные варианты изменения приращений $\Delta x_1, \Delta x_2$ по осям

$i := 0..2$ $j := 0..2$ - дискретные аргументы

Рассчитать значения квадратичной формы KB_F для всех вариантов изменения приращений $\Delta x_1, \Delta x_2$ по осям.

$$KB_{i,j} := KB_F(\Delta x_{1_i}, \Delta x_{2_j}) \quad KB = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 4 \\ 2 & 4 & 4 \end{pmatrix}$$

Вывод. Квадратичная форма положительна кроме случая $\Delta x_1 := 0, \Delta x_2 := 0$. Следовательно, квадратичная форма и матрица Гессе положительно определена

Рис. А 1. Листинг программы классификации квадратичной формы и матрицы Гессе

Пример 1.3. Рассчитать:

- градиент функции в заданных точках $(0; 1)$, $(\sqrt{2}; \sqrt{2})$, $(1; 0)$, $(0; -1)$;
- матрицу Гессе;
- построить график линий уровня и отобразить градиенты функции в заданных точках.

Исходные данные

$f(x) := (x_0)^2 + (x_1)^2$ - исходное выражение

$x_0 := \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $x_1 := \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$ - координаты заданных точек расчета градиента в виде двух векторов

Расчет матрицы Гессе в общем виде (символьно)

$x := \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \end{pmatrix}$ - вектор неизвестных переменных

$H(x) := \begin{bmatrix} \frac{d^2}{dx_0^2} f(x) & \frac{d}{dx_0} \left(\frac{d}{dx_1} f(x) \right) \\ \frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_0} f(x) \right) & \frac{d^2}{dx_1^2} f(x) \end{bmatrix}$ - функция для расчета элементов матрицы Гессе

$H(x) \rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ - символьное вычисление матрицы Гессе в общем виде

Рис. А 2. Листинг программы расчета градиента функции и матрицы Гессе

Расчет градиента функции в заданных точках в общем виде (символьно)

Символьное вычисление вектора градиента функции в общем виде

$$\text{vector_gradienta}(x_0, x_1) := \nabla_x f(x) \rightarrow \begin{pmatrix} 2 \cdot x_0 \\ 2 \cdot x_1 \end{pmatrix}$$

Рассчитать значение градиента в заданных точках

$$V_GR := \overrightarrow{\text{vector_gradienta}(x_0, x_1)}$$

$$V_GR^T = \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.414 \\ 1.414 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \end{pmatrix} \right] \quad \text{- величина градиента в заданных точках}$$

Построение графиков линий уровня и градиентов

1. Расчет линии уровня, на котором находятся заданные точки при радиусе круга $R = 1$

$$f_y_v(x, R) := \sqrt{R^2 - x^2} \quad \text{- функция для расчета верхней половины линии уровня в виде круга}$$

$$R := 1 \quad \text{- радиус линии уровня в виде круга}$$

Расчет количества точек в кривой

$$x_{\min} := -1 \quad x_{\max} := 1 \quad \Delta x := 0.01$$

$$N1 := \frac{x_{\max} - x_{\min}}{\Delta x} \quad N1 = 200$$

$$i := 0..N1$$

Рис. А 2. Листинг программы расчета градиента функции и матрицы Гессе (продолжение)

$x1_i := x_{\min} + i \cdot \Delta x$ - расчет вектора абсцисс

Расчет вектора ординат для верхней и нижней половины линии уровня

$y_v := \overrightarrow{f_{y_v}(x1, R)}$ $y_n := -y_v$

2. Расчет координат вектора градиента на графике

2.1. Расчет координат начала и конца вектора градиента в первой точке

$X0 := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ - координата первой точки, из которой строится вектор градиента

$VG1 := V_{GR0} + X0$

$VG1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \end{pmatrix}$ - координата конца вектора градиента, построенного из первой точки

Координаты начала и конца вектора градиента на графике в виде блочного вектора. Первый элемент-вектор содержит X-координаты точек начала и конца вектора, а второй элемент-вектор - Y-координаты начала и конца вектора

$K_1 := \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} X0_0 \\ VG1_0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} X0_1 \\ VG1_1 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$ $K_1^T = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$

Рис. А 2. Листинг программы расчета градиента функции и матрицы Гессе (продолжение)

2.2. Расчет координат вектора градиента на графике во второй точке

$$X1 := \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \quad VG2 := V_GR_1 + X1$$

$$K_20 := \begin{pmatrix} X1_0 \\ VG2_0 \end{pmatrix} \quad K_21 := \begin{pmatrix} X1_1 \\ VG2_1 \end{pmatrix} \quad K_2^T = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 0.707 \\ 2.121 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0.707 \\ 2.121 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$

2.3. Расчет координат вектора градиента на графике в третьей точке

$$X2 := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad VG3 := V_GR_2 + X2$$

$$K_30 := \begin{pmatrix} X2_0 \\ VG3_0 \end{pmatrix} \quad K_31 := \begin{pmatrix} X2_1 \\ VG3_1 \end{pmatrix} \quad K_3^T = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$

2.4. Расчет координат вектора градиента на графике в четвертой точке

$$X3 := \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad VG4 := V_GR_3 + X3$$

$$K_40 := \begin{pmatrix} X3_0 \\ VG4_0 \end{pmatrix} \quad K_41 := \begin{pmatrix} X3_1 \\ VG4_1 \end{pmatrix} \quad K_4^T = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 \\ -3 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$

Рис. А 2. Листинг программы расчета градиента функции и матрицы Гессе (продолжение)

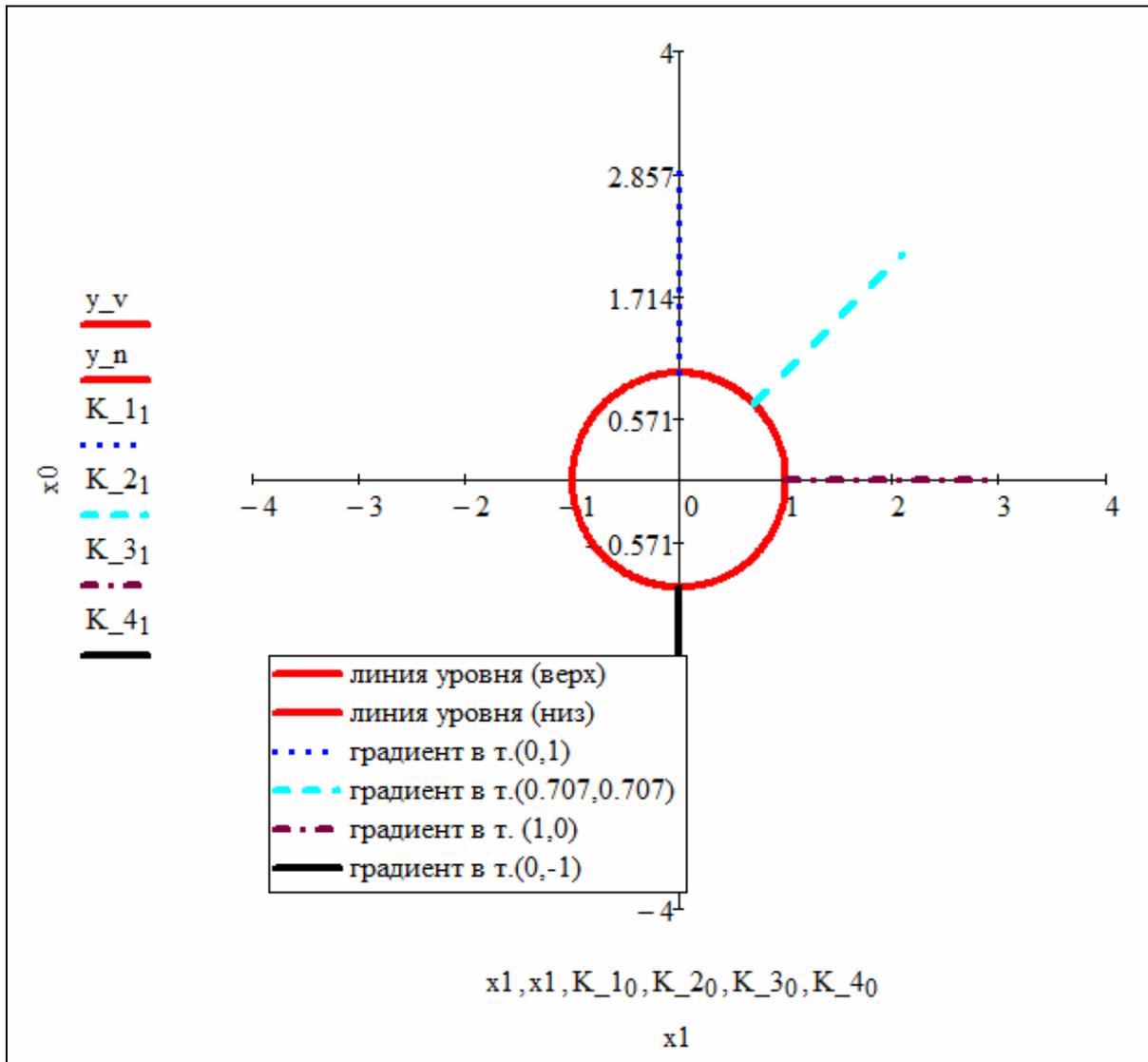


Рис. А 2. Листинг программы расчета градиента функции и матрицы Гессе (окончание)

Пример 1.4. Рассчитать:

- градиент функции в заданных точках (0; 0), (1; 1), (1.3; -0.746);
- матрицу Гессе;
- построить график линий уровня и отобразить градиенты функции в заданных точках.

Исходные данные

$f(x) := (x_0)^2 + (x_1)^4$ - исходное выражение

$x_0 := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1.3 \end{pmatrix}$ $x_1 := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -0.746 \end{pmatrix}$ - координаты заданных точек расчета градиента в виде двух векторов

Нижние индексы в имена векторов x_0 , x_1 вводятся через клавишу (.).

Расчет матрицы Гессе в общем виде (символьно)

$x := \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \end{pmatrix}$ - вектор неизвестных переменных

$H(x) := \begin{bmatrix} \frac{d^2}{dx_0^2} f(x) & \frac{d}{dx_0} \left(\frac{d}{dx_1} f(x) \right) \\ \frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_0} f(x) \right) & \frac{d^2}{dx_1^2} f(x) \end{bmatrix}$ - функция для расчета элементов матрицы Гессе

$H(x) \rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 12 \cdot x_1^2 \end{pmatrix}$ - символьное вычисление матрицы Гессе в общем виде

Рис. А 3. Листинг программы расчета градиента функции и матрицы Гессе

Функция для расчета значений матрицы Гессе. Скопировать
 символьное выражение, полученное выше, в функцию:

$$FH(x_0, x_1) := \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 12 \cdot x_1^2 \end{pmatrix}$$

Значение матрицы Гессе в расчетных точках:

$$V_MG := \overrightarrow{FH(x_0, x_1)} \quad V_MG^T = \left[\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 12 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 6.678 \end{pmatrix} \right]$$

Расчет градиента функции в заданных точках

Символьное вычисление вектора градиента функции в общем виде:

$$\text{vector_gradianta}(x_0, x_1) := \nabla_x f(x) \rightarrow \begin{pmatrix} 2 \cdot x_0 \\ 4 \cdot x_1^3 \end{pmatrix}$$

Скопировать общее выражение вектора градиента, полученное выше,
 в функцию:

$$\text{vector_gradianta}(x_0, x_1) := \begin{pmatrix} 2 \cdot x_0 \\ 4 \cdot x_1^3 \end{pmatrix}$$

Значение градиента в заданных точках:

$$V_GR := \overrightarrow{\text{vector_gradianta}(x_0, x_1)} \quad V_GR^T = \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 2.6 \\ -1.661 \end{pmatrix} \right]$$

Рис. А 3. Листинг программы расчета градиента функции
 и матрицы Гессе (продолжение)

Построение линий уровня и градиентов

1. Расчет линии уровня, на котором находятся вторая и третья точки. Для первой точки величина $R = 0$

$f_y_v(x,R) := \sqrt{\sqrt{R - x^2}}$ - функция для расчета верхней половины линии уровня

$x0 := x0_1$ $x1 := x1_1$

Величина R для первой и второй точек находится из выражения:

$R := x0^2 + x1^4$ $R = 2$

Расчет количества точек в кривой

$x_{\min} := -3$ $x_{\max} := 3$ $\Delta x := 0.0001$

$N1 := \frac{x_{\max} - x_{\min}}{\Delta x}$ $N1 = 6 \times 10^4$

$i := 0..N1$

$x1_i := x_{\min} + i \cdot \Delta x$ - расчет вектора абсцисс

$y_v := \overset{\longrightarrow}{f_y_v(x1,R)}$ - расчет вектора ординат для верхней и нижней половины линии уровня

$y_n := -y_v$

Рис. А 3. Листинг программы расчета градиента функции и матрицы Гессе (продолжение)

2. Расчет координат вектора градиента на графике

2.1. Расчет координат вектора градиента на графике в первой точке

$$X0 := \begin{pmatrix} x_{0_0} \\ x_{1_0} \end{pmatrix} \quad \text{- координата первой заданной точки, из которой строится вектор градиента}$$

$$VG1 := V_GR_0 + X0 \quad \text{- координата конца вектора градиента, построенного из первой точки}$$

$$K_1 := \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} X0_0 \\ VG1_0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} X0_1 \\ VG1_1 \end{pmatrix} \end{bmatrix} \quad \text{- координата начала вектора градиента на графике}$$

$$K_1^T = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{bmatrix} \quad \text{- координата начала и конца вектора градиента на графике в виде блочного вектора.}$$

Первый элемент-вектор содержит X-координаты точек начала и конца вектора, а второй элемент-вектор - Y-координаты этих точек.

2.2. Расчет координат вектора градиента на графике во второй точке

$$X1 := \begin{pmatrix} x_{0_1} \\ x_{1_1} \end{pmatrix} \quad VG2 := V_GR_1 + X1$$

$$K_2_0 := \begin{pmatrix} X1_0 \\ VG2_0 \end{pmatrix} \quad K_2_1 := \begin{pmatrix} X1_1 \\ VG2_1 \end{pmatrix} \quad K_2^T = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 \\ 5 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$

Рис. А 3. Листинг программы расчета градиента функции и матрицы Гессе (продолжение)

2.3. Расчет координат вектора градиента на графике в третьей точке

$$X2 := \begin{pmatrix} x_{0_2} \\ x_{1_2} \end{pmatrix} \quad VG3 := V_GR_2 + X2$$

$$K_{_30} := \begin{pmatrix} X2_0 \\ VG3_0 \end{pmatrix} \quad K_{_31} := \begin{pmatrix} X2_1 \\ VG3_1 \end{pmatrix} \quad K_{_3}^T = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 1.3 \\ 3.9 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -0.746 \\ -2.407 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$

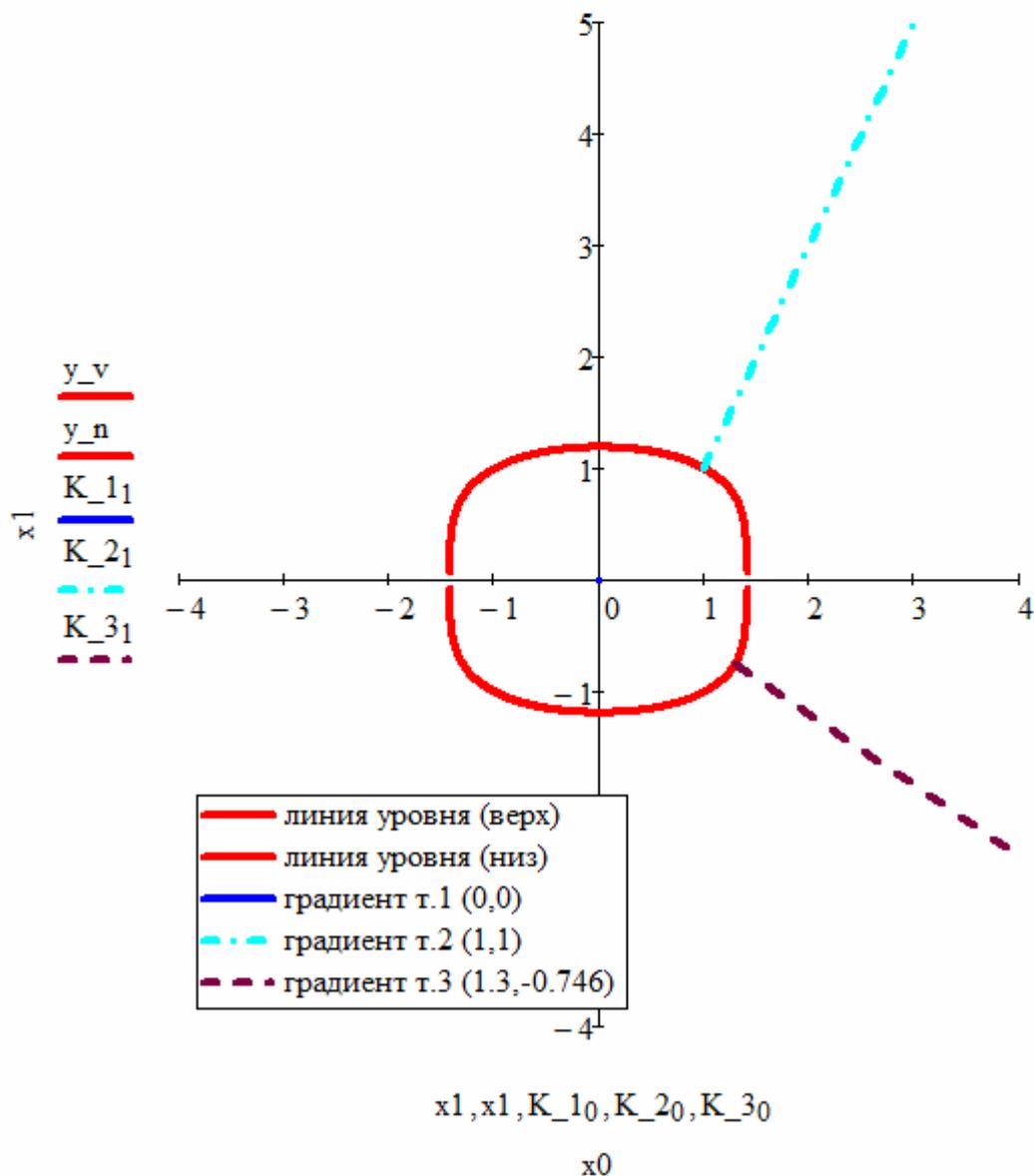


Рис. А 3. Листинг программы расчета градиента функции и матрицы Гессе (окончание)

Пример 1.5. Проверить, удовлетворяют ли условию Липшица следующие функции:

- а) $f(x) := 2x$ на интервале $[0; 1]$;
- б) $f(x) := \sin(x)$ на интервале $[0; \pi]$;
- в) $f(x) := \sqrt{x}$ на интервале $[0; 1]$.

1. Исследовать функцию $f(x) := 2x$ на интервале $[0; 1]$

1.1. Производная функции

$$fd(x) := \left(\frac{d}{dx} f(x) \right) \rightarrow 2$$

1.2. Константа Липшица

$$L := 2$$

Вывод. Функция и производная непрерывны на интервале $[0; 1]$, величина производной в интервале постоянна и положительна, константа Липшица $L = 2$, следовательно, условие Липшица выполняется.

2. Исследовать функцию $f(x) := \sin(x)$ на интервале $[0, \pi]$

2.1. Производная функции

$$fd(x) := \frac{d}{dx} f(x) \rightarrow \cos(x)$$

2.2. Рассчитать константу Липшица

2.2.1. Используя графический способ, построить график производной функции $f(x)$

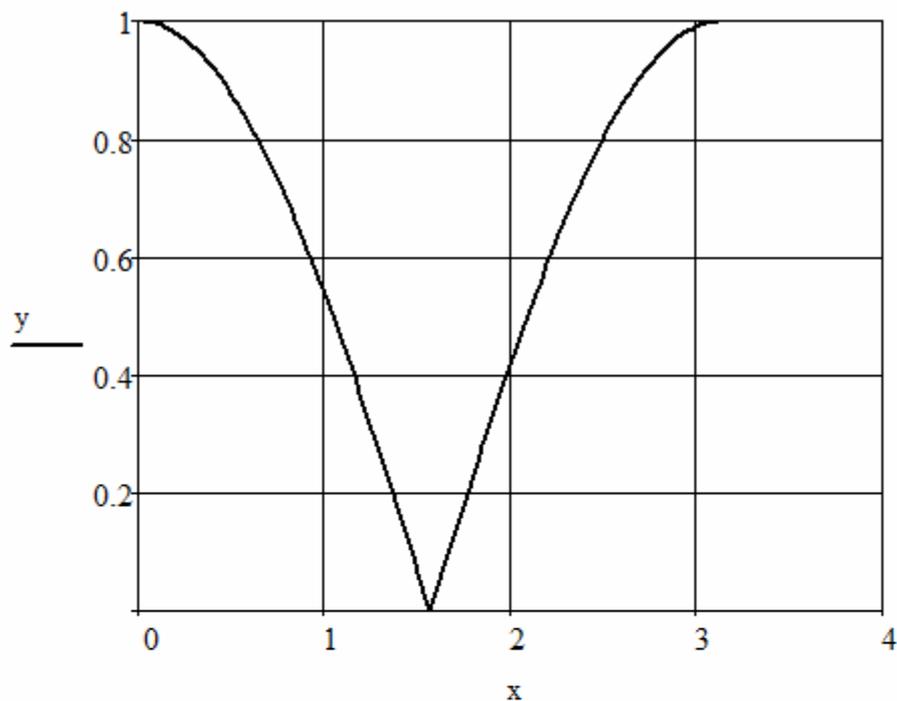
$$x_{\min} := 0 \quad x_{\max} := \pi \quad \Delta x := 0.01\pi \quad N := \frac{x_{\max} - x_{\min}}{\Delta x}$$

$$i := 0..N \quad x_i := x_{\min} + i \cdot \Delta x \quad y := \overrightarrow{|fd(x)|}$$

Рис. А 4. Листинг программы проверки выполнения условия Липшица

Константа Липшица

$$L := \max(y) = 1$$



2.2.2. Определить константу Липшица, используя расчет в опорных точках

Определение пределов производных в опорных $(0, \frac{\pi}{2}, \pi)$ точках.

$$L_0 := \lim_{x \rightarrow 0^+} |fd(x)| \rightarrow 1$$

$$L_1 := \lim_{x \rightarrow \frac{\pi}{2}} |fd(x)| \rightarrow 0$$

$$L_2 := \lim_{x \rightarrow \pi^+} |fd(x)| \rightarrow 1$$

Константа Липшица

$$L := \max(L) = 1$$

Вывод. Функция и производная непрерывны на интервале $[0, \pi]$ константа Липшица $L = 1$, следовательно, условие Липшица **выполняется.**

Рис. А 4. Листинг программы проверки выполнения условия Липшица (продолжение)

3. Исследовать функцию $f(x) := \sqrt{x}$ на интервале $[0, 1]$

3.1 Производная функции

$$fd(x) := \frac{d}{dx} f(x) \rightarrow \frac{1}{2 \cdot \sqrt{x}}$$

3.2 Расчет константы Липшеца

Определение пределов производных в опорных точках.

Производные в опорных точках $(0, \frac{1}{2}, 1)$ равны:

$$L2_0 := \lim_{x \rightarrow 0^+} |fd(x)| \rightarrow \infty \quad L2_1 := \lim_{x \rightarrow \frac{1}{2}} |fd(x)| \rightarrow \frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$L2_2 := \lim_{x \rightarrow 1} |fd(x)| \rightarrow \frac{1}{2}$$

Константа Липшица

$$L2 := \max(L2) = 1 \cdot \infty$$

Вывод: функция и производная непрерывны на интервале $[0, \pi]$, константа Липшица в точке $x = 0$ равна $L2 = 1 \cdot \infty$, следовательно, условие Липшица **не выполняется**.

Рис. А 4. Листинг программы проверки выполнения условия Липшица (окончание)

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

ЛИСТИНГИ ПРИМЕРОВ В MATHCAD 15

БЕЗУСЛОВНЫЙ ЭКСТРЕМУМ

Пример 2.1. Проверить, является ли точка $x_{st} := (0 \ 0 \ 0)^T$ безусловным экстремумом функции

$$f(x) := (x_0)^2 + 2 \cdot (x_1)^2 - 3(x_2)^2 - 6 \cdot x_0 \cdot x_1 + 8x_0 \cdot x_2 - 4x_1 \cdot x_2 .$$

Рассчитать.

1. Матрицу Гессе в общем виде и в стационарной точке.
2. Все угловые миноры определителя матрицы Гессе в стационарной точке.
3. Все главные миноры определителя матрицы Гессе в стационарной точке.
4. Собственные значения матрицы Гессе в стационарной точке.

Сделать выводы о характере стационарной точки.

Исходная информация в MathCAD

Исходная функция

$$f(x) := (x_0)^2 + 2 \cdot (x_1)^2 - 3(x_2)^2 - 6 \cdot x_0 \cdot x_1 + 8x_0 \cdot x_2 - 4x_1 \cdot x_2$$

$x_{st} := (0 \ 0 \ 0)^T$ - исследуемая точка

Ход решения задачи в MathCAD

1. Расчет матрицы Гессе в общем виде

$$x := \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad \text{- вектор неизвестных переменных}$$

Рис. Б 1. Листинг программы идентификации точки с использованием угловых, главных миноров и собственных значений матрицы Гессе

Функция для расчета элементов матрицы Гессе:

$$H(x) := \begin{bmatrix} \frac{d^2}{dx_0^2} f(x) & \frac{d}{dx_0} \left(\frac{d}{dx_1} f(x) \right) & \frac{d}{dx_0} \left(\frac{d}{dx_2} f(x) \right) \\ \frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_0} f(x) \right) & \frac{d^2}{dx_1^2} f(x) & \frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_2} f(x) \right) \\ \frac{d}{dx_2} \left(\frac{d}{dx_0} f(x) \right) & \frac{d}{dx_2} \left(\frac{d}{dx_1} f(x) \right) & \frac{d^2}{dx_2^2} f(x) \end{bmatrix}$$

Расчет матрицы Гессе в стационарной точке (символьно):

$$H_{xst} := H(x) \rightarrow \begin{pmatrix} 2 & -6 & 8 \\ -6 & 4 & -4 \\ 8 & -4 & -6 \end{pmatrix}$$

2. Расчет угловых миноров

$$i := 0.. \text{rows}(H_{xst}) - 1 \quad \Delta_{\text{угл}_i} := \text{submatrix}(H_{xst}, 0, i, 0, i)$$

Угловые миноры матрицы Гессе:

$$\Delta_{\text{угл}}^T = \left[(2) \begin{pmatrix} 2 & -6 \\ -6 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -6 & 8 \\ -6 & 4 & -4 \\ 8 & -4 & -6 \end{pmatrix} \right]$$

Определители угловых миноров матрицы Гессе:

$$\det_{\text{угл}} := \overrightarrow{\left| \Delta_{\text{угл}} \right|} \quad \det_{\text{угл}}^T = (2 \quad -28 \quad 264)$$

Рис. Б 1. Листинг программы идентификации точки с использованием угловых, главных миноров и собственных значений матрицы Гессе (продолжение)

Вывод. Знаки определителей угловых миноров матрицы Гессе чередуются, начиная с положительного. Достаточные условия экстремума не выполняются (критерий Сильвестера). Следовательно, исследуемая точка **не является** точкой локального экстремума

3. Главные миноры матрицы Гессе

Загрузка файла с функциями для расчета главных миноров и их определителей:

 Ссылка: C:\Аналитические методы\Функции для расчета главных миноров2_bk_14.xmcd(R)

3.1. Расчет главных миноров матрицы Гессе (если функции для определения главных миноров нет, определить их вручную)

Блочная матрица со всеми главными минорами матрицы Гессе:

Главные_Миноры := VECTOR_GL_MIN(H_{xst})

а) главные миноры первого порядка ($k = n - m$, где m - порядок главного минора, n - порядок матрицы Гессе, k - количество строк и столбцов, которые надо вычеркнуть из матрицы Гессе, т. е. для миноров первого порядка $k = 3 - 1 = 2$).

Главные_Миноры₁^T = [(-6) (4) (2)]

б) главные миноры второго порядка ($k = n - m$, где m - порядок главного минора, n - порядок матрицы Гессе, k - количество строк и столбцов, которые надо вычеркнуть из матрицы Гессе, т.е. для миноров второго порядка $k = 3 - 2 = 1$).

Главные_Миноры₀^T = $\left[\left(\begin{array}{cc} 4 & -4 \\ -4 & -6 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} 2 & 8 \\ 8 & -6 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} 2 & -6 \\ -6 & 4 \end{array} \right) \right]$

Рис. Б 1. Листинг программы идентификации точки с использованием угловых, главных миноров и собственных значений матрицы Гессе (продолжение)

в) главные миноры третьего порядка

Расчет главного минора третьего порядка, который совпадает с матрицей Гессе:

Главные_Минор3 := H_{xst}

$$\text{Главные_Минор3} = \begin{pmatrix} 2 & -6 & 8 \\ -6 & 4 & -4 \\ 8 & -4 & -6 \end{pmatrix} \text{ - главный минор третьего порядка}$$

3.2. Расчет определителей главных миноров матрицы Гессе

Блочная матрица со всеми определителями главных миноров матрицы Гессе:

Определители_Гл_Мин := DET_GL_MIN(Главные_Миноры)

Определители главных миноров первого порядка:

$$\text{Определители_Гл_Мин}_1^T = (-6 \quad 4 \quad 2)$$

Определители главных миноров второго порядка:

$$\text{Определители_Гл_Мин}_0^T = (-40 \quad -76 \quad -28)$$

Расчет определителя главного минора третьего порядка:

$$\text{Определитель_Гл_Мин}_3 := |\text{Главные_Минор}_3|$$

Значение определителя главного минора третьего порядка:

$$\text{Определитель_Гл_Мин}_3 = 264$$

Выводы.

1. Определители главных миноров матрицы Гессе знакопеременны.
2. Необходимые условия экстремума второго порядка не выполняются.
3. Следовательно, исследуемая точка **не является** точкой локального экстремума.

Рис. Б 1. Листинг программы идентификации точки с использованием угловых, главных миноров и собственных значений матрицы Гессе (продолжение)

4. Расчет собственных значений матрицы Гессе

Единичная матрица, равная размером матрице Гессе:

$$E := \text{identity}(\text{rows}(H_{xst})) \quad E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

4.1. Расчет собственных значений матрицы Гессе символьным способом

Характеристическое уравнение для расчета собственных значений матрицы Гессе, полученное символьным способом:

$$\text{Sobst_znach}(\lambda) := |H_{xst} - \lambda \cdot E| \text{ series} \rightarrow 264 + 144 \cdot \lambda - \lambda^3$$

4.1.1. Расчет корней характеристического уравнения символьным способом

$$S_z := \text{Sobst_znach}(\lambda) \text{ solve} \rightarrow \begin{bmatrix} \dots \end{bmatrix} \dots$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} \frac{(-75744 + 3168i \cdot \sqrt{647})^{\frac{1}{3}} + 48}{(132 + 12i \cdot \sqrt{647})^{\frac{1}{3}}} \\ \frac{(-75744 + 3168i \cdot \sqrt{647})^{\frac{1}{3}} + 48 - 48i \cdot \sqrt{3} + \sqrt{3} \cdot (-75744 + 3168i \cdot \sqrt{647})^{\frac{1}{3}} \cdot i}{2 \cdot (132 + 12i \cdot \sqrt{647})^{\frac{1}{3}}} \\ \frac{(-75744 + 3168i \cdot \sqrt{647})^{\frac{1}{3}} + 48 - \sqrt{3} \cdot (-75744 + 3168i \cdot \sqrt{647})^{\frac{1}{3}} \cdot i + 48i \cdot \sqrt{3}}{2 \cdot (132 + 12i \cdot \sqrt{647})^{\frac{1}{3}}} \end{bmatrix}$$

Рис. Б 1. Листинг программы идентификации точки с использованием угловых, главных миноров и собственных значений матрицы Гессе (продолжение)

Значения корней характеристического уравнения:

$$S_z = \begin{pmatrix} 12.829 \\ -1.879 \\ -10.949 \end{pmatrix}$$

4.1.2. Расчет собственных значений матрицы Гессе численным способом

Расчет вектора коэффициентов полинома характеристического уравнения символьным способом:

$$V := \text{Sobst_znach}(\lambda) \text{ coeffs} \rightarrow \begin{pmatrix} 264 \\ 144 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} 264 \\ 144 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Расчет корней характеристического уравнения численным способом:

$$\lambda_{\text{sob}} := \text{polyroots}(V) \quad \lambda_{\text{sob}}^T = (-10.949 \quad -1.879 \quad 12.829)$$

Выводы.

1. Собственные значения матрицы Гессе знакопеременны.
2. Необходимые условия экстремума второго порядка не выполняются.
3. Следовательно, стационарная точка **не является точкой** локального экстремума.

Рис. Б 1. Листинг программы идентификации точки с использованием угловых, главных миноров и собственных значений матрицы Гессе (окончание)

Функции для расчета главных миноров матрицы Гессе и их определителей

1. Функция для расчета одного главного минора первого порядка матрицы Гессе.
На входе: H_{xst} - матрица Гессе, ind - индекс вычеркиваемой строки.

На выходе: блочный вектор, содержащий: первый элемент - главный минор в виде матрицы, второй элемент - индексы столбцов и строк матрицы Гессе, из которых сформирован главный минор, третий элемент - индекс строки и столбца, которые были исключены из матрицы Гессе при формировании главного минора.

```
ГЛ_МИНОРЫ_2( $H_{xst}, ind$ ) := | k ← 0
                             | l ← 0
                             | for i ∈ 0.. rows( $H_{xst}$ ) - 1
                             |   | if i ≠ ind
                             |   |   | for j ∈ 0.. rows( $H_{xst}$ ) - 1
                             |   |   |   | if j ≠ ind
                             |   |   |   |   |  $v_{k,1} ← H_{xst_{i,j}}$ 
                             |   |   |   |   |  $vv_k ← i$ 
                             |   |   |   |   |  $wl_0 ← ind$ 
                             |   |   |   |   | l ← l + 1
                             |   |   |   | k ← k + 1
                             |   |   | l ← 0
                             |   |  $v2_0 ← v$ 
                             |   |  $v2_1 ← vv$ 
                             |   |  $v2_2 ← wl$ 
                             |   | v2
```

Рис. Б 2. Листинг программы с описанием функций, используемых при расчете главных миноров матрицы Гессе

2. Функция для расчета всех главных миноров второго порядка матрицы Гессе
 На входе: H_{xst} - матрица Гессе.

На выходе: все главные миноры второго порядка в виде блочного вектора, каждый элемент которого - блочный вектор, рассчитанный функцией $ГЛ_МИНОРЫ_2(H_{xst}, ind)$.

```

ГЛ_МИНОРЫ_2_БЛ( $H_{xst}$ ) := | for  $i \in 0.. rows(H_{xst}) - 1$ 
                           |   |  $v_i \leftarrow ГЛ\_МИНОРЫ\_2(H_{xst}, i)$ 
                           |   |  $vv_0 \leftarrow i$ 
                           |   v
    
```

3. Вспомогательная функция, используемая в функции $ГЛ_МИНОРЫ_2A(ГЛ_M2ind_ind, indx)$

```

АКТИВ_СТР( $ind\_ACT, ind$ ) := |  $k \leftarrow 0$ 
                           | for  $i \in 0.. last(ind\_ACT)$ 
                           |   if  $ind \neq i$ 
                           |     |  $v_k \leftarrow ind\_ACT_i$ 
                           |     |  $k \leftarrow k + 1$ 
                           |     v
    
```

Рис. Б 2. Листинг программы с описанием функций, используемых при расчете главных миноров матрицы Гессе (продолжение)

4. Функция для расчета одного главного минора второго порядка из одного главного минора первого порядка

На входе: GL_M2ind - один минор первого порядка, полученный из функции ГЛ_МИНОРЫ_2_БЛ(H_{xst}), indx - индексы строки и столбца, которые вычитаются.

На выходе: блочный вектор из трех элементов, первый элемент которого - минор второго порядка.

```

ГЛ_МИНОРЫ_2А(GL_M2ind,indx) :=
  Mi_H ← GL_M2ind0
  Mi_2 ← GL_M2ind1
  k ← 0
  l ← 0
  for i ∈ 0..rows(Mi_H) - 1
    if i ≠ indx
      for j ∈ 0..rows(Mi_H) - 1
        if j ≠ indx
          vk,1 ← Mi_Hi,j
          vv ← ACTIV_STR(Mi_2,indx)
          w10 ← (Mi_2)indx
          l ← l + 1
          k ← k + 1
      l ← 0
  w11 ← stack(GL_M2ind2,w1)
  v20 ← v
  v21 ← vv
  v22 ← w11
  v2

```

Рис. Б 2. Листинг программы с описанием функций, используемых при расчете главных миноров матрицы Гессе (продолжение)

5. Функция для расчета всех главных миноров второго порядка для одного минора первого порядка

На входе: GL_M2ind - один минор первого порядка, полученный из функции ГЛ_МИНОРЫ_2_БЛ(H_{xst}).

На выходе: блочный вектор из всех миноров второго порядка. Каждый элемент блочного вектора - блочный вектор, рассчитанный функцией ГЛ_МИНОРЫ_2А(GL_M2ind, indx).

$$\text{ГЛ_МИНОРЫ_2В}(\text{GL_M2ind}) := \left| \begin{array}{l} \text{for } i \in 0.. \text{rows}(\text{GL_M2ind}_0) - 1 \\ \quad v_i \leftarrow \text{ГЛ_МИНОРЫ_2А}(\text{GL_M2ind}, i) \\ v \end{array} \right.$$

Расчет всех главных миноров и их детерминантов

6. Функция для расчета всех главных миноров матрицы Гессе (включая и дублирующие)

На входе: вектор GM2XALL, полученный при выполнении функции ГЛ_МИНОРЫ_2ALL.

На выходе: блочный вектор, состоящий из всех (в том числе и дублирующих) элементов-векторов. Каждый элемент-вектор состоит из трех элементов-векторов. Первый элемент - главный определитель матрицы Гессе n-го порядка, второй элемент - вектор, содержащий индексы строк и столбцов матрицы Гессе, из которых сформирован главный определитель, третий элемент-вектор содержит индексы строк и столбцов матрицы Гессе, не вошедшие в главный определитель, расположенные **в произвольном порядке**.

$$\text{ГЛ_МИНОРЫ_2АЛЛ}(\text{GL_M2ind}) := \left| \begin{array}{l} \text{for } i \in 0.. \text{rows}(\text{GL_M2ind}) - 1 \\ \quad v_i \leftarrow \text{ГЛ_МИНОРЫ_2В}(\text{GL_M2ind}_i) \\ v \end{array} \right.$$

Рис. Б 2. Листинг программы с описанием функций, используемых при расчете главных миноров матрицы Гессе (продолжение)

7. Функция убирает лишние вложения в блоки

На входе: вектор GM2XALL, полученный при выполнении функции ГЛ_МИНОРЫ_2ALL.

На выходе: блочный вектор, состоящий из всех (в том числе и дублирующих) элементов-векторов. Каждый элемент-вектор состоит из трех элементов-векторов. Первый элемент - главный определитель матрицы Гессе n-го порядка, второй элемент - вектор, содержащий индексы строк и столбцов матрицы Гессе, из которых сформирован главный определитель, третий элемент-вектор содержит индексы строк и столбцов матрицы Гессе, не вошедшие в главный определитель, расположенные **в произвольном порядке**.

```

UMEN(GM2XALL) := | k ← 0
                  | for i ∈ 0.. last(GM2XALL)
                  |   for j ∈ 0.. last(GM2XALL0)
                  |     | vk ← (GM2XALLi)j
                  |     | k ← k + 1
                  | v
  
```

8. Функция, сортирующая по возрастанию вектор в третьем (содержит исключенные индексы) элементе каждого блочного вектора

На входе: вектор GM2XALL, полученный при выполнении функции UMEN.

На выходе: блочный вектор, состоящий из всех (в том числе и дублирующих) элементов-векторов. Каждый элемент-вектор состоит из трех элементов-векторов. Первый элемент - главный определитель матрицы Гессе n-го порядка, второй элемент-вектор содержит индексы строк и столбцов матрицы Гессе, из которых сформирован главный определитель, третий элемент-вектор содержит индексы строк и столбцов матрицы Гессе, не вошедшие в главный определитель, расположенные **по возрастающей**.

```

SORT_IND(GM2XALL_S) := | for i ∈ 0.. last(GM2XALL_S)
                       |   (GM2XALL_Si)2 ← sort[(GM2XALL_Si)2]
                       | GM2XALL_S
  
```

Рис. Б 2. Листинг программы с описанием функций, используемых при расчете главных миноров матрицы Гессе (продолжение)

9. Функция для всех (в том числе и **дублирующих**) главных миноров матрицы Гессе

На входе: блочный вектор V2, полученный при выполнении функции SORT_IND.

На выходе: блочный вектор, состоящий из всех (в том числе и дублирующих) элементов-векторов. Каждый элемент-вектор состоит из трех элементов-векторов. Первый элемент - главный определитель матрицы Гессе n-го порядка, второй элемент-вектор содержит индексы строк и столбцов матрицы Гессе, из которых сформирован главный определитель, третий элемент-вектор содержит индексы строк и столбцов матрицы Гессе, не вошедшие в главный определитель, **расположенные по возрастающей**.

```

ISKL_SORT(V2) :=
  k ← 0
  n ← 0
  l ← 0
  BUF0 ← -1
  for i ∈ 0..last(V2)
    for j ∈ 0..last(BUF)
      n ← 1 if (V2i)2 = BUFj
    if n = 0
      vk ← V2i
      k ← k + 1
      BUF1 ← (V2i)2
      l ← l + 1
    n ← 0
  v

```

Рис. Б 2. Листинг программы с описанием функций, используемых при расчете главных миноров матрицы Гессе (продолжение)

10. Функция для расчета блочного вектора главных миноров n-го порядка
 На входе: блочный вектор, полученный при выполнении функции
 ISKL_SORT(dfg).

На выходе: блочный вектор главного минора n-го порядка.

$$V_GL_MIN(GGH) := \left| \begin{array}{l} \text{for } i \in 0.. \text{last}(GGH) \\ v_i \leftarrow (GGH_i)_0 \\ v \end{array} \right.$$

11. Функция для расчета всех главных миноров матрицы Гессе

На входе: блочный вектор BL, полученный при выполнении функции
 ГЛ_МИНОРЫ_2_БЛ.

На выходе: блочный вектор, состоящий из элементов-векторов. Каждый элемент-вектор состоит из трех элементов-векторов. Первый элемент - главные миноры матрицы Гессе n-го порядка, второй элемент-вектор содержит индексы строк и столбцов матрицы Гессе, из которых сформирован главный определитель, третий элемент-вектор содержит индексы строк и столбцов матрицы Гессе, не вошедшие в главный определитель, расположенные по возрастающей.

$$VECTOR_GL_MIN_BL_M(BL) := \left| \begin{array}{l} BL_G_BLV \leftarrow \text{ГЛ_МИНОРЫ_2ALL}(BL) \\ BL_G_S \leftarrow \text{UMEN}(BL_G_BLV) \\ BL_G_S_V \leftarrow \text{SORT_IND}(BL_G_S) \\ OTCEV \leftarrow \text{ISKL_SORT}(BL_G_S_V) \\ OTCEV \end{array} \right.$$

Рис. Б 2. Листинг программы с описанием функций, используемых при расчете главных миноров матрицы Гессе (продолжение)

12. **Главная функция** для расчета всех главных миноров матрицы Гессе
 На входе: H_{xst} - матрицы Гессе.

На выходе: блочный вектор. Элементы каждого вектора - миноры первого, второго и т. д. порядка.

```

VECTOR_GL_MIN( $H_{xst}$ ) :=
     $v_0 \leftarrow$  ГЛ_МИНОРЫ_2_БЛ( $H_{xst}$ )
    if rows( $H_{xst}$ ) > 2
        for  $i \in 0..$  rows( $H_{xst}$ ) - 3
             $v_{i+1} \leftarrow$  VECTOR_GL_MIN_BL_M( $v_i$ )
        K  $\leftarrow$  1
    for  $i \in 0..$  last(v)      if rows( $H_{xst}$ ) > 2
         $vv_i \leftarrow$  V_GL_MIN( $v_i$ )
    for  $i \in 0..$  last(v)      otherwise
         $vv_i \leftarrow$  V_GL_MIN( $v_0$ )
    vv
    
```

13. **Главная функция** для расчета детерминанта всех главных миноров матрицы Гессе

На входе: блочный вектор с главными минорами матрицы Гессе, полученный функцией VECTOR_GL_MIN(H_{xst}).

На выходе: блочный вектор. Элементы каждого вектора - определители первого, второго и т. д. порядка.

```

DET_GL_MIN(OPRED_GL_MIN) :=
    for  $i \in 0..$  last(OPRED_GL_MIN)
        for  $j \in 0..$  last(OPRED_GL_MIN $_i$ )
             $v_j \leftarrow$  |(OPRED_GL_MIN $_i$ ) $_j$ |
         $vv_i \leftarrow$  v
    v  $\leftarrow$  0
    vv
    
```

Рис. Б 2. Листинг программы с описанием функций, используемых при расчете главных миноров матрицы Гессе (окончание)

Пример 2.2. Найти экстремум функции:

$$f(x) := (x_0)^3 + (x_1)^2 + (x_2)^2 + x_1 \cdot x_2 - 3 \cdot x_0 + 6 \cdot x_1 + 2 \quad \text{на множестве } \mathbb{R}^3$$

Рассчитать:

1. Стационарные точки.
2. Матрицу Гессе функции в общем виде и в стационарных точках.
3. Классифицировать стационарные точки, используя:
 - угловые миноры определителя матрицы Гессе в стационарных точках;
 - главные миноры определителя матрицы Гессе в стационарных точках;
 - собственные значения матрицы Гессе в стационарных точках.

Сделать выводы:

1. О характере функции $f(x)$.
2. О характере стационарных точек.

Исходная информация в MathCAD

$$f(x) := (x_0)^3 + (x_1)^2 + (x_2)^2 + x_1 \cdot x_2 - 3 \cdot x_0 + 6 \cdot x_1 + 2 \quad \text{- исходная функция}$$

Ход решения задачи в MathCAD

1. Расчет стационарных точек

1.1. Необходимые условия экстремума первого порядка - градиент функции в стационарной точке равен нулю

$$\text{Градиент}_\Phi(x) := \nabla_x f(x) \rightarrow \begin{bmatrix} 3 \cdot (x_0)^2 - 3 \\ 2 \cdot x_1 + x_2 + 6 \\ x_1 + 2 \cdot x_2 \end{bmatrix} \quad \text{- вектор градиента функции в общем виде (символьный способ решения)}$$

Анализ системы уравнений показывает, что имеют место две стационарные точки

Рис. Б 3. Листинг программы поиска безусловного экстремума

Расчет стационарных точек с использованием блока Given-Find

а) расчет **первой** стационарной точки

$$x_{1\text{пр}} := \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \text{- начальное приближение первой стационарной точки}$$

Given

$$\text{Градиент}_\Phi(x_{1\text{пр}}) = 0$$

$$x_{\text{st1}} := \text{Find}(x_{1\text{пр}})$$

$$x_{\text{st1}}^T = (1 \quad -4 \quad 2) \quad \text{- первая точка}$$

б) Расчет **второй** стационарной точки

$$x_{2\text{пр}} := \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \text{- начальное приближение второй стационарной точки}$$

Given

$$\text{Градиент}_\Phi(x_{2\text{пр}}) = 0$$

$$x_{\text{st2}} := \text{Find}(x_{2\text{пр}})$$

$$x_{\text{st2}}^T = (-1 \quad -4 \quad 2) \quad \text{- вторая точка}$$

Рис. Б 3. Листинг программы поиска безусловного экстремума (продолжение)

Проверить выполнение достаточных и необходимых условий второго порядка в каждой стационарной точке двумя способами.

Исследование стационарных точек

2. Расчет матрицы Гессе в общем виде

$$x := \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad - \text{ вектор неизвестных переменных}$$

Функция для расчета элементов матрицы Гессе

$$H(x) := \begin{bmatrix} \frac{d^2}{dx_0^2} f(x) & \frac{d}{dx_0} \left(\frac{d}{dx_1} f(x) \right) & \frac{d}{dx_0} \left(\frac{d}{dx_2} f(x) \right) \\ \frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_0} f(x) \right) & \frac{d^2}{dx_1^2} f(x) & \frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_2} f(x) \right) \\ \frac{d}{dx_2} \left(\frac{d}{dx_0} f(x) \right) & \frac{d}{dx_2} \left(\frac{d}{dx_1} f(x) \right) & \frac{d^2}{dx_2^2} f(x) \end{bmatrix}$$

Символьное вычисление матрицы Гессе в общем виде:

$$M_GESSE(x_0, x_1, x_2) := H(x) \rightarrow \begin{pmatrix} 6 \cdot x_0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Рис. Б 3. Листинг программы поиска безусловного экстремума (продолжение)

3. Исследование первой стационарной точки

3.1. Расчет матрицы Гессе в первой стационарной точке

$$x_{st1}^T = (1 \quad -4 \quad 2) \quad - \text{ первая стационарная точка}$$

Расчет матрицы Гессе в первой стационарной точке

$$H_{xst1} := M_GESSE(x_{st1_0}, x_{st1_1}, x_{st1_2})$$

$$H_{xst1} = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad - \text{ значение матрицы Гессе в первой стационарной точке}$$

3.2. Исследование выполнения достаточных условий

Первый способ. С помощью угловых миноров

3.2.1. Расчет угловых миноров

$$i := 0.. \text{rows}(H_{xst1}) - 1 \quad \Delta_{\text{угл}1_i} := \text{submatrix}(H_{xst1}, 0, i, 0, i)$$

$$\Delta_{\text{угл}1}^T = \left[(6) \quad \begin{pmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \right] \quad - \text{ угловые миноры матрицы Гессе}$$

$$\det_{\text{угл}1} := \overrightarrow{|\Delta_{\text{угл}1}|}$$

$$\det_{\text{угл}1}^T = (6 \quad 12 \quad 18) \quad - \text{ определители угловых миноров матрицы Гессе}$$

Рис. Б 3. Листинг программы поиска безусловного экстремума (продолжение)

Выводы.

1. Все определители угловых миноров матрицы Гессе положительные.
2. Достаточные условия экстремума выполняются.
3. Следовательно, первая стационарная точка - точка локального минимума.
4. Проводить исследование выполнения необходимых условий экстремума второго порядка не надо.

3.3. Исследование выполнения достаточных условий**Второй способ. С помощью собственных значений матрицы Гессе**

$E := \text{identity}(\text{rows}(H_{xst1}))$

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{- единичная матрица, равная размером матрице Гессе}$$

а) расчет собственных значений матрицы Гессе по формуле $|H_{xst1} - \lambda \cdot E|$

Символьным способом

Характеристическое уравнение для расчета собственных значений матрицы Гессе, полученное символьным способом. **Скопировать** значения матриц H_{xst1} и E .

$$\text{Charact_Ur}(\lambda) := \left| \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} - \lambda \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right| \rightarrow 10 \cdot \lambda^2 - \lambda^3 - 27 \cdot \lambda + 18$$

Расчет корней характеристического уравнения символьным способом.

$$\text{Sobst_znach}(\lambda) := \text{Charact_Ur}(\lambda) \text{ solve, } \lambda \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 6 \end{pmatrix}$$

Рис. Б 3. Листинг программы поиска безусловного экстремума (продолжение)

б) расчет собственных значений матрицы Гессе **численным способом**.

Расчет вектора коэффициентов полинома характеристического уравнения **символьным способом**.

$$V := \text{Charact_Ur}(\lambda) \text{ coeffs} \rightarrow \begin{pmatrix} 18 \\ -27 \\ 10 \\ -1 \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} 18 \\ -27 \\ 10 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Расчет корней характеристического уравнения **численным способом** с использованием функции `polyroots(V)`.

$$\lambda_{\text{sob}} := \text{polyroots}(V)$$

$$\lambda_{\text{sob}}^T = (1 \ 3 \ 6) \quad - \text{ корни характеристического уравнения}$$

Выводы.

1. Все собственные значения матрицы Гессе положительны, т. е. имеют знак плюс.
2. Достаточные условия экстремума выполняются.
3. Следовательно, первая стационарная точка - точка локального минимума.
4. Проводить исследование выполнения необходимых условий экстремума второго порядка не надо.

Дополнительные исследования.

1. Матрица Гессе положительно определена, т. е. $H_{\text{xst1}} > 0$.
2. Функция строго выпуклая.
3. Следовательно, первая точка - точка локального минимума и, одновременно, точка глобального минимума.

Рис. Б 3. Листинг программы поиска безусловного экстремума (продолжение)

4. Исследование второй стационарной точки

4.1. Расчет матрицы Гессе во второй стационарной точке

$$x_{st2}^T = (-1 \quad -4 \quad 2) \quad - \text{вторая стационарная точка}$$

Расчет матрицы Гессе во второй стационарной точке

$$H_{xst2} := M_GESSE(x_{st2_0}, x_{st2_1}, x_{st2_2})$$

$$H_{xst2} = \begin{pmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad - \text{значение матрицы Гессе во второй стационарной точке}$$

4.2. Исследование выполнения достаточных условий

Первый способ. С помощью угловых миноров

4.2.1. Расчет угловых миноров

$$i := 0.. \text{rows}(H_{xst2}) - 1 \quad \Delta_{\text{угл}2_i} := \text{submatrix}(H_{xst2}, 0, i, 0, i)$$

$$\Delta_{\text{угл}2}^T = \left[\begin{array}{c} (-6) \quad \begin{pmatrix} -6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \end{array} \right] \quad - \text{угловые миноры матрицы Гессе}$$

$$\det_{\text{угл}2} := \overrightarrow{|\Delta_{\text{угл}2}|}$$

$$\det_{\text{угл}2}^T = (-6 \quad -12 \quad -18) \quad - \text{определители угловых миноров матрицы Гессе}$$

Рис. Б 3. Листинг программы поиска безусловного экстремума (продолжение)

Выводы.

1. Все определители угловых миноров матрицы Гессе отрицательны.
2. Достаточные условия экстремума не выполняются.
3. Надо проверить выполнение необходимых условий экстремума второго порядка.

4.3. Проверка выполнения необходимых условий экстремума второго порядка двумя способами (используя главные миноры и собственные значения матрицы Гессе)

Загрузка файла с пользовательскими функциями для расчета главных миноров и их определителей

☞ Ссылка:С:\Аналитические методы\Функции для расчета главных миноров2_bk_14.xmcd(R)

4.4 Расчет главных миноров матрицы Гессе (если функции VECTOR_GL_MIN(H_{xst2}) для расчета главных миноров нет, определить главные миноры "вручную")

Главные_Миноры := VECTOR_GL_MIN(H_{xst2})

Главные_Миноры = $\begin{pmatrix} \{3,1\} \\ \{3,1\} \end{pmatrix}$ - блочная матрица со всеми главными минорами матрицы Гессе

Главные миноры определяются путем вычеркивания любых $k = n - m$ строк и столбцов, где m - порядок главного минора, n - порядок матрицы Гессе, k - количество строк и столбцов, которые надо вычеркнуть из матрицы Гессе.

Главные_Миноры₁^T = [(2) (2) (-6)] - главные миноры первого порядка. Для миноров первого порядка $k := 3 - 2 = 1$

Рис. Б 3. Листинг программы поиска безусловного экстремума (продолжение)

Главные_Миноры₀^T = $\left[\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \right]$ - главные миноры второго порядка

Главные_Минор3 := H_{xst2}

Главные_Минор3 = $\begin{pmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ - главный минор третьего порядка. Совпадает с матрицей Гессе

4.4.1. Расчет определителей главных миноров матрицы Гессе

Определители_Гл_Мин := DET_GL_MIN(Главные_Миноры)

Определители_Гл_Мин = $\begin{pmatrix} \{3,1\} \\ \{3,1\} \end{pmatrix}$ - блочная матрица со всеми определителями главных миноров матрицы Гессе

Определители_Гл_Мин₁^T = (2 2 -6) - значения определителей главных миноров первого порядка

Определители_Гл_Мин₀^T = (3 -12 -12) - значения определителей главных миноров второго порядка

Расчет определителя главного минора третьего порядка

Определитель_Гл_Мин3 := |Главные_Минор3|

Определитель_Гл_Мин3 = -18 - значение определитель главного минора третьего порядка

Рис. Б 3. Листинг программы поиска безусловного экстремума (продолжение)

Выводы.

1. Определители главных миноров матрицы Гессе первого порядка - знакопеременны, второго порядка - знакопеременны, третьего порядка - отрицателен.
2. Необходимые условия второго порядка не выполняются.
3. Следовательно, вторая стационарная точка - **не является** точкой локального минимума.

4.5. Исследование выполнения достаточных условий

Второй способ - с помощью собственных значений матрицы Гессе

$E := \text{identity}(\text{rows}(H_{xst2}))$

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{- единичная матрица размером, равным матрице Гессе}$$

а) расчет собственных значений матрицы Гессе по формуле $|H_{xst2} - \lambda \cdot E|$ символьным способом

Характеристическое уравнение для расчета собственных значений матрицы Гессе, полученное символьным способом. Скопировать значения матриц H_{xst2} и E

$$\text{Charact_Ur}(\lambda) := \left| \begin{pmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} - \lambda \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right| \rightarrow 21 \cdot \lambda - 2 \cdot \lambda^2 - \lambda^3 - 18$$

Расчет корней характеристического уравнения символьным способом.

$$\text{Sobst_znach}(\lambda) := \text{Charact_Ur}(\lambda) \text{ solve, } \lambda \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ -6 \end{pmatrix}$$

Рис. Б 3. Листинг программы поиска безусловного экстремума (продолжение)

б) расчет собственных значений матрицы Гессе численным способом

Расчет вектора коэффициентов полинома
характеристического уравнения символьным способом.

$$V := \text{Xaract_Ur}(\lambda) \text{ coeffs} \rightarrow \begin{pmatrix} -18 \\ 21 \\ -2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$V = \begin{pmatrix} -18 \\ 21 \\ -2 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{- вектор коэффициентов полинома}$$

Расчет корней характеристического уравнения численным
способом с использованием функции `polyroots(V)`.

$$\lambda_{\text{sob}} := \text{polyroots}(V)$$

$$\lambda_{\text{sob}}^T = (-6 \ 1 \ 3) \quad \text{- корни характеристического уравнения}$$

Выводы.

1. Собственные значения матрицы Гессе **знакопеременны**.
2. Достаточные условия экстремума **не выполняются**.
3. Следовательно, вторая стационарная точка не является точкой локального минимума.

Общие выводы.

1. Первая стационарная точка с координатами $x_{\text{st1}}^T = (1 \ -4 \ 2)$ является точкой глобального минимума.
2. Значение функции в первой точке равно $f(x_{\text{st1}}) = -12$.
3. Вторая стационарная точка с координатами $x_{\text{st2}}^T = (-1 \ -4 \ 2)$ не является точкой экстремума.

Рис. Б 3. Листинг программы поиска безусловного экстремума (окончание)

Задача 2.3. Исследовать функцию

$$f(x) := 4 \cdot (x_0)^2 + 3 \cdot (x_1)^2 - 4 \cdot x_0 \cdot x_1 + x_0$$

Рассчитать:

1. Стационарные точки;
2. Матрицу Гессе функции в общем виде и в стационарной точке
3. Классифицировать стационарные точки, используя:
 - угловые миноры определителя матрицы Гессе в стационарной точке;
 - главные миноры определителя матрицы Гессе в стационарной точке;
 - собственные значения матрицы Гессе в стационарной точке.

Сделать выводы:

О характере стационарной точки.

Построить графики:

Трехмерные графики (в виде поверхности и в виде линии уровня) и нанести на них стационарную точку.

Исходная информация

$$f(x) := 4 \cdot (x_0)^2 + 3 \cdot (x_1)^2 - 4 \cdot x_0 \cdot x_1 + x_0 \quad - \text{исходная функция}$$

Ход решения задачи

1. Расчет стационарных точек

1.1. Необходимые условия первого порядка. Градиент функции равен нулю в стационарной точке.

$$\nabla_x f(x) \rightarrow \begin{pmatrix} 8 \cdot x_0 - 4 \cdot x_1 + 1 \\ 6 \cdot x_1 - 4 \cdot x_0 \end{pmatrix} \quad - \text{символьное вычисление вектора градиента функции в общем виде}$$

Рис. Б 4. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции

а) первый способ. Найти стационарные точки, решая систему уравнений матричным способом.

$$A := \begin{pmatrix} 8 & -4 \\ -4 & 6 \end{pmatrix} \quad B := \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$x_{st} := A^{-1} \cdot B \quad x_{st} = \begin{pmatrix} -0.188 \\ -0.125 \end{pmatrix}$$

б) второй способ. Найти стационарные точки, используя блок Given-Find

$$x := \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

Given

$$8 \cdot x_0 - 4 \cdot x_1 + 1 = 0$$

$$6 \cdot x_1 - 4 \cdot x_0 = 0$$

$$x_{st} := \text{Find}(x)$$

$$x_{st} = \begin{pmatrix} -0.188 \\ -0.125 \end{pmatrix}$$

Вывод. Найдена одна стационарная точка $x_{st}^T = (-0.188 \ -0.125)$.

2. Исследовать стационарную точку

2.1. Рассчитать матрицу Гессе (в общем виде, символично)

$$x := \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad \text{- вектор неизвестных переменных}$$

Рис. Б 4. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции (продолжение)

```

H(x) := 
$$\begin{bmatrix} \frac{d^2}{dx0^2} f(x) & \frac{d}{dx0} \left( \frac{d}{dx2} f(x) \right) \\ \frac{d}{dx2} \left( \frac{d}{dx0} f(x) \right) & \frac{d^2}{dx2^2} f(x) \end{bmatrix}$$
 - функция для расчета элементов
матрицы Гессе размером 2x2

M_GESSE(x0, x1) := H(x) → 
$$\begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 - символическое вычисление матрицы
Гессе в общем виде

Расчет матрицы Гессе в стационарной точке

H_xst := M_GESSE(x_st0, x_st1)

H_xst = 
$$\begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 - значение матрицы Гессе в стационарной точке

2.2. Исследование выполнения достаточных условий второго порядка

Первый способ - с помощью угловых миноров

Расчет угловых миноров

i := 0..rows(H_xst) - 1                      Δуглi := submatrix(H_xst, 0, i, 0, i)

ΔуглT = 
$$\begin{bmatrix} (8) & \begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$
 - угловые миноры матрицы Гессе

```

Рис. Б 4. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции (продолжение)

$$\det_{\text{угл}} := \overrightarrow{|\Delta_{\text{угл}}|}$$

$$\det_{\text{угл}}^T = (8 \ 0) \quad - \text{определители угловых миноров матрицы Гессе}$$

Выводы. Все определители угловых миноров матрицы Гессе неотрицательны, не строго положительны. Достаточные условия экстремума не выполняются. Проверить необходимые условия экстремума второго порядка, используя главные миноры.

2.3. Исследование выполнения достаточных условий второго порядка

Второй способ - с помощью собственных значений матрицы Гессе

Расчет собственных значений матрицы Гессе

$$E := \text{identity}(\text{rows}(H_{\text{xst}}))$$

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad - \text{единичная матрица, равная размером матрице Гессе}$$

а) первый способ. Расчет собственных значений матрицы Гессе символьным способом

Характеристическое уравнение для расчета собственных значений матрицы Гессе, полученное символьным способом

$$\text{Sobst_znach}(\lambda) := |H_{\text{xst}} - \lambda \cdot E| \text{ series} \rightarrow -8 \cdot \lambda + \lambda^2$$

Рис. Б 4. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции (продолжение)

Расчет корней характеристического уравнения символьным способом

$$\text{собств_знач} := \text{Sobst_znach}(\lambda) \text{ solve}, \lambda \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 8 \end{pmatrix}$$

б) второй способ. Расчет собственных значений матрицы Гессе численным способом

Расчет вектора коэффициентов полинома характеристического уравнения символьным способом

$$V := \text{Sobst_znach}(\lambda) \text{ coeffs} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ -8 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$V = \begin{pmatrix} 0 \\ -8 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{- значения коэффициентов полинома}$$

$$\lambda_{\text{sob}} := \text{polyroots}(V) \quad \text{- расчет корней характеристического уравнения численным способом}$$

$$\lambda_{\text{sob}}^T = (0 \ 8) \quad \text{- значение корня полинома}$$

Выводы.

1. Собственные значения матрицы Гессе не отрицательны.
3. Достаточные условия не выполняются, но выполняются необходимые условия экстремума второго порядка.
3. Следовательно, стационарная точка может являться точкой локального минимума. Требуется дополнительные исследования.

Рис. Б 4. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции (продолжение)

2.4. Исследование выполнения необходимых условий второго порядка с помощью главных миноров

а) главные миноры матрицы Гессе

Загрузка файла с функциями для расчета главных миноров и их определителей

☛ Ссылка: C:\Аналитические методы\Функции для расчета главных миноров2_bk_14.xmcd(R)

Расчет главных миноров матрицы Гессе (если функции для определения главных миноров нет, определить их вручную)

Блочная матрица со всеми главными минорами матрицы Гессе

Главные_Миноры := VECTOR_GL_MIN(H_{xst})

Главные миноры первого порядка ($k = n - m$, где m - порядок главного минора, n - порядок матрицы Гессе, k - количество строк и столбцов, которые надо вычеркнуть из матрицы Гессе, т. е. для миноров первого порядка $k = 3 - 1 = 2$)

Главные_Миноры^T = [(0) (8)]

Расчет главного минора второго порядка, который совпадает с матрицей Гессе

Главные_Минор2 := H_{xst}

Главные_Минор2 = $\begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ - главные миноры второго порядка

Рис. Б 4. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции (продолжение)

б) расчет определителей главных миноров матрицы Гессе

Блочная матрица со всеми определителями главных миноров матрицы Гессе

Определители_Гл_Мин := DET_GL_MIN(Главные_Миноры)

Определители_Гл_Мин₀^T = (0 8) - определители главных миноров первого порядка

Определитель_Гл_Мин2 := |Главные_Минор2| - расчет определителя главного минора второго порядка

Определитель_Гл_Мин2 = 0 - определитель главного минора второго порядка

Выводы.

1. Определители главных миноров матрицы Гессе первого порядка и второго порядка неотрицательны.
2. Необходимые условия экстремума второго порядка выполняются.
4. Следовательно, стационарная точка может быть точкой локального минимума. Требуется дополнительные исследования.

2.5. Дополнительные исследования

Матрица Гессе положительно полуопределена. Матрица Гессе постоянна (не зависит от переменных на всем множестве) на всем выпуклом множестве R^n , следовательно, функция $f(x)$ является выпуклой функцией и имеет одну точку глобального минимума. Учитывая сказанное, стационарная точка $x_{st}^T = (-0.188 \ -0.125)$ является точкой как локального, так и глобального минимума.

Рис. Б 4. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции (продолжение)

Так же можно подтвердить сказанное выше, построив график функции и нанеся на него стационарную точку.

Так же можно доказать, что стационарная точка является точкой локального минимума, рассчитав значения функции в малой окрестности стационарной точки и сравнив результаты расчета со значением функции в стационарной точке.

3. Построение графиков и точек локального минимума

Построить трехмерный график исследуемой функции в диапазоне значений $-2 < x < 2$, $-2 < y < 2$, с шагом 0.01, нанести точку минимума, отредактировать график, как показано ниже.

Расчет исходной матрицы для построения графика функции, используя дискретный аргумент.

$F(x, y) := 4x^2 + 3y^2 - 4x \cdot y + x$ - исследуемая функция
для построения графика

$x_{\min} := -2$ $x_{\max} := 2$ $\Delta x := 0.1$

$y_{\min} := -2$ $y_{\max} := 2$ $\Delta y := 0.01$

$N_i := \frac{x_{\max} - x_{\min}}{\Delta x}$
- количество расчетных точек

$N_j := \frac{y_{\max} - y_{\min}}{\Delta y}$

$i := 0..N_i$ $j := 0..N_j$ - дискретные аргументы

Расчет массивов для построения трехмерного графика

$x_{1,i,j} := x_{\min} + \Delta x \cdot i$ $y_{1,i,j} := y_{\min} + \Delta y \cdot j$ $M := \overrightarrow{F(x_1, y_1)}$

Рис. Б 4. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции (продолжение)

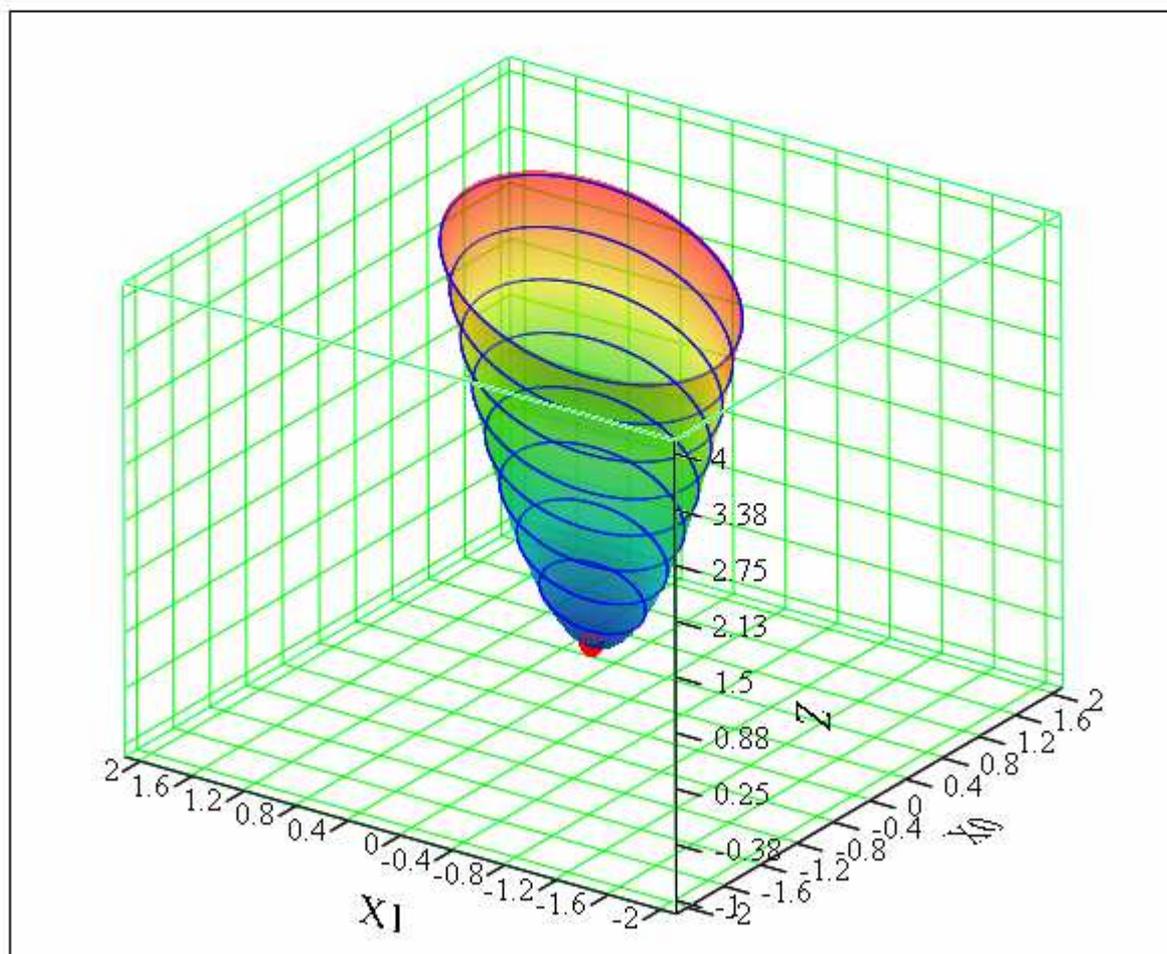
**Расчет координат стационарной точки минимума
для нанесения ее на график**

$X12_0 := x_{st_0}$ $X12 = (-0.188)$ - значение x-составляющей

$Y12_0 := x_{st_1}$ $Y12 = (-0.125)$ - значение y-составляющей

$Z12_0 := f(x_{st})$ $Z12 = (-0.094)$ - значение z-составляющей

Построить трехмерный график в виде поверхности и нанести
точку локального минимума



$(x_1, y_1, M), (X12, Y12, Z12)$

Рис. Б 4. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции (продолжение)

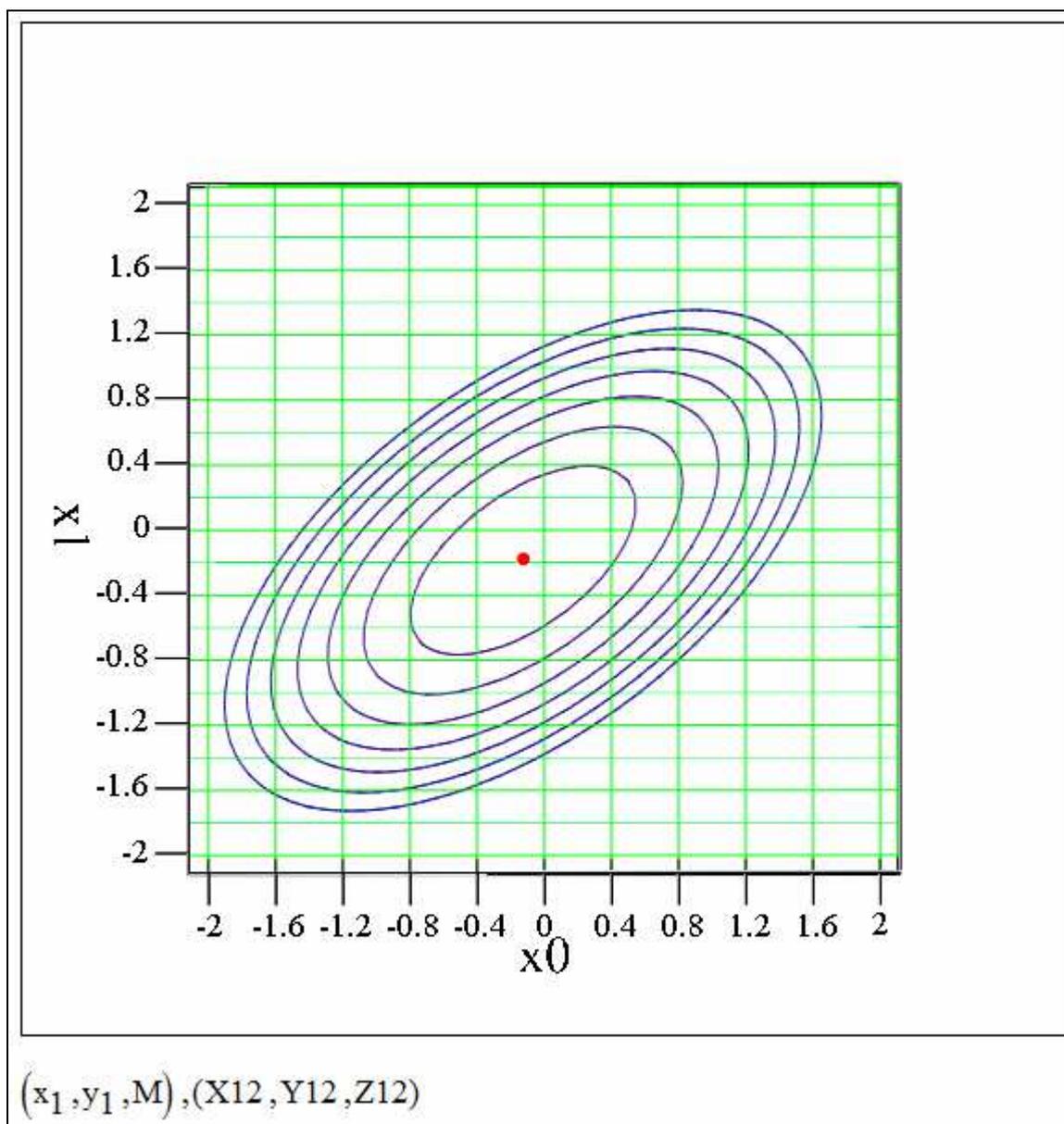


Рис. Б 4. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции (окончание)

Пример 2.4. Найти минимум функции Розенброка

$f_R(x,y) := 100 \cdot (y - x^2)^2 + (1 - x)^2$ двумя способами, используя блок Given-MinErr и функцию Minimize(f_R,x,y) ■

Вид функции Розенброка напоминает глубокий овраг с ямкой на дне, что сильно осложняет реализацию многих алгоритмов оптимизации.

Исходные данные

Функция Розенброка

$$f_R(x,y) := 100 \cdot (y - x^2)^2 + (1 - x)^2$$

CTOL := 0.1 - точность расчета

Ход решения задачи

1. Рассчитать точку минимума двумя способами, используя блок Given-MinErr и функцию Minimize(f_R,x,y) ■

1.1. Рассчитать минимум функции, используя метод Levenberg-Marquardt и расчетный блок Given-MinErr

x := 1.2 y := -5 - начальное приближение координат минимума

Given

$x \geq 0$ $y \geq 0$ $y \leq 9 - x$ - ограничения на переменные

$$\frac{d}{dx} f_R(x,y) = 0 \qquad \frac{d}{dy} f_R(x,y) = 0$$

Рис. Б 5. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции Розенброка

Координаты точки минимума. Для выбора метода расчета Levenberg-Marquardt необходимо навести курсор на имя функции Minerr, нажать правую кнопку мыши, выбрать из контекстного меню Nonlinear- Levenberg-Marquardt.

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} := \text{Minerr}(x, y) \quad \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$z := f_R(x, y) = 0$ - значение функции в точке минимума

Осуществить численное решение уравнений, используя метод QuasiNewton (КвазиНьютон) и Conjugate Gradient (Сопряженный градиент)

Результаты расчета при точности расчета STOL := 0.1:

Метод Conjugate Gradient (Сопряженный градиент)

$$\begin{pmatrix} xc \\ yc \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 0.9997463 \\ 0.9994915 \end{pmatrix}$$

Метод QuasiNewton (КвазиНьютон)

$$\begin{pmatrix} xq \\ yq \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 1.0000126 \\ 1.0000256 \end{pmatrix}$$

Методы QuasiNewton (КвазиНьютон) и Conjugate Gradient (Сопряженный градиент) дают погрешность расчета в пятом и четвертом знаке, соответственно.

При STOL := 0.0000001 все три метода дают точное решение. Проверить самостоятельно.

Рис. Б 5. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции Розенброка (продолжение)

1.2. Рассчитать минимум функции, используя метод QuasiNewton (КвазиНьютон) и функцию Minimize. Метод Levenberg-Marquardt с данной функцией не работает.

STOL := 0.1 - точность расчета

MIN := Minimize(f_R, x, y) MIN = $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

f_R(MIN₀, MIN₁) = 0 - значение функции в точке минимума

2. Построить график и нанести точку минимума

Диапазон изменения переменных

x_{min} := -0.5 x_{max} := 3.0 Δx := 0.02

Ni := $\frac{x_{\max} - x_{\min}}{\Delta x}$ Ni = 175 - количество точек расчета

y_{min} := -0.5 y_{max} := 3.0 Δy := 0.02

Nj := $\frac{y_{\max} - y_{\min}}{\Delta y}$ Nj = 175 - количество точек расчета

i := 0.. Ni j := 0.. Nj - дискретные аргументы

Расчет матриц переменных для построения 3D графика

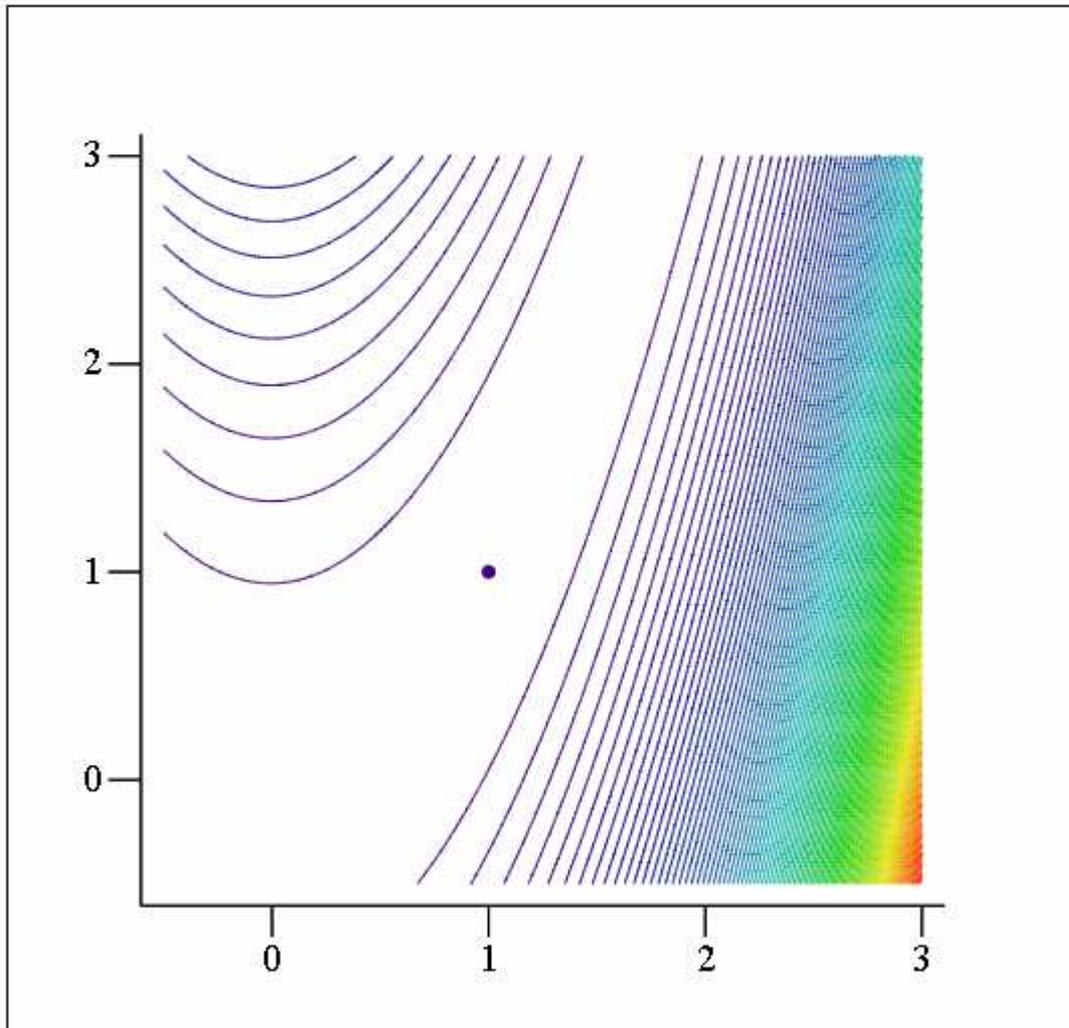
x_{1,i,j} := x_{min} + Δx·i y_{1,i,j} := y_{min} + Δy·j

M_{i,j} := f_R(x_{1,i,j}, y_{1,i,j})

Рис. Б 5. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции Розенброка (продолжение)

Координаты точки минимума функции Розенброка

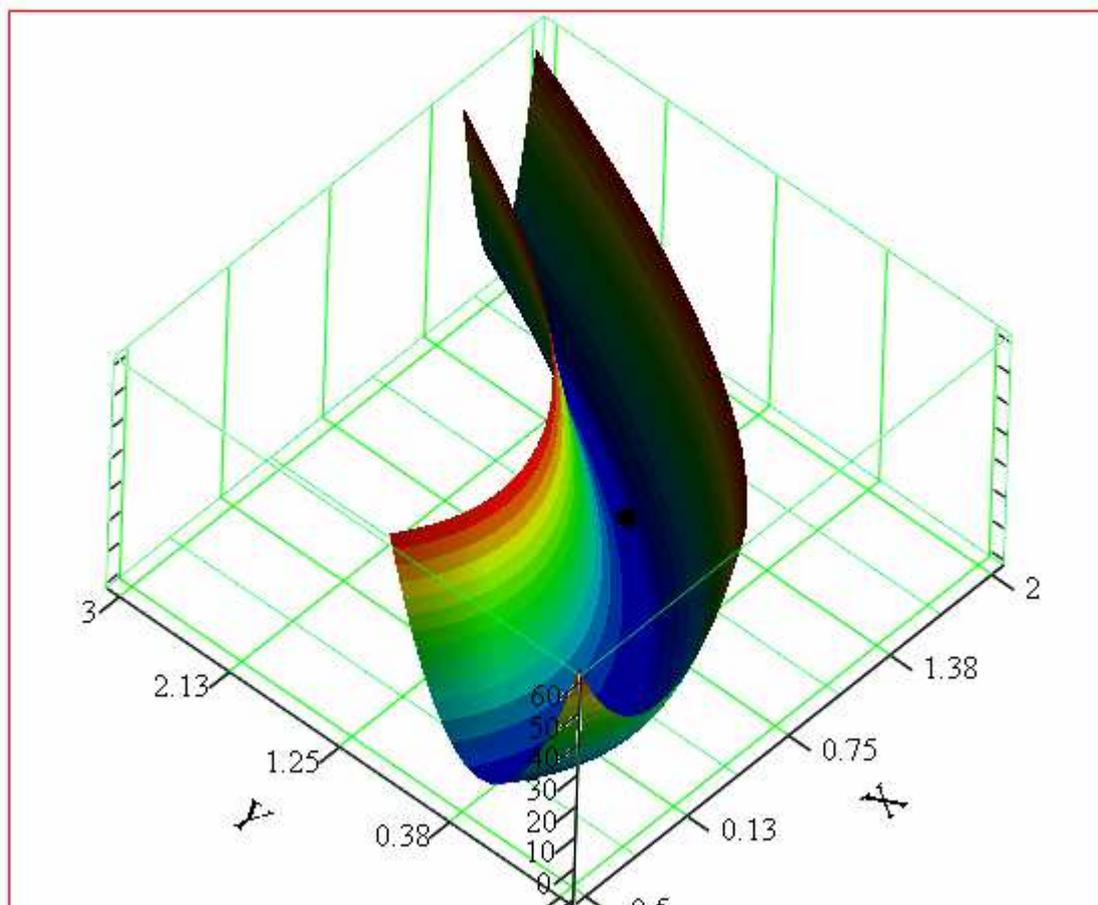
$x_{10} := x$ $y_{10} := y$ $z_{10} := z$



$(x_1, y_1, M), (x_1, y_1, z_1)$

Рис. Б 5. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции Розенброка (продолжение)

Для получения поверхности в виде, приведенном на графике, необходимо установить диапазон значений по оси z в интервале от - 10 до 60. Остальные настройки произвести самостоятельно.



$(x_1, y_1, M), (x_1, y_1, z_1)$

Рис. Б 5. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции Розенброка (окончание)

Пример 2.5. Найти экстремумы функции Хаммельблау

$f_R(x,y) := (x^2 + y - 11)^2 + (x + y^2 - 7)^2$, используя блоки Given-MinErr и Given-Maximize. Построить график функции и точки экстремума.

Вид функции Хаммельблау напоминает глубокую яму с четырьмя углублениями и одной выпуклостью на дне, что сильно осложняет реализацию многих алгоритмов оптимизации

Исходные данные

Функция Хаммельблау

$$f_R(x,y) := (x^2 + y - 11)^2 + (x + y^2 - 7)^2$$

STOL := 0.001 - точность расчета

Ход решения

1. Получить аналитические выражения для производных функции по переменным x и y , используя символьный метод

$$\frac{d}{dx} f_R(x,y) \rightarrow 2 \cdot x + 4 \cdot x \cdot (x^2 + y - 11) + 2 \cdot y^2 - 14$$

$$\frac{d}{dy} f_R(x,y) \rightarrow 2 \cdot y + 4 \cdot y \cdot (y^2 + x - 7) + 2 \cdot x^2 - 22$$

2. Найти минимумы функций, используя блок расчета Given-MinErr. В качестве уравнений использовать выражения для первых производных (скопировав их). При решении использовать метод Levenberg-Marquardt.

Рис. Б 6. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции Хаммельблау

```

x :=  $\begin{pmatrix} -0.5 \\ -3 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix}$       y :=  $\begin{pmatrix} -1 \\ 3 \\ -3 \\ 3 \end{pmatrix}$       - начальные приближения

Given

4*(x2 + y - 11)*x + 2*x + 2*y2 - 14 = 0
2*x2 + 2*y - 22 + 4*(x + y2 - 7)*y = 0

 $\begin{pmatrix} X3 \\ Y3 \end{pmatrix} := \overrightarrow{\text{Minerr}(x,y)}$ 

 $\begin{pmatrix} X3 \\ Y3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \{4,1\} \\ \{4,1\} \end{pmatrix}$       - результаты расчета в виде блочного вектора

X3 =  $\begin{pmatrix} -3.779 \\ -2.805 \\ 3.584 \\ 3 \end{pmatrix}$       Y3 =  $\begin{pmatrix} -3.283 \\ 3.131 \\ -1.848 \\ 2 \end{pmatrix}$ 

Значение функции в расчетной точке
Z_min := f_R(X3, Y3)      Z_minT = (0 0 0 0)

```

Рис. Б 6. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции Хаммельблау (продолжение)

3. Осуществить численное решение уравнений, используя метод QuasiNewton (КвазиНьютон) и Conjugate Gradient (Сопряженный градиент)

Результаты расчета:

$$X4 := \begin{pmatrix} -0.079 \\ -0.079 \\ -0.079 \\ -0.079 \end{pmatrix} \quad Y4 := \begin{pmatrix} -0.199 \\ -0.199 \\ -0.199 \\ -0.199 \end{pmatrix}$$

Вывод: Методы QuasiNewton (КвазиНьютон) и Conjugate Gradient (Сопряженный градиент) дают одинаковый и не удовлетворительный результат

4. Определить максимум функции на дне ямы, используя блок Given-Maximize

$x0 := 0$ $y0 := 0$ - начальное приближение координат точки максимума

Given

Ограничения в виде неравенств. Ограничивается зона дна ямы с максимумом. В противном случае максимум всегда будет на стенке ямы.

$$x0 \leq 3.5 \quad x0 \geq -3.5 \quad y0 \leq 3.5 \quad y0 \geq -3.5$$

$MAX := \text{Maximize}(f_R, x0, y0)$

$$MAX = \begin{pmatrix} -0.271 \\ -0.923 \end{pmatrix} \quad \text{- координаты точки максимума на дне ямы}$$

Значение функции в точке максимума на дне ямы

$$Z_max := f_R(MAX_0, MAX_1) = 181.617$$

Рис. Б 6. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции Хаммельблау (продолжение)

5. Построить график поверхности функции и нанести точки экстремума

Построить трехмерный график в виде контурных линий в диапазоне значений $-6 < x < 6$, $-6 < y < 6$, с шагом 0.1, нанести расчетные точки минимума и максимума, отредактировать график, как показано ниже.

5.1. Рассчитать матрицы функции для построения графика, используя дискретный аргумент

$$x_{\min} := -6 \quad x_{\max} := 6 \quad \Delta x := 0.1$$

$$y_{\max} := 6 \quad y_{\min} := -6 \quad \Delta y := 0.1$$

$$N_i := \frac{x_{\max} - x_{\min}}{\Delta x} \quad \text{- количество точек расчета}$$

$$N_j := \frac{y_{\max} - y_{\min}}{\Delta y}$$

$$i := 0..N_i \quad j := 0..N_j \quad \text{- дискретные аргументы}$$

Искомые матрицы

$$x_{1,i,j} := x_{\min} + \Delta x \cdot i \quad y_{1,i,j} := y_{\min} + \Delta y \cdot j$$

$$M_{i,j} := f_R(x_{1,i,j}, y_{1,i,j})$$

5.2. Рассчитать координаты четырех точек минимума для нанесения на график

$$NN1 := Z_min \quad \text{- значение z-составляющей точек}$$

$$XN1 := X3 \quad \text{- значение x-составляющей точек}$$

$$YN1 := Y3 \quad \text{- значение y-составляющей точек}$$

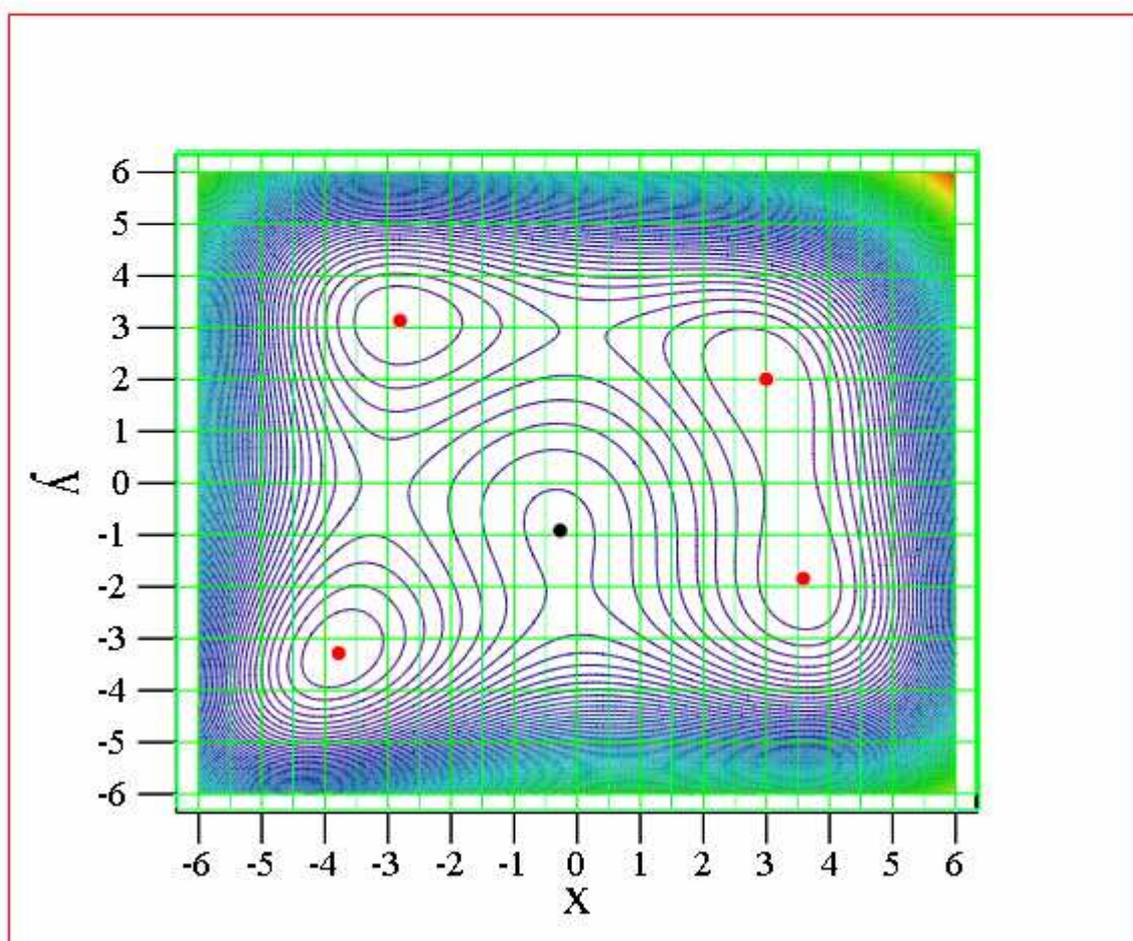
Рис. Б 6. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции Хаммельблау (продолжение)

5.3. Расчет координат точки максимума (черная точка) для нанесения на график, в виде вектора из одного элемента

$NN2_0 := Z_max$ - значение z-составляющей $NN2 = (181.617)$

$XN2_0 := MAX_0$ - значение x-составляющей $XN2 = (-0.271)$

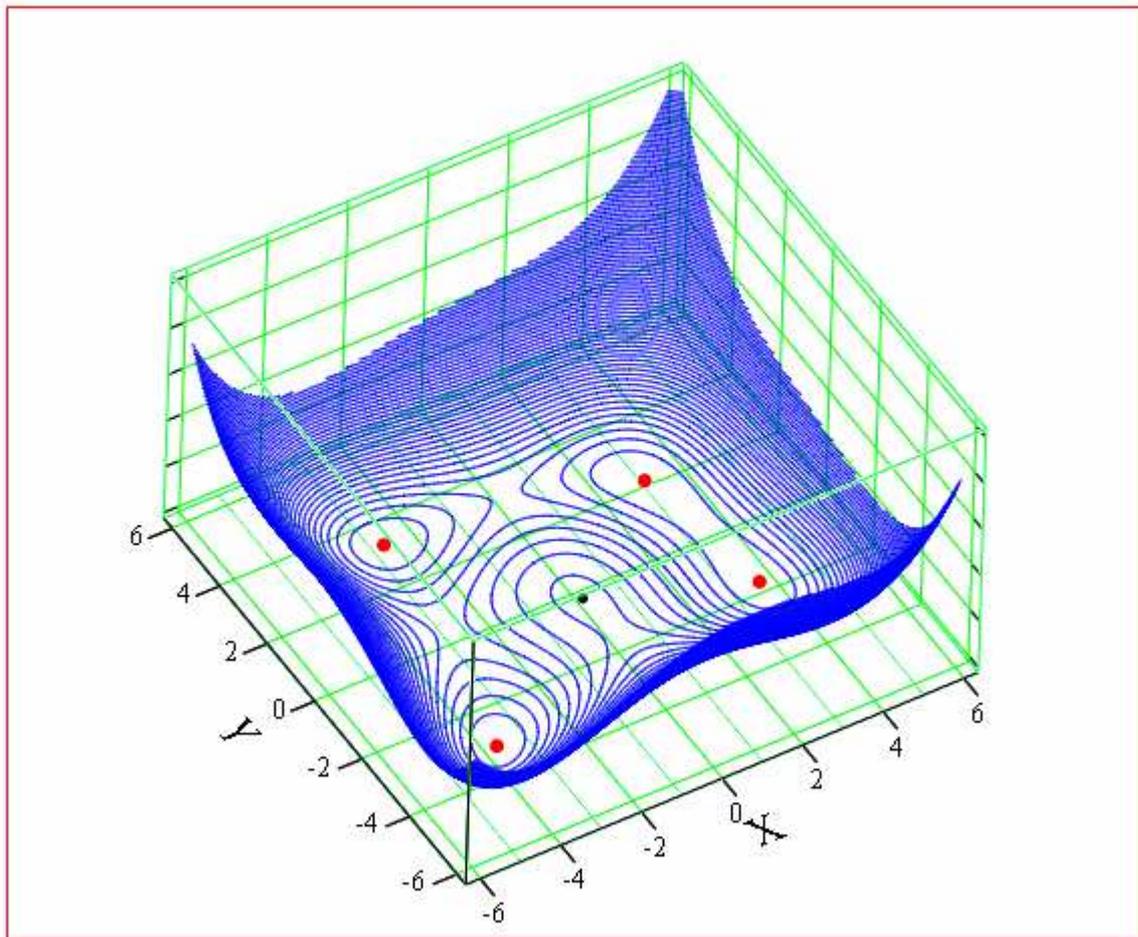
$YN2_0 := MAX_1$ - значение y-составляющей $YN2 = (-0.923)$



$(x_1, y_1, M), (XN1, YN1, NN1), (XN2, YN2, NN2)$

Рис. Б 6. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции Хаммельблау (продолжение)

Построить трехмерный график в виде поверхности и нанести стационарные точки (минимумы и максимумы)



$(x_1, y_1, M), (XN1, YN1, NN1), (XN2, YN2, NN2)$

Рис. Б 6. Листинг программы поиска безусловного экстремума функции Хаммельблау (окончание)

ПРИЛОЖЕНИЕ В

ЛИСТИНГИ ПРИМЕРОВ В MATHCAD 15

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Пример 3.1. Найти коэффициенты полинома второй степени методом наименьших квадратов.

Исходные данные для аппроксимации:

$$x := \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \quad - \text{ экспериментальные значения аргумента}$$

$$y := \begin{pmatrix} 10 \\ 12 \\ 14 \\ 17 \end{pmatrix} \quad - \text{ экспериментальные значения функции}$$

Степень полинома:

$$d := 2$$

1. Вычисление коэффициентов с использованием встроенных функций `regress` и `interp`

1.1. Вычисление коэффициентов полинома с помощью функции `regress`. В первом поле функции `regress` указываются значения аргумента; во втором - значения функции; в третьем - степень аппроксимирующего полинома. Значения аргумента x должны быть расположены в порядке возрастания.

На выходе: вектор. Первые три значения этого вектора являются служебными значениями пакета MathCad. Коэффициенты полинома расположены с четвертой строки, начиная со свободного члена, в порядке возрастания степеней.

$$C_1 := \text{regress}(x, y, d) \quad C_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 2 \\ 8.75 \\ 1.05 \\ 0.25 \end{pmatrix}$$

Рис. В 1. Листинг программы поиска коэффициентов функции одной переменной

1.2. Определение аппроксимирующей зависимости с помощью функции `interp`

В первом поле функции `interp` указывается вектор, полученный с помощью функции `regress`; во втором - значения аргумента; в третьем - значения функции; в четвертом - переменная, от которой зависит функция аппроксимации. Имя переменной не должно совпадать ни с одним из имен, указанных в первых трех полях.

$$f_1(t) := \text{interp}(C_1, x, y, t)$$

1.3. Определение аппроксимирующей зависимости в явном виде

$$f_2(t) := C_13 + C_14 \cdot t + C_15 \cdot t^2$$

1.4. Расчет значений аппроксимирующих функций в экспериментальных точках

$$\vec{f_1(x)} = \begin{pmatrix} 10.05 \\ 11.85 \\ 14.15 \\ 16.95 \end{pmatrix} \quad \vec{f_2(x)} = \begin{pmatrix} 10.05 \\ 11.85 \\ 14.15 \\ 16.95 \end{pmatrix}$$

Вывод. Функции, определенные с помощью `interp` и в явном виде, равнозначны.

2. Вычисление коэффициентов с использованием блока `Given-Find`

2.1. Аппроксимирующая функция

Функция зависит от переменной x и искомым коэффициентов D_0 , D_1 и D_2 .

$$f_3(x, D_0, D_1, D_2) := D_0 + D_1 \cdot x + D_2 \cdot x^2$$

2.2. Функция вычисления суммы квадратов разностей между аппроксимирующей функцией и экспериментальными значениями y

$$F(x, y, D_0, D_1, D_2) := \sum_{k=0}^{\text{last}(x)} (f_3(x_k, D_0, D_1, D_2) - y_k)^2$$

Рис. В 1. Листинг программы поиска коэффициентов функции одной переменной (продолжение)

2.3. Символьный расчет частных производных функции $F(x, y, D_0, D_1, D_2)$ по D_0 , D_1 и D_2

$$\frac{d}{dD_0} F(x, y, D_0, D_1, D_2) \rightarrow 8 \cdot D_0 + 20 \cdot D_1 + 60 \cdot D_2 - 106$$

$$\frac{d}{dD_1} F(x, y, D_0, D_1, D_2) \rightarrow 20 \cdot D_0 + 60 \cdot D_1 + 200 \cdot D_2 - 288$$

$$\frac{d}{dD_2} F(x, y, D_0, D_1, D_2) \rightarrow 60 \cdot D_0 + 200 \cdot D_1 + 708 \cdot D_2 - 912$$

2.4. Вычисление коэффициентов с помощью блока Given-Find
СИМВОЛЬНЫМ СПОСОБОМ

Given

$$\frac{d}{dD_0} F(x, y, D_0, D_1, D_2) = 0$$

$$\frac{d}{dD_1} F(x, y, D_0, D_1, D_2) = 0$$

$$\frac{d}{dD_2} F(x, y, D_0, D_1, D_2) = 0$$

C_3 := Find(D_0, D_1, D_2)

$$C_3 \text{ float, 3} \rightarrow \begin{pmatrix} 8.75 \\ 1.05 \\ 0.25 \end{pmatrix}$$

Рис. В 1. Листинг программы поиска коэффициентов функции одной переменной (продолжение)

2.5. Вычисление коэффициентов с помощью блока Given-Find численным способом

Для расчета численным способом перед блоком Given-Find необходимо задать начальные приближения искомых коэффициентов D_0 , D_1 и D_2 .

$D_0 := 1$ $D_1 := 1$ $D_2 := 1$

Given

$$\frac{d}{dD_0} F(x, y, D_0, D_1, D_2) = 0$$

$$\frac{d}{dD_1} F(x, y, D_0, D_1, D_2) = 0$$

$$\frac{d}{dD_2} F(x, y, D_0, D_1, D_2) = 0$$

$C_4 := \text{Find}(D_0, D_1, D_2)$

$$C_4 = \begin{pmatrix} 8.75 \\ 1.05 \\ 0.25 \end{pmatrix}$$

Вывод. Коэффициенты аппроксимирующей функции, найденные символьным и численным методами, совпадают.

Рис. В 1. Листинг программы поиска коэффициентов функции одной переменной (продолжение)

3. Вычисление коэффициентов с помощью пользовательской функции

3.1. Вычисление коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений методом наименьших квадратов с помощью функции $MNK(x, y, d)$

На входе: x, y - экспериментальные значения; d - степень полинома.

На выходе: вектор из двух строк. В первой строке содержится матрица коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений, во второй - вектор правых частей.

Загрузка файла с функцией $MNK(x, y, d)$

 Ссылка: C:\Аналитические методы\MNK\MNK.xmcd

Результат расчета пользовательской функции $MNK(x, y, d)$

$$MNK(x, y, d) = \begin{pmatrix} \{3,3\} \\ \{3,1\} \end{pmatrix}$$

Матрица коэффициентов

$$A := MNK(x, y, d)_0$$

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 10 & 30 \\ 10 & 30 & 100 \\ 30 & 100 & 354 \end{pmatrix}$$

Вектор правых частей

$$B := MNK(x, y, d)_1$$

$$B = \begin{pmatrix} 53 \\ 144 \\ 456 \end{pmatrix}$$

Рис. В 1. Листинг программы поиска коэффициентов функции одной переменной (продолжение)

3.2. Реализация прямого хода метода Гаусса с помощью пользовательской функции SLAU_1(A,B)

На входе: A - матрица коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений; B - вектор правых частей.

На выходе: вектор из двух строк. В первой строке содержится матрица коэффициентов системы уравнений, приведенная к треугольному виду; во второй строке - вектор правых частей новой системы уравнений.

Загрузка файла с пользовательскими функциями SLAU_1(A,B) и SLAU_2(C,D)

☞ Ссылка: C:\Аналитические методы\МНК\Slau.xmcd

Результат расчета пользовательской функции SLAU_1(A,B)

$$SLAU_1(A,B) = \begin{pmatrix} \{3,3\} \\ \{3,1\} \end{pmatrix}$$

Матрица коэффициентов

Вектор правых частей

$$C := SLAU_1(A,B)_0$$

$$D := SLAU_1(A,B)_1$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2.5 & 7.5 \\ 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} 13.25 \\ 2.3 \\ 0.25 \end{pmatrix}$$

3.3. Реализация обратного хода метода Гаусса с помощью пользовательской функции SLAU_2(C,D)

На входе: C - матрица коэффициентов системы уравнений, приведенная к треугольному виду; D - вектор правых частей.

На выходе: вектор с решением системы линейных алгебраических уравнений. Найденные неизвестные также являются искомыми коэффициентами аппроксимирующей функции. В первой строке расположен свободный член. В остальных строках коэффициенты в порядке возрастания степеней.

$$C_5 := SLAU_2(C,D) \quad C_5 = \begin{pmatrix} 8.75 \\ 1.05 \\ 0.25 \end{pmatrix}$$

Рис. В 1. Листинг программы поиска коэффициентов функции одной переменной (продолжение)

4. Решение системы линейных алгебраических уравнений методом обратной матрицы

Система линейных алгебраических уравнений может быть записана в матричном виде $A^{-1} X = B$. Отсюда $X = A^{-1} B$.

$$C_6 := A^{-1} \cdot B \quad C_6 = \begin{pmatrix} 8.75 \\ 1.05 \\ 0.25 \end{pmatrix}$$

5. Решение системы линейных алгебраических уравнений с помощью функции `lsolve`

$$C_7 := \text{lsolve}(A, B) \quad C_7 = \begin{pmatrix} 8.75 \\ 1.05 \\ 0.25 \end{pmatrix}$$

6. Построение графика

`t := 0, 0.1.. 5` - дискретный аргумент

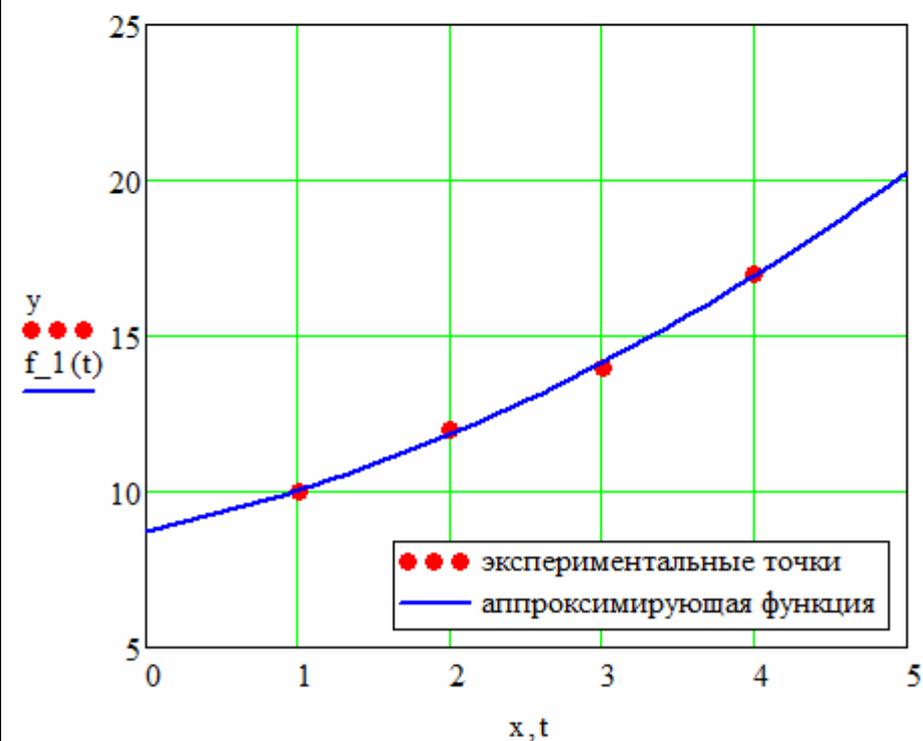


Рис. В 1. Листинг программы поиска коэффициентов функции одной переменной (продолжение)

7. Оценка точности регрессионной модели

7.1. Абсолютная погрешность

$$\Delta y := \overrightarrow{(f_1(x) - y)} \quad \Delta y = \begin{pmatrix} 0.05 \\ -0.15 \\ 0.15 \\ -0.05 \end{pmatrix}$$

7.2. Относительная погрешность

$$dy := \overrightarrow{\left(\frac{f_1(x) - y}{f_1(x)} \cdot 100 \right)} \quad dy = \begin{pmatrix} 0.498 \\ -1.266 \\ 1.06 \\ -0.295 \end{pmatrix}$$

7.3. Индекс детерминации

Среднее арифметическое значений y :

$$y_s := \frac{\sum y}{\text{длина}(y)} \quad y_s = 13.25$$

Индекс детерминации:

$$R_2 := 1 - \frac{\sum_{i=0}^{\text{last}(x)} (y_i - f_1(x_i))^2}{\sum_{i=0}^{\text{last}(x)} (y_i - y_s)^2} \quad R_2 = 0.99813$$

Рис. В 1. Листинг программы поиска коэффициентов функции одной переменной (окончание)

Функция, реализующая вычисление коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений методом наименьших квадратов

На входе: X - вектор с экспериментальными значениями аргумента;
Y - вектор с экспериментальными значениями функции; d - степень полинома.

На выходе: вектор из двух строк. В первой строке вектора содержится матрица коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений; во второй - вектор правых частей системы.

```
MNK(X, Y, d) := | B ← 0
                  | BB ← 0
                  | AA ← 0
                  | A ← 0
                  | for k ∈ 0.. d
                  |   for i ∈ 0.. d
                  |     for j ∈ 0.. last(X)
                  |       AA ← AA + (Xj)i · (Xj)k
                  |     Ak,i ← AA
                  |     AA ← 0
                  |   for k ∈ 0.. d
                  |     for j ∈ 0.. last(X)
                  |       BB ← BB + Yj · (Xj)k
                  |     Bk ← BB
                  |     BB ← 0
                  | C0 ← A
                  | C1 ← B
                  | C
```

Рис. В 2. Листинг программы вычисления коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений методом наименьших квадратов

Нумерацию строк и столбцов массива устанавливаем с нуля $ORIGIN := 0$

Функция, реализующая прямой ход метода Гаусса

На входе: A - матрица с коэффициентами системы уравнений;

B - вектор правых частей этой системы.

На выходе: вектор из двух строк. В первой строке содержится матрица коэффициентов, приведенная к треугольному виду; во второй - вектор правых частей этой системы.

```

SLAU_1(A,B) :=
  for n ∈ 0..last(A<0>)
    for i ∈ n..last(A<0>)
      for j ∈ n..last(A<0>)
        AAi,j ←  $\frac{A_{i,j}}{A_{i,n}}$ 
        AAi,j ← AAi,j - AAn,j if i > n
        BBi ←  $\frac{B_i}{A_{i,n}}$ 
        BBi ← BBi - BBn if i > n
      A ← AA, B ← BB
    C0 ← A, C1 ← B
  C
  
```

Функция, реализующая обратный ход метода Гаусса

На входе: A - матрица с коэффициентами системы уравнений, приведенная к треугольному виду; B - вектор правых частей этой системы.

На выходе: вектор с неизвестными этой системы.

```

SLAU_2(A,B) :=
  C ← 0, Xlast(B) ← 0
  for i ∈ last(X)..0
    for j ∈ last(X)..0
      C ← C + Ai,j·Xj if j ≠ i
    Xi ← Bi - C, C ← 0
  X
  
```

Рис. В 3. Листинг программы решения системы линейных алгебраических уравнений методом Гаусса

Пример 3.2. Построить регрессионные модели зависимости титруемой кислотности от продолжительности сквашивания и зависимости титруемой кислотности от продолжительности сквашивания и соотношения СОМ и ИСБ.

Экспериментальные данные

Продолжительность сквашивания	Кислотность смеси	Доля СОМ в смеси	Вес точек
-------------------------------	-------------------	------------------	-----------

Соотношение СОМ и ИСБ 75:25

$t_1 :=$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1.5 \\ 2 \\ 2.5 \\ 3 \\ 3.5 \\ 4 \\ 4.5 \\ 5 \end{pmatrix}$	$T_1 :=$	$\begin{pmatrix} 12 \\ 15 \\ 17 \\ 21 \\ 24 \\ 30 \\ 36 \\ 43 \\ 49 \\ 54 \end{pmatrix}$	$n_{\text{COM}_1} :=$	$\begin{pmatrix} 0.75 \\ 0.75 \\ 0.75 \\ 0.75 \\ 0.75 \\ 0.75 \\ 0.75 \\ 0.75 \\ 0.75 \\ 0.75 \end{pmatrix}$	$W_{11} :=$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
----------	--	----------	--	-----------------------	--	-------------	--

Соотношение СОМ и ИСБ 50:50

$t_2 :=$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1.5 \\ 2 \\ 2.5 \\ 3 \\ 3.5 \\ 4 \\ 4.5 \\ 5 \end{pmatrix}$	$T_2 :=$	$\begin{pmatrix} 10 \\ 13 \\ 14 \\ 17 \\ 19 \\ 23 \\ 29 \\ 34 \\ 39 \\ 39 \end{pmatrix}$	$n_{\text{COM}_2} :=$	$\begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix}$	$W_{12} :=$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
----------	--	----------	--	-----------------------	--	-------------	--

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных

Соотношение СОМ и ИСБ 25:75

$$t_3 := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1.5 \\ 2 \\ 2.5 \\ 3 \\ 3.5 \\ 4 \\ 4.5 \\ 5 \end{pmatrix} \quad T_3 := \begin{pmatrix} 8 \\ 10 \\ 13 \\ 16 \\ 18 \\ 23 \\ 28 \\ 30 \\ 31 \\ 31 \end{pmatrix} \quad n_{\text{COM}_3} := \begin{pmatrix} 0.25 \\ 0.25 \\ 0.25 \\ 0.25 \\ 0.25 \\ 0.25 \\ 0.25 \\ 0.25 \\ 0.25 \\ 0.25 \end{pmatrix} \quad W_{13} := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

В качестве аргументов выбраны данные о продолжительности сквашивания времени и доле СОМ в смеси. Веса всех точек равны единице для реализации метода наименьших квадратов.

Степень полинома

$$d := 3$$

1. Одномерная аппроксимация экспериментальных данных

1.1. Вычисление коэффициентов аппроксимирующих функций с помощью встроенной функции regress

Соотношение СОМ и ИСБ 75:25

$$C_1 := \text{submatrix}(\text{regress}(t_1, T_1, d), 3, \text{last}(\text{regress}(t_1, T_1, d)), 0, 0)$$

$$C_1 = \begin{pmatrix} 12.333 \\ -0.841 \\ 2.927 \\ -0.213 \end{pmatrix}$$

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

Соотношение СОМ и ИСБ 50:50

$C_2 := \text{submatrix}(\text{regress}(t_2, T_2, d), 3, \text{last}(\text{regress}(t_2, T_2, d)), 0, 0)$

$$C_2 = \begin{pmatrix} 10.641 \\ -1.878 \\ 3.066 \\ -0.299 \end{pmatrix}$$

Соотношение СОМ и ИСБ 25:75

$C_3 := \text{submatrix}(\text{regress}(t_3, T_3, d), 3, \text{last}(\text{regress}(t_3, T_3, d)), 0, 0)$

$$C_3 = \begin{pmatrix} 8.23 \\ -1.89 \\ 3.859 \\ -0.513 \end{pmatrix}$$

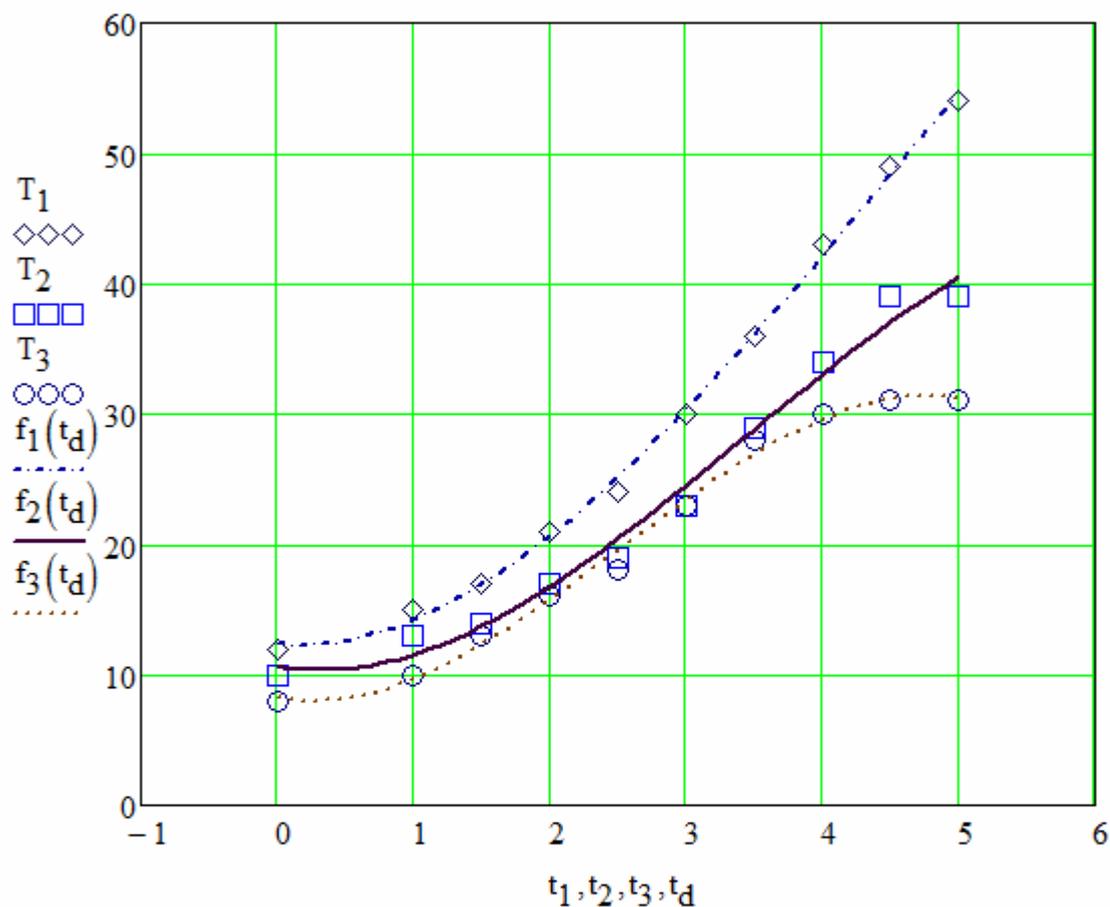
1.2. Функции зависимости титруемой кислотности от продолжительности сквашивания

	Соотношение СОМ и ИСБ
$f_1(t) := \sum_{i=0}^d (C_1 \cdot t^i)$	75:25
$f_2(t) := \sum_{i=0}^d (C_2 \cdot t^i)$	50:50
$f_3(t) := \sum_{i=0}^d (C_3 \cdot t^i)$	25:75

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

1.3. Построение графика с аппроксимирующими функциями и экспериментальными данными

$t_d := 0, 0.1 \dots 5$ - дискретный аргумент



2. Двухмерная аппроксимация экспериментальных данных

2.1. Подготовка экспериментальных данных

Необходимо объединить все экспериментальные данные для каждой измеренной величины в один вектор.

Объединение в один вектор данных о продолжительности сквашивания

```
t := stack(t1, t2, t3)
```

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

Объединение в один столбец данных о доле COM

$$n_{\text{COM}} := \text{stack}(n_{\text{COM}_1}, n_{\text{COM}_2}, n_{\text{COM}_3})$$

Объединение в один столбец данных о титруемой кислотности

$$T := \text{stack}(T_1, T_2, T_3)$$

Объединение в один столбец данных о весе экспериментальных точек

$$W_1 := \text{stack}(W_{11}, W_{12}, W_{13})$$

t =	
	0
0	0
1	1
2	1.5
3	2
4	2.5
5	3
6	3.5
7	4
8	4.5
9	5
10	0
11	1
12	1.5
13	2
14	2.5
15	...

n _{COM} =	
	0
0	0.75
1	0.75
2	0.75
3	0.75
4	0.75
5	0.75
6	0.75
7	0.75
8	0.75
9	0.75
10	0.5
11	0.5
12	0.5
13	0.5
14	0.5
15	...

T =	
	0
0	12
1	15
2	17
3	21
4	24
5	30
6	36
7	43
8	49
9	54
10	10
11	13
12	14
13	17
14	19
15	...

W ₁ =	
	0
0	1
1	1
2	1
3	1
4	1
5	1
6	1
7	1
8	1
9	1
10	1
11	1
12	1
13	1
14	1
15	...

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

Необходимо объединить в матрицу из двух столбцов данные о экспериментальных значениях аргументов. В первом столбце матрицы содержатся данные о продолжительности сквашивания, во втором - о доле СОМ в смеси.

`t_n := augment(t, nСОМ)`

`t_n =`

	0	1
0	0	0.75
1	1	0.75
2	1.5	0.75
3	2	0.75
4	2.5	0.75
5	3	0.75
6	3.5	0.75
7	4	0.75
8	4.5	0.75
9	5	0.75
10	0	0.5
11	1	0.5
12	1.5	...

2.2. Аппроксимация с помощью встроенных функций

2.2.1. Вычисление коэффициентов аппроксимирующей функции с помощью встроенной функции regress

`D := regress(t_n, T, d)`

`D =`

	0
0	3
1	3
2	3
3	10.216
4	139.384
5	-208.66
6	106.028
7	-16.521
8	2.605
9	-7.888
10	3.744
11	1.982
12	-0.342

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

2.2.2. Определение аппроксимирующей зависимости с помощью функции `interp`

В первом поле функции `interp` указывается вектор, полученный с помощью функции `regress`; во втором - значения всех аргументов, объединенные в одну матрицу; в третьем - значения функции; в четвертом - вектор с переменными, от которых зависит функция аппроксимации. Имена переменных не должны совпадать ни с одним из имен, указанных в первых трех полях.

$$f(t_d, n_d) := \text{interp} \left[D, t_n, T, \begin{pmatrix} t_d \\ n_d \end{pmatrix} \right]$$

2.2.3. Построение графика с аппроксимирующей функцией и экспериментальными данными

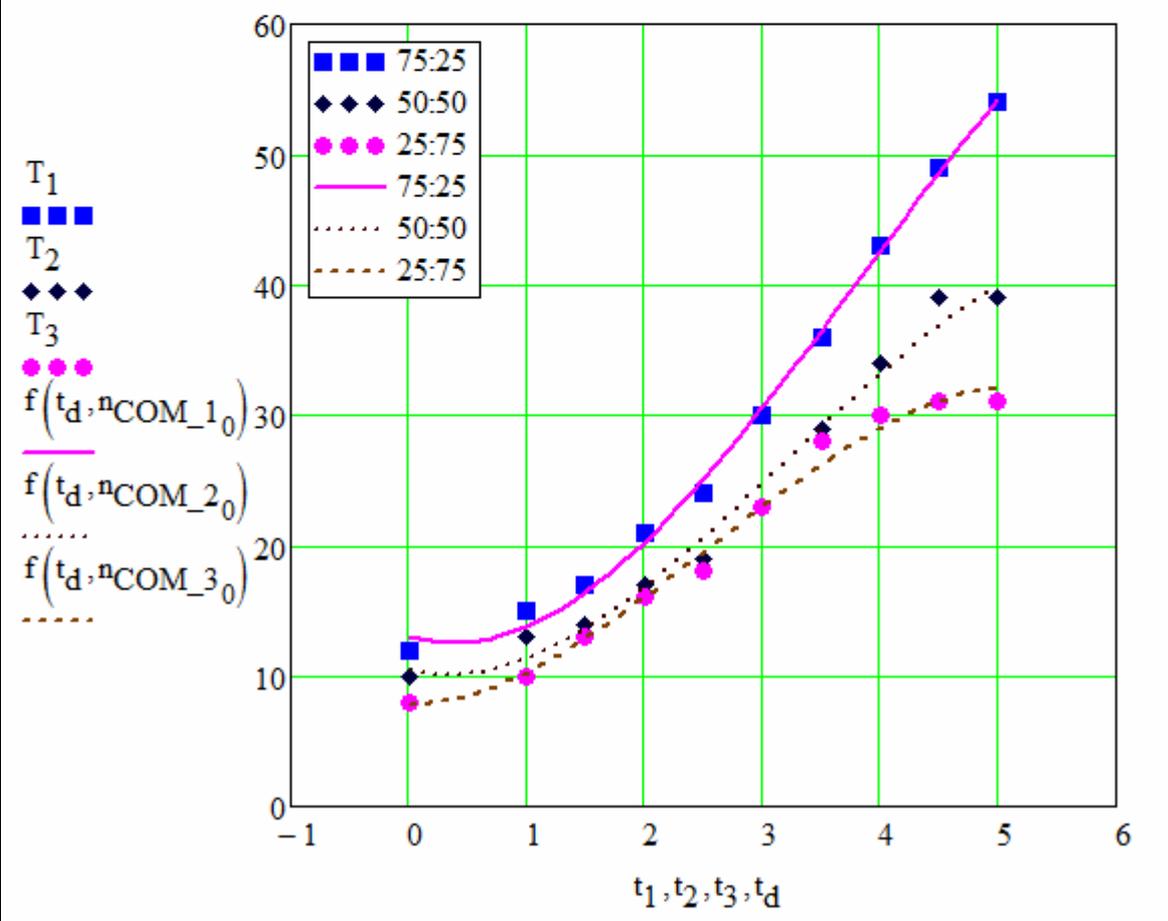


Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

2.2.4. Подготовка данных с помощью функции CreateMesh

В первое поле записывается имя функции, значения которой необходимо рассчитать (функция должна зависеть от двух переменных; имя функции записывается без указания в скобках переменных, от которых она зависит); во второе - начальное значение первой переменной; в третье - конечное значение первой переменной; в четвертое - начальное значение второй переменной; в пятое - конечное значение второй переменной; в шестое - количество рассчитываемых значений первой переменной (m); в седьмое - количество рассчитываемых значений второй переменной (n). Количество рассчитываемых значений можно не указывать, по умолчанию оно равно двадцати.

На выходе: матрица из одного элемента, в котором содержится вектор из трех элементов. В первой строке вектора находится матрица со значениями первой переменной; во второй - матрица со значениями второй переменной; в третьей - матрица с расчетными значениями функции. Размер всех трех матриц mxn.

$F := \text{CreateMesh}(f, 0, 5, 0.25, 0.75, 25, 30)$

$$F = (\{3,1\}) \quad F_0 = \begin{pmatrix} \{25,30\} \\ \{25,30\} \\ \{25,30\} \end{pmatrix}$$

Матрица со значениями первой переменной

$$(F_0)_0 =$$

	0	1	2	3	4	5	6	7	8
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0.208	0.208	0.208	0.208	0.208	0.208	0.208	0.208	0.208
2	0.417	0.417	0.417	0.417	0.417	0.417	0.417	0.417	0.417
3	0.625	0.625	0.625	0.625	0.625	0.625	0.625	0.625	0.625
4	0.833	0.833	0.833	0.833	0.833	0.833	0.833	0.833	0.833
5	1.042	1.042	1.042	1.042	1.042	1.042	1.042	1.042	1.042
6	1.25	1.25	1.25	1.25	1.25	1.25	1.25	1.25	1.25
7	1.458	1.458	1.458	1.458	1.458	1.458	1.458	1.458	1.458
8	1.667	1.667	1.667	1.667	1.667	1.667	1.667	1.667	1.667
9	1.875	1.875	1.875	1.875	1.875	1.875	1.875	1.875	1.875
10	2.083	2.083	2.083	2.083	2.083	2.083	2.083	2.083	2.083
11	2.292	2.292	2.292	2.292	2.292	2.292	2.292	2.292	...

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

Матрица со значениями второй переменной

$$(F_0)_1 =$$

	0	1	2	3	4	5	6	7
0	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
1	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
2	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
3	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
4	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
5	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
6	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
7	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
8	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
9	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
10	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
11	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
12	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
13	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	0.371
14	0.25	0.267	0.284	0.302	0.319	0.336	0.353	...

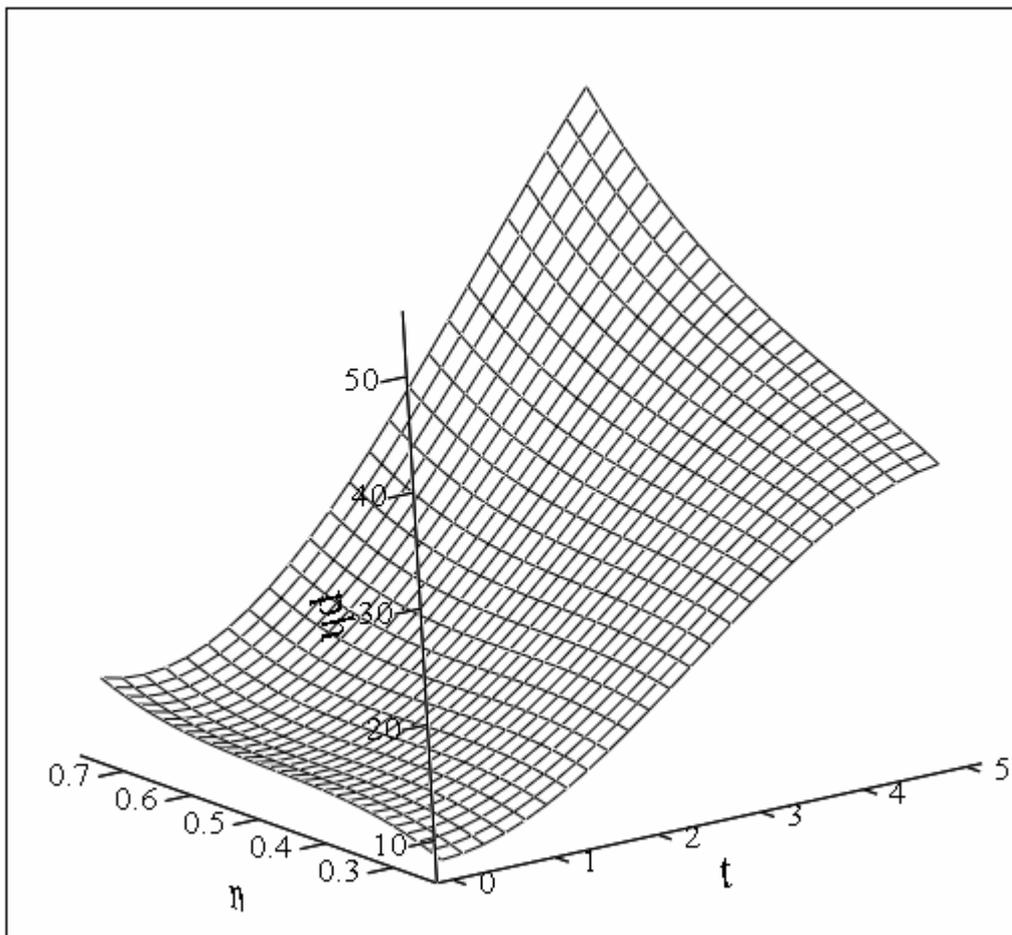
Матрица с рассчитанными значениями функции

$$(F_0)_2 =$$

	0	1	2	3	4	5	6
0	7.756	8.206	8.598	8.936	9.226	9.471	9.675
1	7.92	8.331	8.686	8.989	9.244	9.455	9.628
2	8.294	8.67	8.992	9.263	9.487	9.669	9.813
3	8.859	9.205	9.497	9.74	9.937	10.094	10.214
4	9.597	9.917	10.183	10.402	10.576	10.711	10.811
5	10.49	10.786	11.032	11.23	11.386	11.503	11.586
6	11.518	11.796	12.024	12.206	12.346	12.449	12.52
7	12.664	12.927	13.141	13.31	13.439	13.533	13.594
8	13.909	14.161	14.365	14.525	14.647	14.734	14.791
9	15.234	15.478	15.676	15.832	15.951	16.036	16.092
10	16.621	16.862	17.058	17.213	17.332	17.419	17.478
11	18.051	18.292	18.49	18.648	18.772	18.864	18.93
12	19.505	19.751	19.955	20.12	20.252	20.354	20.43
13	20.966	21.22	21.433	21.61	21.753	21.869	21.96
14	22.414	22.681	22.908	23.099	23.258	23.391	...

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

2.2.5. Построение поверхности аппроксимирующей функции



F

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

2.3. Аппроксимация с помощью пользовательской функции методом наименьших квадратов

2.3.1. Степени аппроксимирующего полинома

В первом столбце содержатся степени первой переменной; во втором - степени второй переменной

$$I := \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 3 \\ 0 & 2 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 2 & 0 \\ 3 & 0 \end{pmatrix}$$

2.3.2. Вычисление коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений методом наименьших квадратов с помощью функции $MNK_2(t, n_{COM}, T, W_1, I)$

На входе: t - вектор с экспериментальными значениями первого аргумента; n_{COM} - вектор с экспериментальными значениями второго аргумента; T - вектор с экспериментальными значениями функции; W_1 - вектор со значениями веса каждой точки; I - матрица из двух столбцов, в первом столбце содержатся степени первой переменной, во втором - степени второй переменной.

На выходе: вектор из двух строк. В первой строке содержится матрица коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений, во второй - вектор правых частей.

Загрузка файла с функцией $MNK_2(t, n_{COM}, T, W_1, I)$

➔ Ссылка: C:\Аналитические методы\МНК\МНК_2.xmcd(R)

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

Результат расчета пользовательской функции $MNK_2(t, n_{COM}, T, W_1, I)$

$$MNK_2(t, n_{COM}, T, W_1, I) = \begin{pmatrix} \{10,10\} \\ \{10,1\} \end{pmatrix}$$

Матрица коэффициентов

$$A := MNK_2(t, n_{COM}, T, W_1, I)_0$$

	0	1	2	3	4	5
0	36.75	7.277	10.336	15.188	54	212.625
1	7.277	1.938	2.695	3.828	10.336	36.75
2	10.336	2.695	3.828	5.625	15.188	54
3	15.188	3.828	5.625	8.75	23.625	84
4	54	10.336	15.188	23.625	84	330.75
5	212.625	36.75	54	84	330.75	$1.385 \cdot 10^3$
6	23.625	5.625	8.75	15	40.5	144
7	84	15.188	23.625	40.5	144	567
8	330.75	54	84	144	567	$2.375 \cdot 10^3$
9	$1.385 \cdot 10^3$	212.625	330.75	567	$2.375 \cdot 10^3$...

Вектор правых частей

	0
0	815.438
1	159.859
2	241.563
3	396.25
4	$1.334 \cdot 10^3$
5	$5.235 \cdot 10^3$
6	746
7	$2.502 \cdot 10^3$
8	$9.779 \cdot 10^3$
9	$4.08 \cdot 10^4$

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

2.3.3. Реализация прямого хода метода Гаусса с помощью пользовательской функции SLAU_1(A,B)

Загрузка файла с пользовательскими функциями SLAU_1(A,B) и SLAU_2(C,D)

☞ Ссылка: C:\Аналитические методы\МНК\Slau.xmcd(R)

Результат расчета пользовательской функции SLAU_1(A,B)

$$SLAU_1(A,B) = \begin{pmatrix} \{10,10\} \\ \{10,1\} \end{pmatrix}$$

Матрица коэффициентов Вектор правых частей

C := SLAU_1(A,B)₀ D := SLAU_1(A,B)₁

C =

	0	1	2	3	4	5
0	1	0.198	0.281	0.413	1.469	5.786
1	0	1	1.304	1.65	-0.718	-10.765
2	0	0	1	3.756	6.173	15.649
3	0	0	0	1	2.7	9.6
4	0	0	0	0	1	5.143
5	0	0	0	0	0	1
6	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	0	...

D =

	0
0	22.189
1	-3.249
2	189.826
3	147.533
4	21.697
5	1.63
6	9.199
7	5.615
8	-0.569
9	-0.342

2.3.4. Реализация обратного хода метода Гаусса с помощью пользовательской функции SLAU_2(C,D)

C_{2_2} := SLAU_2(C,D)

C_{2_2} =

	0
0	10.216
1	130.451
2	-195.26
3	99.887
4	-16.521
5	2.605
6	-7.05
7	3.744
8	1.982
9	-0.342

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

2.3.5. Запись аппроксимирующей функции в явном виде

$$f_{-1}(t_d, n_d) := \sum_{i=0}^{\text{last}(I^{(0)})} \left(C_{2-2_i} \cdot t_d^{I_{i,0}} \cdot n_d^{I_{i,1}} \right)$$

2.3.6. Построение графика с аппроксимирующей функцией и экспериментальными данными

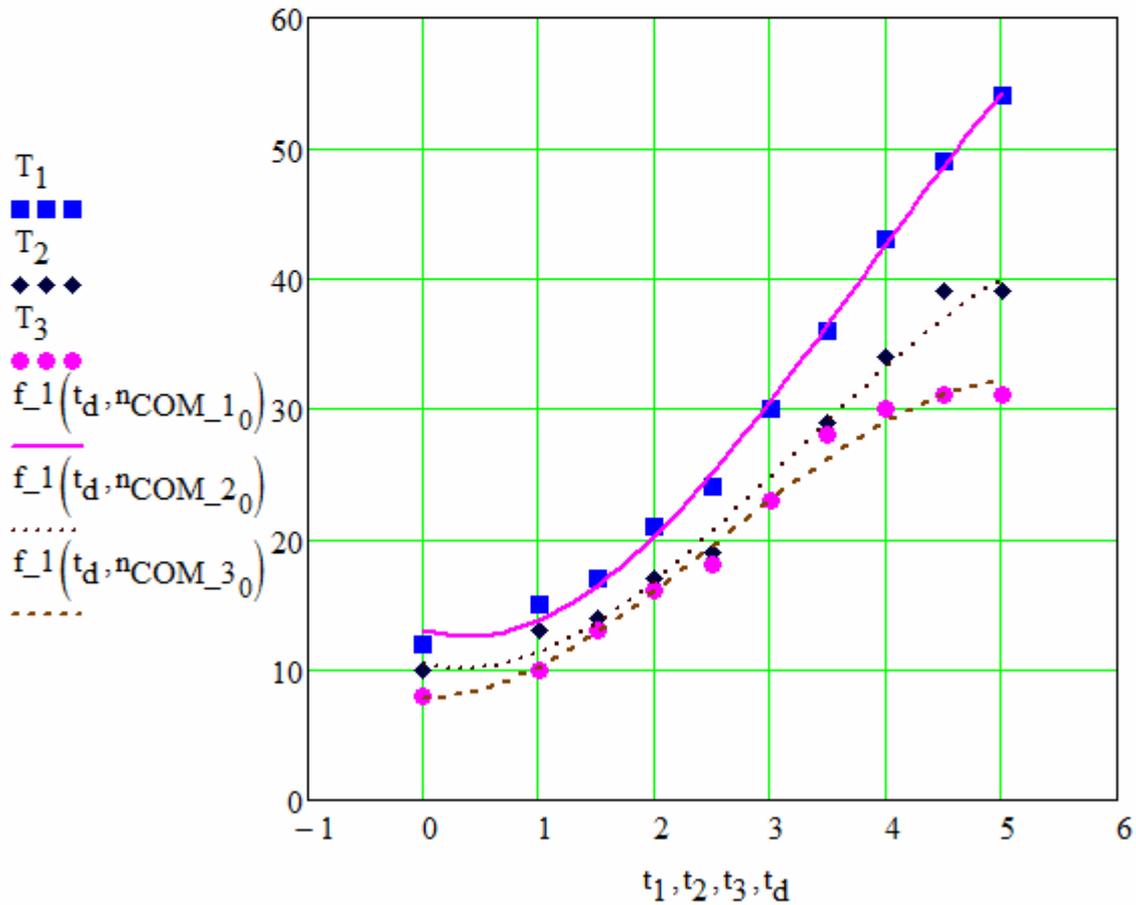


Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

2.4.4. Реализация прямого хода метода Гаусса с помощью пользовательской функции SLAU_1(A,B)

$$SLAU_1(A,B) = \begin{pmatrix} \{10,10\} \\ \{10,1\} \end{pmatrix}$$

Матрица коэффициентов Вектор правых частей

$$C := SLAU_1(A,B)_0 \qquad D := SLAU_1(A,B)_1$$

2.4.5. Реализация обратного хода метода Гаусса с помощью пользовательской функции SLAU_2(C,D)

$$C_{2_3} := SLAU_2(C,D)$$

$$C_{2_3} =$$

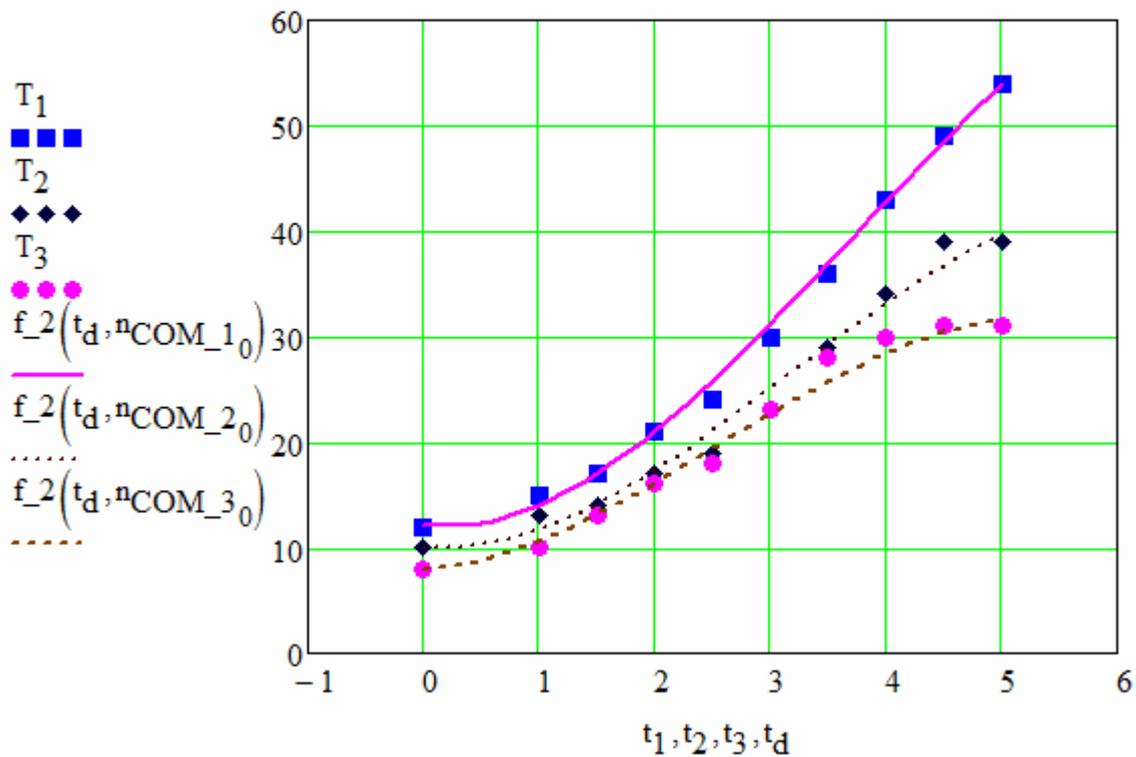
	0
0	9.754
1	-70.135
2	104.765
3	-39.33
4	-13.667
5	2.243
6	12.341
7	3.455
8	1.785
9	-0.307

2.4.6. Запись аппроксимирующей функции в явном виде

$$f_2(t_d, n_d) := \sum_{i=0}^{\text{last}(I^{(0)})} \left(C_{2_3}_i \cdot t_d^{I_{i,0}} \cdot n_d^{I_{i,1}} \right)$$

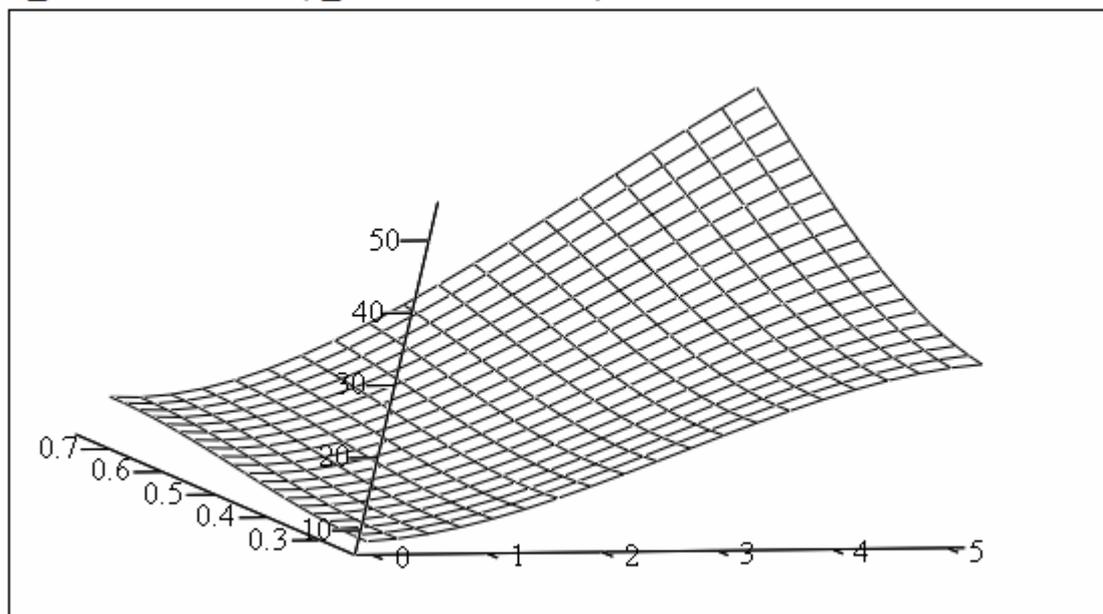
Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (продолжение)

2.4.7. Построение графика с аппроксимирующей функцией и экспериментальными данными



2.4.8. Построение поверхности аппроксимирующей функции

$F_2 := \text{CreateMesh}(f_2, 0, 5, 0.25, 0.75)$



F_2

Рис. В 4. Листинг программы поиска коэффициентов функции двух переменных (окончание)

Функция, реализующая вычисление коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений взвешенным методом наименьших квадратов
 На входе: X - вектор с экспериментальными значениями первого аргумента; Y - вектор с экспериментальными значениями второго аргумента; Z - вектор с экспериментальными значениями функции; W - вектор со значениями веса каждой точки; I - матрица из двух столбцов, в первом столбце содержатся степени первой переменной, во втором - степени второй переменной. На выходе: вектор из двух строк. В первой строке вектора содержится матрица коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений; во второй - вектор правых частей системы.

```

MNK_2(X,Y,Z,W,I) :=
    B ← 0, BB ← 0, AA ← 0, A ← 0
    for k ∈ 0..last(I<sup>0</sup>)
        for i ∈ 0..last(I<sup>0</sup>)
            for j ∈ 0..last(X)
                D ← (Xj)Ii,0 · (Yj)Ii,1
                F ← (Xj)Ik,0 · (Yj)Ik,1
                AA ← AA + D · F · Wj
            Ak,i ← AA
            AA ← 0
        for k ∈ 0..last(I<sup>0</sup>)
            for j ∈ 0..last(X)
                BB ← BB + Zj · [(Xj)Ik,0 · (Yj)Ik,1] · Wj
            Bk ← BB
            BB ← 0
    C0 ← A, C1 ← B
    C
    
```

Рис. В 5. Листинг программы вычисления коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений взвешенным методом наименьших квадратов

Пример 3.3. Аппроксимировать экспериментальные данные на жидкостной ветви линии фазового равновесия.

Нумерацию строк и столбцов массива устанавливаем с единицы

ORIGIN := 1

1. Исходные данные

Критическая температура, К: $T_c := 345.04$

Критическое давление, бар: $p_c := 26.4$

Критическая плотность, кг/м³: $\rho_c := 632.0$

Относительная температура: $t(T) := \frac{T}{T_c}$

Приведенная температура: $\tau(T) := \frac{T}{T_c} - 1$

Приведенная плотность: $\Delta\rho(\rho) := \frac{\rho}{\rho_c} - 1$

Критические индексы:

$\alpha := 0.14$ $\beta := 0.325$ $\gamma := 1.21$ $\Delta := 0.5$

$\delta := \frac{\gamma}{\beta} + 1$ $\delta = 4.723077$

$x_0 := 0.1097334210511261$

Степени: $s := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 5 \\ 7 \end{pmatrix}$

Количество коэффициентов: $m := \text{last}(s)$ $m = 5$

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия

2. Экспериментальные данные на жидкостной ветви линии фазового равновесия

Чтение данных о температуре, давлении и весе каждой точки на жидкостной ветви линии фазового равновесия из файла. Данные представлены в виде: в первой строке каждой серии эксперимента содержится информация об авторе эксперимента, во второй - количество экспериментальных точек, в первом столбце - температура, во втором - плотность, в третьем - вес точек.

```
M := READFILE("lin_g_r218_dat" ,"delimited")
```

M =

	1	2	3
1	"Brawn"	NaN	NaN
2	10	NaN	NaN
3	223.45	1.65	1
4	232.45	1.618	1
5	236.45	1.601	1
6	240.85	1.585	1
7	250.15	1.538	0
8	263.35	1.493	1
9	268.45	1.474	1
10	303.05	1.293	1
11	313.15	1.225	1
12	323.15	1.145	1
13	"Рябушева_1"	NaN	NaN
14	1	NaN	NaN
15	336.85	0.988	1
16	"Рябушева_2"	NaN	NaN
17	3	NaN	NaN
18	195.61	1.753	0.1
19	236.1	1.609	0.1
20	278.86	1.428	0.1
21	"Барышев"	NaN	NaN
22	23	NaN	...

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

3. Обработка массива экспериментальных данных

На выходе - вектор `Data_in`. Первая строка этого вектора содержит матрицу из двух столбцов в первом столбце, которого находится информация об авторе эксперимента, во втором - количество экспериментальных точек. Вторая строка вектора `Data_in` содержит вектор со значениями температуры, третья - плотности, четвертая - веса точек. Информация об экспериментальной температуре всех авторов объединена в один столбец. Аналогично представлены данные о плотности и весе точек. Т. к. данные о плотности в файле `lin_g_r218` представлены в г/см^3 , их необходимо умножить на 1000 для перевода в кг/м^3 .

```

Data_in := | j ← 1 , n ← 1 , k ← 1
           | while n < last(M<sup>1</sup>))
           |   Namek ← Mn,1 , NumPk ← Mn+1,1
           |   for i ∈ (n + 2) .. (n + NumPk + 1)
           |     | Tj ← Mi,1 , ρj ← Mi,2 · 1000 , Wesj ← Mi,3
           |     | j ← j + 1
           |   n ← n + NumPk + 2 , k ← k + 1
           | Inf ← augment(Name , NumP)
           | Out1 ← Inf , Out2 ← T
           | Out3 ← ρ , Out4 ← Wes
           | Out
Data_in = ( {7,2}
           {270,1}
           {270,1}
           {270,1} )
Data_in1 = ( "Brawn"      10
              "Рябушева_1"  1
              "Рябушева_2"  3
              "Барышев"    23
              "tab_new"    107
              "tab_new"    107
              "Defibaugh"  19 )
    
```

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

4. Выделение из переменной Data_in экспериментальной информации

Вектор с экспериментальными данными о температуре на жидкостной ветви линии фазового равновесия $T := \text{Data_in2}$

Вектор с экспериментальными данными о плотности на жидкостной ветви линии фазового равновесия $\rho := \text{Data_in3}$

Вектор с данными о весе каждой экспериментальной точки $W := \text{Data_in4}$

5. Аппроксимация взвешенным методом наименьших квадратов

5.1. Вычисление коэффициентов системы, составленной из уравнений частных производных функции суммы квадратов разностей расчетных и экспериментальных значений. Дифференцирование проводится по искомым коэффициентам аппроксимирующей функции

5.1.1. Коэффициенты уравнения частной производной по c_1

Коэффициент при c_1 :

$$A_{1,1} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^\delta \cdot W_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^\delta \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_2 :

$$A_{1,2} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2-\beta}} \cdot W_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^\delta \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_3 :

$$A_{1,3} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \cdot W_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^\delta \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_4 :

$$A_{1,4} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[\Delta\rho(\rho_i)^{s4} \cdot W_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^\delta \cdot T_c \right]$$

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

Коэффициент при c_5 :

$$A_{1,5} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[\Delta\rho(\rho_i)^{s_5} \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^\delta \cdot T_c \right]$$

Правая часть уравнения:

$$B_1 := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[T_i + x_0 \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{1}{\beta}} \cdot T_c - T_c \right] \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^\delta$$

5.1.2. Коэффициенты уравнения частной производной по c_2

Коэффициент при c_1 :

$$A_{2,1} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^\delta \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2-\beta}} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_2 :

$$A_{2,2} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2-\beta}} \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2-\beta}} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_3 :

$$A_{2,3} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2-\beta}} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_4 :

$$A_{2,4} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[\Delta\rho(\rho_i)^{s_4} \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2-\beta}} \cdot T_c \right]$$

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

Коэффициент при c_5 :

$$A_{2,5} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[\Delta\rho(\rho_i)^{s5} \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2\cdot\beta}} \cdot T_c \right]$$

Правая часть уравнения:

$$B_2 := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[\left[T_i + x_0 \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{1}{\beta}} \cdot T_c - T_c \right] \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2\cdot\beta}} \right]$$

5.1.3. Коэффициенты уравнения частной производной по c_3

Коэффициент при c_1 :

$$A_{3,1} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^\delta \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_2 :

$$A_{3,2} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2\cdot\beta}} \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_3 :

$$A_{3,3} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_4 :

$$A_{3,4} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[\Delta\rho(\rho_i)^{s4} \cdot w_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \cdot T_c \right]$$

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

Коэффициент при c_5 :

$$A_{3,5} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[\Delta\rho(\rho_i)^{s_5} \cdot W_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \cdot T_c \right]$$

Правая часть уравнения:

$$B_3 := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[\left[T_i + x_0 \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{1}{\beta}} \cdot T_c - T_c \right] \cdot W_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \right]$$

5.1.4. Коэффициенты уравнения частной производной по c_4

Коэффициент при c_1 :

$$A_{4,1} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta} \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s_4} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_2 :

$$A_{4,2} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2 \cdot \beta}} \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s_4} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_3 :

$$A_{4,3} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s_4} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_4 :

$$A_{4,4} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left(\Delta\rho(\rho_i)^{s_4} \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s_4} \cdot T_c \right)$$

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

Коэффициент при c_5 :

$$A_{4,5} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left(\Delta\rho(\rho_i)^{s5} \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s4} \cdot T_c \right)$$

Правая часть уравнения:

$$B_4 := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[\left[T_i + x_0 \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{1}{\beta}} \cdot T_c - T_c \right] \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s4} \right]$$

5.1.5. Коэффициенты уравнения частной производной по c_5

Коэффициент при c_1 :

$$A_{5,1} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta} \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s5} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_2 :

$$A_{5,2} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2-\beta}} \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s5} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_3 :

$$A_{5,3} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{\delta-\alpha}{\beta}} \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s5} \cdot T_c \right]$$

Коэффициент при c_4 :

$$A_{5,4} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left(\Delta\rho(\rho_i)^{s4} \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s5} \cdot T_c \right)$$

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

Коэффициент при c_5 :

$$A_{5,5} := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left(\Delta\rho(\rho_i)^{55} \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{55} \cdot T_c \right)$$

Правая часть уравнения:

$$B_5 := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[\left[T_i + x_0 \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{1}{\beta}} \cdot T_c - T_c \right] \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{55} \right]$$

5.1.6. Окончательный вид системы линейных алгебраических уравнений

Матрица коэффициентов:

$$A = \begin{pmatrix} 1.06 \times 10^7 & 9.882 \times 10^6 & 8.002 \times 10^6 & 1.272 \times 10^7 & 4.805 \times 10^7 \\ 9.882 \times 10^6 & 9.21 \times 10^6 & 7.46 \times 10^6 & 1.185 \times 10^7 & 4.47 \times 10^7 \\ 8.002 \times 10^6 & 7.46 \times 10^6 & 6.049 \times 10^6 & 9.588 \times 10^6 & 3.601 \times 10^7 \\ 1.272 \times 10^7 & 1.185 \times 10^7 & 9.588 \times 10^6 & 1.526 \times 10^7 & 5.787 \times 10^7 \\ 4.805 \times 10^7 & 4.47 \times 10^7 & 3.601 \times 10^7 & 5.787 \times 10^7 & 2.243 \times 10^8 \end{pmatrix}$$

Вектор правых частей:

$$B = \begin{pmatrix} 1.451 \times 10^5 \\ 1.352 \times 10^5 \\ 1.094 \times 10^5 \\ 1.741 \times 10^5 \\ 6.588 \times 10^5 \end{pmatrix}$$

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

5.2. Реализация прямого хода метода Гаусса с помощью пользовательской функции SLAU_1(A,B)

Загрузка файла с пользовательскими функциями SLAU_1(A,B) и SLAU_2(C,D)

☞ Ссылка: C:\Аналитические методы\МНК\Slau.xmcd

Результат расчета пользовательской функции SLAU_1(A,B)

$$\text{SLAU}_1(A,B) = \begin{pmatrix} \{5,5\} \\ \{5,1\} \end{pmatrix}$$

Матрица коэффициентов

Вектор правых частей

$$C := \text{SLAU}_1(A,B)_0$$

$$D := \text{SLAU}_1(A,B)_1$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0.932 & 0.755 & 1.199 & 4.531 \\ 0 & 1 & 3.331 & -3.204 & -85.285 \\ 0 & 0 & 1 & 1.077 & 152.186 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 468.988 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} 0.014 \\ -0.026 \\ -0.444 \\ 1.975 \\ -7.991 \times 10^{-3} \end{pmatrix}$$

5.3. Реализация обратного хода метода Гаусса с помощью пользовательской функции SLAU_2(C,D)

$$C_1 := \text{SLAU}_2(C,D) \quad C_1 = \begin{pmatrix} -35.908 \\ 35.586 \\ -5.391 \\ 5.723 \\ -7.991 \times 10^{-3} \end{pmatrix}$$

Нумерацию строк и столбцов массива устанавливаем с единицы, т. к. в файле Slau.xmcd переменная ORIGIN = 0.

ORIGIN := 1

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

6. Вычисление коэффициентов с помощью блока Given-Find

6.1. Уравнение жидкостной ветви линии насыщения для поиска коэффициентов

Функция зависит от неизвестных c_1, c_2, c_3, c_4, c_5 и плотности ρ .

$$T_1(\rho, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) := T_c \cdot \left[\begin{array}{l} 1 - x_0 \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\frac{1}{\beta}} + c_1 \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\delta} \dots \\ + c_2 \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\frac{3}{2 \cdot \beta}} + c_3 \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \dots \\ + c_4 \cdot \Delta\rho(\rho)^{s_4} + c_5 \cdot \Delta\rho(\rho)^{s_5} \end{array} \right]$$

6.2. Функция вычисления суммы квадратов отклонений между расчетными значениями температуры на жидкостной ветви линии фазового равновесия $T_1(\rho, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5)$ и экспериментальными значениями T

$$K_1(\rho, T, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[(T_1(\rho_i, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) - T_i)^2 \cdot W_i \right]$$

6.3. Вычисление частных производных функции $K_1(\rho, T, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5)$

Вспомогательная функция:

$$dT_1(\rho, T, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) := 2 \cdot T_c \cdot (T_1(\rho, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) - T)$$

Частная производная по c_1 :

$$dK_1(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[dT_1(\rho_i, T_i, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) \cdot W_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta} \right]$$

Частная производная по c_2 :

$$dK_2(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[dT_1(\rho_i, T_i, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) \cdot W_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\frac{3}{2 \cdot \beta}} \right]$$

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

Частная производная по c_3 :

$$dK_3(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left[dT_1(\rho_i, T_i, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) \cdot W_i \cdot (|\Delta\rho(\rho_i)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \right]$$

Частная производная по c_4 :

$$dK_4(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left(dT_1(\rho_i, T_i, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s_4} \right)$$

Частная производная по c_5 :

$$dK_5(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) := \sum_{i=1}^{\text{last}(T)} \left(dT_1(\rho_i, T_i, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) \cdot W_i \cdot \Delta\rho(\rho_i)^{s_5} \right)$$

6.4. Решение системы линейных алгебраических уравнений с помощью блока Given-Find

Начальные приближения неизвестных c_1, c_2, c_3, c_4, c_5

для поиска корней системы уравнений численным методом:

$$c_1 := 1 \quad c_2 := 2 \quad c_3 := 3 \quad c_4 := 4 \quad c_5 := 5$$

Given

$$dK_1(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) = 0$$

$$dK_2(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) = 0$$

$$dK_3(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) = 0$$

$$dK_4(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) = 0$$

$$dK_5(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5) = 0$$

$$C_4 := \text{Find}(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5)$$

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

$$C_{-4} = \begin{pmatrix} -35.944 \\ 35.62 \\ -5.396 \\ 5.729 \\ -8.004 \times 10^{-3} \end{pmatrix}$$

7. Уравнение жидкостной ветви линии фазового равновесия

$$T_s(\rho) := T_c \cdot \left[1 - x_0 \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\frac{1}{\beta}} + C_{-11} \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^\delta \dots \right. \\ \left. + C_{-12} \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\frac{3}{2-\beta}} + C_{-13} \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\delta - \frac{\alpha}{\beta}} \dots \right. \\ \left. + \sum_{i=4}^m (C_{-1i} \cdot \Delta\rho(\rho)^{s_i}) \right]$$

8. Уравнение первой производной жидкостной ветви линии фазового равновесия

$$dT_s(\rho) := \frac{T_c}{\rho_c} \cdot \left[\frac{-x_0}{\beta} \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\frac{1}{\beta}-1} + \delta \cdot C_{-11} \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\delta-1} \dots \right. \\ \left. + C_{-12} \cdot \frac{1+\Delta}{\beta} \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\frac{1+\Delta-\beta}{\beta}} \dots \right. \\ \left. + C_{-13} \cdot \left(\delta - \frac{\alpha}{\beta} \right) \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\frac{\gamma-\alpha}{\beta}} \dots \right. \\ \left. + \sum_{i=4}^m (s_i \cdot C_{-1i} \cdot \Delta\rho(\rho)^{s_i-1}) \right]$$

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

8. Уравнение второй производной жидкостной ветви линии фазового равновесия

$$d^2T_s(\rho) := \frac{T_c}{\rho_c^2} \cdot \left[\begin{aligned} & \frac{-x_0 \cdot (1 - \beta)}{\beta^2} \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\frac{1}{\beta}-2} \dots \\ & + \delta \cdot (\delta - 1) \cdot C_{-1_1} \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\delta-2} \dots \\ & + \frac{(1 + \Delta) \cdot (1 + \Delta - \beta)}{\beta^2} \cdot C_{-1_2} \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\frac{1+\Delta-2\cdot\beta}{\beta}} \dots \\ & + C_{-1_3} \cdot \frac{(\delta \cdot \beta - \alpha) \cdot (\gamma - \alpha)}{\beta^2} \cdot (|\Delta\rho(\rho)|)^{\frac{\gamma-\alpha-\beta}{\beta}} \dots \\ & + \sum_{i=4}^m \left[s_i \cdot (s_i - 1) \cdot C_{-1_i} \cdot \Delta\rho(\rho)^{s_i-2} \right] \end{aligned} \right]$$

9. Построение графиков функций

$$\rho_1 := \max(\rho), \max(\rho) - \frac{\max(\rho) - \rho_c}{100} \dots \rho_c \quad - \text{дискретный аргумент}$$

9.1. График уравнения жидкостной ветви линии фазового равновесия

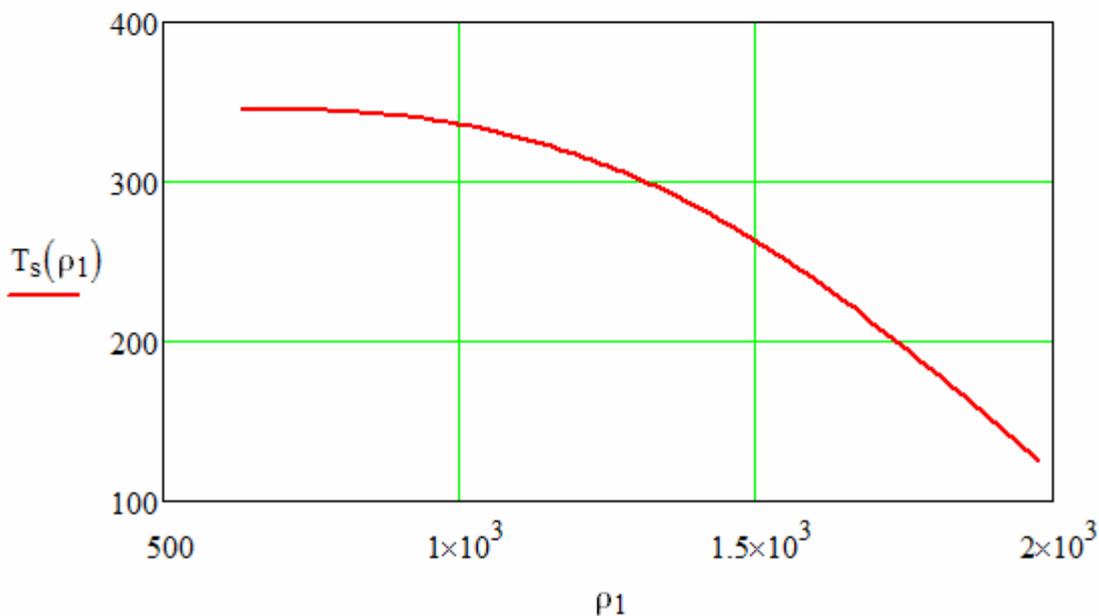
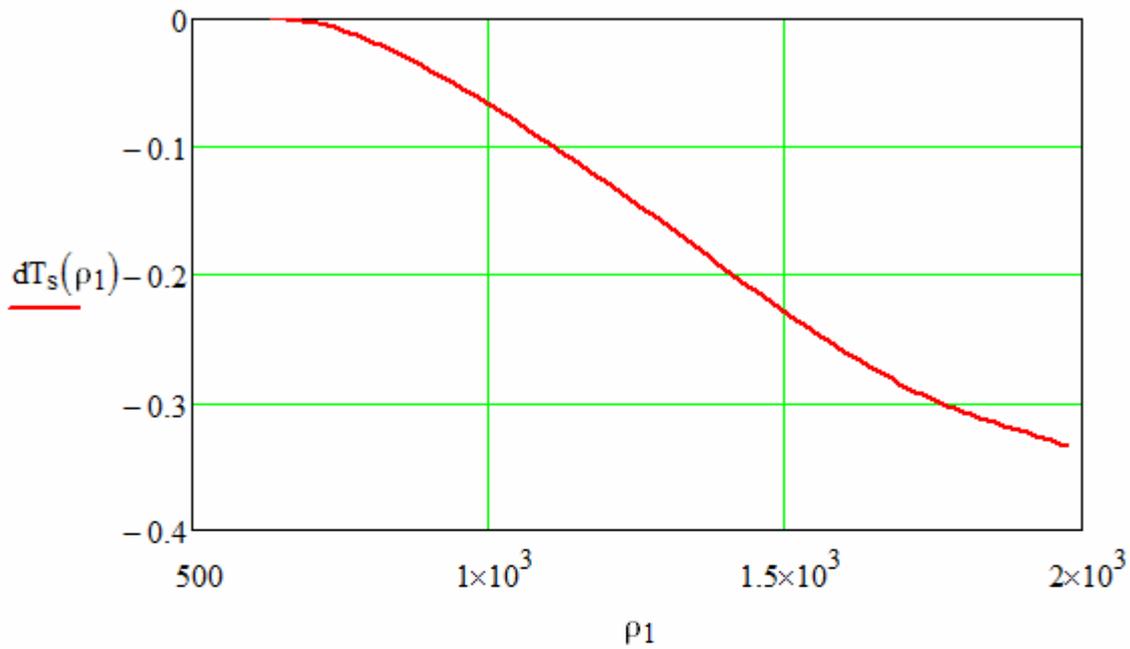


Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

9.2. График уравнения первой производной жидкостной ветви линии фазового равновесия



9.3. График уравнения второй производной жидкостной ветви линии фазового равновесия

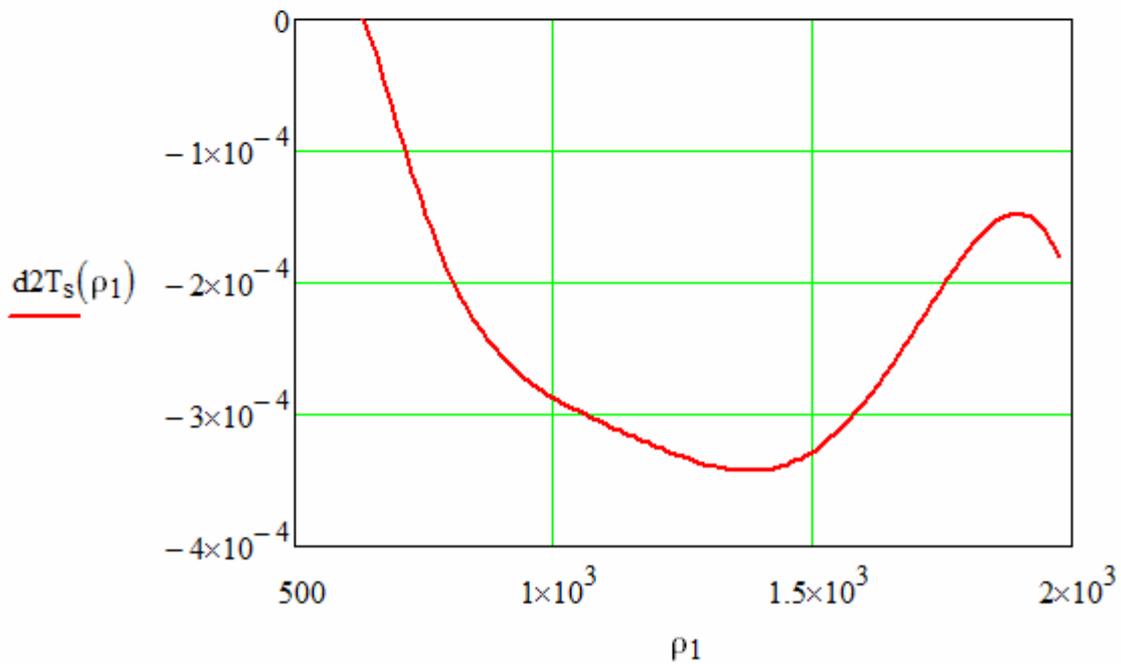


Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

10. Вычисление плотности на жидкостной ветви

Функция вычисления плотности при заданной температуре:

$$\rho_{g_1}(T) := \text{root}(T_s(\rho) - T, \rho, 630, 2000)$$

Границы поиска корня:

$$\rho_{\min} := \min(\rho) \quad \rho_{\max} := \max(\rho) + 10$$

Программа вычисления значений плотности в экспериментальных точках:

$$\rho_{g_ras} := \left| \begin{array}{l} \text{for } j \in 1.. \text{last}(T) \\ \rho_{g_ras_j} \leftarrow \text{root}[(T_s(\rho) - T_j), \rho, \rho_{\min}, \rho_{\max}] \\ \rho_{g_ras} \end{array} \right.$$

	1
1	$1.656 \cdot 10^3$
2	$1.623 \cdot 10^3$
3	$1.608 \cdot 10^3$
4	$1.591 \cdot 10^3$
5	$1.554 \cdot 10^3$
6	$1.498 \cdot 10^3$
7	$1.476 \cdot 10^3$
8	$1.294 \cdot 10^3$
9	...

11. Вычисление отклонений на линии упругости

На входе: матрица с экспериментальными данными Data_in.

На выходе: матрица D_Out. В первой строке матрицы содержится номер автора эксперимента; во второй - имя автора; в третьей - количество экспериментальных точек каждой серии эксперимента; в четвертой, пятой, шестой, седьмой и восьмой - вектора со значениями экспериментальной температуры, экспериментальной плотности, расчетной плотности, абсолютной погрешности, относительной погрешности, соответственно; в девятой - значение среднего отклонения; в десятой - среднеквадратичного отклонения.

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

```

D_Out := Inf ← Data_in1, Name ← Inf(1), NumP ← Inf(2)
O1,1 ← "№ автора", O2,1 ← "Автор", O3,1 ← "Кол-во точек"
O4,1 ← "Темп.", O5,1 ← "Эксп. плотн.", O6,1 ← "Расч. плотн."
O7,1 ← "Абс. погр.", O8,1 ← "Отн. погр.", O9,1 ← "Сред. отк."
O10,1 ← "Среднеквадр. отклон.", k ← 0, n ← 1, m ← 1, d ← 2
for i ∈ 1..last(Name)
  k ← k + NumPi, O1,d ← d - 1, O2,d ← Namei, O3,d ← NumPi
  for j ∈ n..k
    O_Tm ← Tj, O_ρ_expm ← ρj, O_ρ_rasm ← ρg_ras_j
    O_dρ_absm ← ρj - ρg_ras_j, O_dρ_otnm ←  $\frac{\rho_j - \rho_{g\_ras\_j}}{\rho_j} \cdot 100$ 
    dρ_s ← dρ_s + O_dρ_absm
    dρ_sk ← dρ_sk +  $\left( \frac{\rho_j - \rho_{g\_ras\_j}}{\rho_j} \cdot 100 \right)^2$ 
    m ← m + 1
  O4,d ← O_T, O5,d ← O_ρ_exp, O6,d ← O_ρ_ras
  O7,d ← O_dρ_abs, O8,d ← O_dρ_otn, O9,d ←  $\frac{d\rho\_s}{NumP_i}$ 
  O10,d ←  $\sqrt{\frac{d\rho\_sk}{NumP_i}}$ 
  O_T ← 0, O_ρ_exp ← 0, O_ρ_ras ← 0, O_dρ_abs ← 0
  O_dρ_otn ← 0, dρ_s ← 0, dρ_sk ← 0
  n ← n + NumPi, m ← 1, d ← d + 1
O

```

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

	1	2	3
1	"№ автора"	1	2
2	"Автор"	"Brawn"	"Рябушева_1"
3	"Кол-во точек"	10	1
4	"Темп."	[10, 1]	[1, 1]
5	"Эксп. плотн."	[10, 1]	[1, 1]
6	"Расч. плотн."	[10, 1]	[1, 1]
7	"Абс. погр."	[10, 1]	[1, 1]
8	"Отн. погр."	[10, 1]	[1, 1]
9	"Сред. отк."	-4.77	0.867
10	"Среднеквадр. отклон."	0.413	...

12. Подготовка данных для построения графиков

Функция зависит от переменной n, номера серии эксперимента.

На выходе: матрица из пяти столбцов. В первом столбце содержатся данные об экспериментальной температуре; во втором - данные об экспериментальной плотности; в третьем - данные о расчетной плотности; в четвертом - абсолютная погрешность; в пятом - относительная погрешность.

```

Rez(n) :=
  T ← D_Out4,n+1, ρexp ← D_Out5,n+1
  ρras ← D_Out6,n+1, dρabs ← D_Out7,n+1
  dρotn ← D_Out8,n+1
  Out ← augment(T, ρexp, ρras, dρabs, dρotn)
  Out

```

Автор эксперимента:

Name(n) := D_Out2,n+1

Экспериментальная температура:

Tn(n) := Rez(n)⁽¹⁾

Экспериментальная плотность:

ρn(n) := Rez(n)⁽²⁾

Расчетная плотность:

ρan(n) := Rez(n)⁽³⁾

Абсолютные отклонения:

dρna(n) := Rez(n)⁽⁵⁾

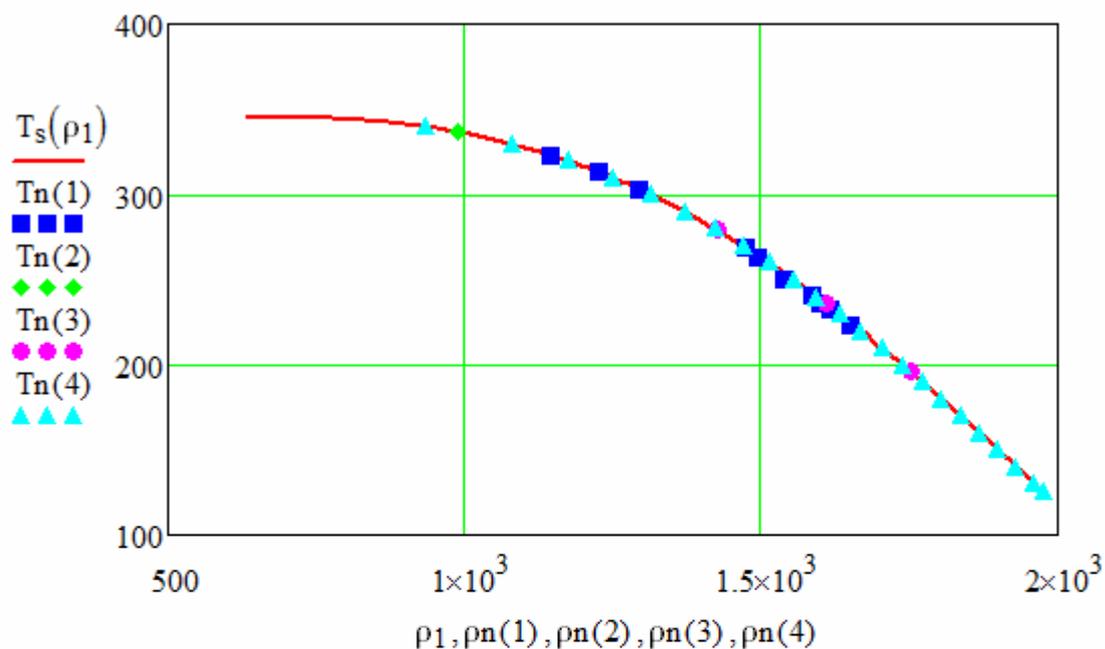
Относительные отклонения:

dρno(n) := Rez(n)⁽⁴⁾

Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (продолжение)

13. Построение графиков

13.1. График жидкостной ветви линии фазового равновесия и экспериментальных данных



13.2. График относительных отклонений плотности между расчетными и экспериментальными значениями

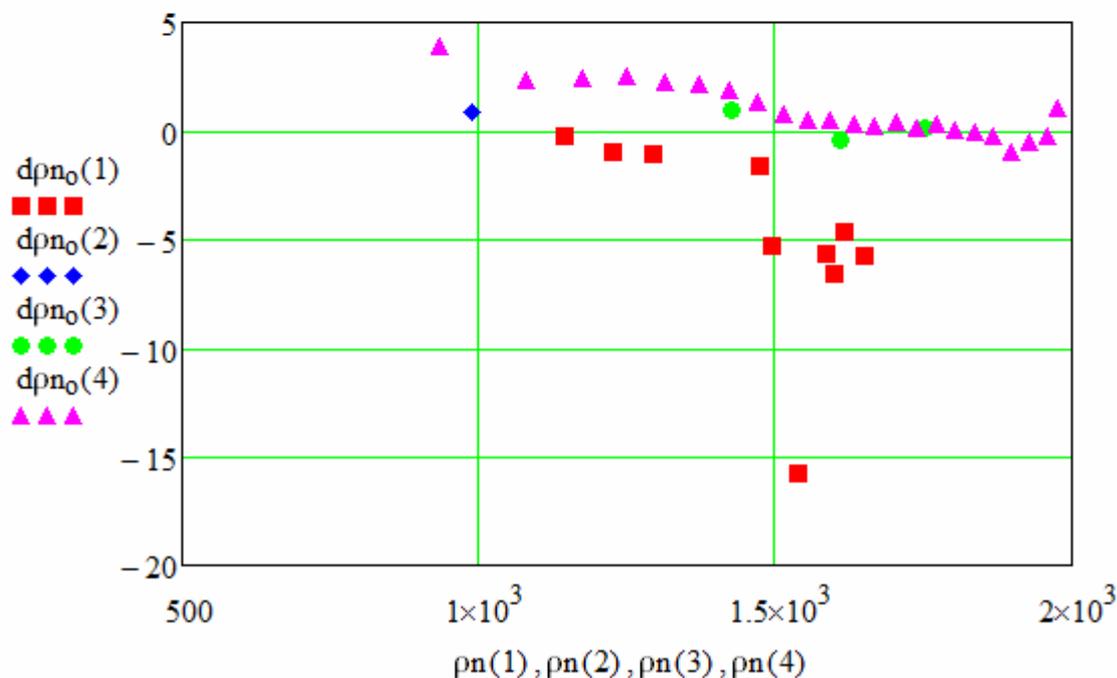


Рис. В 6. Листинг программы поиска коэффициентов жидкостной ветви линии фазового равновесия (окончание)

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ	4
1.1. Общая постановка задачи	4
1.2. Градиент функции	5
1.3. Матрица Гессе.....	6
1.4. Приращение функции	6
1.5. Квадратичная форма	6
1.6. Выпуклое множество	7
1.7. Выпуклые функции	7
1.8. Минимум функции	8
1.9. Условие Липшица.....	8
1.10. Угловые и главные миноры матрицы Гессе	9
1.11. Собственные значения матрицы Гессе	9
1.12. Практические примеры	10
1.13. Задачи для самостоятельного решения	19
2. АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ПОИСКА БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА	20
2.1. Постановка задачи.....	20
2.1.1. Необходимые условия безусловного экстремума первого порядка	20
2.1.2. Необходимые условия второго порядка.....	20
2.1.3. Достаточные условия второго порядка	21
2.2. Критерии проверки условий экстремума.....	21
2.2.1. Дополнительные исследования стационарных точек	22
2.2.2. Алгоритм решения задачи.....	23
2.3. Практические примеры	25
2.4. Задачи для самостоятельного решения	44
3. АППРОКСИМАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ МЕТОДОМ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ.....	48
3.1. Аппроксимация данных	48
3.2. Метод наименьших квадратов	48
3.3. Решение системы линейных алгебраических уравнений методом Гаусса	50
3.3.1. Прямой ход метода Гаусса	50
3.3.2. Обратный ход метода Гаусса	53
3.4. Практические примеры	54
3.5. Задачи для самостоятельного решения	65
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	67

ПРИЛОЖЕНИЕ А. ЛИСТИНГИ ПРИМЕРОВ В МАТНСАД 15	
ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ	69
ПРИЛОЖЕНИЕ Б. ЛИСТИНГИ ПРИМЕРОВ В МАТНСАД 15	
БЕЗУСЛОВНЫЙ ЭКСТРЕМУМ	83
ПРИЛОЖЕНИЕ В. ЛИСТИНГИ ПРИМЕРОВ В МАТНСАД 15	
МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ	129

Рыков Сергей Владимирович
Кудрявцева Ирина Владимировна
Рыков Сергей Алексеевич
Рыков Владимир Алексеевич

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ В ПРИМЕРАХ В ПАКЕТЕ MATHCAD 15

Часть II

Учебное пособие

Ответственный редактор
Т.Г. Смирнова

Титульный редактор
Т.В. Белянкина

Компьютерная верстка
С.В. Рыков

Дизайн обложки
Н.А. Потехина

Печатается
в авторской редакции

Подписано в печать 30.12.2015. Формат 60×84 1/16
Усл. печ. л. 10,46. Печ. л. 11,25. Уч.-изд. л. 11,0
Тираж 100 экз. Заказ № С 108

Университет ИТМО. 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49

Издательско-информационный комплекс
191002, Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, 9