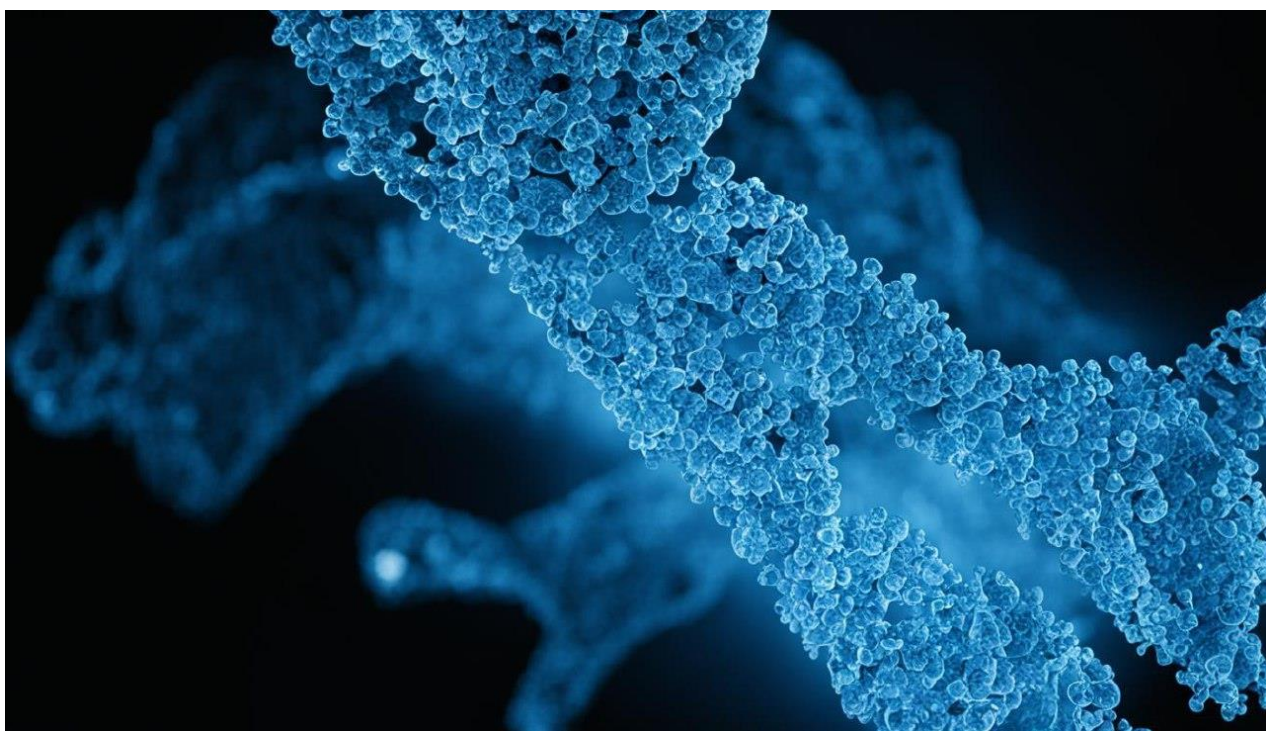


**С. И. ДВОРЕЦКИЙ, Д. С. ДВОРЕЦКИЙ,
Е. И. АКУЛИНИН, М. С. ТЕМНОВ**

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ В БИОТЕХНОЛОГИИ: МЕТОДЫ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ И ПОИСКОВОЙ ОПТИМИЗАЦИИ



**Тамбов
Издательский центр ФГБОУ ВО «ТГТУ»
2024**

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Тамбовский государственный технический университет»

С. И. ДВОРЕЦКИЙ, Д. С. ДВОРЕЦКИЙ,
Е. И. АКУЛИНИН, М. С. ТЕМНОВ

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ В БИОТЕХНОЛОГИИ: МЕТОДЫ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ И ПОИСКОВОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Утверждено Ученым советом университета
в качестве учебного пособия для студентов бакалавриата
и магистратуры высших учебных заведений технологических
направлений и специальностей

Учебное электронное издание



Тамбов
Издательский центр ФГБОУ ВО «ТГТУ»
2024

УДК 303.732,663.15
ББК 30в6
С34

Рецензенты:

Доктор технических наук, профессор, профессор кафедры
информационных и управляющих систем ФГБОУ ВО «ВГУИТ»
С. Г. Тихомиров

Доктор технических наук, профессор, профессор кафедры
«Техника и технологии производства нанопродуктов» ФГБОУ ВО «ТГТУ»
Е. Н. Туголуков

С34 Системный анализ в биотехнологии: методы принятия решений и поисковой оптимизации [Электронный ресурс]: учебное пособие / С. И. Дворецкий, Д. С. Дворецкий, Е. И. Акулинин, М. С. Темнов. – Тамбов : Издательский центр ФГБОУ ВО «ТГТУ», 2024. – 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). – Системные требования : ПК не ниже класса Pentium II ; CD-ROM-дисковод ; 2,7 Мб ; RAM ; Windows 95/98/XP ; мышь. – Загл. с экрана.
ISBN 978-5-8265-2750-4

Является систематическим введением в современную теорию и практику системного анализа, принятия решений и оптимизации при проектировании биотехнологических процессов и систем. Рассмотрены модели и методы системного анализа, включающие процедуры проведения экспертизы и экспертного оценивания, детерминированные методы принятия решений и методы принятия решений в условиях неопределенности; численные методы и алгоритмы условной оптимизации, постановки и методы решения одноэтапных задач оптимизации при проектировании биотехнологических процессов и систем в условиях неопределенности. Каждый раздел учебного пособия включает широкий диапазон примеров: от получения и обработки экспертной информации, постановок задач безусловной и условной оптимизации до методов поиска и получения решения этих задач.

Предназначено для студентов бакалавриата и магистратуры высших учебных заведений технологических направлений и специальностей, может быть полезно для повышения квалификации преподавателей вузов и специалистов.

УДК 303.732,663.15
ББК 30в6

Все права на размножение и распространение в любой форме остаются за разработчиком. Нелегальное копирование и использование данного продукта запрещено.

ISBN 978-5-8265-2750-4

© Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тамбовский государственный технический университет» (ФГБОУ ВО «ТГТУ»), 2024

ВВЕДЕНИЕ

Системный анализ как дисциплина возник в силу необходимости проводить междисциплинарные исследования. По мере усложнения биотехнологических производств, их автоматизации и роботизации, при проектировании сложных биотехнологических производств, анализе экологических ситуаций, связанных с эксплуатацией биотехнологических производств, потребовались объединение усилий специалистов разных областей, унификация и согласование разнохарактерной информации, получаемой в результате исследования и решения конкретных проблем.

Успешное проведение междисциплинарных и комплексных исследований связано с математическим моделированием, методами представления и обработки информации, широким использованием вычислительной техники.

Результатом системного анализа при проектировании биотехнологических процессов и систем является выбор альтернативы (варианта, стратегии действий при проектировании, технологии и технологической схемы биотехнологического производства, конструктивных и режимных параметров функционирования технологического оборудования и т.д.).

В обыденной жизни в простых ситуациях люди обходятся стандартными приемами, традиционными навыками, интуицией; необходимость в специальных методах возникает в сложных ситуациях, в задачах при отсутствии уверенности в правильности принимаемых решений. Задачи, которые не решаются с помощью традиционных математических методов и в которых все более существенное место занимает процесс формализации и постановки задачи, методов получения и обработки информации с широким использованием вычислительной техники, а процесс решения связан с активным участием человека, составляют основу подходов и инструментария теории принятия решений. На современном этапе развития аппарат, модели и методы теории принятия решений предполагают широкое использование взаимодействия человека и вычислительной техники.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Учебное пособие написано на основе лекций по системному анализу и оптимизации биотехнологических производств, читаемых одним из авторов бакалаврам, магистрантам и аспирантам в Тамбовском государственном техническом университете.

Методы системного анализа, принятия решений и оптимизации играют существенную роль при проектировании биотехнологических процессов, систем и производств. Совокупность методов системного анализа позволяет формализовать многие возникающие проблемы как задачи принятия решений, оптимизации биотехнологических процессов и систем в условиях неопределенности. Упор в учебном пособии сделан на практические методы решения широкого спектра задач системного анализа биотехнологических процессов и систем: экспертных оценок, многокритериального принятия решений при определенности, риске и неопределенности. Также описаны наиболее эффективные методы и алгоритмы решения задач безусловной и условной оптимизации биотехнологических систем, составляющие основу поисковой оптимизации.

Семантически учебное пособие состоит из трех частей. В первой части (главы 1, 2, 3) изложены основные понятия и задачи системного анализа в биохимической инженерии, анализ биотехнологического производства как сложной системы исследования, эксплуатации и проектирования, основные понятия и задачи теории принятия решений, методы проведения экспертизы, экспертного оценивания и обработки экспертной информации. Важное место в этой части отведено постановке и решению многокритериальных задач принятия решений (раздел 3) при проектировании биотехнологических систем, освещению прин-

ципов оптимальности в задачах принятия решений, содержательным примерам решения многокритериальных задач принятия решений.

Во второй части (главы 4, 5) приведены постановки задач, эффективные методы и алгоритмы решения задач безусловной и условной оптимизации, широко применяемые при проектировании биотехнологических процессов и систем: для решения задач безусловной оптимизации изложены методы наискорейшего градиентного спуска, Гаусса–Зейделя, Флетчера–Ривса, Дэвидона–Флетчера–Пауэлла; для решения задач условной оптимизации – методы внешних штрафов, барьерных функций, комбинированный метод, метод множителей Лагранжа; приводится большое количество решенных примеров.

В третьей части (глава 6) рассматриваются основные подходы к постановке и решению одноэтапных задач оптимизации при проектировании биотехнологических процессов и систем в условиях неопределенности; приводятся методы, позволяющие найти оптимальные конструкции биотехнологического оборудования и оптимальные режимы их функционирования, гарантирующие сохранение работоспособности производства, несмотря на возможные случайные изменения неопределенных факторов в процессе эксплуатации производства.

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ЗАДАЧИ СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА В БИОХИМИЧЕСКОЙ ИНЖЕНЕРИИ

Термин «системный анализ» можно обобщенно определить как совокупность методов, ориентированных на исследование сложных систем и основанных на использовании вычислительной техники. Формально этот термин также можно определить как метод научного познания, состоящий в том, что любой объект по отношению к субъекту рассматривается как система – целостное образование, состоящее из большого числа элементов, связанных между собой вещественными, энергетическими, информационными связями сильнее, чем с окружающей средой.

Системный анализ как дисциплина занимается проблемами принятия решений в условиях, когда выбор решения – альтернативы (варианта, стратегии действий, технологии и технологической схемы биотехнологического производства, конструктивных и режимных параметров функционирования технологического оборудования и т.д.) требует анализа сложной информации различной природы; результатом системного анализа является выбор наилучшей альтернативы (варианта, стратегии действий, технологии и технологической схемы биотехнологического производства, конструктивных и режимных параметров функционирования технологического оборудования и т.д.).

К основным понятиям системного анализа относятся «система», «подсистема», «элемент», «структура», «целостное образование», «связь», «иерархия», «отношение система–среда».

1.1. СИСТЕМА

Рассмотрим понятие «система» через определение свойств, которыми она должна обладать [1, 2].

1. *Свойство целостности и членимости.* Система – целостная совокупность элементов, т.е. целостное образование, в составе которого могут быть выделены целостные объекты (подсистемы, элементы). Она допускает детализацию (расчленение) на подсистемы, т.е. пространственно-временные агрегаты, состоящие из взаимосвязанных элементов.

Расчленение системы на подсистемы и элементы часто является условным и зависит от целей проводимого исследования. Для системы первичным является признак целостности, т.е. она рассматривается как единое целое, состоящее из взаимодействующих частей, часто разнокачественных, но одновременно совместимых.

2. *Свойство связности.* Система обладает наличием существенных устойчивых связей (отношений) между элементами, превосходящих по мощности (силе) связи этих элементов с элементами, не входящими в данную систему. Связи между элементами различают по физической сущности (вещественные, энергетические, информационные) и направлению (прямые, обратные, нейтральные связи).

Связь можно определить как канал, по которому обеспечивается обмен между элементами системы и окружающей средой веществом, энергией и информацией. Ее характеристикой является мощность (сила), которая оценивается через коэффициент чувствительности связи; для информационных связей оценкой может служить пропускная способность канала связи или величина потока информации.

3. *Свойство организованности системы.* Это свойство характеризует наличие у системы определенной организации, связанной с формированием

существенных связей элементов, упорядоченным распределением связей и элементов во времени и пространстве. При формировании связей складывается определенная структура системы, свойства элементов трансформируются в функции (действие, поведение), связанные с интегративными качествами системы.

Структура системы – это устойчивость, упорядоченность во времени и пространстве ее элементов и связей, она отражает определенные взаимосвязи, взаиморасположение составных частей системы, ее устройство. Наглядно структура системы может быть представлена в виде графа, узлы которого соответствуют элементам, а дуги – связям. Структура системы может быть сетевая, иерархическая, многоуровневая иерархическая специального вида («страты», «слои», «эшелоны»), характеризующиеся разными принципами взаимоотношений элементов в пределах уровня и различным правом вмешательства вышестоящего уровня в организацию взаимоотношений между элементами нижележащего уровня.

4. *Интегративные качества (эмерджентность) системы.* Данные качества присущи системе в целом, но не свойственны ни одному из ее элементов в отдельности.

Объект, обладающий всеми четырьмя свойствами, является системой. Здесь важно заметить, что:

- 1) система не сводится к простой совокупности элементов;
- 2) расчленяя систему на отдельные части и изучая каждую из них в отдельности, нельзя познать все свойства системы в целом.

Под элементом системы принято понимать простейшую, неделимую часть системы; при этом ответ на вопрос, что является такой частью, зависит от исследователя, который изучает систему, от того, какие свойства и связи он считает существенными.

Систему можно расчленять на элементы разными способами в зависимости от постановки задачи, цели и ее уточнения в процессе проведения системного исследования. При необходимости исследователь может изменять принцип разбиения (декомпозиции), выделять другие элементы и получать с помощью нового разбиения более адекватное представление об анализируемом объекте или о проблемной ситуации.

При определении элемента использовалось понятие «цель», которое играет важнейшую роль в системном анализе.

При многоуровневом расчленении сложной системы часто систему делят на подсистемы, ориентируясь на обобщенные свойства системы и связи. Понятие «подсистема» подразумевает, что выделяется относительно независимая часть системы, обладающая свойствами системы (целостностью, связностью, организацией) и, в частности, имеющая подцель, на достижение которой она ориентирована.

1.2. ЦЕЛЬ И ЦЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ

Цель отражает некоторое конечное состояние управляемого развития: цель – конечный результат, на достижение которого направлено функционирование системы. С целью связаны такие понятия, как проект, программа и целеобразование.

Проект – это способ представления продукта, результата, а программа является способом его достижения.

Целеобразование заключается в построении целостного представления о конечном результате, оно включает проект конечного результата и способ его достижения, т.е. программу. Целеобразование является личностным процессом, поэтому проект, программа и соответствующие средства деятельности выбираются или создаются исследователем в соответствии с его устремлениями и возможностями.

1.3. МЕТОДИКА И ПРИНЦИПЫ СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА

Методика системного анализа (или модель системного исследования) может разрабатываться не обязательно с охватом всего процесса изучения или проектирования системы, а для одной из ее страт, что, как правило, и бывает на практике.

Охарактеризуем методологические принципы системного исследования применительно к системному анализу [3].

Принцип органической целостности субъективного и объективного в системном анализе. К группе важных методологических принципов системного анализа относятся несколько принципов, различающихся между собой тем, как фиксируется роль субъективного фактора в системном исследовании, а точнее, каковы взаимоотношения объекта и субъекта исследования. Концепция этих взаимоотношений требует учитывать различие и взаимосвязь между системами двух типов: системами как объектами исследования и системами как инструментами организации знания, направленного на решение проблем, свойственных системе–объекту и существенных для субъекта–исследователя.

Принцип структурности. Проблема структуризации является важной особенностью системных исследований. Именно структура придает системам необходимую целостность и определяет устойчивые характеристики системы, позволяющие отличать то, что называется системой, от объектов другого вида.

Понятие «структура» предполагает, что в рамках данного рассмотрения система не изменится, если в ней одна из подсистем будет заменена другой, удовлетворяющей тем конечным условиям адекватного взаимодействия с другими подсистемами, которые диктуются структурой системы. Целостность системы достигается за счет устойчивости, выражающейся в ее структуре, и ее относительной изменчивости, выявляемой в обобщении описания элементов системы и фиксирующей лишь характер их возможных взаимодействий в рамках рассматриваемой структуры.

Структуры различных систем могут быть весьма разнообразны; в системном анализе чаще всего приходится иметь дело со структурами иерархического характера. С одной стороны, это объясняется тем, что иерархическая структура представляет наиболее эффективный способ организации данных о поведении системы; с другой стороны, иерархические структуры возникают естественно в процессе эволюционного образования сложного из простого с закреплением промежуточных форм развития.

Принцип динамизма систем. Целостность любой системы и ее структуры становится очевидной чаще всего на фоне ее изменений во времени, когда изменение состояния одной из подсистем влечет за собой и изменение состояния других. Меняться во времени могут не только состояния различных подсистем, но и структура системы, что обычно свидетельствует о существовании еще одного, более высокого иерархического уровня в системе, постоянство структуры которого обеспечивает целостность системы.

Одновременно с требованием изучать поведение системы во времени системный анализ обращает внимание и на принципиальную ограниченность отрезка времени, на котором можно наблюдать за поведением конкретной системы. В связи с этим выдвигается еще один методологический принцип наблюдаемости: на основании возможных опытов по наблюдению состояния системы должна иметься возможность идентификации ее состояния, знание которого достаточно для суждения о возможном поведении системы в будущем.

Принцип междисциплинарности. Системный анализ занимается изучением объектов такой сложности, что для их описания приходится привлекать понятия, изучаемые в рамках разных научных дисциплин, и поэтому требует согласования различных профессиональных языков и инструментария, реализуя принцип междисциплинарности.

Традиционные научные дисциплины обычно изучают различные аспекты поведения систем в особых «лабораторных» условиях, специально исключаяю-

щих перекрестные связи с явлениями, изучение которых – прерогатива других дисциплин. В системных же объектах такая изоляция принципиально невозможна, а проблема интерпретации результатов «лабораторных исследований» приводит к системному эффекту, когда совокупность фактов, объединенных в систему, приводит к появлению нового качества.

Принцип органического единства формализованного и неформализованного. В системном анализе на уровне специального научного знания явным образом признается важная роль «субъективных» составляющих, входящих в задачи принятия решений, разрабатываются научные методы решения соответствующих задач с учетом этих составляющих.

Успех действий в системном анализе в первую очередь зависит от того, насколько правильно поставлена цель, насколько точно понята задача, и только во вторую очередь – от того, насколько успешно решена поставленная задача. Отсюда следует важнейшая практическая рекомендация системного анализа: начинать с тщательного и всестороннего изучения задачи. Чем естественней и «объективнее» выглядит задача, тем более пристального рассмотрения она заслуживает. Формулировка задачи далеко не всегда находится в точном соответствии с ее сутью.

Системный анализ требует ясного понимания и широкого использования связи постановки проблемы (задачи) и выбора методов ее решения.

Единство формализованных и неформализованных разработок – характерная черта системного подхода и анализа. При реализации принципа единства теории и практики в системном анализе центральное место занимает выбор критериев эффективности решения поставленной задачи. С этим связана основная количественная составляющая методов системного анализа, заключающаяся в широком использовании различных критериев показателей качества разных альтернатив (вариантов) решения поставленной задачи. В системном анализе обращается внимание на то, что любой показатель качества не может полностью адекватно описывать все многообразие отношений

к рассматриваемой альтернативе, и сделан упор на необходимость использования векторных критериев качества, содержащих как различные оценки эффективности решения, так и оценки затрат на его достижение, в том числе и затрат на научные исследования и внедрение.

1.4. БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

Живая клетка представляет собой сложный «химический реактор», в котором осуществляется более 1000 независимых катализируемых ферментами реакций [4]. В то же время биологические системы подчиняются тем же основным законам сохранения вещества, энергии и термодинамики. Поэтому клетку вполне закономерно рассматривать как химический реактор, концентрируя внимание на стехиометрических соотношениях, процессах выделения или поглощения энергии, характерных для живых организмов.

Совокупность всех осуществляющихся в клетке химических превращений называется метаболизмом. Рассматривая упрощенную схему некоторых важных процессов метаболизма в бактерии *Escherichia coli*, приведенную в работе [4], можно видеть, что метаболические реакции большей частью объединяются в последовательности, называемые путями метаболизма. Между этими последовательностями осуществляются связи, во-первых, через циклические пути, и во-вторых, посредством ответвлений от основных путей, объединяющих одну последовательность с другой. В результате происходящих в клетке катализируемых ферментами реакций одни компоненты клетки (метаболиты) превращаются в другие.

В клетке также существует система каналов регулирования и передачи информации, между которыми имеется связь. При этом следует обратить внимание на то, что в клетке реализована каскадная схема регулирования: активация и ингибирование (на уровне ферментов) позволяет клетке быстро адаптироваться к изменениям в химическом балансе клетки, в то время как

индукция и репрессия (на уровне генов) дают возможность изменить всю картину метаболизма в тех случаях, когда изменившиеся условия и состав среды далее стабилизируются на достаточно длительный период.

Таким образом, основу клетки как биотехнологической системы (БТС) составляют процессы микробиологического синтеза, направленные на получение разнообразных целевых продуктов биосинтеза – белков, аминокислот, липидов и др., или процессы биологической очистки, в которых микроорганизмами утилизируются органические и неорганические соединения.

Промышленные биотехнологические процессы связаны главным образом с так называемыми ферментациями. Ферментация – это особый класс биохимических превращений веществ, состоящий из серии взаимосвязанных реакций синтеза и разложения, протекающих в органических веществах под воздействием ферментов (независимо от того, где они находятся – внутри клеток органического субстрата или вне их). В связи с тем, что ферменты – универсальные биологические катализаторы, основным звеном в цепи ферментации является каталитическая биохимическая реакция, в которой носителем катализатора (фермента) служит внутриклеточный материал.

Общий характер и направление реакций, основанных на жизнедеятельности микроорганизмов, контролируются самим микро-организмом, например регулированием скорости образования фермента либо ингибированием или наоборот – активацией синтезированного фермента.

При рассмотрении процессов на уровне биологического реактора нет необходимости в детальном анализе внутриклеточных процессов. Достаточно полная и обобщенная информация о происходящих в клеточной популяции процессах (реакциях) заключается в кинетической модели роста клеток на данном субстрате, обобщенно учитывающей явления на клеточном уровне. Кинетические модели используются при составлении уравнений материального и энергетического балансов БТС; при анализе биотехнологических процессов

с учетом влияния роста клеток, гидродинамики потоков веществ, тепло- и массообменных процессов, диспергирования взаимодействующих фаз и т.д.

Биотехнология – это совокупность способов, приемов для получения из исходного материала (сырья) некоторого практически ценного биопродукта, осуществляемых под воздействием и при непосредственном участии микроорганизмов и выделяемых из них ферментов (биологических катализаторов). Основу биотехнологии составляют многочисленные и разнообразные процессы биохимического превращения вещества. Эти процессы отличаются от химических большей сложностью, так как одновременно с процессами тепло- и массопереноса в них протекает биохимическая реакция на микроуровне (в клетке), что приводит параллельно с биохимическим превращением вещества к увеличению (росту) биомассы в реакционном объеме. На практике они осуществляются в специальных аппаратах, которые называются биологическими или биохимическими реакторами (биореакторами).

Таким образом, биореакторы можно рассматривать как специальные технические устройства, предназначенные для создания необходимых условий для культивирования (роста и размножения) клеток. Для преобразования необходимых материальных и энергетических потоков в биореакторе должны быть обеспечены:

- необходимые условия для осуществления процессов тепло- и массообмена, аэрации среды и подходящей гидродинамики потоков;
- заданные температура культивирования, давление, рН среды, окислительно-восстановительный потенциал, уровень растворенного кислорода, время флотации и концентрация лимитирующего субстрата.

Конкретное аппаратное оформление стадии культивирования микроорганизмов зависит от особенностей подготовки питательных сред, сырья для культивирования микроорганизмов и получаемого целевого продукта микробиологического синтеза.

По назначению биореактор является главным аппаратом технологической установки и занимает ведущее место в биохимическом процессе производства.

Биотехнологическое производство можно определить как совокупность процессов и операций переработки сырья путем биохимических превращений с использованием микроорганизмов и(или) ферментов, осуществляемых в биореакторах. Такие производства характеризуются разнообразием технологических процессов (операций) и их аппаратурного оформления, наличием прямых и обратных связей между отдельными технологическими стадиями производства.

Биотехнологическое производство также можно определить как совокупность машин, аппаратов, агрегатов и других устройств, связанных между собой магистральными трубопроводами, паропроводами, линиями (каналами) электрическими, транспортными и связи (для получения информации и управления).

Биотехнологические производства характеризуются многоуровневой иерархической схемой связей подсистем (технологических линий, установок, отделений, цехов), элементов (биореакторов, машин, аппаратов, агрегатов) и в них осуществляемых биотехнологических процессов.

Основное назначение (миссия) биотехнологического производства заключается в рациональном или экономически оптимальном и безопасном преобразовании определенного количества исходных веществ в конечные биопродукты заданного качества с использованием микроорганизмов и(или) ферментов.

Общая структура биотехнологического производства включает в себя следующие функциональные части, представленные на рис. 1.1.

Подготовка сырья (блок 1 на рис. 1.1) включает в себя приготовление и стерилизацию среды, подготовку и стерилизацию газов (воздуха), подготовку посевного материала и биокатализатора, предварительную обработку сырья.

Подготовленное и предварительно обработанное сырье проходит ряд превращений на основной биотехнологической стадии производства (блок 2

на рис. 1.1), на которой с использованием того или иного биологического агента (микроорганизмов, изолированных клеток, ферментов или клеточных органелл) происходит преобразование сырья в тот или иной целевой биопродукт.

Биотехнологическая стадия включает в себя не только синтез новых органических соединений, но и ряд других биотехнологических процессов (ферментацию, биотрансформацию, биокатализ, биоокисление, метановое брожение, биокомпостирование, биосорбцию и др.).

Поскольку чаще всего целевой продукт находится либо в самой биомассе, либо в культуральной жидкости, необходимо вначале разделить эти две фазы. В зависимости от свойств биомассы и жидкости для этих целей могут быть использованы различные процессы биотехнологического производства (отстаивание, фильтрация, сепарация, центрифугирование, микро- и ультрафильтрация, коагуляция, флотация) (блок 3 на рис. 1.1).

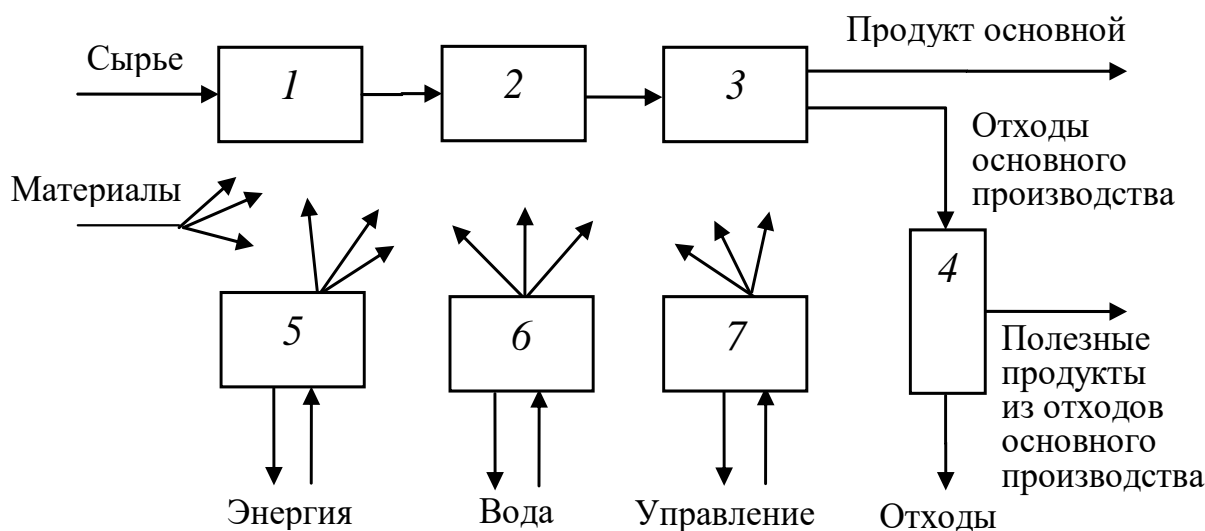


Рис. 1.1. Структура и функциональные элементы биотехнологического производства:

1 – подготовка сырья; 2 – переработка сырья (биотехнологические процессы и системы);

3 – выделение основного продукта; 4 – санитарная очистка и утилизация отходов;

5 – энергетическая система; 6 – подготовка вспомогательных материалов

и водоподготовка; 7 – система управления

Для внутриклеточных продуктов сначала необходимо разрушить клеточную оболочку одним из методов (дезинтеграция клеток, гидролиз, ферментализ, автолиз, экстракция, осаждение, адсорбция, ионный обмен, ректификация, ультра-, нанофильтрация и обратный осмос, ультрацентрифугирование).

На стадии выделения биопродукта главная задача – отделить основную часть продукта, пусть даже и с некоторыми примесями. Поэтому, когда необходимо получать биопродукты высокой кондиции, добавляют еще стадию очистки продукта от примесей (блок 3 на рис. 1.1). Эта задача решается с помощью следующих процессов биотехнологического производства (экстракция, адсорбция, ионный обмен, ультрафильтрация и обратный осмос, ректификация и ферментализ, хроматография, диализ, кристаллизация).

После очистки биопродукта он часто находится в растворе с небольшими концентрациями примесей; дальнейшая задача – обеспечить его концентрирование. На стадии концентрирования (блок 3 на рис. 1.1) применяют такие процессы биотехнологического производства, как выпаривание, сушка, осаждение, кристаллизация с фильтрацией образующихся кристаллов, ультра- и нанофильтрация.

На завершающей стадии производства биопродукт приобретает товарную форму, при этом применяются процессы гранулирования, дражжирования, таблетирования, розлива или фасовки, ампулирования (затаривания в ампулы).

Отходы производства или невостребованные продукты переработки сырья могут содержать как вредные компоненты, которые опасно выбрасывать в окружающую среду, так и полезные, которые нецелесообразно выбрасывать, например, очищенная вода может быть возвращена в основное производство. Поэтому существенной стадией биотехнологического производства является санитарная очистка и утилизация отходов производства (блок 4 на рис. 1.1).

Биотехнологическое производство практически на всех стадиях имеет определенные стоки и выбросы в атмосферу; очистка стоков и выбросов – специальная задача, которая должна решаться в обязательном порядке. По существу, очистка стоков – это отдельное биотехнологическое производство, имеющее свои подготовительные стадии, биотехнологическую стадию, стадию отстаивания биомассы активного ила и стадию дополнительной очистки стоков и переработки осадка.

Биотехнологическая промышленность потребляет довольно много энергии, чтобы обеспечить переработку сырья в биопродукты, – порядка 12...15% всех энергоресурсов расходуется в этой области техники. Поэтому энергетическая система – важная и сложная подсистема биотехнологического производства (блок 5 на рис. 1.1). Энергия не столько потребляется непосредственно для получения биопродукта, сколько обеспечивает условия его производства. Кроме того, энергетическая подсистема должна обеспечивать не только распределение энергии по стадиям производства, но и по возможности возвращение ее после использования в переработке сырья.

Кроме энергии, в биотехнологическом производстве используются вспомогательные материалы, например сорбенты для очистки и выделения продуктов; вещества, с помощью которых создается среда, необходимая для протекания биотехнологических процессов, и др. Особое место занимает вода – она используется для охлаждения технологических потоков, выработки пара, растворения и разбавления технологических потоков. Потребление ее может быть значительным. Подготовка вспомогательных материалов и особенно водоподготовка (блок 6 на рис. 1.1) – также очень важная и сложная часть биотехнологического производства. Поскольку вспомогательные материалы и вода обеспечивают биотехнологический процесс, но, как правило, не входят в биопродукты, то система подготовки должна обеспечивать восстановление их

свойств после проведения цикла операций с их участием и возврат их в основное производство.

Таким образом, биотехнологическое производство представляет собой сложную систему, его эксплуатация невозможна без наличия подсистемы контроля и управления состоянием биотехнологических процессов производства (блок 7 на рис. 1.1). Основной целью этой подсистемы является обеспечение функционирования биотехнологического производства в соответствии с технологическим регламентом производства – нормативного документа, включающего в себя все «ноу-хау» биотехнологии и являющегося поэтому строго охраняемым объектом. Для достижения этой цели подсистема управления выполняет следующие функции:

1) сбор информации о текущем состоянии биотехнологических процессов производства и вычисление значений критериев качества их функционирования;

2) нахождение оптимальных режимов функционирования биотехнологических процессов производства, при которых достигается минимальное (максимальное) значение одного из критериев качества;

3) реализация найденных оптимальных режимов функционирования биотехнологических процессов в производстве. Выполнение этих функций возлагается на управленческий персонал и всевозможные технические средства (регуляторы, приборы, линии связи, исполнительные механизмы и др.), функционирующие в составе автоматизированной системы управления технологическими процессами биотехнологического производства.

Определение полезности и эффективности биотехнологического производства проводится по различным показателям, которые можно сгруппировать следующим образом [5].

Технологические показатели определяют качество биотехнологического процесса. *Производительность (мощность)* Пр производства – количество F

получаемого биопродукта или количество G перерабатываемого сырья за единицу времени: $Pr = F/t$ или $Pr = G/t$.

Обычно производительность выражают в количестве продукта за 1 ч или 1 сут, показывая максимальную производительность в непрерывном режиме. Производительность за длительный срок – один год – учитывает плановые остановки производства. Поэтому применительно к биохимическим производствам для связи часовой или суточной производительности с годовой принимают, что производство работает 8000 ч или 330 сут в году.

Значение Pr зависит от конкретного производства. Крупнотоннажные производства выпускают десятки тысяч тонн в год, а в малотоннажных производствах (реактивы, редкие металлы, продукты тонкого органического синтеза) производительность составляет килограммы и даже граммы продукта в час.

Расходный коэффициент G/F показывает количество G перерабатываемого сырья, материалов или энергии на производство единицы биопродукта, его размерность очевидна: [кг сырья/кг продукта], [м³ сырья/кг продукта], [кВт – ч /кг продукта], [Гкал /т продукта] и т.д. Расходный коэффициент показывает количественно затраты на производство продукта, но не отражает эффективности использования расходующихся компонентов.

Выход продукта η – отношение реально получаемого количества F_p продукта из использованного сырья к максимальному количеству F_m , которое теоретически можно получить из того же сырья, т.е. $\eta = F_p/F_m$. Например, на получение 1 т HNO_3 реально расходуется 290...296 кг NH_3 , а теоретический расход составляет 270 кг; при этом выход продукта – $\eta = 91 \dots 93\%$. Неполнота выхода продукта зависит от неполноты превращения сырья (NH_3), потерь и наличия примесей.

Интенсивность процесса γ – количество G перерабатываемого сырья или образующегося продукта F в единице объема V аппарата, т.е. $\gamma = G/V$ или $\gamma = F/V$, – характеризует совершенство организации процесса.

Удельные капитальные затраты $KZ_{уд}$ – затраты $Z_{об}$ на технологическое оборудование, отнесенные к единице его производительности $Пр$, т.е. – $KZ_{уд} = Z_{об}/Пр$, характеризуют эффективность организации процесса в отдельных аппаратах и в производстве в целом, совершенство используемых аппаратов.

Качество биопродукта определяет его потребительские свойства и товарную ценность; показатель качества индивидуален для каждого продукта, он может включать содержание (состав и количество) примесей, физические и химические показатели, внешний вид и размеры, цвет, запах и пр. Определяется нормативными документами (ГОСТ – государственный отраслевой стандарт, технические условия, сертификат качества).

Экономические показатели определяют экономическую эффективность производства.

Себестоимость продукции – суммарные затраты C на получение единицы продукции; себестоимость складывается из следующих расходов: затрат на сырье, энергию, вспомогательные материалы; единовременные капитальные затраты, распределяемые равномерно на срок эксплуатации оборудования, затраты на оплату труда работников:

$$C = \sum_i C_i G_i + E \cdot Z_k + Z_{тр}/F,$$

где C_i, G_i – цена и количество израсходованного сырья, энергии и материалов на производство единицы биопродукта; Z_k – капитальные затраты; E – коэффициент окупаемости капитальных затрат (их доля, отнесенная на время произ-

водства количества продукта F); в среднем для биотехнологических производств эта доля составляет $E = 0,15$ в расчете на годовую производительность Pr ; $Z_{тр}$ – оплата труда.

Себестоимость C имеет денежное выражение.

Производительность труда – количество продукции, произведенной в единицу времени (обычно за год) в пересчете на одного работающего; характеризует эффективность производства относительно затрат труда.

Поскольку экономические показатели рассчитываются на основе технологических показателей, то их также называют техноэкономическими.

Технические (эксплуатационные) показатели производства характеризуют изменения, возникающие в производстве в ходе его эксплуатации при появлении отклонений от регламентных условий и состояний функционирования биотехнологических процессов.

Надежность производства характеризуют средним временем безаварийной работы технологического оборудования либо числом аварийных остановок оборудования или производства в целом за определенный отрезок времени.

Свойство надежности определяется качеством технологического и энергетического оборудования, технических средств подсистемы автоматизации, а также регламентом их эксплуатации.

Безопасность функционирования производства – вероятность нарушений, приводящих к нанесению вреда или ущерба обслуживающему персоналу, оборудованию, а также окружающей среде, населению.

Чувствительность технологических процессов производства к нарушениям режима их функционирования и изменению условий эксплуатации определяется отношением изменения соответствующих эксплуатационных показателей к возможным отклонениям от регламента эксплуатации производства.

Социальные показатели определяют комфортность работы на данном производстве и его влияние на окружающую среду.

Безвредность обслуживания следует из сопоставления санитарно-гигиенических условий для обслуживающего персонала с соответствующими нормами по загазованности, запыленности, уровню шума и др.

Уровень автоматизации и механизации биотехнологических процессов производства определяет долю ручного труда в эксплуатации производства.

Экологическая безопасность производства определяется степенью его воздействия на окружающую среду и экологическую обстановку в регионе.

Перечень основных показателей эффективности функционирования биотехнологического производства свидетельствует о том, насколько высоки требования к качеству его разработки, проектирования, создания и эксплуатации. Нередко одновременное достижение наилучших показателей вступает в противоречие друг с другом и требует незамедлительных компромиссных решений, принимаемых инженером-биотехнологом. Для этого необходимо, чтобы инженер-биотехнолог обладал не только обширными, разносторонними знаниями, но и высокой культурой.

1.5. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ

Теория принятия решений как раздел системного анализа исследует ситуации, модели процессов принятия решений и их свойства; в ее основе лежат задачи принятия решений, соответствующие широкому кругу практических ситуаций. Приведем некоторые примеры.

На биотехнологическом предприятии освободилась должность главного инженера; задача директора – назначить главного инженера.

При проектировании сложной биотехнологической системы было выделено шесть основных проблем:

1 – подготовка исходных данных для проектирования;

2 – устойчивость;

3 – согласованность стадий переработки сырья и выделения биопродукта;

4 – управляемость;

5 – сложность подготовки посевного материала;

6 – переработка и обезвреживание отходов производства. Пять экспертов проранжировали эти факторы по их важности. Получить групповое ранжирование факторов по степени их влияния на работоспособность БТС и с использованием вычисленного дисперсионного коэффициента конкордации оценить согласованность мнений экспертов.

Пяти экспертам было предложено упорядочить 10 факторов, наиболее сильно влияющих на протекание периодического процесса ферментации при глубинном культивировании на глюкозе биомассы бактерий *Bac. thuringiensis var. kurstaki*. Получить групповое ранжирование факторов по степени их влияния на протекание процесса ферментации; вычислить и оценить значимость коэффициента конкордации (вероятность ошибки $\rho_{\text{ош}} = 5\%$, табличное значение χ^2 (Chi – квадрат)-распределения для числа степеней свободы $\nu = n - 1 = 9$ и уровня значимости $\alpha = 0,05$ равно χ^2_T ; проверить гипотезу о согласованности мнений экспертов (ранжировок).

Три эксперта, используя собственные шкалы, провели оценивание в баллах пяти факторов, влияющих на кинетику процессов утилизации субстрата и образования продуктов метаболизма и биомассы в культурах клеток. Получить групповое ранжирование факторов по степени их влияния на кинетику; проведя преобразование шкал, найти групповые оценки альтернатив; оценить согласованность мнений экспертов и вычислить коэффициенты их компетентности.

В приведенных выше примерах общим является следующее. Имеется множество X , состоящее из альтернатив (вариантов, стратегий действия и т.п.). Требуется выделить из множества альтернатив некоторое подмножество $X^* \subseteq X$ или одну лучшую альтернативу $x^* \in X$, либо проранжировать (упорядочить) альтернативы.

Представление о качестве альтернатив характеризуют принципом оптимальности ϕ , который задает или отражает понятие лучших альтернатив и позволяет их сравнивать.

Задачей принятия решений назовем пару $\langle X, \phi \rangle$, решением задачи $\langle X, \phi \rangle$ – альтернативу $x^* \in X$, подмножество $X^* \subseteq X$ либо ранжировку альтернатив, полученных с помощью принципа оптимальности ϕ . Часто принцип оптимальности ϕ выражается с помощью целевой функции $F(x)$ (функции качества, эффективности, выигрыша или потерь). В этом случае требуется найти $x^* \in X$ или подмножество X^* , на которых функция $F(x)$ достигает экстремального значения (максимума или минимума) в соответствии со смыслом решаемой задачи.

Иногда целевая функция $F(x)$ не задана в явном виде. Тогда предполагается, что существует субъект принятия решений, имеющий представление о значениях целевой функции $F(x)$ в зависимости от x .

В задаче упорядочения альтернатив предполагаются известными множество альтернатив и принцип оптимальности, отражающий сравнительное качество альтернатив. На основе принципа оптимальности все альтернативы ранжируются в порядке ухудшения или улучшения их качества.

Процесс решения задачи $\langle X, \phi \rangle$ предполагает участие в нем людей с различными функциями, возможностями и ответственностью: лицо, принимающее решения; эксперты; консультанты.

Лицом, принимающим решения (ЛПР), называют специалиста, имеющего цель, которая служит побудительным мотивом постановки задачи и поиска ее решения. Предполагается, что ЛПР является компетентным в области, связанной с задачей, обладает необходимым опытом деятельности, наделено необходимыми полномочиями и несет ответственность за принятое решение.

Эксперт имеет информацию об отдельных элементах задачи, но не несет непосредственной ответственности за результат ее решения. Эксперт помогает ЛПР сформировать исходное множество альтернатив, оценить альтернативы x по локальным критериям $z_1 = f_1(x), z_2 = f_2(x), \dots, z_m = f_m(x)$, предлагает модель принятия решений.

Принятие решений часто осуществляется в условиях неопределенности, т.е. ЛПР обладает меньшим количеством информации, чем это необходимо для целесообразной организации его действий в процессе принятия решений. Неопределенность в принятии решений обычно обусловлена недостаточными надежностью и количеством информации, на основе которой ЛПР осуществляет выбор решения.

Существуют различные виды неопределенности:

- 1) неопределенность, вызванная недостатком информации и ее достоверности в силу технических, социальных и иных причин;
- 2) неопределенность, обусловленная слишком высокой или недоступной платой за получение дополнительной информации и переходом к определенности;
- 3) неопределенность, порожденная ЛПР из-за недостатка его опыта и знаний факторов, влияющих на принятие решений;
- 4) неопределенность, вызванная поведением среды, влияющей на процесс принятия решений.

Таким образом, в процессах принятия решений и задачах, с ними связанных, имеется ряд ситуаций с той или иной степенью неопределенности, требующих для своего описания и получения решения такого математического аппарата, который предусматривал бы возможность учета неопределенности.

К такому аппарату относится теория вероятностей, в соответствии с которой неопределенность задачи описывается некоторой мерой, характеризующей возможность появления заданных случайных исходов (элементов или подмножеств некоторого множества).

Эффективным инструментарием для описания неопределенностей принятия решений является теория нечетких множеств [6].

Задача выбора – одна из главных в теории принятия решений; в центре теории принятия решений стоит субъект выбора – человек, лицо, принимающее решения. Одно из существенных допущений теории принятия решений состоит в том, что решение человека является результатом упорядоченного процесса анализа.

Для определения понятия рационального выбора и рационального человека – субъекта принятия решений – используется ряд предположений о поведении человека, которые называются аксиомами рационального поведения. При условии, что эти аксиомы справедливы, доказывается теорема о существовании некоторой функции, описывающей выбор человека, – *функции полезности*. Полезностью называют величину, которую в процессе выбора максимизирует человек с рациональным поведением.

Опишем проблемную ситуацию многокритериального принятия решений при определенности, которую необходимо формализовать, и осуществить постановку задачи.

Данная проблемная ситуация формально описывается следующей моделью:

– существуют альтернативы x , принадлежащие исходному множеству альтернатив X , образованному ограничениями и условиями ($x \in X$);

– альтернативы x обладают m свойствами (характеристиками) z_1, z_2, \dots, z_m ;

– каждому i -му ($i = 1, 2, \dots, m$) свойству z_i альтернативы x соответствует критериальная оценка $z_i = f_i(x)$ – локальный критерий (лучшими значениями критериев считаются те, которые больше);

– каждой альтернативе x соответствует в m -мерном критериальном пространстве Z решение (точка) $z = (z_1, z_2, \dots, z_m) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)) \in R^m$;

– отображение множества альтернатив X в критериальное пространство Z порождает в этом пространстве множество решений Z_X , являющееся образом

$$\text{множества } X : X \xrightarrow{(f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x))} Z_X \subset Z = R^m.$$

Требуется предложить формализованную постановку детерминированной задачи выбора лучшей альтернативы, сведя ее к задаче оптимизации, и алгоритмы решения поставленной задачи. В дальнейшем для задач выбора будем рассматривать дискретные задачи принятия решений, обозначая альтернативы через $x_k, k = 1, 2, \dots, n$. Множество X альтернатив в этом случае состоит из n альтернатив: $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$. При решении задачи выбора требуется определить номер k , которому соответствует лучшая альтернатива.

Проблемную ситуацию при неопределенности формально можно описать следующим образом:

– существуют альтернативы $x \in X$, одну из которых необходимо выбрать ЛПР;

– качество альтернатив x описывается m локальными критериями (характеристиками) качества z_i , $i = 1, 2, \dots, m$;

– существует множество состояний среды $S_i = \{s_{i1}, s_{i2}, \dots, s_{iq}, i = 1, 2, \dots, m\}$, при этом ЛПР точно неизвестно, в каком конкретном состоянии находится среда;

– на множествах решений X и состояний среды $S_i = \{s_{i1}, s_{i2}, \dots, s_{iq}, i = 1, 2, \dots, m\}$ определено m локальных критериев (характеристик) качества z_i , $i = 1, 2, \dots, m$, каждый из которых описывается функцией полезности $U_i = \|u_i(x, s_{ij})\|$, $x \in X$, $s_{ij} \in S$, если ЛПР исходит из условия ее максимизации, либо функцией потерь $V_i = \|v_i(x, s_{ij})\|$, $x \in X$, $s_{ij} \in S$, если ЛПР исходит из условия ее минимизации.

Требуется решить задачу выбора – определить лучшую альтернативу $x_k \in X$ для дискретного случая в зависимости от ситуаций априорной информированности ЛПР о состояниях среды:

– ЛПР известно априорное распределение вероятностей состояний среды;

– ЛПР известно, что среда активно противодействует его целям;

– ЛПР располагает «нечетким» знанием состояний среды.

2. МЕТОДЫ ЭКСПЕРТНОГО ОЦЕНИВАНИЯ

Полная математическая формализация многих задач системного анализа биотехнологических процессов и производств часто неосуществима вследствие их сложности и качественного характера исходной информации. В ходе развития биотехнологического производства возрастают сложность управления биотехнологическими процессами и требования к качеству принимаемых решений. Чтобы учесть множество факторов и повысить обоснованность принимаемых решений, необходим системный анализ, основанный как на расчетах, так и аргументированных суждениях руководителей и специалистов (ЛПР, экспертов, консультантов, аналитиков по системному анализу). Одним из способов получения и обработки информации, поступающей от специалистов, являются методы экспертного оценивания.

2.1. ПРЕДПОСЫЛКИ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДОВ ЭКСПЕРТНОГО ОЦЕНИВАНИЯ

Большинство промышленных биотехнологических процессов и производств настолько сложны, что невозможно или нецелесообразно строить модели, которые полностью отражали бы природу и количественные взаимосвязи различных факторов. Реальные задачи принятия решений требуют участия в качестве неотъемлемого элемента людей, причем сам процесс управления, принятия решений всегда предполагает ориентацию не только на количественную, но и на качественную информацию, на здравый смысл и опыт людей, участвующих в принятии управленческих решений.

Методологические основы экспертных методов заключаются в получении от специалистов-экспертов необходимой информации (в виде количественных и качественных оценок), обработке и использовании собранной информации

для подготовки и принятия решений. Применение расчетов здесь сочетается с использованием суждений (знаний) руководителей, ученых, специалистов, т.е. экспертов. Эти суждения позволяют хотя бы частично компенсировать недостаток информации, полнее использовать индивидуальный и коллективный опыт. Именно опыт, понимание существа проблемы, чувство и интуиция помогают специалисту в ситуации неопределенности оценить значимость альтернативных вариантов (стратегий действия), выбрать для них наиболее рациональную оценку.

Применение математико-статистических методов, даже самых простых в сочетании с экспертной информацией при оценивании альтернативных вариантов или решений часто приводит к более успешным результатам, чем «точные» расчеты с ориентацией на средние показатели.

В процессе принятия решений принимают участие руководители производства и специалисты (ЛПР, эксперты, консультанты, аналитики, специалисты по системному анализу). Считается, что ЛПР целеобусловлено, при этом цель служит мотивом постановки задачи и ее решения, имеет полномочия и ответственность, систему предпочтений о преимуществах и недостатках альтернативных вариантов. Для помощи ЛПР в подготовке и формировании решения привлекаются эксперты, консультанты, аналитики, специалисты по системному анализу. Эксперты имеют информацию об отдельных элементах задачи, помогают ЛПР сформировать множество альтернатив, оценить альтернативы по отдельным критериям, предлагают варианты оптимального выбора решений.

Консультант, аналитик, специалист по системному анализу разрабатывают модель задачи, процедуры ее решения, организуют работу ЛПР и экспертов.

В общем случае предпочтения экспертов могут не совпадать с предпочтениями ЛПР; это позволяет ему критически осмыслить свою точку зрения и более обоснованно выбрать наилучшее решение. Таким образом, экспертные оценки в задачах принятия решений используются для выбора наилучшего решения.

2.2. МЕТОДЫ ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРТИЗЫ

Экспертное оценивание представляет собой процесс измерения, который можно определить как процедуру сравнения альтернативных вариантов (стратегий действия) по выбираемым критериям (показателям). Если при измерении можно указать, какой из вариантов предпочтительнее, а также определить, на сколько или во сколько раз один вариант лучше другого, то целесообразно использовать количественные оценки критерия. Такие оценки выражаются числами и являются более полными и информативными, чем качественные, которые позволяют лишь упорядочить варианты по предпочтению. На выбор критериев сравнения вариантов существенно влияет тип шкалы, с помощью которой измеряют показатели вариантов.

К наиболее распространенным методам измерений при экспертизе относятся ранжирование, непосредственное измерение, парное сравнение.

Предположим, что имеется конечное число измеряемых альтернатив x_1, x_2, \dots, x_n , определены критерии сравнения (показатели) z_1, z_2, \dots, z_k , по которым осуществляется сравнение альтернатив (вариантов). Методы измерений различаются процедурой сравнения, которая включает построение отношений между альтернативами и определением типа шкалы измерений.

Ранжирование представляет собой процедуру упорядочения альтернатив, выполняемую экспертом в шкале порядка; на основе своих знаний и опыта эксперт располагает альтернативные варианты в порядке предпочтения, руководствуясь одним или несколькими показателями сравнения.

При ранжировании эксперт должен расположить альтернативы в порядке, который представляется ему наиболее рациональным, и приписать каждой из них числа натурального ряда – ранги; при этом ранг 1 (первый) получает наиболее предпочтительный вариант, а ранг n – наименее предпочтительный. Следовательно, порядковая шкала, используемая для ранжирования, должна

удовлетворять условию равенства числа рангов n числу ранжируемых альтернативных вариантов.

Между альтернативными вариантами могут существовать отношения строгого порядка и эквивалентности: 1) между альтернативными вариантами существует только отношение строгого порядка, обладающего свойствами несимметричности (если $x_i \succ x_j$, то $x_i \not\prec x_j$, где \succ, \prec – соответственно знаки предпочтительности (лучше) и не предпочтительности (не лучше)), транзитивности (если $x_i \succ x_j, x_j \succ x_k$, то $x_i \succ x_k$) и связности (для $\forall x_i, x_j$ выполняется либо $x_i \succ x_j$, либо $x_i \prec x_j$, либо $x_i \sim x_j$ (где \sim – знак эквивалентности)).

Если среди альтернатив имеются эквивалентные, то в таких случаях им присваивают так называемые связанные ранги, значения которых определяются как среднее суммы мест, поделенных между собой альтернативами с одинаковыми рангами. Пусть имеет место следующая запись результатов ранжирования в виде рангов: $x_1 \succ x_2 \succ x_3 \sim x_4 \sim x_5 \succ \dots \succ x_{n-1} \sim x_n$. В этом случае имеем: $r_1 = 1, r_2 = 2, r_3 = r_4 = r_5 = (3 + 4 + 5)/3 = 4, r_{n-1} = r_n = (n - 1 + n)/2 = n - 1/2$.

Таким образом, сумма рангов, получаемая в результате ранжирования n альтернатив, равна сумме n чисел натурального ряда $(1, 2, \dots, n)$.

Один из распространенных способов получения групповой ранжировки заключается в расчете суммы рангов, присваиваемых экспертами каждой альтернативе: $R_j = \sum_{i=1}^m r_{ij}$.

Затем, исходя из величины R_j устанавливают результирующий ранг для каждой альтернативы: наивысший ранг (первый) присваивают альтернативе, получившей наименьшую сумму рангов, и, наоборот, альтернативе, получившей наибольшую сумму рангов присваивают самый низкий ранг; остальные альтернативы упорядочивают в соответствии со значением суммы рангов относительно альтернативы, которой присваивается первый ранг.

Ранги альтернатив определяют только порядок их расположения по критериям (показателям) сравнения; ранги как числа не дают возможности сделать вывод о том, на сколько или во сколько раз одна альтернатива предпочтительнее другой.

Часто для удобства суммарные оценки ранги нормируют; когда в экспертизе участвует несколько экспертов, стремятся получить усредненную оценку (вес) для каждой альтернативы по числу экспертов.

Другой способ установления зависимости между оценками альтернатив состоит в том, что важнейшей (с точки зрения эксперта) альтернативе присваивают вес, равный неперед заданному числу, а оценка следующих друг за другом по важности альтернатив определяется последовательно как доля более важного. Затем полученные значения оценок нормируются.

Метод непосредственного оценивания представляет собой процедуру присвоения альтернативам числовых значений в шкале интервалов: диапазон изменения какой-либо переменной разбивается на несколько интервалов, каждому из которых присваивается определенная оценка (балл), например от 0 до 100; задача эксперта заключается в помещении каждой из рассматриваемых альтернатив в определенный интервал в соответствии со степенью обладания ими тем или иным свойством или представлениями эксперта об их значимости.

Метод парных сравнений используют в целях непосредственного оценивания при выявлении предпочтений для большого числа альтернатив: для этого экспертам предлагается сравнить альтернативы попарно в шкале порядка, чтобы установить в паре наиболее важную. В результате сравнения пары альтернатив x_i, x_j эксперт упорядочивает эту пару, высказывая, что $x_i > x_j$, или $x_i < x_j$, или $x_i \propto x_j$. Выбор числового сравнения пары естественно произвести так, что если $x_i > x_j$, то $f(x_i) > f(x_j)$; если предпочтение в паре обратное, то $f(x_i) < f(x_j)$, а если альтернативы эквивалентны, то $f(x_i) = f(x_j)$.

2.3. КАЧЕСТВЕННЫЕ ЭКСПЕРТНЫЕ ОЦЕНКИ

Качественными называют экспертные оценки, не содержащие чисел; их можно разделить на две группы:

- 1) оценки, проводимые по заранее составленным шкалам (оценка качественных признаков);
- 2) оценки, шкалы для которых заранее не могут быть составлены.

Оценки первой группы применяют при определении значений признаков, имеющих качественную вариацию, все значения которых могут быть заранее перечислены и определены некоторыми стандартными терминами или выражениями; например, признак «влияние режимной переменной биотехнологического процесса на количество и качество получаемого биопродукта» может иметь следующие градации:

- значительно увеличивается выход биопродукта, а его качество ухудшается;
- увеличивается выход биопродукта, а его качество не изменяется;
- выход биопродукта не меняется, а его качество повышается;
- выход биопродукта уменьшается, а его качество значительно повышается и т.д.

Оценивая влияние данной режимной переменной на количество и качество биопродукта, эксперт указывает одну из перечисленных градаций и, следовательно, проводит выбор оценки из заранее определенных значений.

Оценки второй группы, не имеющей заранее составленных шкал, используют при генерировании альтернативных вариантов; они выражаются в предложениях, гипотезах, перечнях тех или иных показателей, фактов. Качественные экспертные оценки второй группы, имеющие характер рекомендаций (аргументов) по выбору той или иной последовательности действий, применяют при составлении сценариев и в деловых играх.

2.4. ОРГАНИЗАЦИЯ ЭКСПЕРТНОГО ОЦЕНИВАНИЯ И ОТБОР ЭКСПЕРТОВ

Организационные работы по применению экспертного оценивания начинаются с разработки плана, в котором формулируются цель работы и основные положения по ее выполнению. В этом документе должны быть отражены: описание проблемы, обоснование необходимости проведения экспертного оценивания, цели и задачи экспертизы, сроки выполнения работ, состав группы управления, финансовое и материальное обеспечение работ.

Группа управления определяет структуру экспертизы и осуществляет отбор экспертов. Одновременно группа управления проводит разработку организационных мероприятий и методики проведения опроса экспертов; при этом определяются место и время проведения опроса, предполагаемое количество и задачи туров опроса, форма и порядок проведения опроса, формы и содержание вопросов, порядок фиксации и сбора результатов опроса, формы оформления результатов опроса. Экспертное оценивание завершается оформлением полученных результатов.

Достоверность экспертизы зависит от количества экспертов в группе, долевого состава различных специалистов в группе, квалификации экспертов. Для описания экспертов с точки зрения оценки качества решения проблемы используют следующие характеристики: компетентность, креативность, отношение к экспертизе, конформизм, аналитичность и широта мышления, коллективизм, самокритичность и др.; перечисленные характеристики в основном оценивают качественно.

Компетентность – это степень квалификации эксперта в определенной области знаний; компетентность может быть оценена на основе анализа плодотворности деятельности специалиста, уровня и широты знакомства с достижениями науки, понимания проблем и перспектив развития. На практике оценка компетентности часто проводится путем самооценки эксперта или оценки дру-

гими экспертами. Для оценки этой характеристики эксперта введен числовой показатель – коэффициент компетентности k :

$$k = (k_{и} + k_{а})/2, 0 \leq k \leq 1,$$

где $k_{и}$ – коэффициент информированности по проблеме, устанавливаемый на основе самооценки (по балльной шкале); $k_{а}$ – коэффициент аргументации, получаемый в результате суммирования баллов по эталонной таблице.

Существуют и другие методики оценки компетентности экспертов. Например, согласно методике, основанной на вычислении относительных коэффициентов компетентности, ряду специалистов предлагается высказать суждения о включении лиц в экспертную группу для решения определенной проблемы, и далее для каждого эксперта рассчитываются относительные коэффициенты компетентности.

Иной способ определения коэффициента компетентности основан на результатах опроса экспертов и сравнения полученных индивидуальных оценок.

Креативность – это способность решать творческие задачи, которая оценивается на основе суждений о деятельности эксперта.

Отношение к экспертизе необходимо учитывать для принятия решения о привлечении специалиста к решению конкретной проблемы: занятость и другие факторы, существенно влияющие на выполнение специалистом функций эксперта.

Конформизм – это подверженность влиянию авторитетов; данное свойство проявляется в виде неустойчивости собственного мнения эксперта.

Свойство коллективизма (этика поведения человека в коллективе экспертов) во многих случаях существенно влияет на создание определенного психологического климата.

Самокритичность эксперта проявляется при оценке степени своей компетентности, а также при принятии решений по рассматриваемой проблеме.

В качестве обобщенной характеристики эксперта, учитывающей важнейшие качества, с одной стороны, и допускающие непосредственное измерение –

с другой, можно принять *достоверность суждений эксперта*. Количественно достоверность эксперта оценивают по формуле

$$D_i = N_{\text{пр}}/N, i = 1, 2, \dots, m,$$

где $N_{\text{пр}}$ – число случаев, когда i -й эксперт дал решение, приемлемость которого подтвердилось практикой; N – общее число случаев участия i -го эксперта в решении проблемы.

2.5. МЕТОДЫ ОПРОСА ЭКСПЕРТОВ

Опрос – основной этап совместной работы группы управления и экспертов, основным содержанием которого являются:

- постановка задачи и предъявление вопросов экспертам;
- информационное обеспечение работы экспертов;
- выработка экспертами суждений, оценок, предложений;
- сбор результатов работы экспертов.

Целью опроса является получение от экспертов возможно большего объема информации в виде фактов, подходов, идей, гипотез и других сведений, относящихся к предмету экспертизы.

Анкетный опрос. Анкетный опрос заключается в подготовке и предъявлении экспертам опросных карт-анкет, на вопросы которых они должны дать ответы в письменной форме. Анкеты составляются часто в табличной форме, содержание которых определяется особенностями анализируемой проблемы. Анкетирование может быть очным и заочным.

Одним из наиболее распространенных методов анкетирования является *метод Дельфи*: каждый эксперт получает специально разработанную анкету-вопросник, которую заполняет независимо от других. Ответы экспертов обобщают и вместе с обобщенными безличными аргументами в пользу тех или иных оценок возвращают экспертам для уточнения или изменения, если они найдут это необходимым, своих первоначальных ответов. Процедуру повторя-

ют до тех пор, пока не будет получено удовлетворительное совпадение мнений экспертов или пока не станет ясным устойчивое различие во мнениях.

На практике обычно ограничиваются тремя-четырьмя турами. В первом туре опроса эксперты дают свои ответы без аргументирования; ответы обрабатываются в целях выявления среднего и крайних мнений. Экспертам сообщаются эти мнения, и проводится второй тур опроса, в ходе которого они пересматривают и при желании изменяют ответы, данные в первом туре. Кроме того, эксперты должны аргументировать свои ответы.

Последующие туры аналогичны. Обычно после третьего или четвертого опроса ответы экспертов перестают изменяться, что и является сигналом к прекращению опросов. Такая процедура позволяет экспертам учесть обстоятельства, которыми они пренебрегали или о которых не знали. Введение обратной связи путем повторения опроса вносит элемент объективности и делает оценки более надежными, позволяет уменьшить колебания в ответах и имеет несомненные преимущества по сравнению с простым статистическим объединением индивидуальных мнений с помощью средних.

Интервью является беседой, в ходе которой организатор экспертизы ставит вопросы эксперту по заранее разработанной программе; при интервью эксперт дает ответы в устной форме на устные вопросы. При таком опросе эксперт не имеет времени для глубокого продумывания своих ответов, а консультант строит свои вопросы в значительной степени в зависимости от ответов эксперта на предыдущие вопросы. Непрерывный, живой контакт эксперта и консультанта позволяет быстро получить большое количество информации об исследуемой проблеме.

Дискуссия. Дискуссию целесообразно проводить на первом этапе изучения проблемы для выявления возможных путей ее решения. Основными этапами подготовки и проведения этого вида опроса являются:

– определение и формулирование предмета дискуссии и порядка ее проведения;

- подготовка участников к дискуссии и ее материально-техническое обеспечение;
- собственно дискуссия;
- подведение итогов, фиксация и обработка результатов дискуссии.

Процедура проведения дискуссии определяется группой управления; при этом выбираются методы анализа проблем, методы изложения соображений; доказательств, используемых экспертами, средства представления информации, средства фиксации и переработки информации в ходе дискуссии; устанавливаются место и время проведения дискуссии, порядок и регламент выступлений.

Дискуссия обычно включает вступительное слово ведущего, доклад по анализируемой проблеме, вопросы к докладчику и его ответы, выступления экспертов, принятие решения.

Сценарные методы. Методы опроса экспертов, связанные с составлением документов типа докладных записок и сценариев, применяются в следующих случаях:

- 1) при прогнозе и предварительном анализе качественных изменений и конфликтных ситуаций в различных сферах производства и человеческой деятельности;
- 2) при установлении условий достижения желаемых результатов на объекте экспертизы и выявлении проблем, которые могут возникнуть на пути достижения этих результатов;
- 3) при определении вероятного режима эксплуатации различных систем и их влияния на окружающие системы и среду.

Задача, которая должна быть решена при составлении сценария, состоит в установлении логической последовательности событий, отражающей переход системы из предыдущего состояния в последующее.

Мозговой штурм представляет собой метод получения новых идей при решении какой-либо проблемы в результате коллективного творчества группы экспертов в ходе заседания – сеанса, проводимого по определенным правилам.

Цель такой экспертизы состоит в том, чтобы попытаться выдвинуть как можно больше идей в решении проблемной ситуации для последующего их анализа.

Отобранных специалистов для участия в экспертизе заранее извещают и вручают документацию, содержащую:

- формулировку проблемы и цели заседания;
- правила проведения мозгового штурма;
- предложение подумать и подготовить несколько идей по проблеме,

которая будет обсуждаться.

Мозговым штурмом руководит ведущий, основной задачей которого является поощрение свободного творчества, свободного высказывания идей, абсолютное недопущение критики, организация штурма проблемы.

Сеанс продолжается от 15...20 до 40...45 мин без перерыва и заканчивается, когда поток предложений иссякает. Обычно за время сеанса поступает несколько десятков предложений; все выступления должны быть зафиксированы.

Оценивание предложенных идей, точек зрения, мыслей заключается в их тщательном анализе в спокойной деловой обстановке, критике и отборе наиболее ценных из них. Анализ проводится группой специалистов и может включать несколько этапов, в том числе и этап количественного анализа с помощью компьютерных программ.

Морфологический анализ – способ анализа и сбора информации предназначен для генерации, выявления, подсчета и оценивания всех возможных вариантов осуществления некоторого решения или процесса, всех вариантов состояний исследуемого объекта и т.п.

Этот метод позволяет систематически выявить всю совокупность возможных вариантов, сформировать исходное множество альтернатив, проанализировать последствия принимаемых решений и учесть многокритериальность исследуемого объекта.

Основными этапами реализации метода морфологического анализа являются:

- 1) точная формулировка решаемой задачи (описание желаемых функциональных свойств исследуемой системы);
- 2) выявление максимально полного перечня основных функций системы;
- 3) определение альтернативных способов реализации каждой из выявленных ранее функций и генерирование всех возможных вариантов рассматриваемой системы, каждый из которых состоит из цепочки, содержащей ровно по одному способу реализации каждой отдельной функции;
- 4) определение эффективности вариантов системы;
- 5) выбор и реализация наиболее предпочтительного варианта.

При использовании метода морфологического анализа необходимо ответить на ряд вопросов: как сформулировать задачу и оценить точность ее формулировки; как можно определить полон ли список выявленных функций и способов их реализации; каким должен быть способ оценивания эффективности вариантов; как преодолеть проблему размерности, возникающую из-за того, что число возможных вариантов системы велико даже при решении относительно небольшой по сложности задачи; каким образом проверять и учитывать несовместимость отдельных способов реализации разных функций.

Возможность получения ответов на перечисленные вопросы и конструктивность этих ответов определяются степенью сложности и новизны решаемой задачи, неопределенностью исходной информации и наличием опытных специалистов по исследуемой проблеме. Характер ответов зависит от уровня квалификации и опыта исследователя и специалистов-экспертов, их интуиции и степени понимания ими сущности рассматриваемой проблемы.

2.6. МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРТНОЙ ИНФОРМАЦИИ

Основными целями обработки являются получение обобщенных данных и выявление новой информации, содержащейся в скрытой форме в экспертных оценках; на основе результатов обработки формируется решение проблемы.

В зависимости от целей экспертного оценивания и выбранного метода опроса при обработке результатов опроса решаются следующие задачи:

- построение обобщенной оценки альтернатив на основе индивидуальных оценок экспертов;
- построение обобщенной оценки на основе парного сравнения альтернатив каждым экспертом;
- определение относительных весов альтернатив;
- оценка согласованности мнений экспертов;
- определение зависимостей между ранжировками;
- оценка надежности результатов обработки.

Задача построения обобщенной оценки альтернатив по индивидуальным оценкам экспертов возникает при групповом экспертном оценивании: пусть m экспертов оценили n альтернатив по l показателям; результаты оценивания представим в виде величин x_{ij}^k , где i – номер эксперта ($i = 1, 2, \dots, m$); j – номер альтернативы ($j = 1, 2, \dots, n$); k – номер показателя (признака) сравнения; если оценка альтернатив произведена методом ранжирования, то величины x_{ij}^k представляют собой ранги, если оценка альтернатив выполнена методом непосредственного оценивания, то величины x_{ij}^k представляют собой числа из некоторого отрезка числовой оси или баллы.

Пусть величины x_{ij}^k получены методом непосредственного оценивания, т.е. x_{ij}^k являются числами или баллами; для получения групповой оценки альтернатив можно воспользоваться средним значением оценки каждой альтернативы:

$$x_j = \sum_{k=1}^l \sum_{i=1}^m q_k K_i x_{ij}^k, j = 1, 2, \dots, n,$$

где x_j – групповая оценка i -й альтернативы; q_k – весовые коэффициенты показателей сравнения альтернатив; K_i – коэффициенты компетентности экспертов.

Обычно используют нормированные коэффициенты весов показателей и компетентности экспертов:

$$\sum_{k=1}^l q_k = 1, \sum_{i=1}^m K_i = 1.$$

Весовые коэффициенты показателей могут быть определены экспертным путем; если q_{ki} — коэффициент веса k -го показателя, даваемый i -м экспертом, то средний коэффициент веса k -го показателя по всем экспертам вычисляется как

$$q_k = \sum_{i=1}^m q_{ki} K_i.$$

Коэффициенты компетентности экспертов можно вычислить по апостериорным данным, т.е. по результатам оценивания альтернатив. Основной идеей этой процедуры вычисления является предположение о том, что компетентность экспертов должна оцениваться по степени согласованности их оценок с групповой оценкой альтернативных вариантов.

Пусть m экспертов оценили n альтернатив, используя одну и ту же шкалу интервалов; тогда получим матрицу оценок $\|x_{ij}\|$, $i = 1, \dots, m$, $j = 1, \dots, n$, где x_{ij} — оценка i -го эксперта для j -й альтернативы.

Алгоритмы, предложенные А. С. Рыковым [3], основаны на итеративной процедуре корректирования коэффициента компетентности K_i^v , $i = 1, 2, \dots, m$, $v = 0, 1, 2, \dots$ — номер итерации. Идея предложенных алгоритмов заключается в следующем: на каждой итерации вычисляется взвешенная групповая оценка альтернативы (варианта). Коэффициенты компетентности экспертов, которые близки к групповым оценкам, повышаются, а коэффициенты экспертов, оценки которых далеки от групповых оценок, понижаются. Расстояние между оценками рассчитывается с помощью нормы, в зависимости от выбора которой порождается соответствующий вариант алгоритма.

Алгоритмы 1, 2.

Шаг 1. Задать начальный номер итерации $v = 0$, начальные значения коэффициентов компетентности: $K_i^0 = 1/m$, $i = 1, 2, \dots, m$, величины параметров p, q, ε алгоритма.

Шаг 2. Начать итерационный процесс с номера $v := v + 1$.

Шаг 3. Вычислить средние групповые оценки:

$$x_j^v = \sum_{i=1}^m K_i^{v-1} x_{ij}, i = 1, 2, \dots, m.$$

Шаг 4. Вычислить поправочные коэффициенты, которые обратно пропорциональны норме Гельдера отклонения i -го вектора экспертных оценок (оценки i -го эксперта) от средней групповой оценки:

при $p \geq 1$

$$\Delta K_i^v = \frac{1}{q + \left[\sum_{j=1}^n |x_j^v - x_{ij}|^p \right]^{1/p}}, i = 1, 2, \dots, m, q > 0;$$

при $p = \infty$

$$\Delta K_i^v = \frac{1}{q + \max_j |x_j^v - x_{ij}|}, i = 1, 2, \dots, m, q > 0.$$

Шаг 5. Скорректировать коэффициенты компетентности:

для аддитивного варианта (алгоритм 1):

$$K_i^v = K_i^{v-1} + \Delta K_i^v, i = 1, 2, \dots, m;$$

для мультипликативного варианта (алгоритм 2):

$$K_i^v = K_i^{v-1} * \Delta K_i^v, i = 1, 2, \dots, m.$$

Шаг 6. Нормализовать коэффициенты компетентности:

$$K_i^v = \frac{K_i^v}{\sum_{i=1}^m K_i^v}, i = 1, 2, \dots, m.$$

Шаг 7. Проверить выполнение условия окончания работы алгоритма:

$$\max_i |K_i^v - K_i^{v-1}| \leq \varepsilon.$$

Если условие выполняется, то получаем $K_i^{v*} = K_i^v$, $x_j^{v*} = x_j^v$; в противном случае перейти к шагу 2.

Свойства алгоритмов 1, 2, включая их сходимость, зависят от выбора параметров и вида корректирования коэффициентов компетентности; значения p сильно влияют на скорость сходимости. В то же время слишком малое q приводит к слишком большому коэффициенту для наиболее компетентного эксперта при небольших коэффициентах для остальных экспертов.

При обработке результатов ранжирования возникают задачи определения зависимости между ранжировками двух и более экспертов и оценки связи между достижением различных целей при решении одной и той же совокупности проблем. Решение данных задач проводится с помощью оценки ранговой корреляции – статистической связи между ранжировками на основании исходных статистических данных, представленных ранжировками m экспертов n альтернатив в виде матрицы $\|r_{ij}\|$, $i = 1, 2, \dots, m$, $j = 1, 2, \dots, n$, где r_{ij} – ранговая оценка i -го эксперта для j -й альтернативы. Статистический анализ дает ответ на вопрос о том, есть ли какая-то согласованность (связь) между упорядочениями анализируемых альтернатив.

Рассмотрим случай оценки связи между ранжировками двух экспертов, сделанными λ -м и k -м экспертами ($\lambda, k = 1, 2, \dots, m, \lambda \neq k$). Мерой взаимосвязи в этих задачах служит коэффициент ранговой корреляции Спирмена.

Пусть выполнено ранжирование оцениваемых альтернатив двумя экспертами:

$$r_\lambda = (r_{\lambda 1}, r_{\lambda 2}, \dots, r_{\lambda n}), r_k = (r_{k 1}, r_{k 2}, \dots, r_{k n}),$$

где r_λ, r_k – векторы рангов, выставяемых соответственно λ -м и k -м экспертами. Коэффициент ранговой корреляции Спирмена $\rho_{\lambda, k}$ вычисляется по формуле

$$\rho_{\lambda, k} = \frac{\frac{1}{6}(n^3 - n) - S_{\lambda, k}^2 - T_\lambda - T_k}{\sqrt{[\frac{1}{6}(n^3 - n) - 2T_\lambda][\frac{1}{6}(n^3 - n) - 2T_k]}}$$

где $S_{\lambda, k}^2 = \sum_{j=1}^n (r_{\lambda j} - r_{kj})^2$, $T_i = \frac{1}{12} \sum_{d=1}^{H_i} (h_d^3 - h_d)$, $i = \lambda, k$; T_i – показатель связанных рангов в i -й ранжировке; H_i – число групп равных рангов

в i -й ранжировке; h_d – число равных рангов в d -й группе связанных рангов в i -й ранжировке.

При отсутствии связанных рангов ($T_i = 0, i = \lambda, k$) выборочный коэффициент Спирмена вычисляется по формуле

$$\rho_{\lambda,k} = 1 - \frac{6}{(n^3 - n)} \sum_{j=1}^n (r_{\lambda j} - r_{kj})^2.$$

Проверка статистически значимого отличия от нуля рангового коэффициента Спирмена при $n > 10$ и заданном уровне значимости $\alpha = 1 - P_{\text{дов}}$, где $P_{\text{дов}}$ – доверительная вероятность (обычно $P_{\text{дов}} \in (0,85; 0,95)$, в наиболее ответственных случаях – $P_{\text{дов}} \in (0,95; 0,99)$), с помощью неравенства

$$|\rho_{\lambda,k}| > t_Q(v) \sqrt{\frac{1 - (\rho_{\lambda,k})^2}{n - 2}},$$

где $t_Q(v)$ – $100Q\%$ -ная точка распределения Стьюдента с v степенями свободы; $Q = \alpha/2$; $v = n - 2$ (табл. 2.1).

В случае небольших объемов выборок при $4 < n < 10$ статистическая проверка гипотезы об отсутствии ранговой корреляционной связи проводится с помощью специальных таблиц (табл. 2.2).

Входом в табл. 2.2 является пара значений $(n, Q = \alpha/2)$, выходом – значение вспомогательной величины S_C , позволяющей рассчитать то пороговое значение $\rho_{C\text{max}}$, при превышении которого коэффициентом Спирмена следует признать наличие статистически значимой связи между сравниваемыми ранжировками (гипотеза об отсутствии корреляционной связи отвергается).

Задавшись уровнем значимости α критерия и числом сравниваемых альтернатив n , из табл. 2.2 определяем величину $S_C = S_C(n, Q)$ и далее рассчитываем значение $\rho_{C\text{max}}$ по формуле

$$\rho_{C\text{max}} = \frac{2S_C(n, Q)}{K_n} - 1,$$

где $K_n = \frac{1}{3}(n^3 - n)$.

**2.1. Значения 100Q%-ных точек $t_Q(v)$ распределения Стьюдента
с v степенями свободы**

v	Q							
	0,4	0,25	0,1	0,05	0,025	0,01	0,005	0,0025
1	0,000	1,000	3,078	6,314	12,706	31,821	63,657	12,732
2	0,289	0,816	1,886	2,920	4,303	6,965	9,925	14,089
3	0,277	0,765	1,638	2,353	3,182	4,541	5,841	7,453
4	0,271	0,741	1,533	2,132	2,776	3,747	4,604	5,598
5	0,267	0,727	1,476	2,015	2,571	3,365	4,032	4,773
6	0,265	0,718	1,440	1,943	2,447	3,143	3,707	4,317
7	0,263	0,711	1,415	1,895	2,365	2,998	3,499	4,029
8	0,262	0,706	1,397	1,860	2,306	2,896	3,355	3,833
9	0,261	0,703	1,383	1,833	2,262	2,821	3,250	3,690
10	0,260	0,700	1,372	1,812	2,228	2,764	3,169	3,581
11	0,260	0,697	1,363	1,796	2,201	2,718	3,106	3,497
12	0,259	0,695	1,356	1,782	2,179	2,681	3,055	3,428
13	0,259	0,694	1,350	1,771	2,160	2,650	3,012	3,372
14	0,258	0,692	1,345	1,761	2,145	2,624	2,977	3,326
15	0,258	0,691	1,341	1,753	2,131	2,602	2,947	3,286
16	0,258	0,690	1,337	1,746	2,120	2,583	2,921	3,252
17	0,257	0,689	1,333	1,740	2,110	2,567	2,898	3,222

В случае превышения выборочным значением коэффициента ранговой корреляции Спирмена $\rho_{\lambda,k}$ порогового значения ρ_{Cmax} , т.е. при $\rho_{\lambda,k} > \rho_{Cmax}$, оценка коэффициента $\rho_{\lambda,k}$ является значимой и следует признать наличие статистически значимой связи между сравниваемыми ранжировками.

2.2. Таблица значений вспомогательной величины S_c

$n = 4$		$n = 5$		$n = 6$		$n = 7$		$n = 8$		$n = 9$		$n = 10$	
S_c	Q	S_c	Q	S_c	Q	S_c	Q	S_c	Q	S_c	Q	S_c	Q
12	0,458	22	0,475	50	0,210	74	0,249	108	0,250	156	0,218	208	0,235
14	0,375	24	0,392	52	0,178	78	0,198	114	0,195	164	0,168	218	0,184
16	0,208	26	0,342	54	0,149	82	0,151	120	0,150	172	0,125	228	0,139
18	0,167	28	0,258	56	0,121	86	0,118	126	0,108	180	0,089	238	0,102
20	0,042	30	0,225	58	0,088	90	0,083	132	0,076	188	0,060	248	0,072
		32	0,175	60	0,068	94	0,055	138	0,048	196	0,038	258	0,048
		34	0,117	62	0,051	98	0,033	144	0,029	204	0,022	268	0,030
		36	0,067	64	0,029	102	0,017	150	0,014	212	0,011	278	0,017
		38	0,042	66	0,017	106	0,0062	156	0,0054	220	0,0041	288	0,0087
		40	0,0083	68	0,0083	110	0,0014	162	0,0011	228	0,0010	298	0,0036
				70	0,0014							308	0,001
20		40		70		112		168		240		330	

Пример 2.1. Два эксперта определили степень влияния 10 режимных переменных биотехнологического процесса на выход биопродукта при культивировании цианобактерий:

- 1) концентрация витамина В₁ в питательной среде;
- 2) концентрация азота в нитратной форме;
- 3) скорость перемешивания среды культивирования;
- 4) концентрация глюкозы в питательной среде;
- 5) уровень рН среды культивирования;
- 6) концентрация фосфатов в питательной среде;
- 7) концентрация аминного азота в питательной среде;
- 8) концентрация углекислого газа в газовой смеси, подаваемой в биореактор;
- 9) температура в биореакторе;

2.3. Результаты экспертного ранжирования переменных

Эксперт	Альтернатива (режимная переменная)									
	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7	A_8	A_9	A_{10}
Ξ_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ξ_2	2	3	1	4	6	5	9	7	8	10

10) уровень освещенности культуральной среды. Результаты ранжирования 10 альтернатив приведены в табл. 2.3; требуется вычислить коэффициент ранговой корреляции Спирмена и оценить значимость его оценки.

В данном примере $n = 10$, связанные ранги отсутствуют ($T_1, T_2 = 0$). Вычислим выборочный коэффициент корреляции Спирмена:

$$\rho_{1,2} = 1 - \frac{6}{(n^3 - n)} \sum_{j=1}^n (r_{1j} - r_{2j})^2 = 1 - \frac{6}{(10^3 - 10)} [(1 - 2)^2 + (2 - 3)^2 + (3 - 1)^2 + (4 - 4)^2 + (5 - 6)^2 + (6 - 5)^2 + (7 - 9)^2 + (8 - 7)^2 + (9 - 8)^2 + (10 - 10)^2] = 0,915.$$

Определим статистическую значимость полученной оценки при заданном уровне значимости $\alpha = 0,05$. По табл. 2.2 при $n = 10, Q = \alpha/2$ находим $S_C = S_C(10; 0,025) \approx 270$, $K_n = \frac{1}{3}(n^3 - n) = \frac{1}{3}(10^3 - 10) = 330$ и вычисляем

$$\rho_{C\max} = \frac{2S_C(n,Q)}{K_n} - 1 = \frac{2 \cdot 270}{330} - 1 = 0,6363.$$

Вывод: поскольку выборочное значение коэффициента ранговой корреляции Спирмена превышает пороговое значение $\rho_{C\max}$ ($\rho_{1,2} = 0,915 > \rho_{C\max} = 0,6363$), то следует признать наличие статистически значимой связи между сравниваемыми ранжировками, и оценка коэффициента ранговой корреляции Спирмена является значимой.

Пример 2.2. Для достижения двух целей (производства максимального количества биомассы клеток и наибольшего количества внутриклеточных липидов) эксперт-биотехнолог предложил семь мероприятий:

1) культивирование микроорганизма липидной направленности в оптимальных, а затем стрессовых условиях (при дефиците азота),

2) культивирование микроорганизма липидной направленности в оптимальных, а затем стрессовых условиях (при дефиците фосфора),

3) культивирование дикого штамма микроорганизма в оптимальных, а затем стрессовых условиях (при дефиците азота),

4) культивирование дикого штамма микроорганизма в оптимальных, а затем стрессовых условиях (при дефиците фосфора),

5) культивирование дикого штамма микроорганизма в оптимальных условиях,

б) культивирование микроорганизма липидной направленности в стрессовых условиях (при дефиците азота),

7) культивирование дикого штамма микроорганизма в стрессовых условиях при дефиците азота) и дал оценку в баллах эффективности мероприятий для достижения целей (табл. 2.4).

Используя коэффициент ранговой корреляции Спирмена, определить, насколько способствуют мероприятия одновременному достижению целей.

Вначале выполним ранжирование мероприятий по достижению двух целей, присваивая наивысший ранг (первый) мероприятию с максимальным числом баллов (табл. 2.5).

2.4. Результаты экспертного ранжирования мероприятий

Цель	Мероприятие						
	М ₁	М ₂	М ₃	М ₄	М ₅	М ₆	М ₇
Ц ₁	20	15	8	10	2	4	7
Ц ₂	15	10	6	12	1	3	6

2.5. Результаты экспертного ранжирования мероприятий

Цель	Мероприятие						
	М ₁	М ₂	М ₃	М ₄	М ₅	М ₆	М ₇
Ц ₁	1	2	4	3	7	6	5
Ц ₂	1	3	4,5	2	7	6	4,5

В данном примере $n = 7$, для второй цели имеются связанные ранги ($T_1 = 0, T_2 = \frac{1}{12}(2^3 - 2) = 0,5$). Вычислим выборочный коэффициент корреляции Спирмена по формуле

$$\rho_{1,2} = \frac{\frac{1}{6}(n^3 - n) - S_{1,2}^2 - T_2}{\sqrt{\left[\frac{1}{6}(n^3 - n)\right]\left[\frac{1}{6}(n^3 - n) - 2T_2\right]}} = \frac{\frac{1}{6}(7^3 - 7) - 2,5 - 0,5}{\sqrt{\left[\frac{1}{6}(7^3 - 7)\right]\left[\frac{1}{6}(7^3 - 7) - 2 \cdot 0,5\right]}} = 0,955,$$

где $S_{1,2}^2 = \sum_{j=1}^n (r_{1j} - r_{2j})^2 = [(1 - 1)^2 + (2 - 3)^2 + (4 - 4,5)^2 + (3 - 2)^2 + (7 - 7)^2 + (6 - 6)^2 + (5 - 4,5)^2] = 2,5$.

Определим значимость полученной оценки при уровне значимости $\alpha = 0,05$. По таблице 2.2 при $n = 7, Q = \alpha/2$ находим $S_C = S_C(7; 0,025) \approx 100$, $K_n = \frac{1}{3}(n^3 - n) = \frac{1}{3}(7^3 - 7) = 112$ и вычисляем

$$\rho_{C\max} = \frac{2S_C(n, Q)}{K_n} - 1 = \frac{2 \cdot 100}{112} - 1 = 0,7857.$$

Вывод: поскольку выборочное значение коэффициента ранговой корреляции Спирмена превышает пороговое значение ($\rho_{1,2} = 0,955 > \rho_{C\max} = 0,7857$), то следует признать, что оценка коэффициента ранговой корреляции Спирмена является значимой и предложенные мероприятия способствуют одновременному достижению целей.

Пример 2.3. Два эксперта-биотехнолога провели ранжирование пяти альтернативных вариантов источников азота в составе питательной среды при культивировании микроводорослей:

- 1) дрожжевой гидролизат;
- 2) куриный пептон;
- 3) соевая мука;
- 4) катионы аммония;
- 5) нитрат-анионы; результаты ранжирования приведены в табл. 2.6.

2.6. Результаты экспертного ранжирования мероприятий

Эксперт	Альтернатива				
	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5
\mathcal{E}_1	2	1	4	3	5
\mathcal{E}_2	1	2	4	5	3

Определить статистическое согласие мнений экспертов, вычислив коэффициент ранговой корреляции Спирмена.

Поскольку связанные ранги в ранжировках отсутствуют ($T_1 = T_2 = 0$), выборочный коэффициент ранговой корреляции Спирмена будем рассчитывать по формуле

$$\rho_{1,2} = 1 - \frac{6}{(n^3 - n)} \sum_{j=1}^n (r_{1j} - r_{2j})^2 = 1 - \frac{6}{(5^3 - 5)} ((2 - 1)^2 + (1 - 2)^2 + (4 - 4)^2 + (3 - 5)^2 + (5 - 3)^2) = 0,5.$$

При $\alpha = 0,05$, $n = 5$ по табл. 2.2 определим величину $S_C = S_C(5; 0,025) = 39$, и рассчитаем пороговое значение $\rho_{C\max}$ по формуле

$$\rho_{C\max} = \frac{2S_C(n, \alpha)}{K_n} - 1 = \frac{2 \cdot 39}{\frac{1}{3}(5^3 - 5)} - 1 = 0,95.$$

Вывод: поскольку значение выборочного коэффициента ранговой корреляции Спирмена $\rho_{1,2} = 0,5$ меньше порогового значения $\rho_{C\max} = 0,95$, то оценка коэффициента $\rho_{1,2}$ не является статистически значимой, и следует принять гипотезу об отсутствии статистической связи между сравниваемыми ранжировками.

Рассмотрим вопросы оценки согласованности мнений экспертов, когда число экспертов больше двух. В качестве меры согласованности мнений группы экспертов чаще используют дисперсионный коэффициент конкордации (или согласованности) Кэндалла, реже – энтропийный коэффициент конкордации.

Коэффициент конкордации Кэндалла. Пусть $\|r_{ij}\|$ – матрица результатов ранжирования, полученная в результате оценки n альтернатив m экспертами, т.е. r_{ij} – ранг, присваиваемый i -м экспертом j -й альтернативе.

Составим суммы рангов по каждому столбцу матрицы; в результате получим вектор R_j с компонентами:

$$R_j = \sum_{i=1}^m r_{ij}, j = 1, 2, \dots, n.$$

Поскольку величины R_j представляют собой реализации случайной величины, найдем несмещенную оценку дисперсии D по формуле

$$D = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (R_j - \bar{r})^2,$$

где \bar{r} – оценка математического ожидания, $\bar{r} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n R_j = \frac{1}{2} m(n+1)$.

Дисперсионный коэффициент конкордации W равен отношению оценки дисперсии к максимальному значению D_{\max} этой величины, т.е. $W = D/D_{\max}$, где $0 \leq W \leq 1$.

При наличии связанных рангов дисперсионный коэффициент конкордации вычисляется по следующей формуле:

$$W = \frac{12S}{m^2(n^3-n) - m \sum_{i=1}^m T_i}, S = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m r_{ij} - \bar{r} \right)^2, T_i = \sum_{k=1}^{H_i} (h_k^3 - h_k),$$

где T_i – показатель связанных рангов в i -й ранжировке; H_i – число групп равных рангов в i -й ранжировке; h_k – число равных рангов в k -й группе связанных рангов в i -й ранжировке.

Если совпадающих рангов нет, то $H_i = 0$ и, следовательно, $T_i = 0$; в этом случае дисперсионный коэффициент конкордации вычисляется по формуле

$$W = \frac{12S}{m^2(n^3-n)}.$$

Коэффициент конкордации является выборочной оценкой истинного (теоретического) значения коэффициента и, следовательно, представляет собой случайную величину, для определения значимости которой необходимо знать распределение вероятностей для разных значений числа экспертов m и количества альтернатив n . Для малых значений m и n ($2 \leq m \leq 20, 3 \leq n \leq 7$), выборочных значений $S = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m r_{ij} - \frac{1}{2} m(n+1) \right)^2$ с помощью табл. 2.7 – 2.10 может быть определено пороговое значение вероятности $P_T = 1 - \alpha_T$, и получен

ответ на вопрос о том, как сильно могут отклоняться от нуля выборочные значения коэффициента конкордации W . «Входами» в указанные таблицы является тройка чисел (m, n, S) , «выходом» – вероятность $P_T = 1 - \alpha_T$ того, что значение S при n сравниваемых альтернативах и соответствующем m достигнет или превысит табличное значение S_T .

Если окажется, что табличное значение уровня значимости α_T меньше принятой величины уровня значимости критерия α (например, $\alpha = 0,05$), т.е. $\alpha_T < \alpha$, то гипотезу об отсутствии связи следует отвергнуть, т.е. признать статистическую значимость анализируемой связи.

2.7. К проверке статистической значимости выборочной величины коэффициента конкордации

S_T	$m = 2$	$m = 3$	$m = 4$	$m = 5$	$m = 6$	$m = 7$	$m = 8$	$m = 9$	$m = 10$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
2	0,833	0,944	0,931	0,954	0,956	0,964	0,967	0,971	0,974
6	0,500	0,528	0,653	0,691	0,740	0,768	0,794	0,814	0,830
8	0,167	0,361	0,431	0,522	0,570	0,620	0,654	0,685	0,710
14		0,194	0,273	0,367	0,430	0,486	0,531	0,569	0,601
18		0,028	0,125	0,182	0,252	0,305	0,355	0,398	0,436
24			0,069	0,124	0,184	0,237	0,285	0,328	0,368
26			0,042	0,0930	0,142	0,192	0,236	0,278	0,316
32			0,0046	0,039	0,072	0,112	0,149	0,187	0,222
38				0,024	0,052	0,085	0,120	0,154	0,187
42				0,0085	0,029	0,051	0,079	0,107	0,135
50				0,00077	0,012	0,027	0,047	0,069	0,092
54					0,0081	0,021	0,038	0,057	0,078
56					0,0055	0,016	0,030	0,048	0,066
62					0,0017	0,0084	0,018	0,031	0,046
72					0,00013	0,0036	0,0099	0,019	0,030
74						0,0027	0,0080	0,016	0,026
78						0,0012	0,0048	0,010	0,018

2.8. К проверке статистической значимости выборочной величины коэффициента конкордации W : вероятность $P_T = 1 - \alpha_T$ того, что выборочное значение S при трех сравниваемых альтернативах ($n = 3$) и соответствующем m достигнет или превысит табличное значение S_T

S_T	$m = 3$	$m = 5$	ST	$m = 5$
1	2	3	4	5
1	1,000	1,000	61	0,055
3	0,958	0,975	65	0,044
5	0,910	0,944	67	0,034
9	0,727	0,857	69	0,031
11	0,608	0,771	73	0,023
13	0,524	0,709	75	0,020
17	0,446	0,652	77	0,017
19	0,342	0,561	81	0,012
21	0,300	0,521	83	0,0087
25	0,207	0,445	85	0,0067
27	0,175	0,408	89	0,0055
29	0,148	0,372	91	0,0031
33	0,075	0,298	93	0,0023
35	0,054	0,260	97	0,0018
37	0,033	0,226	99	0,0016
41	0,017	0,210	101	0,0014
43	0,0017	0,162	105	0,00064
45	0,0017	0,141	107	0,00033

2.9. К проверке статистической значимости выборочной величины коэффициента конкордации W : вероятность $P_T = 1 - \alpha_T$ того, что выборочное значение S при четырех сравниваемых альтернативах ($n = 4$) и соответствующем m достигнет или превысит табличное значение S_T

S_T	$m = 2$	$m = 4$	$m = 6$	S_T	$m = 6$
1	2	3	4	5	6
0	1,000	1,000	1,000	82	0,035
2	0,958	0,992	0,996	84	0,032
4	0,833	0,928	0,957	86	0,029
6	0,792	0,900	0,940	88	0,023
8	0,625	0,800	0,874	90	0,022
10	0,542	0,754	0,844	94	0,017
12	0,458	0,677	0,789	96	0,014
14	0,375	0,649	0,772	98	0,013
16	0,208	0,524	0,679	100	0,010
18	0,167	0,508	0,668	102	0,0096
20	0,042	0,432	0,609	104	0,0085
22		0,389	0,574	106	0,0073
24		0,365	0,541	108	0,0061
26		0,324	0,512	110	0,0057
30		0,242	0,431	114	0,0040
32		0,200	0,386	116	0,0033
34		0,190	0,375	118	0,0028
36		0,158	0,338	120	0,0023
38		0,141	0,317	122	0,0020
40		0,105	0,270	126	0,0015
42		0,094	0,256	128	0,00090
44		0,077	0,230	130	0,00087
46		0,068	0,218	132	0,00073
48		0,054	0,197	134	0,00065
50		0,052	0,194	136	0,00040
52		0,036	0,163	138	0,00036
54		0,033	0,155	140	0,00028
56		0,019	0,127	144	0,00024
58		0,014	0,114	146	0,00022
62		0,012	0,108	148	0,00012

2.10. К проверке статистической значимости выборочной величины коэффициента конкордации W : вероятность $P_T = 1 - \alpha_T$ того, что выборочное значение S при пяти сравниваемых альтернативах ($n = 5$) и $m = 3$ достигнет или превысит табличное значение S_T

S_1	$m = 3$	S_2	$m = 3$	S_3	$m = 3$	S_4	$m = 3$
0	1,000	22	0,649	44	0,236	66	0,038
2	1,000	24	0,595	46	0,213	68	0,028
4	0,988	26	0,559	48	0,172	70	0,026
6	0,972	30	0,493	50	0,163	72	0,017
8	0,941	28	0,475	52	0,127	74	0,015
10	0,914	32	0,432	54	0,117	76	0,0078
12	0,845	34	0,406	56	0,096	78	0,0053
14	0,831	36	0,347	58	0,080	80	0,0040
16	0,768	38	0,326	62	0,063	82	0,0028
18	0,720	40	0,291	64	0,056	86	0,0009
20	0,682	42	0,253	44	0,045	90	0,000069

Следующая таблица критических значений коэффициента конкордации W (табл. 2.11) построена несколько иначе; в ней при уровне значимости $\alpha = 0,05$ и в соответствии со «входами» (m, n) приведены «критические» значения S_T

2.11. К проверке статистической значимости выборочной величины коэффициента конкордации W : критические значения S_T при заданном уровне значимости α , n сравниваемых альтернативах и m ранжировках

$\alpha = 0,05$							
m	n					$n = 3$	
	3	4	5	6	7	m	S_T
1	2	3	4	5	6	7	8
3			64,4	103,9	157,3	9	54,0
4		49,5	88,4	143,3	217,0	12	71,9
5		62,6	112,3	182,4	276,2	14	83,8
6		75,7	136,1	221,4	335,2	16	95,8
8	48,1	101,7	183,7	299,0	453,1	18	107,7
10	60,0	127,8	231,2	376,7	571,0		
15	89,8	192,9	349,8	570,5	864,9		
20	119,7	258,0	468,5	764,4	1158,7		

$\alpha = 0,01$							
m	n					$n = 3$	
	3	4	5	6	7	m	S_r
3			75,6	122,8	185,6	9	75,9
4		61,4	109,3	176,2	265,0	12	103,5
5		80,5	142,8	229,4	343,8	14	121,9
6		99,6	176,1	282,4	422,6	16	140,2
8	66,8	137,4	242,7	388,3	579,9	18	158,6
10	85,1	175,3	309,1	494,0	737,0		
15	131,0	269,8	475,2	758,2	1129,5		
20	177,0	364,2	641,2	1022,2	1521,9		

вспомогательной величины S , т.е. такие критические значения, при превышении которых следует отвергать гипотезу об отсутствии связей между ранжировками и признавать их статистическую значимость.

Пример 2.4. Три эксперта проанализировали влияние пяти режимных переменных, наиболее сильно влияющих на протекание биотехнологического процесса: температура в биореакторе, состав питательной среды, величина аэрации реакционной массы, уровень рН культуральной среды, скорость перемешивания культурального бульона; результаты ранжирования приведены в табл. 2.12. Требуется оценить согласованность мнений экспертов.

2.12. Результаты экспертного ранжирования мероприятий

Эксперт	Фактор				
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
\mathcal{E}_1	5	3	4	1,5	1,5
\mathcal{E}_2	4	2	5	2	2
\mathcal{E}_3	3,5	3,5	5	2	1

В данном примере $m = 3, n = 5$, и имеются связанные ранги. Вычислим значения вспомогательной переменной S и коэффициента конкордации W :

$$S = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m r_{ij} - \frac{1}{2}m(n+1) \right)^2 =$$

$$= ((5 + 4 + 3,5) - 9)^2 + ((3 + 2 + 3,5) - 9)^2 + ((4 + 5 + 5) - 9)^2 +$$

$$+ ((1,5 + 2 + 2) - 9)^2 + ((1,5 + 2 + 1) - 9)^2 = 70;$$

$$T_1 = 2^3 - 2 = 6, T_2 = 3^3 - 3 = 24, T_3 = 2^3 - 2 = 6;$$

$$W = \frac{12S}{m^2(n^3-n) - m \sum_{i=1}^m T_i} = \frac{12 \cdot 70}{9(125-5) - 3(6+24+6)} = 0,8642.$$

В целях определения статистической значимости коэффициента конкордации W из табл. 2.11 находим $\alpha_T = 0,026$. Если выбрать уровень значимости критерия $\alpha = 0,05$, то $\alpha_T = 0,026 < \alpha = 0,05$ и гипотезу об отсутствии связи между ранжировками следует отвергнуть, т.е. признать статистическую значимость анализируемой связи (коэффициента конкордации) и считать, что мнения экспертов согласованны.

Также можно воспользоваться табл. 2.12, из которой для $m = 3, n = 5$ и уровня значимости критерия $\alpha = 0,05$ находим то пороговое значение $S_T = 64,4$ вспомогательной величины S , при превышении которого ($S = 70 > S_T = 64,4$) гипотезу об отсутствии связи между ранжировками следует отвергнуть, т.е. признать статистическую значимость анализируемой связи (коэффициента конкордации) и считать, что мнения экспертов согласованны.

Пример 2.5. При проектировании сложной биотехнологической системы было выделено шесть основных проблем: 1 – подготовка исходных данных для проектирования; 2 – устойчивость; 3 – согласованность стадий переработки сырья и выделения биопродукта; 4 – управляемость БТС; 5 – сложность подготовки посевного материала; 6 – переработка и обезвреживание отходов произ-

водства. Пять экспертов проранжировали эти проблемы по их важности (табл. 2.13).

Провести ранжирование проблем по их важности, вычислить дисперсионный коэффициент конкордации, оценить согласованность мнений экспертов.

Проведем ранжирование проблем по их важности; для этого вычислим суммы рангов R_j , полученных каждой альтернативой от всех экспертов:

$$R_j = \sum_{i=1}^m r_{ij}, R_1 = 10, R_2 = 13, R_3 = 18, R_4 = 11, R_5 = 29, R_6 = 24,$$

и далее альтернативы упорядочим в порядке возрастания суммы рангов:

$$\Pi_1 \succ \Pi_4 \succ \Pi_2 \succ \Pi_3 \succ \Pi_6 \succ \Pi_5,$$

где \succ – знак предпочтительности (важнее).

При отсутствии связанных рангов дисперсионный коэффициент конкордации определяют по формуле

$$W = \frac{12S}{m^2(n^3-n)}, \quad S = \sum_{j=1}^n (\sum_{i=1}^m r_{ij} - \bar{r})^2,$$

$$\bar{r} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n R_j = \frac{1}{2} m(n+1).$$

2.13. Результаты экспертного ранжирования мероприятий

Эксперт	Проблема					
	Π_1	Π_2	Π_3	Π_4	Π_5	Π_6
\mathcal{E}_1	1	4	3	2	6	5
\mathcal{E}_2	2	1	3	4	5	6
\mathcal{E}_3	2	4	5	1	6	3
\mathcal{E}_4	1	3	4	2	6	5
\mathcal{E}_5	4	1	3	2	6	5

Вычислим значения вспомогательной переменной S и коэффициента конкордации W :

$$\begin{aligned}
 S &= \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m r_{ij} - \frac{1}{2}m(n+1) \right)^2 = \\
 &= ((1+2+2+1+4) - 17,5)^2 + ((4+1+4+3+1) - 17,5)^2 + \\
 &= ((3+3+5+4+3) - 17,5)^2 + ((2+4+1+2+2) - 17,5)^2 + \\
 &= ((5+6+3+5+5) - 17,5)^2 = 293,5;
 \end{aligned}$$

$$W = \frac{12S}{m^2(n^3-n)} = \frac{12 \cdot 293,5}{25(6^3-6)} = 0,67.$$

В целях определения значимости коэффициента конкордации W воспользуемся табл. 2.12, из которой для $m = 5, n = 6$ и уровня значимости критерия $\alpha = 0,05$ находим то пороговое значение $S_T = 182,4$ вспомогательной величины S , при превышении которого ($S = 293,5 > S_T = 182,4$) гипотезу об отсутствии связи между ранжировками следует отвергнуть, т.е. признать статистическую значимость анализируемой связи (коэффициента конкордации) и считать, что мнения экспертов согласованны.

Для больших значений n и m можно использовать известные статистики; так, при числе альтернатив $n > 7$ оценка значимости коэффициента конкордации может быть проведена по критерию χ^2 (Хи-квадрат). Установлено, что величина $m(n-1)W$ имеет χ^2 -распределение с $\nu = n-1$ степенями свободы. Для оценки значимости W выбирают уровень значимости критерия α (часто равный 0,05) и далее по табл. 2.14 при $\nu = n-1$ определяют величину $\chi_\alpha^2(\nu)$. Если $m(n-1)W \geq \chi_\alpha^2(\nu)$, то гипотезу об отсутствии связи между ранжировками следует отвергнуть, признать коэффициент W статистически значимым и считать, что мнения экспертов согласованны.

2.14. Значения 100α%-ных точек $\chi^2_\alpha(v)$ с v степенями свободы

v	α									
	0,995	0,990	0,975	0,950	0,900	0,100	0,050	0,025	0,010	0,005
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	$4 \cdot 10^{-15}$	$2 \cdot 10^{-15}$	$1 \cdot 10^{-15}$	$4 \cdot 10^{-13}$	0,0158	2,7055	3,8415	5,0239	6,6349	7,8794
2	0,0100	0,0201	0,0506	0,1026	0,2107	4,6052	5,9915	7,3778	9,2103	10,5966
3	0,0717	0,1148	0,2158	0,3518	0,5844	6,2514	7,8147	9,3484	11,3449	12,8381
4	0,2070	0,2971	0,4844	0,7107	1,0636	7,7794	9,4877	11,1433	13,2767	14,8602
5	0,4117	0,5543	0,8312	1,1455	1,6103	9,2363	11,0705	12,8325	15,0860	16,7496
6	0,6757	0,8721	1,2373	1,6354	2,204 1	10,6446	12,5916	14,0671	16,8119	18,5476
7	0,9893	1,2390	1,6899	2,1673	2,8331	12,0170	14,0671	16,0128	18,753	20,2777
8	1,3444	1,6465	2,1797	2,7326	3,4895	13,3616	15,5073	17,5346	20,0902	21,9550
9	1,7349	2,0879	2,7004	3,3251	4,1682	14,6837	16,9190	19,0228	21,6660	23,5893
10	2,1558	2,5582	3,2470	3,9403	4,8652	15,9871	18,3070	20,4831	23,2093	25,1882
11	2,6032	3,0536	3,8157	4,5748	5,5778	17,2750	19,6751	21,9200	24,7250	26,7569
12	3,0738	3,5706	4,4038	5,2260	6,3038	18,5494	21,0261	23,3367	26,2170	28,2995
13	3,5650	4,1069	5,0087	5,8919	7,0415	19,8119	22,3621	24,7356	27,6883	29,8194
14	4,0747	4,6604	5,6287	6,5706	7,7895	21,0642	23,6848	26,1190	29,1413	31,3193
15	4,6009	5,2293	6,2621	7,2609	8,5467	22,3072	24,9958	27,4884	30,5779	32,8013

Продолжение табл. 2.14

v	α									
	0,995	0,990	0,975	0,950	0,900	0,100	0,050	0,025	0,010	0,005
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
16	5,1422	5,8122	6,9077	7,9616	9,3122	23,5418	26,2962	28,8454	31,9999	34,2672
17	5,6972	6,4078	7,5642	8,6718	10,0852	24,7690	27,5871	30,1910	33,4087	35,7185
18	6,2648	7,0149	8,2307	9,3905	10,8649	25,9894	28,8693	31,5264	34,8053	37,1564
19	6,8440	7,6327	8,9065	10,1170	11,6509	27,2036	30,1435	32,8523	36,1908	38,5822
20	7,4339	8,2604	9,5908	10,8508	12,4426	28,4120	31,4104	34,1696	37,5662	39,9968
21	8,0337	8,8972	10,2829	11,5913	13,2396	29,6151	32,6705	35,4789	38,9321	41,4010
30	13,7867	14,9535	16,7908	18,4926	20,5992	40,2560	43,7729	46,9792	50,8922	53,6720
40	20,7065	22,1643	24,4331	26,5093	29,0505	51,8050	55,7585	59,3417	63,6907	66,7659
50	27,9907	29,7067	32,3574	34,7642	37,6886	63,1671	67,5048	71,4202	76,1539	79,4900
60	35,5346	37,4848	40,4817	43,1879	46,4589	74,3970	79,0819	83,2976	88,3794	91,9517
70	43,2752	45,4418	48,7576	51,7393	55,3290	85,5271	90,5312	95,0231	100,425	104,215
80	51,1720	53,5400	57,1532	60,3915	64,2778	96,5782	101,879	106,629	112,329	116,321
90	59,1963	61,7541	65,6466	69,1260	73,2912	107,565	113,145	118,136	124,116	128,299
100	67,3276	70,0648	74,2219	77,9295	82,3581	118,498	124,342	129,561	135,807	140,169

Следующий пример иллюстрирует то, как оценивается значимость коэффициента конкордации Кэндалла по критерию χ^2 .

Пример 2.6. Метод экспертного оценивания был применен для оценки 10 факторов, наиболее сильно влияющих на эффективность функционирования БТС:

- 1) концентрация аминного азота в питательной среде;
- 2) скорость перемешивания;
- 3) вид фотобиореактора;
- 4) концентрация витамина В₂ в питательной среде;
- 5) уровень углекислого газа в газовой смеси;
- 6) уровень рН культуральной среды;
- 7) качество посевного материала;
- 8) уровень освещенности;
- 9) стерильность оборудования;

10) концентрация катионов магния в питательной среде, наиболее сильно влияющих на кинетику биотехнологического процесса культивирования цианобактерий.

Результаты ранжирования приведены в табл. 2.15; требуется оценить согласованность мнений экспертов.

2.15. Результаты экспертного ранжирования влияния факторов на эффективность функционирования БТС

Эксперт	Фактор									
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}
Э ₁	1	3	4,5	4,5	6,5	6,5	9	10	2	8
Э ₂	1,5	1,5	5	6	7,5	7,5	9,5	9,5	3	4
Э ₃	2	2	4,5	4,5	8,5	8,5	8,5	8,5	2	6
Э ₄	1	3	4	5	7,5	7,5	9,5	9,5	2	6
Э ₅	1,5	1,5	5,5	5,5	7	8	9	10	3,5	3,5

В данном примере $m = 5, n = 10$, и имеются связанные ранги. Вычислим значения вспомогательной величины S и дисперсионного коэффициента конкордации W :

$$\begin{aligned}
 S &= S = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m r_{ij} - \frac{1}{2}m(n+1) \right)^2 = \\
 &= ((1 + 1,5 + 2 + 1 + 1,5) - 27,5)^2 + ((3 + 1,5 + 2 + 3 + 1,5) - 27,5)^2 + \\
 &+ ((4,5 + 5 + 4,5 + 4 + 5,5) - 27,5)^2 + ((4,5 + 6 + 4,5 + 5 + 5,5) - 27,5)^2 + \\
 &+ ((6,5 + 7,5 + 8,5 + 7,5 + 7) - 27,5)^2 + ((6,5 + 7,5 + 8,5 + 7,5 + 8) - 27,5)^2 + \\
 &+ ((9 + 9,5 + 8,5 + 9,5 + 9) - 27,5)^2 + ((10 + 9,5 + 8,5 + 9,5 + 10) - 27,5)^2 + \\
 &+ ((2 + 3 + 2 + 2 + 3,5) - 27,5)^2 + ((8 + 4 + 6 + 6 + 3,5) - 27,5)^2 = 1862.
 \end{aligned}$$

Поскольку в ранжировках имеются связанные ранги, то для вычисления коэффициента конкордации сначала найдем величины T_i :

$$T_1 = (2^3 - 2) + (2^3 - 2) = 12, T_2 = (2^3 - 2) + (2^3 - 2) + (2^3 - 2) = 18,$$

$$T_3 = (2^3 - 2) + (4^3 - 4) = 90, T_4 = (2^3 - 2) + (2^3 - 2) = 12,$$

$$T_5 = (2^3 - 2) + (2^3 - 2) + (2^3 - 2) = 18,$$

а затем рассчитаем его значение:

$$W = \frac{12 \cdot S}{m^2(n^3 - n) - m \sum_{i=1}^m T_i} = \frac{12 \cdot 1862}{25(1000 - 10) - 5(12 + 18 + 90 + 12 + 18)} = 0,931.$$

Далее оценим значимость коэффициента конкордации; в данном случае число степеней свободы $\nu = n - 1 = 9$; табличное значение $\chi_\alpha^2(\nu)$ для числа степеней свободы $\nu = 9$ и уровня значимости $\alpha = 0,05$ равно $\chi_\alpha^2(\nu) = 16,92$. Вычислим выборочное значение χ^2 : $\chi^2 = m(n - 1)W = 5 \cdot 9 \cdot 0,931 = 41,895$.

Поскольку значение $\chi_\alpha^2(\nu) = 16,92 < \chi^2 = 41,895$, гипотеза об отсутствии статистически значимой связи между ранжировками отвергается и считается, что мнения экспертов согласованны.

Обработка экспертной информации, полученной на основе метода парных сравнений.

Пусть m экспертов проводят оценивание всех пар альтернатив, давая количественную оценку:

$$r_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } A_i \succ A_j, \\ 0,5, & \text{если } A_i \sim A_j, \\ 0, & \text{если } A_i \prec A_j. \end{cases}$$

При оценивании пары альтернатив A_i и A_j m_i экспертов высказались в пользу предпочтения $A_i \succ A_j$, m_j экспертов высказались противоположным образом – $A_i \prec A_j$, а m_h экспертов считают эти альтернативы равноценными; тогда оценка x_{ij} математического ожидания случайной величины r_{ij} такова:

$$x_{ij} = M\{r_{ij}\} = 1 \cdot \frac{m_i}{m} + 0,5 \cdot \frac{m_h}{m} + 0 \cdot \frac{m_j}{m}, \quad m = m_i + m_h + m_j.$$

Выразив m_h из формулы $m = m_i + m_h + m_j$ и подставив в выражение для оценки x_{ij} математического ожидания случайной величины r_{ij} , получим:

$$x_{ij} = \frac{1}{2} + \frac{m_i + m_j}{2m}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n.$$

Очевидно, что $x_{ij} = x_{ji} = 1$. Совокупность величин x_{ij} образует матрицу $n \times n$, на основе которой можно построить ранжировку всех альтернатив и определить коэффициенты относительной важности альтернатив.

3. ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЕ МЕТОДЫ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ

Задачи принятия решений, возникающие при оценке свойств биотехнологических систем, при проектировании и управлении ими, как правило, являются многокритериальными, так как биотехнологические системы обычно описываются несколькими свойствами – локальными критериями.

3.1. ПОСТАНОВКИ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНЫХ ЗАДАЧ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ

Проблемная ситуация многокритериального принятия решений при определенности формально описывается следующим образом:

- существуют альтернативы (варианты, стратегии действий и т.п.) x , принадлежащие исходному множеству X альтернатив, образованному соответствующими ситуации условиями и ограничениями ($x \in X$);

- альтернативы x обладают m свойствами (характеристиками) z_1, z_2, \dots, z_m ;

- каждому i -му ($i = 1, 2, \dots, m$) свойству z_i соответствует критериальная оценка $z_i = f_i(x)$ – локальный критерий;

- значения локальных критериев таковы, что *лучшие значения* те, которые *больше*;

- каждой альтернативе x соответствует в m -мерном критериальном пространстве Z решение (точка)

$$z = (z_1, z_2, \dots, z_m) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)) \in R^m.$$

Требуется решить одну из следующих задач:

- 1) упорядочение альтернатив по совокупности m свойств;

2) выбор – выделение лучшей альтернативы; необходимо предложить формализованную постановку детерминированной задачи выбора, сведя ее к задаче оптимизации, и предложить алгоритм решения поставленной задачи.

По признаку непрерывности задачи принятия решений делят на дискретные, непрерывные и смешанные. В целях упрощения описания в дальнейшем мы будем рассматривать дискретные задачи принятия решений с обозначением альтернатив как $x_k, k = 1, 2, \dots, n$; множество альтернатив X в этом случае состоит из n альтернатив, т.е. $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$. Решая задачу выбора, требуется выбрать номер k , которому соответствует лучшая альтернатива.

Дополним представленное описание задачи условием того, что лучшими значениями по каждому локальному критерию являются решения с большими значениями критерия.

Постановка задачи принятия решений в общем случае имеет следующий вид: требуется найти альтернативу (решение) x^* , для которой выполняется условие

$$x^* = \arg \max_{x \in X} f_i(x), i = 1, 2, \dots, m, \quad (3.1)$$

где $f_i(x)$ – локальные критерии, значения которых либо вычисляются, либо получены с помощью экспертных оценок; X – исходное множество альтернатив.

Сформулированная задача является некорректной, поскольку она имеет решение только в том исключительном случае, когда максимум всех m критериев достигается в одной точке; обычно критерии являются противоречивыми, и улучшение (увеличение) значений по одному из критериев приводит к ухудшению (уменьшению) значений по другим критериям. В этой ситуации требуется искать компромиссное решение.

При наличии различного характера локальных критериев необходимо их предварительное преобразование, связанное с формированием одно-направленных критериев и их нормализацией.

Для преодоления неопределенности, связанной с многокритериальностью, необходимо ввести понятия лучших решений (альтернатив) и использовать принципы оптимальности, которые обеспечивают способы сравнения решений в пространстве критериев. Сама процедура принятия решений включает следующие операции:

- описание ситуации и оценка ресурсов;
- формирование множества критериев, ограничений, альтернатив;
- оценивание критериев и альтернатив;
- формирование правил выбора;
- упорядочение альтернатив по многомерным признакам;
- выбор и принятие решений.

Задачи принятия решений в условиях определенности характеризуются однозначной детерминированной связью между альтернативами $x \in X$ и результатом выбора $z_i = f_i(x)$, $i = 1, 2, \dots, m$. Важно отметить, что при решении задач оптимизации рассматриваются только статические свойства систем, которые не зависят от времени или являются установившимися величинами в результате завершения переходного процесса в системе.

Разные критерии могут иметь различную важность с точки зрения ЛПР; помимо критериев свойства системы, могут быть описаны также множеством ограничений типа равенств и неравенств.

Ряд приоритета. Ряд приоритета $I = \{1, 2, [3,4], 5, \dots, m\}$ отражает упорядочение критериев по важности: $z_1 \succ z_2 \succ z_3 \propto z_4 \succ z_5 \succ \dots \succ z_m$ и выражает существование более важных, менее важных и эквивалентных по важности критериев. Самый важный критерий имеет номер 1 (z_1), следующий по важности критерий – номер 2 (z_2), критерии с номерами 3 и 4 (z_3, z_4) имеют одинаковую важность и наименее важный критерий имеет номер m (z_m).

Вектор приоритета. В векторе приоритета $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{m-1})^T$ число λ_i показывает (для упорядоченных по важности критериев), во сколько раз критерий z_i более важен, чем критерий z_{i+1} .

Весовой вектор. В весовом векторе $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{m-1})^T$ число γ_i представляет относительную важность i -го критерия z_i по отношению к остальным критериям; связь между элементами весового вектора γ и вектора приоритета λ имеет вид

$$\gamma_i = \lambda_i \gamma_{i+1}, \quad i = 1, 2, \dots, m-1; \quad \gamma_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^m \gamma_i = 1.$$

Нормализация критериев. Часто критерии измеряются в разных единицах, шкалах; для одних критериев лучшие значения – это те, которые больше, а для других, наоборот, меньше. Чтобы сравнивать значения разных критериев, необходимо перейти к однонаправленным шкалам, выразить значения критериев в одинаковых абсолютных единицах либо перейти к безразмерным шкалам.

1. Смена направленности цели (замена \max на \min или \min на \max); предполагается, что критерии описывают достижение некоторой цели.

2. Нормализация по заданному значению: $z_i = \bar{z}_i / z_i^I$, где \bar{z}_i – исходная величина критерия; z_i^I – заданная или идеальная величина критерия, например $z_i^I = \max_{x \in X} \bar{z}_i$; здесь осуществляется переход к безразмерной шкале.

3. Сравнительная нормализация: $z_i = \bar{z}_i - \min_{x \in X} \bar{z}_i$; данная нормализация совмещает наименьшее значение критерия с нулем, и все значения критериев становятся неотрицательными.

4. Естественная нормализация: $z_i = \bar{z}_i / \left(\max_{x \in X} \bar{z}_i - \min_{x \in X} \bar{z}_i \right)$; обычно предполагается, что исходные критерии неотрицательны, в противном случае переходят к полной нормализации $z_i = \left(\bar{z}_i - \min_{x \in X} \bar{z}_i \right) / \left(\max_{x \in X} \bar{z}_i - \min_{x \in X} \bar{z}_i \right)$.

5. Нормализация Севиджа: $z_i = \max_{x \in X} \bar{z}_i - \bar{z}_i$; данная нормализация совмещает наибольшее значение критерия с нулем, все значения критерия становятся неотрицательными, и происходит изменение направленности критерия, т.е. лучшими значениями критерия становятся те, которые меньше.

3.2. ПРИНЦИПЫ ОПТИМАЛЬНОСТИ В ЗАДАЧАХ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ

Постулируемый, т.е. выбранный или сконструированный, принцип оптимальности порождает понятие лучших решений и приводит к этим решениям. Вопрос выбора или конструирования принципа оптимальности стоит вне математической задачи определения лучшего решения; выбор принципа остается за ЛПР и наилучшим образом отражает его представления о качестве решений.

Принцип оптимальности по Парето. Данный принцип используется на начальной стадии решения задачи в целях уменьшения исходного множества решений Z_X . Решение (альтернативу) называют оптимальным по Парето (парето-оптимальным, паретовским, эффективным), если невозможно улучшить (увеличить) решение ни по одному из критериев без ухудшения (уменьшения) решения хотя бы по одному из критериев. Парето-оптимальные решения (альтернативы) составляют множество Парето (множество эффективных решений, множество π -оптимальных альтернатив, множество компромиссов).

Обозначим через X_P – множество Парето в пространстве независимых переменных (параметров) и Z_P – множество Парето в пространстве критериев; тогда эти множества для выпуклого множества Z_X могут быть описаны следующим образом:

$$X_P = \left\{ x: \arg \max_{x \in X} \sum_{i=1}^m \gamma_i z_i(x) = \arg \max_{x \in X} \sum_{i=1}^m \gamma_i f_i(x), \gamma_i \geq 0, \sum_{i=1}^m \gamma_i = 1 \right\};$$

$$Z_P = \left\{ z = (z_1, z_2, \dots, z_m): \max_{x \in X} \sum_{i=1}^m \gamma_i z_i(x) = \max_{x \in X} \sum_{i=1}^m \gamma_i f_i(x), \gamma_i \geq 0, \sum_{i=1}^m \gamma_i = 1 \right\}. \quad (3.2)$$

Считают, что альтернатива x_1 доминирует по Парето альтернативу x_2 ($x_1 \underset{\pi}{\succ} x_2$, альтернатива x_1 лучше по Парето альтернативы x_2), если $f(x_1) \geq f(x_2)$, $i = 1, 2, \dots, m$, и хотя бы для одного i такое неравенство является

строгим. Те альтернативы, для которых не существует доминирующих их допустимых альтернатив $x \in X$, называются оптимальными по Парето.

На рисунке 3.1 приведены примеры выпуклых паретовских множеств для непрерывного и дискретного случаев; при этом множество альтернатив (векторных оценок) в пространстве критериев, доминирующих по Парето альтернативу x (векторную оценку $z = f(x)$), совпадает с положительным ортантом (конусом) $C(x)$, вершина которого перенесена в точку $f(x)$. Для любой точки (альтернативы) $z' = (z'_1, z'_2, \dots, z'_m)^T \in C(x)$ выполняются неравенства $z'_i \geq f_i(x), i = 1, 2, \dots, m$, и хотя бы одно из неравенств будет строгим. Если пересечение положительного ортанта $C(x)$ с множеством векторных оценок Z_X содержит какие-либо точки, кроме $f(x)$, то каждая из этих точек доминирует x по Парето (см. рис. 3.1); альтернатива x^* π -оптимальна, если пересечение конуса $C(x)$ с множеством векторных оценок Z_X состоит из единственной точки $z^* = f(x^*)$.

Структура математического описания множеств Парето в пространстве независимых переменных и в пространстве критериев (в случае выпуклых множеств) приводит к простому алгоритму построения множества Парето: определить множество Γ величин весового вектора $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_m)^T$, найти паретовские точки по выражению (3.2) для каждого $\gamma \in \Gamma$, построить конечно-разностную аппроксимацию паретовского множества по полученным точкам.

Принцип идеальной точки. Согласно принципу идеальной точки лучшим считается решение, расположенное в пространстве параметров ближе всего (в смысле некоторой нормы) к «идеальной точке» z^{id} :

$$F(x^*) = \min_{x \in X} F(x) = \min_{x \in X} \|z^{id} - z(x), \gamma\|,$$

где $F(x)$ — целевая функция; $z^{id} = (z_1^{id}, z_2^{id}, \dots, z_q^{id})^T$ — идеальная (несуществующая) точка; $\|\cdot\|$ — норма; γ — весовой вектор.

Запись, приведенную выше, называют сверткой значений критериев или просто сверткой.

В случае применения евклидовой нормы получим

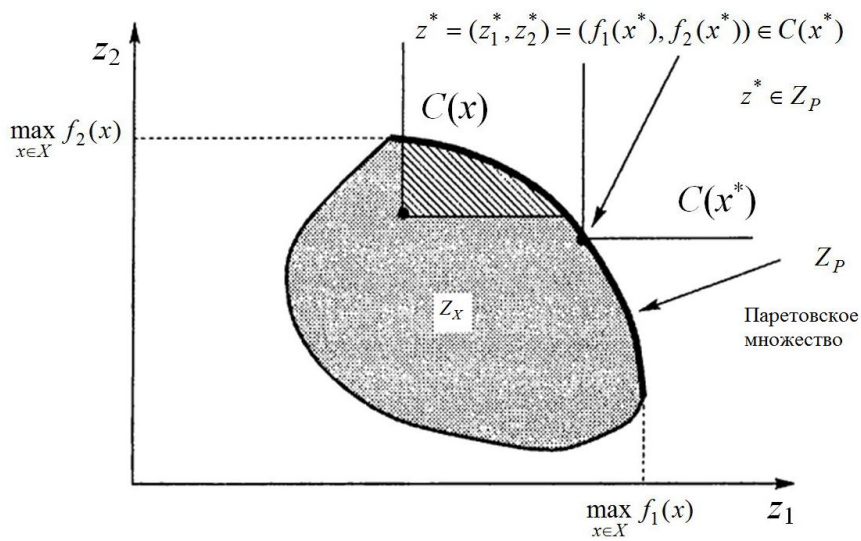
$$x^* = \arg \min_{x \in X} \sum_{i=1}^m \gamma_i^2 (z_i^{id} - z_i)^2.$$

Для удобства можно использовать относительные величины

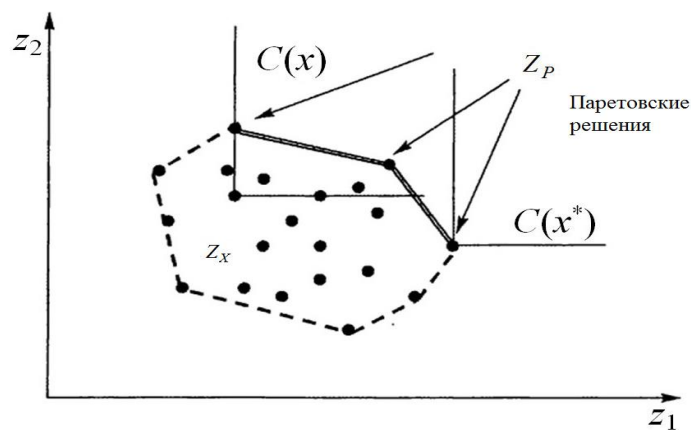
$$x^* = \arg \min_{x \in X} \sum_{i=1}^m \gamma_i^2 \left(1 - \frac{z_i}{z_i^{id}}\right)^2.$$

В общем случае для нормы Гельдера имеем

$$x^* = \arg \min_{x \in X} \left(\sum_{i=1}^m \gamma_i^p (z_i^{id} - z_i)^p \right)^{1/p}.$$



а)



б)

Рис. 3.1. Примеры выпуклых непрерывного (а) и дискретного (б) множеств Парето

Идеальная точка может быть выбрана ЛПР интуитивно или взята формально как вектор максимальных значений каждого из критериев в отдельности:

$$z^{id} = (z_1^{id}, z_2^{id}, \dots, z_m^{id})^T = \left(\max_{x \in X} f_1(x), \max_{x \in X} f_2(x), \dots, \max_{x \in X} f_m(x) \right)^T.$$

Принцип максимина. В соответствии с данным принципом каждое решение описывается наименьшей взвешенной величиной из m критериев; затем выбирается наибольшее среди этих наименьших значений, и соответствующее ему решение принимается за наилучшее:

$$x^* = \arg \max_{x \in X} F(x) = \arg \max_{x \in X} \min_{i \in I} (\gamma_i z_i),$$

где $I = \{1, 2, \dots, m\}$ — множество номеров, ряд приоритета. Иногда данный принцип называют принципом гарантированного результата или принципом наибольшей осторожности.

Принцип абсолютной уступки. При сравнении двух любых решений видно, что у второго решения одна часть критериев меньше, чем у первого решения, а вторая часть критериев больше, чем у первого решения. Согласно рассматриваемому принципу второе решение лучше первого, если сумма взвешенных значений увеличившихся критериев больше суммы значений уменьшившихся критериев. Математическая формализация принципа абсолютных уступок имеет вид

$$x^* = \arg \max_{x \in X} F(x) = \arg \max_{x \in X} \sum_{i=1}^m \gamma_i z_i = \arg \max_{x \in X} \sum_{i=1}^m \gamma_i f_i(x).$$

Описанный принцип позволяет улучшать качество решения за счет компенсации (уступки) уменьшения значений по одним критериям большим увеличением значений по другим критериям.

Принцип главного критерия. Это наиболее широко применяемый принцип при постановке задач многокритериальной оптимизации. Один из критериев (обычно самый важный) принимается за главный, для остальных критериев назначаются пороговые величины; величины этих критериев должны превышать пороговые значения. Наилучшим решением является точка:

$$x^* = \arg \max_{x \in X} U(x) = \arg \max_{x \in X_0} z_1 = \arg \max_{x \in X_0} f_1(x),$$

$$X_0 = \{x: x \in X, \arg(z_i \geq \bar{z}_i), \bar{z}_i = \text{const}, i = 2, 3, \dots, m \}.$$

Выбор главного критерия и пороговых значений \bar{z}_i очень важен; изменяя их, можно получать различные решения.

На рисунке 3.2 дана графическая иллюстрация принципа главного критерия.

Описанные главные принципы оптимальности могут быть использованы при решении задач многокритериальной оптимизации; предполагается их последовательное или комбинированное применение, а также исследование того, как они согласуются с целями ЛПР. Фактически выбор того или другого принципа оптимальности должно приводить к решению, удовлетворяющему требованиям ЛПР, и отражать его представление о качестве решения. Чем больше вариантов постановок задач оптимизации и их решений рассматривается ЛПР, тем больше шансов найти решение, удовлетворяющее ЛПР.

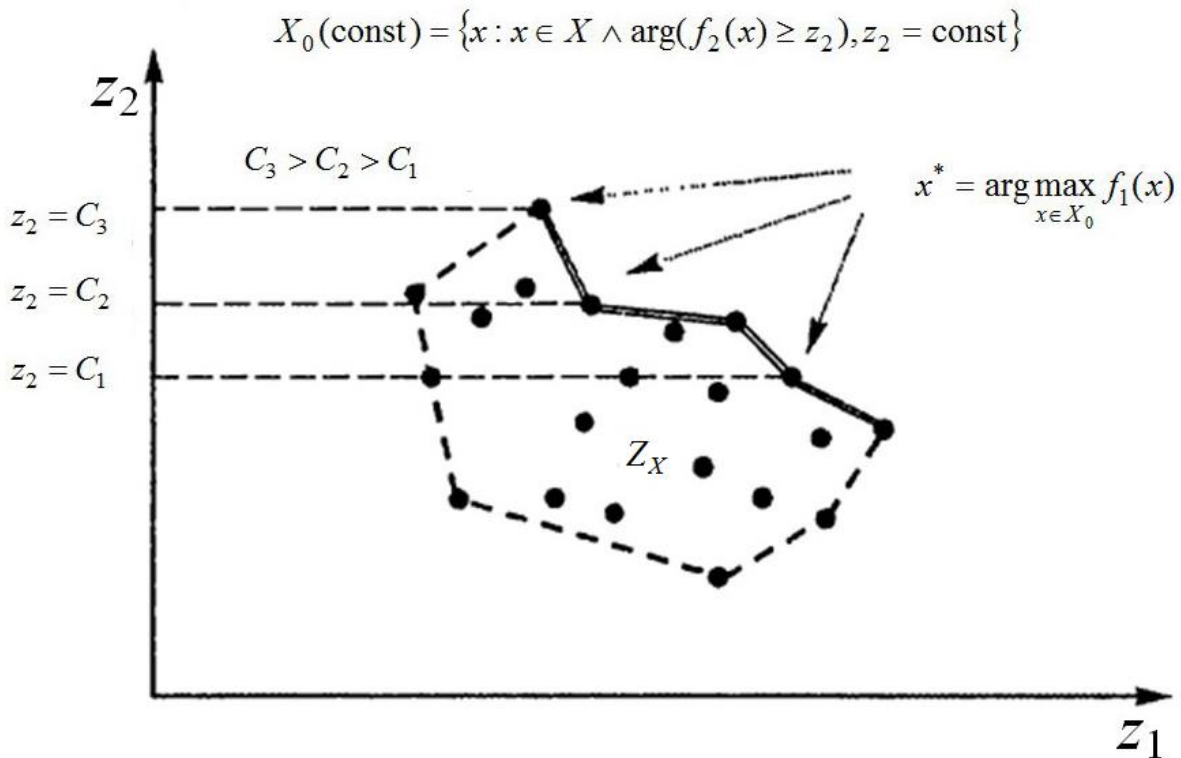


Рис. 3.2. Пример применения принципа главного критерия

Рассмотрим постановку задач оптимизации на основе комбинирования принципов оптимальности; разобьем все критерии на две группы: первая группа состоит из критериев $z_i = f_i(x)$, $i = 1, 2, \dots, q$, вторая группа – из критериев $z_i = f_i(x)$, $i = q + 1, q + 2, \dots, m$. На основе первой группы критериев будет конструироваться целевая функция, а на основе второй группы – ограничения. Для первой группы критериев используются разные свертки и соответствующие принципы оптимальности; для формирования ограничений также применимы разные принципы оптимальности:

1) принцип идеальной точки

$$X_1 = \left\{ x: \arg \left(\sum_{i=q+1}^m \gamma_i^p (z_i^{id} - f_i(x))^p \leq z_{gr} \right) \right\}, p = 1, 2, \dots,$$

где z_{gr} – граничное значение критерия;

2) принцип максимина

$$X_2 = \left\{ x: \arg \left(\min \{ \gamma_{q+1} f_{q+1}(x), \dots, \gamma_m f_m(x) \} \geq z_{gr} \right) \right\};$$

3) принцип абсолютной уступки

$$X_3 = \left\{ x: \arg \left(\sum_{i=q+1}^m \gamma_i f_i(x) \geq z_{gr} \right) \right\}.$$

Применяя для первой группы критериев следующие принципы оптимальности в сочетании с разными ограничениями для второй группы, можно получить различные комбинированные критерии (свертки), например:

$$F(x^*) = \min_{x \in X_l} F(x) = \min_{x \in X_l} \sum_{i=1}^q \gamma_i^p (z_i^{id} - f_i(x))^p, p = 1, 2, \dots, l = 1, 2, 3;$$

$$F(x^*) = \max_{x \in X_l} F(x) = \max_{x \in X_l} \min_{i \in \{1, 2, \dots, q\}} (\gamma_i f_i(x)), l = 1, 2, 3.$$

Приведенные примеры построения двухуровневых сверток показывают возможности комбинирования различных принципов оптимальности; можно конструировать многоуровневые свертки, добиваясь адекватного отражения представлений ЛПР об оптимальности в задачах принятия решений.

3.3. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНЫХ ЗАДАЧ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ

Рассмотрим содержательные примеры задач, решаемых с помощью принципов оптимальности.

Пример 3.1. Группа, состоящая из 10 экспертов, провела оценивание взаимной важности семи показателей (критериев) в баллах, влияющих на накопление в культуральной жидкости антибиотических веществ при культивировании цианобактерий:

- 1) вид фотобиореактора;
- 2) уровень фотосинтетически активной радиации;
- 3) концентрация углекислого газа в газовой смеси, подаваемой в реактор;
- 4) температура культивирования;
- 5) стерильность воды;
- 6) стерильность оборудования;
- 7) качество посевного материала;
- 8) количество серосодержащих соединений в питательной среде;
- 9) количество фосфорсодержащих соединений в питательной среде;
- 10) наличие специфических факторов роста (табл. 3.1).

3.1. Результаты экспертного ранжирования важности показателей

Критерии	Эксперт									
	Э ₁	Э ₂	Э ₃	Э ₄	Э ₅	Э ₆	Э ₇	Э ₈	Э ₉	Э ₁₀
y_1	50	60	20	50	40	45	50	60	30	60
y_2	90	100	80	100	100	90	60	75	90	100
y_3	70	80	60	75	90	85	100	85	75	90
y_4	100	95	100	90	85	100	70	100	100	70
y_5	10	30	15	25	20	10	20	15	20	25
y_6	20	15	25	15	20	30	30	10	15	20
y_7	30	40	70	35	25	20	40	30	60	35

Требуется вычислить значения весового вектора, оценить согласованность мнений экспертов, построить различные свертки критериев, использующие разные принципы оптимальности.

Решение.

Вычислим групповые оценки критериев:

$$y_1: \sum_{i=1}^{10} y_{i1} = (50 + 60 + 20 + 50 + 40 + 45 + 50 + 60 + 30 + 60) = 465;$$

$$y_2: \sum_{i=1}^{10} y_{i2} = (90 + 100 + 80 + 100 + 100 + 90 + 60 + 75 + 90 + 100) = 885;$$

$$y_3: \sum_{i=1}^{10} y_{i3} = (70 + 80 + 60 + 75 + 90 + 85 + 100 + 85 + 75 + 90) = 810;$$

$$y_4: \sum_{i=1}^{10} y_{i4} = (100 + 95 + 100 + 90 + 85 + 100 + 70 + 100 + 100 + 70) = 910;$$

$$y_5: \sum_{i=1}^{10} y_{i5} = (10 + 30 + 15 + 25 + 20 + 10 + 20 + 15 + 20 + 25) = 190;$$

$$y_6: \sum_{i=1}^{10} y_{i6} = (20 + 15 + 25 + 15 + 20 + 30 + 30 + 10 + 15 + 20) = 200;$$

$$y_7: \sum_{i=1}^{10} y_{i7} = (30 + 40 + 70 + 35 + 25 + 20 + 40 + 30 + 60 + 35) = 385.$$

Проранжируем критерии в соответствии с рассчитанной групповой оценкой:

$$y_4 = 910 \succ y_2 = 885 \succ y_3 = 810 \succ y_1 = 465 \succ y_7 = 385 \succ y_6 = 200 \succ y_5 = 190.$$

Значения весового вектора $\gamma = \{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_7\}$ критериев будем находить в соответствии с записанной выше ранжировкой критериев. В весовом векторе γ_i представляет относительную важность i -го критерия y_i по отношению ко всем остальным критериям; из данного определения следует связь между элементами весового вектора γ и вектора приоритета λ :

$$\gamma_i = \lambda_i \cdot \gamma_{i+1}, \sum_{i=1}^7 \gamma_i = 1.$$

Определим значения вектора приоритета λ :

$$\lambda_1 = \frac{910}{885} = 1,0282; \lambda_2 = \frac{885}{810} = 1,0926; \lambda_3 = \frac{810}{465} = 1,7419;$$

$$\lambda_4 = \frac{465}{385} = 1,2078; \lambda_5 = \frac{385}{200} = 1,925; \lambda_6 = \frac{200}{190} = 1,0526.$$

$$\sum_{i=1}^7 \gamma_i = \gamma_1 + \left(\gamma_2 = \frac{\gamma_1}{\lambda_1}\right) + \left(\gamma_3 = \frac{\gamma_2}{\lambda_2} = \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2}\right) + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4 \lambda_5} +$$

$$\frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4 \lambda_5 \lambda_6} = \gamma_1 \left(1 + \frac{\gamma_1}{\lambda_1} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4 \lambda_5} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4 \lambda_5 \lambda_6}\right) = 1;$$

$$1 + \frac{\gamma_1}{\lambda_1} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4 \lambda_5} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4 \lambda_5 \lambda_6} = 4,2246;$$

$$\gamma_1 = 1/4,2246 = 0,237; \gamma_2 = \gamma_1/\lambda_1 = 0,2367/1,0282 = 0,23;$$

$$\gamma_3 = \gamma_2/\lambda_2 = 0,2302/1,0926 = 0,211;$$

$$\gamma_4 = \gamma_3/\lambda_3 = 0,2107/1,7419 = 0,121;$$

$$\gamma_5 = \gamma_4/\lambda_4 = 0,121/1,2078 = 0,1; \gamma_6 = \gamma_5/\lambda_5 = 0,1/1,925 = 0,052;$$

$$\gamma_7 = \gamma_6/\lambda_6 = 0,052/1,0526 = 0,049.$$

Оценим согласованность мнений экспертов; для этого перестроим таблицу в баллах в таблицу в рангах (табл. 3.2).

Вычислим дисперсионный коэффициент конкордации Кэндалла; для этого вначале рассчитаем значение вспомогательной величины S :

$$S = \sum_{j=1}^7 \left(\sum_{i=1}^{10} r_{ij} - \bar{r}_j \right)^2 = \sum_{j=1}^7 \left(\sum_{i=1}^{10} r_{ij} - \frac{1}{2} \cdot m \cdot (n + 1) \right)^2 =$$

$$= ([43 - 40]^2 + [18 - 40]^2 + [26 - 40]^2 + [17 - 40]^2 + [64,5 - 40]^2 +$$

$$+ [63,5 - 40]^2 + [48 - 40]^2) = 2434,75.$$

3.2. Результаты экспертного ранжирования в баллах и рангах

	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7		y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7
\mathfrak{A}_1	50	90	70	100	10	20	30	\mathfrak{A}_6	45	90	85	100	10	30	20
r_{1j}	4	2	3	1	7	6	5	r_{6j}	4	2	3	1	7	5	6
\mathfrak{A}_2	60	100	80	95	30	15	40	\mathfrak{A}_7	50	60	100	70	20	30	40
r_{2j}	4	1	3	2	6	7	5	r_{7j}	4	3	1	2	7	6	5
\mathfrak{A}_3	20	80	60	100	15	25	70	\mathfrak{A}_8	60	75	85	100	15	10	30
r_{3j}	6	2	4	1	7	5	3	r_{8j}	4	3	2	1	6	7	5
\mathfrak{A}_4	50	100	75	90	25	15	35	\mathfrak{A}_9	30	90	75	100	20	1,5	60
r_{4j}	4	1	3	2	6	7	5	r_{9j}	5	2	3	1	6	7	4
\mathfrak{A}_5	40	100	90	85	20	20	25	\mathfrak{A}_{10}	60	100	90	70	25	20	35
r_{5j}	4	1	2	3	6,5	6,5	5	r_{10j}	4	1	2	3	6	7	5

В ранжировке 5-го эксперта имеются связанные ранги; найдем величину

$$T_1 = 2^3 - 2 = 6.$$

$$W = \frac{12 \cdot S}{m^2(n^3 - n) - m \cdot T_1} = \frac{12 \cdot 2434,75}{100(343 - 7) - 10 \cdot 6} = 0,8711.$$

Оценим значимость коэффициента конкордации: в нашем примере число степеней свободы $\nu = n - 1 = 7 - 1 = 6$; табличное значение $\chi^2_{\alpha}(\nu)$ для $\nu = 6$ и уровня значимости $\alpha = 0,05$ равно $\chi^2_{\alpha}(6) = 12,5916$.

Вычислим выборочное значение χ^2 :

$$\chi^2 = m(n - 1)W = 10 \cdot 6 \cdot 0,8711 = 52,2665.$$

Поскольку значение $\chi^2_{\alpha}(6) = 12,5916 < \chi^2 = 52,2665$, то гипотеза о согласованности мнений экспертов (ранжировок) принимается.

Таким образом, в результате экспертного оценивания мы получили групповую ранжировку критериев по степени их важности.

Построим различные свертки критериев, использующие принципы оптимальности: *идеальной точки, максимина, абсолютной уступки и главного критерия.*

Предположим, что ЛПР провело оценивание пяти альтернативных вариантов биотехнологий по семи критериям (табл. 3.3).

3.3. Результаты экспертного ранжирования вариантов

Критерий	Биотехнология				
	T ₁	T ₂	T ₃	T ₄	T ₅
У ₁	r ₁₁	r ₁₂	r ₁₃	r ₁₄	r ₁₅
У ₂	r ₂₁	r ₂₂	r ₂₃	r ₂₄	r ₂₅
У ₃
У ₄	r _{ij}
У ₅
У ₆	r ₆₁	r ₆₂	r ₆₃	r ₆₄	r ₆₅
У ₇	r ₇₁	r ₇₂	r ₇₃	r ₇₄	r ₇₅

Согласно *принципу идеальной точки* наилучшим считается решение, расположенное в пространстве критериев ближе всего (в смысле некоторой нормы) к «идеальной точке» y^{id} :

$$T_{j^*} = \arg \min_{j \in \{1,5\}} \|y^{id} - y(T_j), \gamma\| ,$$

где $y^{id} = (y_1^{id}, y_2^{id}, \dots, y_7^{id})$ – идеальная (несуществующая) точка; $\|\cdot\|$ – норма; γ – весовой вектор. В случае применения евклидовой нормы получим следующую постановку задачи выбора наилучшей альтернативы (биотехнологии):

$$T_{j^*} = \arg \min_{j \in \{1,5\}} \sum_{i=1}^7 \gamma_i^2 (y_i^{id} - y_i(T_j))^2 .$$

Решая задачу $\min_{j \in \{1,5\}} \sum_{i=1}^7 \gamma_i^2 (y_i^{id} - y_i)^2$, получим оценку $\hat{y}(T_{j^*})$ альтернативы (биотехнологии T_{j^*}) и соответственно наилучшую биотехнологию T_{j^*} в соответствии с *принципом идеальной точки*.

В случае применения *принципа максимина* каждое решение описывается наименьшей взвешенной величиной из 7 критериев; затем выбирается наибольшее среди этих наименьших значений, и соответствующее ему значение принимается за наилучшее:

$$T_{j^*} = \arg \max_{j \in \{1,5\}} \min_{i \in I} (\gamma_i \cdot y_i(T_j)) ,$$

где $I = \{1,2, \dots, 7\}$ – множество номеров критериев.

Согласно *принципу абсолютной уступки* сравниваются два решения и осуществляется переход от первого ко второму решению, если при этом переходе сумма взвешенных значений увеличившихся критериев больше суммы взвешенных значений уменьшившихся критериев:

$$T_{j^*} = \arg \max_{j \in \{1,5\}} \sum_{i=1}^7 \gamma_i \cdot y_i(T_j) .$$

В соответствии с *принципом главного критерия* один из критериев (обычно самый важный) принимается за главный, для остальных критериев назначают пороговые значения; при этом величины этих критериев не должны быть ниже пороговых значений. Наилучшим решением считается точка

$$T_j^* = \arg \max_{T_j \in X_0} U(T_j) = \arg \max_{T_j \in X_0} y_1(T_j),$$

где $U(T_j)$ – главный критерий;

$$X_0 = \{T_j: j \in \overline{1,5}, \arg(y \geq \bar{y}_i), \bar{y}_i = \text{const}, i = 2, 3, \dots, 7\}.$$

Пример 3.2. В результате анализа эффективности функционирования биотехнологических процессов по двум критериям (эксплуатационный и экономический) получены оценки в баллах (табл. 3.4).

С учетом того, что первый показатель в 3 раза важнее второго, определить множество компромиссных решений; выбрать наилучший биотехнологический процесс, используя принципы идеальной точки, максимина, абсолютной уступки и главного критерия.

Решение.

Определим множество компромиссных решений: из анализа оценок эксплуатационного и экономического критерия биотехнологических процессов, приведенных в таблице, следует, что точка ТП₈ доминирует альтернативы ТП₂, ТП₃, ТП₄, ТП₅, ТП₉, а точка ТП₁ доминирует альтернативы ТП₇, ТП₁₀, т.е. ТП₈ ≻ ТП₂, ТП₃, ТП₄, ТП₅, ТП₉; ТП₁ ≻ ТП₇, ТП₁₀. Таким образом, множество π эффективных по Парето точек включает следующие оценки альтернатив: $\pi = \{z^{\text{ТП}_1}, z^{\text{ТП}_6}, z^{\text{ТП}_8}\}$, которые мы будем использовать для выбора наилучшей альтернативы ТП_{*j**} в соответствии с тем или иным принципом оптимальности.

3.4. Результаты экспертного ранжирования биотехнологических процессов

Показатель	Биотехнологический процесс									
	ТП ₁	ТП ₂	ТП ₃	ТП ₄	ТП ₅	ТП ₆	ТП ₇	ТП ₈	ТП ₉	ТП ₁₀
Эксплуатационный, z_1	5	3	4	2	1	7	5	4	3	5
Экономический, z_2	5	6	4	6	5	1	3	6	6	4

В случае применения *принципа идеальной точки* будем решать следующую задачу:

$$T_{j^*} = \arg \min_{j=1,6,8} F(T\Pi_j) = \arg \min_{j=1,6,8} \sum_{i=1}^2 \gamma_i^2 (z_i^{id} - z_i(T_j))^2,$$

где $z^{id} = (7; 6)^T$.

Вычислим величины $\sum_{i=1}^2 \gamma_i^2 (z_i^{id} - z_i)^2$ для каждой альтернативы:

$$T\Pi_1: F = 0,75^2 * (7 - 5)^2 + 0,25^2(6 - 5)^2 = 2,3125;$$

$$T\Pi_6: F = 0,75^2 * (7 - 7)^2 + 0,25^2(6 - 1)^2 = 1,5625;$$

$$T\Pi_8: F = 0,75^2 * (7 - 4)^2 + 0,25^2(6 - 6)^2 = 5,0625.$$

Далее выделим минимальное значение этой величины – $F(T\Pi_6) = 1,5625$ для биотехнологического процесса $T\Pi_6$; таким образом оценка $z^{T\Pi_6} = \{7; 1\}$ альтернативы $T\Pi_6$ расположена в пространстве критериев ближе всего к оценке идеальной точки $z^{id} = \{7; 6\}^T$. Следовательно, в качестве наилучшего биотехнологического процесса $T\Pi_{j^*}$ выбираем $T\Pi_6$, т.е.

$$\begin{aligned} T\Pi_{j^*} &= \arg (\min \{F(T\Pi_1) = 2,3125; F(T\Pi_6) = 1,5625; F(T\Pi_8) = (5,0625)\}) = \\ &= \arg (F(T\Pi_6) = 1,5625) = T\Pi_6. \end{aligned}$$

В соответствии с *принципом максимина* каждое решение описывается наименьшей взвешенной величиной из 2 критериев; затем выбирается наи-большее среди этих наименьших значений и соответствующее ему значение принимается за наилучшее:

$$T_{j^*} = \arg \max_{j=1,6,8} F(T\Pi_j) = \arg \max_{j=1,6,8} \min_{i \in I} (\gamma_i \cdot z_i(T\Pi_j)),$$

где $I = \{1,2\}$ – множество номеров критериев; $F = \min_{i \in I} (\gamma_i z_i)$;

$$T\Pi_1: F = \min(0,75 * 5 = 3,75; 0,25 * 5 = 1,25) = \min(3,75; 1,25) = 1,25;$$

$$T\Pi_6: F = \min(0,75 * 7 = 5,25; 0,25 * 1 = 0,25) = \min(5,25; 0,25) = 0,25;$$

$$T\Pi_8: F = \min = (0,75 * 4 = 3; 0,25 * 6 = 1,5) = \min_{i=1,2} (3; 1,5) = 1,5;$$

$$\max_{j=1,6,8} (F(T\Pi_j)) = \max (1,25; 0,25; 1,5) = 1,5.$$

Следовательно, в качестве наилучшего биотехнологического процесса выбираем $ТП_8$, т.е.

$$ТП_{j^*} = \arg \left(\max_{j=1,6,8} F(ТП_j) = 1,5 \right) = ТП_8.$$

В случае применения *принципа абсолютной уступки* необходимо решить следующую задачу:

$$ТП_{j^*} = \arg \max_{j=1,6,8} F(ТП_j) = \arg \max_{j=1,6,8} \sum_{i=1}^2 \gamma_i z_i ;$$

$$ТП_1: F = \sum_{i=1}^2 (\gamma_i z_i) = (0,75 * 5 + 0,25 * 5) = 5;$$

$$ТП_6: F = \sum_{i=1}^2 (\gamma_i z_i) = (0,75 * 7 + 0,25 * 1) = 5,5;$$

$$ТП_8: F = \sum_{i=1}^2 (\gamma_i z_i) = (0,75 * 4 + 0,25 * 6) = 4,5.$$

Определим максимум

$$\max_{j=1,6,8} F(ТП_j) = \max(5; 5,5; 4,5) = 5,5$$

по совокупности биотехнологических процессов $j = 1, 6, 8$; значение максимума соответствует альтернативе $ТП_6$, следовательно:

$$ТП_{j^*} = \arg \left(\max_{j=1,6,8} F(ТП_j) = 5,5 \right) = ТП_6.$$

В соответствии с *принципом главного критерия* один из критериев (обычно самый важный), в нашей задаче это эксплуатационный критерий z_1 , принимается за главный, для экономического критерия z_2 назначают пороговое значение; при этом величина критерия z_2 не должна быть ниже порогового значения. Наилучшим решением считается точка

$$ТП_{j^*} = \arg \max_{ТП_j \in X_0} z_1,$$

где $X_0 = \{ТП_j: ТП_j \in \pi, \arg(z_2 \geq \bar{z}_2), \bar{z}_2 = \text{const}\}$.

Зададим два варианта пороговых значений для второго критерия z_2 : 1) $\bar{z}_2 = 1$; 2) $\bar{z}_2 = 5$. Далее запишем множества X_0 для каждого случая задания пороговых значений: 1) $X_0 = \{ТП_1, ТП_6, ТП_8\}$; 2) $X_0 = \{ТП_1, ТП_8\}$ и выделим для каждого случая альтернативы с максимальным значением главного критерия z_1 :

$$1) \text{ТП}_{j^*} = \arg \max_{\text{ТП}_j \in \pi} z_1 = \arg(\max(5, 7, 4) = 7) = \text{ТП}_6;$$

$$2) \text{ТП}_{j^*} = \arg(\max(5, 4) = 5) = \text{ТП}_1.$$

Следовательно, в качестве наилучших биотехнологических процессов выбираем: для первого случая – ТП_6 с оценками значений критериев $\{z_1; z_2\}^T = \{7; 1\}^T$; для второго случая – ТП_1 с оценками значений критериев $\{z_1; z_2\}^T = \{5; 5\}^T$. ■

Пример 3.3. Экспертами проведено оценивание 8 биотехнологических процессов по 5 показателям: 1) категория ремонтной сложности оборудования; 2) себестоимость питательной среды; 3) стабильность биологического агента; 4) количество целевого продукта в культуральной жидкости; 5) количество отходов (табл. 3.5).

3.5. Результаты экспертного ранжирования биотехнологических процессов

Критерий	Биотехнологический процесс							
	ТП ₁	ТП ₂	ТП ₃	ТП ₄	ТП ₅	ТП ₆	ТП ₇	ТП ₈
z_1	10	15	25	10	40	50	45	55
z_2	50	45	15	25	40	5	15	10
z_3	25	40	50	15	30	25	10	20
z_4	25	15	45	10	20	50	10	10
z_5	30	45	40	15	50	15	60	70

Требуется определить множество эффективных решений Парето, выбрать разными методами наилучшие биотехнологические процессы, считая, что показатели обладают одинаковой важностью, т.е. весовые коэффициенты важности критериев одинаковы, и их можно не учитывать.

Решение.

Для определения множества эффективных решений Парето проведем анализ оценок экспертов, приведенных в таблице, на предмет выявления доминирующих альтернатив: так, альтернатива ТП_1 доминирует альтернативу ТП_4 , т.е.

$ТП_1 \succ ТП_4$, поскольку $z_i^{ТП_1} \geq z_i^{ТП_4}, i = \overline{1,5}$. Таким образом, множество π эффективных по Парето точек включает оценки показателей альтернатив: $\pi = \{z^{ТП_1}, z^{ТП_2}, z^{ТП_3}, z^{ТП_5}, z^{ТП_6}, z^{ТП_7}, z^{ТП_8}\}$; именно эти оценки будем использовать для выбора наилучшей альтернативы $ТП_{j^*}$ в соответствии с тем или иным принципом оптимальности.

Оценим количественно эффективные по Парето биотехнологические процессы:

$$\begin{aligned} ТП_1: \sum_{i=1}^5 z_i &= 140; ТП_2: \sum_{i=1}^5 z_i = 160; ТП_3: \sum_{i=1}^5 z_i = 175; \\ ТП_5: \sum_{i=1}^5 z_i &= 180; ТП_6: \sum_{i=1}^5 z_i = 120; \\ ТП_7: \sum_{i=1}^5 z_i &= 140, ТП_8: \sum_{i=1}^5 z_i = 165. \end{aligned}$$

В случае применения *принципа идеальной точки* будем искать решение, расположенное в пространстве критериев ближе всего к «идеальной точке» $z^{id} = (55; 50; 50; 45; 70)^T$:

$$ТП_{j^*} = \arg \min_{ТП_j \in \pi} F(ТП_j) = \arg \min_{ТП_j \in \pi} \sum_{i=1}^5 (z_i^{id} - z_i(ТП_j))^2.$$

Вычислим величины $F(ТП_j) = \sum_{i=1}^5 (z_i^{id} - z_i)^2$ для каждой альтернативы из множества π .

$$\begin{aligned} ТП_1: F &= 4650; ТП_2: F = 3250; ТП_3: F = 3025; ТП_5: F = 1750; \\ ТП_6: &= 6100; ТП_7: F = 4250; ТП_8: F = 3725. \end{aligned}$$

Далее выделим минимальное значение величины $F(ТП_5) = 1750$ и соответствующий биотехнологический процесс – $ТП_5$; таким образом, оценки показателей $z^{ТП_5} = \{40; 40; 30; 20; 50\}^T$ биотехнологического процесса $ТП_5$ в пространстве критериев ближе всего расположены к идеальной точке $z^{id} = (55; 50; 50; 45; 70)^T$, и в качестве наилучшего биотехнологического процесса $ТП_{j^*}$ следует выбирать $ТП_{j^*} = ТП_5$, т.е.

$$ТП_{j^*} = \arg \left(\min_{ТП_j \in \pi} \sum_{i=1}^5 (z_i^{id} - z_i)^2 = 1750 \right) = ТП_5.$$

В соответствии с *принципом максимина* каждое решение описывается наименьшей взвешенной величиной из 5 показателей (критериев) $z_i, i = \overline{1,5}$; затем выбирается наибольшее среди этих наименьших значений и соответствующее ему значение аргумента (альтернативы) принимается за наилучшее:

$$ТП_{j^*} = \arg \max_{ТП_j \in \pi} F(ТП_j) = \arg \max_{x \in X} \min_{i \in I} (z_i(ТП_j)),$$

где $I = \{1, 2, \dots, 5\}$ – множество номеров критериев $z_i, i = \overline{1,5}$; $F(ТП_j) = \min_{i \in I} (z_i(ТП_j))$.

$ТП_1: F = \min(10; 50; 25; 25; 30) = 10$; $ТП_2: F = \min(15; 45; 40; 15; 45) = 15$;

$ТП_3: F = \min(25; 15; 50; 45; 40) = 15$; $ТП_5: F = \min(40; 40; 30; 20; 50) = 20$;

$ТП_6: F = \min(50; 5; 25; 25; 15) = 5$; $ТП_7: F = \min(45; 15; 10; 10; 60) = 10$;

$ТП_8: F = \min(55; 10; 20; 10; 70) = 10$;

$\max_{ТП_j \in \pi} (F(ТП_j)) = \max(10; 15; 15; 20; 5; 10; 10) = 20$.

Следовательно, в качестве наилучшего биотехнологического процесса выбираем $ТП_5$, т.е.

$$ТП_{j^*} = \arg \left(\max_{ТП_j \in \pi} F(ТП_j) = 20 \right) = ТП_5.$$

В случае применения *принципа абсолютной уступки* необходимо решить следующую задачу:

$$ТП_{j^*} = \arg \max_{ТП_j \in \pi} F(ТП_j) = \arg \max_{j=1,6,8} \sum_{i=1}^5 z_i,$$

где $ТП_1: F = 140$; $ТП_2: F = 160$; $ТП_3: F = 175$; $ТП_5: F = 180$; $ТП_6: F = 120$;

$ТП_7: F = 140$, $ТП_8: F = 165$.

Определим максимум по совокупности биотехнологических процессов $ТП_j \in \pi$:

$$\max_{ТП_j \in \pi} F(ТП_j) = \max(140; 160, 175; 180; 120; 140; 165) = 180;$$

при этом значение максимума соответствует альтернативе $ТП_5$, т.е.

$$ТП_{j^*} = \arg \left(\max_{ТП_j \in \pi} F(ТП_j) = 180 \right) = ТП_5.$$

В соответствии с *принципом главного критерия* необходимо решить следующую задачу:

$$ТП_{j^*} = \arg \max_{ТП_j \in X_0} z_1,$$

где $X_0 = \{ТП_j: ТП_j \in \pi, \arg(z_i \geq \bar{z}_i), \bar{z}_i = \text{const}, i = 2, 3, 5, 6, 7, 8\}$.

Примем за главный критерий $z_1 = f_1(x)$ и в качестве пороговых значений для остальных критериев примем следующие величины:

$$\bar{z}_2 = 40; \bar{z}_3 = 30; \bar{z}_4 = 20; \bar{z}_5 = 40.$$

Далее выпишем альтернативы (биотехнологические процессы), оценки которых превышают заданные значения пороговых значений $\bar{z}_i = \text{const}$:

$$X_0 = \left\{ \left(\underbrace{(ТП_1, ТП_2, ТП_5)}_{\bar{z}_2} \right), \left(\underbrace{(ТП_2, ТП_3, ТП_5)}_{\bar{z}_3} \right), \left(\underbrace{(ТП_1, ТП_3, ТП_5, ТП_6)}_{\bar{z}_4} \right), \right. \\ \left. \left(\underbrace{(ТП_2, ТП_3, ТП_5, ТП_7, ТП_8)}_{\bar{z}_5} \right) \right\} = \{ТП_5\}.$$

Следовательно, в качестве наилучшего биотехнологического процесса следует выбрать $ТП_5$ с оценками значений критериев $z = \{40; 40; 30; 20; 50\}^T$.

Давайте теперь уменьшим требования к пороговым значениям критериев и выберем следующие их величины: $\bar{z}_2 = 15; \bar{z}_3 = 15; \bar{z}_4 = 15; \bar{z}_5 = 30$; в результате получим биотехнологические процессы, составляющие множество X_0 допустимых решений:

$$X_0 = \left\{ \left(\underbrace{(ТП_1, ТП_2, ТП_3, ТП_5, ТП_7)}_{\bar{z}_2} \right), \left(\underbrace{(ТП_1, ТП_2, ТП_3, ТП_5, ТП_6, ТП_8)}_{\bar{z}_3} \right), \right. \\ \left. \left(\underbrace{(ТП_1, ТП_2, ТП_3, ТП_5, ТП_6)}_{\bar{z}_4} \right), \left(\underbrace{(ТП_1, ТП_2, ТП_3, ТП_5, ТП_7, ТП_8)}_{\bar{z}_5} \right) \right\} = \\ = \{ТП_1, ТП_2, ТП_3, ТП_5\}.$$

В качестве наилучшего выберем биотехнологический процесс из множества $X_0 = \{ТП_1, ТП_2, ТП_3, ТП_5\}$ допустимых процессов с максимальным значением главного критерия $z_1 = f_1(x)$:

$$ТП_{j^*} = \arg \max_{ТП_j \in X_0} z_1 = \arg\{\max(10; 15; 25; 40) = 40\} = ТП_5. \blacksquare$$

Пример 3.4. При оценке качества биоматериалов по двум показателям (чистота и срок хранения) группа экспертов дала следующие оценки в баллах различным материалам (табл. 3.6).

3.6. Результаты экспертного ранжирования биоматериалов

Аспект	Биоматериал								
	M_1	M_2	M_3	M_4	M_5	M_6	M_7	M_8	M_9
z_1	9	7	2	4	3	2	1	4	8
z_2	4	3	6	4	5	4	5	2	5

Считая, что показатели обладают одинаковой важностью и наилучшими оценками по показателям $\{z_1, z_2\}$ являются те, которые имеют наибольшее число баллов, определить область компромиссов (множество Парето), лучший вариант биоматериала для биотехнологического процесса и дать геометрическую интерпретацию.

Решение.

Поскольку показатели $\{z_1, z_2\}$ обладают одинаковой важностью, то весовые коэффициенты важности критериев одинаковы и их можно не учитывать. Для определения области π компромиссов (множества Парето) проведем анализ оценок экспертов, приведенных в таблице, на предмет выявления доминирующих альтернатив: так, альтернатива M_1 доминирует альтернативы M_2, M_4, M_6, M_8 , т.е. $M_1 \succ \{M_2, M_4, M_6, M_8\}$, а альтернатива M_9 доминирует альтернативы M_5, M_7 , т.е. $M_9 \succ \{M_5, M_7\}$. Таким образом, множество π эффективных по Парето точек включает следующие оценки показателей альтернатив: $\pi = \{z^{M_1}, z^{M_3}, z^{M_9}\}$; именно эти оценки будем использовать для выбора наилучшей альтернативы M_{j^*} в соответствии с тем или иным принципом оптимальности.

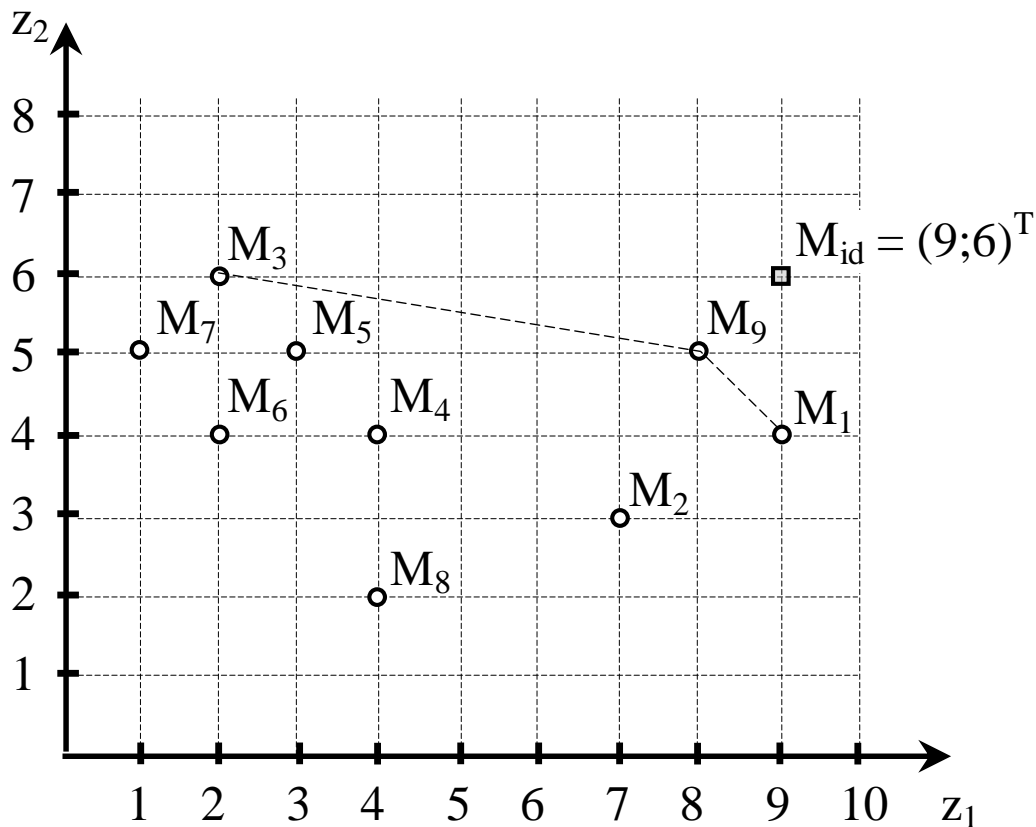


Рис. 3.3. Геометрическая интерпретация предпочтительности альтернатив:

$\pi = \{M_1, M_3, M_9\}$; M_{id} – идеальная (несуществующая) альтернатива $M_{id} = (z_1, z_2)^T = (9; 6)^T$

Оценим количественно эффективно по Парето биотехнологические процессы: точке M_1 соответствует $\sum_{i=1}^2 z_i = 13$; точке M_3 – $\sum_{i=1}^2 z_i = 8$; точке M_9 – $\sum_{i=1}^2 z_i = 13$.

В случае применения *принципа идеальной точки* будем искать решение, расположенное в пространстве критериев ближе всего к «идеальной точке» M_{id} с координатами $z^{id} = (9; 6)^T$:

$$M_{j^*} = \arg \min_{M_j \in \pi} F(M_j) = \arg \min_{M_j \in \pi} \sum_{i=1}^2 (z_i^{id} - z_i(M_j))^2.$$

Вычислим величины $F(M_j) = \sum_{i=1}^2 (z_i^{id} - z_i)^2$ для каждой альтернативы из множества π : $M_1: F = 4$; $M_3: F = 49$; $M_9: F = 2$.

Далее выделим минимальное значение величины $F(M_9) = 2$ и соответствующий биоматериал – M_9 ; таким образом, оценки показателей $z^{M_9} = \{8; 5\}^T$

биоматериала M_9 в пространстве критериев ближе всего расположены к идеальной точке $z^{id} = (9; 6)^T$, и в качестве наилучшего биоматериала M_{j^*} следует выбирать $M_{j^*} = M_9$, т.е.

$$M_{j^*} = \arg \left(\min_{M_j \in \pi} \sum_{i=1}^2 (z_i^{id} - z_i)^2 = 2 \right) = M_9.$$

В соответствии с *принципом максимина* будем решать следующую задачу:

$$M_{j^*} = \arg \max_{M_j \in \pi} F(M_j) = \arg \max_{M_j \in \pi} \min_{i \in I} (z_i(M_j)),$$

где $I = \{1, 2\}$ – множество номеров критериев $z_i, i = \overline{1, 2}$; $F(M_j) = \min_{i \in I} (z_i(M_j))$.

$$M_1: F = \min(9; 4) = 4; M_3: F = \min(2; 6) = 2; M_9: F = \min(8; 5) = 5.$$

$$\max_{M_j \in \pi} (F(M_j)) = \max(4; 2; 5) = 5.$$

Следовательно, в качестве наилучшего биоматериала выбираем M_9 , т.е.

$$M_{j^*} = \arg \left(\max_{M_j \in \pi} F(M_j) = 5 \right) = M_9.$$

В случае применения *принципа абсолютной уступки* необходимо решить следующую задачу:

$$M_{j^*} = \arg \max_{M_j \in \pi} F(M_j) = \arg \max_{M_j \in \pi} \sum_{i=1}^2 z_i,$$

где $M_1: F = 13; M_3: F = 8; M_9: F = 13$.

Определим максимум по совокупности биоматериалов $M_j \in \pi$:

$$\max_{M_j \in \pi} F(M_j) = \max(13; 8; 13) = 13;$$

при этом значение максимума соответствует наиболее предпочтительным альтернативам $\{M_1, M_9\}$, т.е.

$$M_{j^*} = \arg \left(\max_{(j=1,9) \in \pi} \sum_{i=1}^m z_i = 13 \right) = \{M_1, M_9\}.$$

Окончательный выбор наилучшего материала из двух наиболее предпочтительных $\{M_1, M_9\}$ осуществляется ЛПР.

В соответствии с *принципом главного критерия* необходимо решить следующую задачу с главным критерием $U = z_1$:

$$M_{j^*} = \arg \max_{M_j \in X_0} z_1,$$

где $X_0 = \{M_j: M_j \in \pi, \arg(z_2(M_j) \geq \bar{z}_2), \bar{z}_2 = \text{const}\}$.

В нашей задаче в качестве порогового значения для второго показателя (критерия) примем: $\bar{z}_2 = 4$ и выпишем альтернативы из множества π , оценки которых превышают заданное пороговое значение:

$$X_0 = \left\{ \left(\underbrace{M_1, M_3, M_9}_{\bar{z}_2} \right) \right\} = \{M_1, M_3, M_9\}.$$

В качестве наилучшего биоматериала из группы $\{M_1, M_3, M_9\}$ выберем биоматериал с наибольшим значением показателя z_1 :

$$M_{j^*} = \arg \max_{M_j \in \pi} z_1,$$

в результате получим решение $M_{j^*} = \arg\{\max(9; 2; 8)\} = M_1$. ■

Пример 3.5. Группа, состоящая из пяти экспертов, провела оценивание взаимной важности трех критериев в баллах (количество целевого продукта, сложность его очистки, количество отходов), оценивающих эффективность функционирования БТС (табл. 3.7); требуется вычислить значения весового вектора.

ЛПР провело оценивание биотехнологических систем (альтернатив) по данным трем критериям, которые приведены в табл. 3.8.

3.7. Результаты экспертного ранжирования критериев

Критерий	Эксперт				
	Э ₁	Э ₂	Э ₃	Э ₄	Э ₅
у ₁	10	15	5	20	30
у ₂	20	25	15	25	70
у ₃	40	40	30	30	100

3.8. Результаты экспертного оценивания биотехнологических систем

Критерий	Альтернатива						
	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7
y_1	10	0	50	20	15	90	80
y_2	25	40	10	60	80	10	20
y_3	40	18	10	40	30	10	35

Требуется вычислить значения весового вектора; выделить множество компромиссов; выбрать наилучшую биотехнологическую систему (альтернативу), используя принципы оптимальности: идеальной точки, максимина, абсолютной уступки и главного критерия.

Решение.

Вычислим групповые оценки критериев биотехнологических систем:

$$y_1: \sum_{i=1}^5 z_i = (10 + 15 + 5 + 20 + 30) = 80;$$

$$y_2: \sum_{i=1}^5 z_i = (20 + 25 + 15 + 25 + 70) = 155;$$

$$y_3: \sum_{i=1}^5 z_i = (40 + 40 + 30 + 30 + 100) = 240.$$

Проранжируем критерии в соответствии с рассчитанной групповой оценкой: $y_3 = 240 \succ y_2 = 155 \succ y_1 = 80$.

Значения весового вектора $\gamma = \{\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3\}$ будем находить в соответствии с записанной выше ранжировкой критериев. В весовом векторе γ_i представляет относительную важность i -го критерия y_i по отношению ко всем остальным критериям; из данного определения следует связь между элементами весового вектора γ и вектора приоритета λ :

$$\gamma_1 = \lambda_1 \gamma_2, \gamma_2 = \lambda_2 \gamma_3, \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 = 1.$$

Определим значения вектора приоритета λ :

$$\lambda_1 = \frac{240}{155} = 1,5484; \lambda_2 = \frac{155}{80} = 1,9375;$$

и далее рассчитаем весовые множители по формулам:

$$\gamma_1 + \frac{\gamma_1}{\lambda_1} + \frac{\gamma_1}{\lambda_1 \lambda_2} = 1 \rightarrow \gamma_1 \left(1 + \frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_1 \lambda_2}\right) = 1 \rightarrow \gamma_1 = \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_1 \lambda_2}\right)} =$$

$$= \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{1,5484} + \frac{1}{1,5484 \cdot 1,9375}\right)} = 0,5053;$$

$$\gamma_2 = \frac{\gamma_1}{\lambda_1} = \frac{0,5053}{1,5484} = 0,3263; \gamma_3 = \frac{\gamma_2}{\lambda_2} = \frac{0,3263}{1,9375} = 0,1684.$$

Коэффициент конкордации Кэндалла равен единице, поскольку все ранжировки экспертов одинаковы, следовательно, мнения экспертов согласованны.

Выделим множество компромиссов (множество π эффективных решений Парето); анализ показывает, что биотехнологическая система (альтернатива) a_7 доминирует биотехнологическую систему a_3 , а биотехнологическая система a_4 – альтернативы $\{a_1, a_2\}$, т.е.

$$a_7 > a_3, \text{ поскольку } y_i^{a_7} > y_i^{a_3}, \quad i = 1, 2, 3;$$

$$a_4 > a_1, a_2, \text{ поскольку } y_i^{a_4} > y_i^{a_1, a_2}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Таким образом, множество π компромиссов (множество эффективных решений Парето) включает следующие биотехнологические системы (альтернативы):

$$\pi = \{a_4, a_5, a_6, a_7\}.$$

В случае применения *принципа идеальной точки* будем искать решение, расположенное в пространстве критериев ближе всего к «идеальной точке»

$$y^{id} = (90; 80; 40)^T: a_{j^*} = \arg \min_{a_j \in \pi} F(a_j) = \arg \min_{a_j \in \pi} \sum_{i=1}^3 \gamma_i^2 \left(y_i^{id} - y_i(a_j)\right)^2.$$

Вычислим величины $F(a_j) = \sum_{i=1}^3 \gamma_i^2 \left(y_i^{id} - y_i(a_j)\right)^2$ для каждой альтернативы из множества π : $a_4: F = 1293,696$; $a_5: F = 1439,056$; $a_6: F = 547,234$; $a_7: F = 409,54$.

Далее выделим минимальное значение величины $F(a_7) = 409,54$ и соответствующую биотехнологическую систему (альтернативу) – a_7 ; таким образом, оценки показателей $y^{a_7} = \{80; 20; 35\}^T$ биотехнологической системы a_7

в пространстве критериев ближе всего расположены к идеальной точке $y^{id} = (90; 80; 40)^T$, и ее следует выбирать в качестве наилучшей биотехнологической системы (альтернативы) a_{j^*} , т.е.

$$a_{j^*} = \arg \left(\min_{a_j \in \pi} F(a_j) = 409,54 \right) = a_7.$$

В соответствии с *принципом максимина* будем решать следующую задачу:

$$a_{j^*} = \arg \max_{a_j \in \pi} F(a_j) = \arg \max_{a_j \in \pi} \min_{i \in I} (\gamma_i \cdot y_i(a_j)),$$

где $I = \{1,2,3\}$ – множество номеров критериев $y_i, i = \overline{1,3}$;

$$F(a_j) = \min_{i \in I} (\gamma_i \cdot y_i(a_j));$$

$$a_4: F = \min(10,106; 19,578; 6,376) = 6,376;$$

$$a_5: F = \min(7,5795; 26,104; 5,052) = 5,052;$$

$$a_6: F = \min(45,477; 3,263; 1,684) = 1,684;$$

$$a_7: F = \min(40,424; 6,526; 5,984) = 5,984.$$

$$\max_{a_j \in \pi} (F(a_j)) = \max(6,376; 5,052; 1,684; 5,984) = 6,376.$$

Следовательно, в качестве наилучшей биотехнологической системы (альтернативы) выбираем a_4 , т.е.

$$a_{j^*} = \arg \left(\max_{a_j \in \pi} F(a_j) = 6,376 \right) = a_4.$$

В случае применения *принципа абсолютной уступки* необходимо решить следующую задачу:

$$a_{j^*} = \arg \max_{a_j \in \pi} F(a_j) = \arg \max_{a_j \in \pi} \sum_{i=1}^3 (\gamma_i \cdot y_i(a_j)),$$

где $a_4: F(a_4) = 36,42$; $a_5: F(a_5) = 38,7355$; $a_6: F(a_6) = 50,424$;

$F(a_7) = 52,844$.

Определим максимум $F(a_j)$ по совокупности альтернатив $a_j \in \pi$:

$$\max_{a_j \in \pi} F(a_j) = \max(36,42; 38,7355; 50,424; 52,844) = 52,844;$$

при этом значение максимума соответствует наиболее предпочтительной биотехнологической системе a_7 , т.е.

$$a_{j^*} = \arg \left(\max_{a_j \in \pi} F(a_j) = 52,844 \right) = a_7.$$

В соответствии с *принципом главного критерия* необходимо решить следующую задачу с главным критерием U ; в качестве главного критерия выбираем критерий $U = y_3$, тогда

$$a_{j^*} = \arg \max_{a_j \in X_0} y_3,$$

где $X_0 = \{a_j: a_j \in \pi, \arg(y_i(a_j) \geq \bar{y}_i), \bar{y}_i = \text{const}, i = 1,2; \bar{y}_1 = 15; \bar{y}_2 = 25\}$.

Выпишем биотехнологические системы (альтернативы) из множества π , оценки которых превышают заданные пороговые значения $\bar{y}_i = \text{const}$:

$$X_0 = \left\{ \left(\underbrace{a_4, a_5, \cancel{a_6}, \cancel{a_7}}_{\bar{y}_2} \right), \left(\underbrace{a_4, a_5}_{\bar{y}_3} \right) \right\} = \{a_4, a_5\}.$$

В качестве наилучшей альтернативы из группы $\{a_4, a_5\}$ выберем альтернативу с наибольшим значением критерия y_3 :

$$a_{j^*} = \arg \max_{\{a_4, a_5\} \in X_0} y_3 = \arg(\max(40; 30) = 40) = a_4.$$

Выберем теперь в качестве главного критерия критерий $U = y_2$, тогда $a_{j^*} = \arg \max_{a_j \in X_0} y_2$,

где $X_0 = \{a_j: a_j \in \pi, \arg(y_i(a_j) \geq \bar{y}_i), \bar{y}_i = \text{const}, i = 1,3; \bar{y}_1 = 15; \bar{y}_3 = 30\}$.

Выпишем альтернативы из множества π , оценки которых превышают заданные пороговые значения $\bar{y}_i = \text{const}$:

$$X_0 = \left\{ \left(\underbrace{a_4, a_5, \cancel{a_6}, a_7}_{\bar{y}_1} \right), \left(\underbrace{a_4, a_5, a_7}_{\bar{y}_3} \right) \right\} = \{a_4, a_5, a_7\}.$$

В качестве наилучшей биотехнологической системы из группы $\{a_4, a_5, a_7\}$ выберем систему с наибольшим значением критерия y_2 :

$$a_{j^*} = \arg \max_{\{a_4, a_5, a_7\} \in X_0} y_2 = \arg(\max(60; 80; 20) = 80) = a_5.$$

Выберем теперь в качестве главного критерия критерий $U = y_1$, тогда $a_{j^*} = \arg \max_{a_j \in X_0} y_1$,

где $X_0 = \{a_j: a_j \in \pi, \arg(y_i(a_j) \geq \bar{y}_i), \bar{y}_i = \text{const}, i = 2,3; \bar{y}_2 = 15; \bar{y}_3 = 25\}$.

Выпишем альтернативы из множества π , оценки которых превышают заданные пороговые значения $\bar{y}_i = \text{const}$:

$$X_0 = \left\{ \left(\underbrace{a_4, a_5, a_7}_{\bar{y}_2} \right), \left(\underbrace{a_4, a_5, a_7}_{\bar{y}_3} \right) \right\} = \{a_4, a_5, a_7\}.$$

В качестве наилучшей биотехнологической системы из группы $\{a_4, a_5, a_7\}$ выберем альтернативу с наибольшим значением критерия y_1 :

$$a_{j^*} = \arg \max_{a_j \in X_0} y_1,$$

в результате получим решение $a_{j^*} = \arg\{\max(20; 15; 80)\} = a_7$.

Таким образом, выбирая в качестве главного критерия $\{y_3, y_2, y_1\}$ и соответствующие пороговые значения $\bar{y}_i = \text{const}$, мы получаем различные решения $\{a_4, a_5, a_7\}$, а именно биотехнологические системы:

a_4 с оценками $y = \{\gamma_1 y_1 = 10,106; \gamma_2 y_2 = 19,578; \gamma_3 y_3 = 6,736\}$;

a_5 с оценками $y = \{\gamma_1 y_1 = 5,5795; \gamma_2 y_2 = 26,104; \gamma_3 y_3 = 5,052\}$;

a_7 с оценками $y = \{\gamma_1 y_1 = 40,424; \gamma_2 y_2 = 6,526; \gamma_3 y_3 = 5,894\}$. ■

Пример 3.6. Экспертом-биотехнологом проведено оценивание семи альтернатив БТС производства омега-3 жирных кислот (x_i) по восьми показателям (критериям) (y_i): 1) категория сложности технологического оборудования; 2) чистота целевого продукта; 3) количество и класс опасности отходов; 4) стоимость сырья; 5) стабильность продуцента; 6) сложность выделения целевого продукта из смеси; 7) сложность организации необходимых технологических условий; 8) стерильность основных технологических потоков. Построен вектор приоритета (λ_i) критериев (табл. 3.9).

3.9. Результаты экспертного оценивания биотехнологических систем

Альтернатива	Критерий							
	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7	y_8
x_1	10	50	30	40	90	60	70	20
x_2	20	90	70	60	80	40	30	10
x_3	50	40	70	60	30	10	0	20
x_4	30	90	90	40	20	30	80	50
x_5	100	40	90	10	30	80	0	50
x_6	40	90	0	80	100	10	20	30
x_7	60	0	10	90	20	30	50	40
λ_i	1	2	2	1	3	1	2	3

Требуется выбрать наилучшие альтернативы биотехнологических систем методами максимина, абсолютной уступки и главного критерия; сравнить полученные результаты.

Решение.

По вектору приоритета λ_i (табл. 3.9) вычислим весовой вектор

$$\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_7)^T: \gamma_i = \lambda_i \gamma_{i+1}; \gamma_1 = 1 \cdot \gamma_2; \gamma_2 = 2 \cdot \gamma_3; \gamma_3 = 2 \cdot \gamma_4; \gamma_4 = 1 \cdot \gamma_5; \gamma_5 = 3 \cdot \gamma_6; \gamma_6 = 1 \cdot \gamma_7; \gamma_7 = 2 \cdot \gamma_8;$$

$$\sum_{i=1}^8 \gamma_i = 1: \gamma_1 + \gamma_1 + \frac{\gamma_1}{2} + \frac{\gamma_1}{2 \cdot 2} + \frac{\gamma_1}{2 \cdot 2} + \frac{\gamma_1}{3 \cdot 2 \cdot 2} + \frac{\gamma_1}{3 \cdot 2 \cdot 2} + \frac{\gamma_1}{3 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 2} = 1 \rightarrow \gamma_1 = 0,311; \gamma_2 = 0,311; \gamma_3 = 0,156; \gamma_4 = 0,078; \gamma_5 = 0,078; \gamma_6 = 0,026; \gamma_7 = 0,026; \gamma_8 = 0,013.$$

Оценим количественно эффективные по Парето биотехнологические системы: $x_1: \sum_{i=1}^8 (\gamma_i y_i) = 37,12; x_2: \sum_{i=1}^8 (\gamma_i y_i) = 58; x_3: \sum_{i=1}^8 (\gamma_i y_i) = 46,45; x_4: \sum_{i=1}^8 (\gamma_i y_i) = 59,55; x_5: \sum_{i=1}^8 (\gamma_i y_i) = 63,43; x_6: \sum_{i=1}^8 (\gamma_i y_i) = 55,64; x_7: \sum_{i=1}^8 (\gamma_i y_i) = 31,4.$

В соответствии с *принципом максимина* будем решать следующую задачу:

$$x_j^* = \arg \max_{x_j \in \pi} F(x_j) = \arg \max_{x_j \in \pi} \min_{i \in I} (\gamma_i \cdot y_i(x_j)),$$

где $\pi = \{x_j, j = \overline{1,7}\}; I = \{\overline{1,8}\}$ – множество номеров критериев $y_i, i = \overline{1,8}$;

$$F(x_j) = \min_{i \in I} (\gamma_i \cdot y_i(x_j));$$

$$x_1: F = \min(3,117; 15,585; 4,674; 3,116; 7,011; 1,56; 1,82; 0,26) = 0,26;$$

$$x_2: F = \min(6,234; 28,053; 10,906; 4,674; 6,232; 1,04; 0,78; 0,13) = 0,13;$$

$$x_3: F = \min(15,585; 12,468; 10,906; 4,674; 2,337; 0,26; 0; 0,26) = 0;$$

$$x_4: F = \min(9,351; 28,053; 14,022; 3,116; 1,558; 0,78; 2,08; 0,65) = 0,65;$$

$$x_5: F = \min(31,17; 12,468; 14,022; 0,779; 2,337; 2,08; 0; 0,65) = 0;$$

$$x_6: F = \min(12,468; 28,053; 0; 6,232; 7,79; 0,26; 0,52; 0,39) = 0;$$

$$x_7: F = \min(18,702; 0; 1,558; 7,011; 1,558; 0,78; 1,3; 0,52) = 0;$$

$$\max_{x_j \in \pi} (F(x_j)) = \max(0,26; 0,13; 0; 0,65; 0; 0; 0) = 0,65.$$

Следовательно, в качестве наилучшей биотехнологической системы (альтернативы) выбираем x_4 , т.е.

$$x_{j^*} = \arg \left(\max_{x_j \in \pi} F(x_j) = 0,65 \right) = x_4.$$

В случае применения *принципа абсолютной уступки* необходимо решить следующую задачу:

$$x_{j^*} = \arg \max_{x_j \in \pi} F(x_j) = \arg \max_{x_j \in \pi} \sum_{i=1}^3 (\gamma_i \cdot y_i(x_j)),$$

$$\text{где } \pi = \{x_j, j = \overline{1,7}\}; x_1: F(x_1) = 37,143; x_2: F(x_2) = 58,049;$$

$$x_3: F(x_3) = 46,49; F(x_4) = 59,61; F(x_5) = 63,506; F(x_6) = 55,713;$$

$$F(x_7) = 31,429.$$

Определим максимум $F(x_j)$ по совокупности альтернатив $x_j \in \pi$:

$$\max_{x_j \in \pi} F(x_j) = \max(37,143; 58,049; 46,49; 59,61; 63,506; 55,713; 31,429) =$$

$$= 63,506;$$

при этом значение максимума соответствует наиболее предпочтительной биотехнологической системе x_5 , т.е.

$$x_{j^*} = \arg \left(\max_{x_j \in \pi} F(x_j) = 63,506 \right) = x_5.$$

В соответствии с *принципом главного критерия* необходимо решить следующую задачу с главным критерием U ; в качестве главного критерия выбираем критерий $U = y_1$, тогда

$$x_j^* = \arg \max_{x_j \in X_0} y_1,$$

где $X_0 = \{x_j: x_j \in \pi, \arg(y_i(x_j) \geq \bar{y}_i), \bar{y}_i = \text{const}, i = \overline{2,8}; \bar{y}_2 = 40; \bar{y}_3 = 0; \bar{y}_4 = 40; \bar{y}_5 = 20; \bar{y}_6 = 30; \bar{y}_7 = 30; \bar{y}_8 = 10\}$.

Выпишем биотехнологические системы (альтернативы) из множества π , оценки которых превышают заданные пороговые значения $\bar{y}_i = \text{const}$:

$$X_0 = \left\{ \begin{array}{l} \left(\underbrace{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6}_{\bar{y}_2=40} \right), \left(\underbrace{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5}_{\bar{y}_3=30} \right), \left(\underbrace{x_1, x_2, x_3, x_4, x_6, x_7}_{\bar{y}_4=40} \right), \\ \left(\underbrace{x_1, x_2, x_3, x_4, x_6, x_7}_{\bar{y}_5=20} \right), \left(\underbrace{x_1, x_2, x_4, x_5, x_7}_{\bar{y}_6=30} \right), \\ \left(\underbrace{x_1, x_2, x_4, x_7}_{\bar{y}_7=30} \right), \\ \left(\underbrace{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7}_{\bar{y}_8=10} \right). \end{array} \right\}$$

Таковыми альтернативами являются 3 биотехнологические системы x_1, x_2, x_4 , оценки которых превышают заданные пороговые значения $\bar{y}_i = \text{const}$; следовательно, из них мы и будем выбирать наилучшую с максимальным значением критерия, т.е.

$$x_j^* = \arg \max_{x_j \in X_0} y_1 = x_4.$$

Выберем теперь в качестве главного критерия $U = y_2$, тогда

$$x_j^* = \arg \max_{x_j \in X_0} y_2,$$

где $X_0 = \left\{ \begin{array}{l} x_j: x_j \in \pi, \arg(y_i(x_j) \geq \bar{y}_i), \bar{y}_i = \text{const}, i = \overline{1,3,4, \dots, 8}; \\ \bar{y}_1 = 10; \bar{y}_3 = 40; \bar{y}_4 = 40; \bar{y}_5 = 20; \bar{y}_6 = 30; \bar{y}_7 = 30; \bar{y}_8 = 10 \end{array} \right\}$.

Выделим альтернативы, оценки критериев которых превышают значения $\bar{y}_j = \text{const}$:

$$X_0 = \left\{ \begin{array}{l} \left(\underbrace{(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7)}_{\bar{y}_1=10} \right), \left(\underbrace{(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)}_{\bar{y}_3=40} \right), \left(\underbrace{(x_1, x_2, x_3, x_4, x_6, x_7)}_{\bar{y}_4=40} \right), \\ \left(\underbrace{(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7)}_{\bar{y}_5=20} \right), \left(\underbrace{(x_1, x_2, x_4, x_5, x_7)}_{\bar{y}_6=30} \right), \\ \left(\underbrace{(x_1, x_2, x_4, x_7)}_{\bar{y}_7=30} \right), \left(\underbrace{(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7)}_{\bar{y}_8=10} \right). \end{array} \right\}$$

Таковыми альтернативами являются 3 биотехнологические системы: x_1, x_2, x_4 , оценки которых превышают заданные пороговые значения $\bar{y}_i = \text{const}$; следовательно, из них мы и будем выбирать наилучшую с максимальным значением критерия y_2 , т.е.

$$x_{j^*} = \arg \max_{x_j \in X_0} y_2 = \{x_2, x_4\}.$$

Поскольку наилучших альтернатив оказалось две, то окончательный выбор из них будет осуществлять ЛПР, руководствуясь своими предпочтениями. ■

3.4. ПРИНЯТИЕ РЕШЕНИЙ В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

На практике задачи принятия решений можно классифицировать по трем признакам:

- 1) по числу целей и соответствующих им критериев оптимальности (однокритериальные или многокритериальные);
- 2) по наличию зависимости критерия оптимальности и ограничений от времени (статические и динамические);
- 3) по наличию случайных и неопределенных факторов задачи принятия решений делят на три больших класса:

- принятие решений при риске, или стохастические задачи принятия решений (каждый исход имеет вероятность появления, предполагается, что эти вероятности заранее известны ЛПР);
- принятие решений в условиях неопределенности (принятое решение может привести к одному из множества возможных исходов, вероятности появления которых для ЛПР неизвестны).

На практике учет случайных факторов, заданных распределением вероятности, выполняют двумя способами:

- 1) замена случайных параметров их математическими ожиданиями;
- 2) «взвешиванием» показателя качества по вероятности (этот способ иногда называют «оптимизация в среднем»).

На практике достаточно часто приходится принимать решение при наличии неопределенности, с которой необходимо считаться. ЛПР обычно вынуждено действовать в условиях неопределенности, т.е. ЛПР обладает меньшим количеством информации для принятия решений, чем это необходимо для целесообразной организации его действий).

Первая причина неопределенности – это неполнота, недостаточность наших знаний об окружающем мире (т.е. неосведомленность). Чем меньше мы обладаем знаниями в той области, где следует принять решение, тем больше имеется неопределенности при выборе решений.

Вторая причина неопределенности – это случайность (случайностью называют то, что в сходных (похожих) условиях происходит неодинаково, причем заранее нельзя предсказать, что и как будет на этот раз).

Третья причина неопределенности – это противодействие; специалисты полагают, что неопределенность, неясность обстановки появляется не сама по себе (т.е. естественным путем), а насаждается искусственно (во вред нам).

Неопределенность в принятии решений обусловлена недостаточной надежностью и количеством информации, необходимой ЛПР для выбора решения. Проблема выбора решения в условиях неопределенности состоит в следу-

ющем. В реальных задачах показатель эффективности I обычно зависит от трех групп факторов (U, x, ξ) , т.е. $I = I(U, x, \xi)$, где U – заданные условия (ситуация) задачи; x – альтернативы (стратегии действий), среди которых осуществляется выбор наилучшей (принятие решения); ξ – неопределенные факторы. Понятно, что показатель эффективности I системы (альтернативы) зависит от ξ и не может быть вычислен (т.е. остается неопределенным), а сама задача поиска оптимального решения теряет определенность. Присутствие неопределенных факторов ξ придает задаче новое качество: она становится задачей о выборе решения (наилучшей альтернативы) в условиях неопределенности.

На практике выделяют случай стохастической неопределенности, когда неизвестные факторы ξ являются обычными объектами изучения в теории вероятностей – случайными величинами (случайными функциями), статистические характеристики которых известны или в принципе могут быть получены. Имеются некоторые способы действия с неопределенностью такого вида:

1) идея состоит в том, чтобы в качестве показателя эффективности выбрать среднее значение (т.е. математическое ожидание по ξ) от величины I – $M[I(\xi)]$ и далее находить такое решение $x \in X$, при котором этот усредненный показатель обращается в максимум (или минимум), т.е.

$$M_{\xi}[I(U, x^*, \xi)] = \max_{x \in X} M_{\xi}[I(U, x, \xi)];$$

2) в основе лежит способ 1, но вводятся дополнительно стохастические ограничения следующего вида $P(\varphi(U, x, \xi) \leq 0) \geq P_{\text{дов}}$, где $P_{\text{дов}}$ – доверительная вероятность (обычно $P_{\text{дов}} \in 0,85 \div 0,95$, для особо ответственных биотехнологических систем $P_{\text{дов}}$ назначается близкой к 1); наличие в задачах оптимизации стохастических ограничений сильно усложняет задачу оптимизации.

На практике выделяют и другой случай, когда неизвестные (неопределенные) факторы ξ не являются случайными величинами (случайными функциями); в этом случае не имеет смысла говорить об их «законах распределения» или других вероятностных характеристиках. Здесь разумно выбрать некоторое

компромиссное решение x , приемлемое в целом диапазоне возможного изменения неопределенных факторов ξ . В настоящее время отсутствует полноценная научная теория компромисса, однако имеются попытки в этом направлении в виде теории статистических решений и теории игр; на практике окончательный выбор компромиссных решений выполняется ЛПР, которое основываясь на предварительных расчетах (получаемых при решении прямых задач принятия решений для разных условий и разных вариантов решений $x \in X$), может оценить сильные и слабые стороны по каждому варианту и на этой основе сделать окончательный выбор.

Имеются некоторые способы действия с такого рода неопределенностью:

1) следует заранее исключить те решения $x \in X$, которые при любых условиях уступают другим решениям;

2) расчеты следует проводить на «наихудший случай» и принимать те решения, которые дают максимальный эффект в наихудших случаях (реализуя принцип гарантированного результата);

3) проводить расчеты с помощью метода экспертных оценок. При этом важно помнить, что в условиях неопределенности неразумно предъявлять к точности решения слишком высокие требования; например, не следует искать единственное решение, а лучше выделить некоторую область X_0 «приемлемых» решений, из которых ЛПР выберет окончательное решение, опираясь на свою систему предпочтений об анализируемой области X_0 . Под системой предпочтений ЛПР понимается некоторое множество, как правило, не структурированных представлений ЛПР, связанных с его опытом и общей стратегией действия.

Ранее отмечалось, что неопределенность может быть вызвана либо противодействием разумного противника (область исследования теории игр), либо недостаточной осведомленностью ЛПР об условиях осуществления самого выбора решения («игра с природой»). В терминах «игры с природой» задача принятия решений может быть сформулирована так: пусть ЛПР может выбрать один из m возможных вариантов своих решений (стратегий) A_1, A_2, \dots, A_m

и пусть относительно условий, в которых будут реализованы возможные варианты, можно сделать n предположений $\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_n$. Оценки каждого варианта решения при использовании стратегии A_i в условиях Π_j известны и заданы в виде матрицы $|a_{ij}|$ выигрышей ЛПР.

Теория статистических решений предоставляет ЛПР несколько критериев оптимального (в некотором смысле) выбора решений.

1. *Максиминный критерий Вальда*; предполагается, что «игра с природой» ведется как игра с разумным противником, пытающимся помешать ЛПР достичь успеха.

В соответствии с этим критерием оптимальное решение выбирается из следующего условия:

$$V = \max_{1 \leq i \leq m} \left\{ \min_{1 \leq j \leq n} a_{ij} \right\} = a_{i^*j^*}.$$

В каждой строке матрицы $|a_{ij}|$ выбирается минимальная оценка; оптимальному решению соответствует такая стратегия A_i (при $i = i^*$), которой соответствует максимум этого минимума, т.е. $a_{i^*j^*}$. Этот критерий очень осторожен, так как ориентирован на наихудшие условия, среди которых выбирается наилучший и гарантированный результат.

2. *Критерий минимаксного риска Сэвиджа*; выбор оптимального решения ориентируется на риск, а не на выигрыш. В соответствии с этим критерием оптимальное решение выбирается из решения следующей задачи:

$$S = \min_{1 \leq j \leq n} \left\{ \max_{1 \leq i \leq m} r_{ij} \right\}, \text{ где } r_{ij} = \max_{1 \leq k \leq m} \{a_{kj}\} - a_{ij}.$$

Сущность оптимизации состоит в том, чтобы избегать большого риска; риском r_{ij} игрока A при использовании стратегии A_i в условиях Π_j называется разность между выигрышем, который можно получить, если знать условия Π_j , и выигрышем, который мы получим, не зная условия Π_j и выбирая стратегию A_i . Сущность такой оптимизации состоит в том, чтобы выбрать такое решение, при котором величина риска принимает наименьшее значение

в самой неблагоприятной ситуации. Для этого в каждом столбце матрицы $|a_{ij}|$ находят максимальную оценку и составляют новую матрицу $|r_{ij}|$, элементы которой определяются соотношением $r_{ij} = \max_{1 \leq k \leq m} \{a_{kj}\} - a_{ij}$. Эту новую матрицу называют матрицей рисков (или потерь). Далее уже из этой матрицы выбирают такое решение A_i , при котором величина риска принимает наименьшее значение в самой неблагоприятной (т.е. когда риск максимален) ситуации.

3. *Критерий Гурвица*; в соответствии с этим критерием оптимальное решение выбирается из решения следующей задачи:

$$H = \max_{1 \leq i \leq m} \left\{ \chi \min_{1 \leq j \leq n} a_{ij} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq n} a_{ij} \right\},$$

где χ — коэффициент пессимизма; значение χ назначается ЛПР (для более опасной ситуации подход к выбору решения должен быть осторожнее, и тем меньшее значение присваивается ЛПР этому коэффициенту χ).

4. *Критерий Байеса (Лапласа)*; в соответствии с этим критерием оптимальное решение выбирается из условия

$$L = \max_{1 \leq i \leq m} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n a_{ij} \right\}.$$

Основная идея такой оптимизации состоит в том, что вероятности возникновения той или иной ситуации P_j ЛПР не известны, а следовательно, будем полагать их равновероятными. Затем для каждой строки матрицы $|a_{ij}|$ выигрышей подсчитывается среднее арифметическое значение оценок; оптимальному решению будет соответствовать стратегия A_i с максимальным значением этого среднего арифметического.

Для приобретения навыков работы с критериями необходимо самостоятельно решить различные по сложности примеры задач, а также изучить подробные решения разобранных ниже примеров.

Пример 3.7. Используя критерий Вальда, принять решение (выбрать стратегию) в случае платежной матрицы $|a_{ij}|$ (матрицы выигрышей ЛПР, табл. 3.10).

3.10. Матрица выигрышей

Вариант решений для ЛПР (стратегия A_i)	Предположение (ситуация Π_j)		
	Π_1	Π_2	Π_3
A_1	20	30	15
A_2	75	20	35
A_3	27	80	25
A_4	85	5	45

Решение.

В соответствии с этим критерием оптимальное решение выбирается следующим образом:

$$A_{i^*} = \arg V = \arg \max_{1 \leq i \leq 4} \left\{ \min_{1 \leq j \leq 3} a_{ij} \right\};$$

$$A_1: \min_{1 \leq j \leq 3} a_{1j} = \{20, 30, 15\} = 15;$$

$$A_2: \min_{1 \leq j \leq 3} a_{2j} = \{75, 20, 35\} = 20;$$

$$A_3: \min_{1 \leq j \leq 3} a_{3j} = \{27, 80, 15\} = 25;$$

$$A_4: \min_{1 \leq j \leq 3} a_{4j} = \{85, 5, 45\} = 5;$$

$$V = \max_{1 \leq i \leq 4} \{15, 20, 25, 5\} = 25;$$

$$A_{i^*} = \arg(V = 25) = A_3.$$

Критерий Вальда ориентирован на наихудшие условия, среди которых отыскивается наилучший и гарантированный результат. ■

Пример 3.8. Используя критерий Сэвиджа, принять решение (выбрать стратегию) в случае платежной матрицы $|a_{ij}|$ (матрицы выигрышей ЛПР, табл. 3.11).

3.11. Матрица выигрышей

Вариант решений для ЛПР (стратегия A_i)	Предположение (ситуация Π_j)		
	Π_1	Π_2	Π_3
A_1	20	30	15
A_2	75	20	35
A_3	25	80	25
A_4	85	5	45

Решение.

В соответствии с этим критерием оптимальное решение выбирается следующим образом:

$$A_{i^*} = \arg S = \arg \min_{1 \leq i \leq 4} \left\{ \max_{1 \leq j \leq 3} r_{ij} \right\},$$

где $r_{ij} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{kj}\} - a_{ij}$.

Вычисляем элементы матрицы риска $|r_{ij}|$:

$$\max_{1 \leq k \leq 4} \{r_{k1}\} = \max\{20; 75; 25; 85\} = 85;$$

$$\max_{1 \leq k \leq 4} \{r_{k2}\} = \max\{30; 20; 80; 5\} = 80;$$

$$\max_{1 \leq k \leq 4} \{r_{k3}\} = \max\{15; 35; 25; 45\} = 45;$$

$$r_{11} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k1}\} - a_{11} = 85 - 20 = 65;$$

$$r_{12} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k2}\} - a_{12} = 80 - 30 = 50;$$

$$r_{13} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k3}\} - a_{13} = 45 - 15 = 30;$$

$$r_{21} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k1}\} - a_{21} = 85 - 75 = 10;$$

$$r_{22} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k2}\} - a_{22} = 80 - 20 = 60;$$

$$r_{23} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k3}\} - a_{23} = 45 - 35 = 10;$$

$$r_{31} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k1}\} - a_{31} = 85 - 25 = 60;$$

$$r_{32} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k2}\} - a_{32} = 80 - 80 = 0;$$

$$r_{33} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k3}\} - a_{33} = 45 - 25 = 20;$$

$$r_{41} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k1}\} - a_{41} = 85 - 85 = 0;$$

$$r_{42} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k2}\} - a_{42} = 80 - 5 = 75;$$

$$r_{43} = \max_{1 \leq k \leq 4} \{a_{k3}\} - a_{43} = 45 - 45 = 0.$$

Таким образом получили матрицу рисков (табл. 3.12).

3.12. Матрица рисков

Вариант решений для ЛПР (стратегия A_i)	Предположение (ситуация Π_j)		
	Π_1	Π_2	Π_3
A_1	65	50	30
A_2	10	60	10
A_3	60	0	20
A_4	0	75	0

Далее вычисляем величины $\left\{ \max_{1 \leq j \leq 3} r_{ij} \right\}$; фактически это наибольшие значения рисков по строкам матрицы $|r_{ij}|$, т.е. $\max_{1 \leq j \leq 3} r_{1j} = 65$; $\max_{1 \leq j \leq 3} r_{2j} = 60$; $\max_{1 \leq j \leq 3} r_{3j} = 60$; $\max_{1 \leq j \leq 3} r_{4j} = 75$; затем вычисляем величину $S = \min_{1 \leq i \leq 4} \left\{ \max_{1 \leq j \leq 3} r_{ij} \right\}$, т.е. $\min_{1 \leq i \leq 4} \{65; 60; 60; 75\} = 60$ и, наконец, аргумент этой величины

$$A_{i^*} = \arg S = \arg \min_{1 \leq j \leq 3} \left\{ \max_{1 \leq i \leq 4} r_{ij} \right\}, \text{ т.е. } A_{i^*} = \arg (S = 60) = \{A_2, A_3\}^*.$$

В соответствии с критерием Сэвиджа обе стратегии A_2 и A_3 являются оптимальными, поскольку величина риска принимает наименьшее значение в самой неблагоприятной (т.е. когда максимален риск) ситуации.

Окончательное решение по выбору наилучшей альтернативы из $\{A_2, A_3\}$ принимает ЛПР, опираясь на свою систему предпочтений. ■

Пример 3.9. Используя критерий Гурвица (при $\chi = 0,6$), принять решение (выбрать стратегию) в случае платежной матрицы $|a_{ij}|$ (матрицы выигрышей ЛПР, табл. 3.13).

3.13. Матрица выигрышей

Вариант решений для ЛПР (стратегия A_i)	Предположение (ситуация Π_j)		
	Π_1	Π_2	Π_3
A_1	20	30	15
A_2	75	20	35
A_3	25	80	25
A_4	85	5	45

Решение.

В соответствии с критерием Гурвица оптимальное решение выбирается следующим образом:

$$A_{i^*} = \arg H = \operatorname{argmax}_{1 \leq i \leq 4} \left\{ \chi \min_{1 \leq j \leq 3} a_{ij} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq 3} a_{ij} \right\}.$$

Вначале вычислим значения $\min_{1 \leq j \leq 3} a_{ij}$ и $\max_{1 \leq j \leq 4} a_{ij}$:

$$\min_{1 \leq j \leq 3} a_{1j} = \min\{20, 30, 15\} = 15;$$

$$\max_{1 \leq j \leq 3} a_{1j} = \max\{20, 30, 15\} = 30;$$

$$\min_{1 \leq j \leq 3} a_{2j} = \min\{75, 20, 35\} = 20,$$

$$\max_{1 \leq j \leq 3} a_{2j} = \max\{75, 20, 35\} = 75;$$

$$\min_{1 \leq j \leq 3} a_{3j} = \min\{25, 80, 25\} = 25,$$

$$\max_{1 \leq j \leq 3} a_{3j} = \max\{25, 80, 25\} = 80;$$

$$\min_{1 \leq j \leq n} a_{4j} = \min\{85, 5, 45\} = 5;$$

$$\max_{1 \leq j \leq n} a_{4j} = \max\{85, 5, 45\} = 85,$$

а затем значения $\chi \min_{1 \leq j \leq 3} a_{ij} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq 3} a_{ij}$:

$$\chi \min_{1 \leq j \leq 3} a_{1j} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq 3} a_{1j} = 0,6 * 15 + (1 - 0,6) * 30 = 21;$$

$$\chi \min_{1 \leq j \leq 3} a_{2j} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq 3} a_{2j} = 0,6 * 20 + (1 - 0,6) * 75 = 42;$$

$$\chi \min_{1 \leq j \leq 3} a_{3j} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq 3} a_{3j} = 0,6 * 25 + (1 - 0,6) * 80 = 47;$$

$$\chi \min_{1 \leq j \leq 3} a_{4j} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq 3} a_{4j} = 0,6 * 5 + (1 - 0,6) * 85 = 37,$$

значение $H = \max_{1 \leq i \leq 4} \left\{ \chi \min_{1 \leq j \leq 3} a_{ij} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq 3} a_{ij} \right\}$, т.е.

$$H = \max\{21; 42; 47; 37\} = 47,$$

и, наконец, получим решение задачи

$$A_{i^*} = \arg (H = 47) = A_3.$$

Таким образом, в соответствии с критерием Гурвица стратегия A_3 является оптимальной. ■

Пример 3.10. Используя критерии Вальда, Сэвиджа, Гурвица (при $\chi = 0,6$), принять решение (выбрать стратегию) в случае платежной матрицы $|a_{ij}|$ (матрицы выигрышей ЛПР, табл. 3.14).

3.14. Матрица выигрышей

Вариант решений для ЛПР (стратегия A_i)	Предположение (ситуация P_j)			
	P_1	P_2	P_3	P_4
A_1	19	30	41	49
A_2	50	38	10	20
A_3	73	18	81	11

Решение.

1. В соответствии с критерием Вальда оптимальное решение выбирается следующим образом:

$$A_{i^*} = \arg V = \arg \max_{1 \leq i \leq 3} \left\{ \min_{1 \leq j \leq 4} a_{ij} \right\};$$

$$A_1: \min_{1 \leq j \leq 4} a_{1j} = \{19, 30, 41, 49\} = 19;$$

$$A_2: \min_{1 \leq j \leq 4} a_{2j} = \{50, 38, 10, 20\} = 10;$$

$$A_3: \min_{1 \leq j \leq 4} a_{3j} = \{73, 18, 81, 11\} = 11;$$

$$V = \max_{1 \leq i \leq 3} \{19, 10, 11\} = 19;$$

$$A_{i^*} = \arg (V = 19) = A_1.$$

По критерию Вальда получили решение, ориентированное на наихудшие условия и именно для этих условий дающее наилучший и гарантированный результат – стратегию A_1 .

2. В соответствии с критерием Сэвиджа оптимальное решение выбирается следующим образом:

$$A_{i^*} = \arg S = \arg \min_{1 \leq i \leq 3} \left\{ \max_{1 \leq j \leq 4} r_{ij} \right\},$$

где $r_{ij} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{kj}\} - a_{ij}$.

Вычисляем элементы матрицы риска $|r_{ij}|$:

$$\max_{1 \leq k \leq 3} \{r_{k1}\} = \max \{19; 50; 73\} = 73;$$

$$\max_{1 \leq k \leq 3} \{r_{k2}\} = \max \{30; 38; 18\} = 38;$$

$$\max_{1 \leq k \leq 3} \{r_{k3}\} = \max \{41; 10; 81\} = 81;$$

$$\max_{1 \leq k \leq 3} \{r_{k4}\} = \max \{49; 20; 11\} = 49;$$

$$r_{11} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k1}\} - a_{11} = 73 - 19 = 54;$$

$$r_{12} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k2}\} - a_{12} = 38 - 30 = 8;$$

$$r_{13} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k3}\} - a_{13} = 81 - 41 = 40;$$

$$r_{14} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k4}\} - a_{13} = 49 - 49 = 0;$$

$$r_{21} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k1}\} - a_{21} = 73 - 50 = 23;$$

$$r_{22} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k2}\} - a_{22} = 38 - 38 = 0;$$

$$r_{23} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k3}\} - a_{23} = 81 - 10 = 71;$$

$$r_{24} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k4}\} - a_{24} = 49 - 20 = 29;$$

$$r_{31} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k1}\} - a_{31} = 85 - 73 = 12;$$

$$r_{32} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k2}\} - a_{32} = 38 - 18 = 20;$$

$$r_{33} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k3}\} - a_{33} = 81 - 81 = 0;$$

$$r_{34} = \max_{1 \leq k \leq 3} \{a_{k4}\} - a_{34} = 49 - 11 = 38.$$

Таким образом получили матрицу рисков (табл. 3.15).

3.15. Матрица рисков

Вариант решений для ЛПР (стратегия A_i)	Предположение (ситуация Π_j)			
	Π_1	Π_2	Π_3	Π_4
A_1	24	8	40	0
A_2	23	0	71	29
A_3	12	20	0	38

Далее вычисляем величины $\left\{ \max_{1 \leq j \leq 4} r_{ij} \right\}$; фактически это наибольшие значения рисков по строкам матрицы $|r_{ij}|$, т.е. $\max_{1 \leq j \leq 4} r_{1j} = 40$; $\max_{1 \leq j \leq n} r_{2j} = 71$;

$\max_{1 \leq j \leq 4} r_{3j} = 38$; затем вычисляем величину $S = \min_{1 \leq i \leq 3} \left\{ \max_{1 \leq j \leq 4} r_{ij} \right\}$, т.е.

$\min_{1 \leq i \leq 3} \{40; 71; 38\} = 38$ и, наконец, аргумент этой величины

$$A_i^* = \arg S = \arg \min_{1 \leq j \leq 4} \left\{ \max_{1 \leq i \leq 3} r_{ij} \right\}, \text{ т.е. } A_i^* = \arg (S = 38) = A_3.$$

В соответствии с критерием Сэвиджа стратегия A_3 является оптимальной, поскольку величина риска принимает наименьшее значение в самой неблагоприятной (т.е. когда максимален риск) ситуации.

3. В соответствии с критерием Гурвица оптимальное решение выбирается следующим образом:

$$A_{i^*} = \arg H = \arg \max_{1 \leq i \leq 3} \left\{ \chi \min_{1 \leq j \leq 4} a_{ij} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq n} a_{ij} \right\}.$$

Вначале вычислим значения $\min_{1 \leq j \leq 4} a_{ij}$ и $\max_{1 \leq j \leq 4} a_{ij}$:

$$\min_{1 \leq j \leq 4} a_{1j} = \min\{19; 30; 41; 49\} = 19, \quad \max_{1 \leq j \leq 4} a_{1j} = \max\{19; 30; 41; 49\} = 49;$$

$$\min_{1 \leq j \leq 4} a_{2j} = \min\{50; 38; 10; 20\} = 10, \quad \max_{1 \leq j \leq 4} a_{2j} = \max\{50; 38; 10; 20\} = 50;$$

$$\min_{1 \leq j \leq 4} a_{3j} = \min\{73; 18; 81; 11\} = 11, \quad \max_{1 \leq j \leq 4} a_{3j} = \max\{73; 18; 81; 11\} = 81,$$

а затем значения $\chi \min_{1 \leq j \leq 4} a_{ij} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq 4} a_{ij}$:

$$\chi \min_{1 \leq j \leq 4} a_{1j} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq 4} a_{1j} = 0,6 * 19 + (1 - 0,6) * 49 = 27,8;$$

$$\chi \min_{1 \leq j \leq 4} a_{2j} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq 4} a_{2j} = 0,6 * 10 + (1 - 0,6) * 50 = 26;$$

$$\chi \min_{1 \leq j \leq 4} a_{3j} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq 4} a_{3j} = 0,6 * 11 + (1 - 0,6) * 81 = 39,$$

значение $H = \max_{1 \leq i \leq 3} \left\{ \chi \min_{1 \leq j \leq 4} a_{ij} + (1 - \chi) \max_{1 \leq j \leq n} a_{ij} \right\}$, т.е.

$$H = \max \{27,8; 26; 39\} = 39,$$

и, наконец, получим решение задачи

$$A_{i^*} = \arg (H = 39) = A_3.$$

Таким образом, в соответствии с критерием Гурвица стратегия A_3 является оптимальной.

Таким образом, оптимальная стратегия согласно критерию Вальда есть A_1 ; с точки зрения критериев Гурвица и Сэвиджа, оптимальной стратегией является A_3 .

Важно отметить, что на практике возможны различные случаи. В частности возможен случай, когда все три критерия (Вальда, Сэвиджа, Гурвица) указывают на одну и ту же стратегию; при этом не исключен и случай, когда все эти три критерия указывают на три разных стратегии. ■

Пример 3.11. Используя критерий Байеса (Лапласа), принять решение (выбрать стратегию) по этому критерию в случае платежной матрицы $|a_{ij}|$ (матрицы выигрышей ЛПР, табл. 3.16).

3.16. Матрица выигрышей

Вариант решений для ЛПР (стратегия A_i)	Предположение (ситуация P_j)			
	P_1	P_2	P_3	P_4
A_1	1	3	1	1
A_2	3	1	1	2
A_3	2	1	1	1
A_4	1	3	0	4

Решение.

В соответствии с критерием Байеса (Лапласа) оптимальное решение выбирается следующим образом:

$$A_{i^*} = \arg L = \arg \max_{1 \leq i \leq m} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n a_{ij} \right\}.$$

Вычислим по каждой строке матрицы $|a_{ij}|$ среднее арифметическое значение величины a_{ij} :

$$\frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 a_{1j} = (1 + 3 + 1 + 1)/4 = 1,5;$$

$$\frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 a_{2j} = (3 + 1 + 1 + 2)/4 = 1,75;$$

$$\frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 a_{3j} = (2 + 1 + 1 + 1)/4 = 1,25;$$

$$\frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 a_{4j} = (1 + 3 + 0 + 4)/4 = 2,0,$$

затем определим значение величины

$$\max_{1 \leq i \leq 4} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^4 a_{ij} \right\} = \max \{1,5; 1,75; 1,25; 2\} = 1,75,$$

и, наконец, определим аргумент этой величины, т.е.

$$A_{i^*} = \arg L = \arg \max_{1 \leq i \leq 4} \left\{ \frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 a_{ij} \right\} = A_2.$$

Таким образом, стратегия A_2 является оптимальной стратегией согласно критерию Байеса (Лапласа). ■

4. ЭФФЕКТИВНЫЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ БЕЗУСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ

Пусть дана функция $I(x)$, ограниченная снизу на множестве R^n и имеющая непрерывные частные производные во всех точках. Требуется найти локальный минимум функции $I(x)$ на множестве допустимых решений $X = R^n$, т.е. найти такую т. $x^* \in R^n$, что

$$I(x^*) = \min_{x \in R^n} I(x).$$

Стратегия решения сформулированной задачи состоит в построении последовательности точек $\{x^k\}$, $k = 0, 1, \dots$, таких, что $I(x^{k+1}) < I(x^k)$, $k = 0, 1, \dots$; при этом точки последовательности $\{x^k\}$ вычисляются по правилу

$$x^{k+1} = x^k + t_k d^k, k = 0, 1, \dots,$$

где т. x^0 задается пользователем; d^k – выбранное направление поиска локального минимума; t_k – величина продвижения по выбранному направлению d^k .

Построение последовательности $\{x^k\}$ закачивается в т. x^k , для которой $\|\nabla I(x^k)\|_{R^n} \leq \varepsilon_1$, где ε_1 – заданное малое положительное число, или $k \geq M$, где M – предельное число итераций, или при двукратном одновременном выполнении двух неравенств $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| \leq \varepsilon_2$, $\|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} \leq \varepsilon_2$, где ε_2 – заданное малое положительное число.

4.1. МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА С ПОСТОЯННЫМ ШАГОМ

В методе градиентного спуска направление d^k поиска локального минимума на k -й итерации выбирается следующим образом: $d^k = -\nabla I(x^k)$. Градиент целевой функции $\nabla I(x) = \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial I(x)}{\partial x_n} \right)^T$ находится аналитическим методом, если функция задана в явном виде, или численно по формуле

$$\frac{\partial I(x)}{\partial x_i} \cong \frac{I(x_1, \dots, x_i + \Delta x_i, \dots, x_n) - I(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n)}{\Delta x_i},$$

где Δx_i – относительно малое приращение аргумента, $\Delta x_i > 0$; если целевая функция задана алгоритмом своего вычисления.

Алгоритм.

Шаг 1. Задать x^0 , $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M – предельное число итераций, найти (если это возможно) градиент функции в произвольной точке

$$\nabla I(x) = \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial I(x)}{\partial x_n} \right)^T.$$

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить (аналитически или численно) $\nabla I(x^k)$.

Шаг 4. Проверить выполнение условия окончания поиска $\|\nabla I(x^k)\|_{R^n} \leq \varepsilon_1$:

а) если условие выполняется, то расчет закончен, и точка локального минимума целевой функции определена $x^* = x^k$, $I(x^*) = I(x^k)$;

б) если условие не выполняется, то перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить условие окончания поиска $k \geq M$:

а) если условие выполняется, то расчет закончен, и точка локального минимума целевой функции определена $x^* = x^k$, $I(x^*) = I(x^k)$;

б) если условие не выполняется, то перейти к шагу 6.

Шаг 6. Задать величину t_k продвижения по направлению поиска локального минимума.

Шаг 7. Вычислить $x^{k+1} = x^k - t_k \nabla I(x^k)$.

Шаг 8. Проверить выполнение условия продвижения по выбранному направлению спуска $I(x^{k+1}) - I(x^k) < 0$:

а) если условие выполняется, то перейти к шагу 9;

б) если условие не выполняется, положить $t_k = t_k/2$ и перейти к шагу 7.

Шаг 9. Проверить выполнение условий окончания поиска локального минимума $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| \leq \varepsilon_2$, $\|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} \leq \varepsilon_2$:

а) если оба условия выполняются при текущем и предыдущем значениях k и $k - 1$, то расчет окончен и $x^* = x^{k+1}$, $I(x^*) = I(x^{k+1})$;

б) если хотя бы одно из условий не выполняется, положить $k := k + 1$ и перейти к шагу 3.

Пример 4.1. Определить локальный минимум функции

$$I(x^*) = \min_{x \in R^n} (I(x) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2)$$

методом градиентного спуска с постоянным шагом.

1. Зададим $x^0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, M$: $x^0 = (0,5; 1)^T$; $\varepsilon_1 = 0,1$; $\varepsilon_2 = 0,15$; $M = 10$. Определим градиент функции в произвольной точке $\nabla I(x) = \{4x_1 + x_2; x_1 + 2x_2\}^T$.

2. Положим $k = 0$.

3⁰. Вычислим значения градиента функции в т. x^0 : $\nabla I(x^0) = (3; 2,5)^T$.

4⁰. Вычислим норму $\|\nabla I(x^0)\|_{R^2}$ градиента функции в т. x^0 и проверим выполнение условия $\|\nabla I(x^0)\|_{R^2} < \varepsilon_1$ окончания поиска минимума целевой функции: $\|\nabla I(x^0)\|_{R^2} = 3,9 > \varepsilon_1 = 0,1$; поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 5.

5⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума целевой функции $k \geq M$: $k = 0 < M = 10$, поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 6.

6⁰. Зададим величину продвижения t_0 по выбранному направлению поиска локального минимума: $t_0 = 0,5$.

7⁰. Вычислим новую точку последовательности $x^1 = x^0 - t_0 \nabla I(x^0)$:

$$x^1 = (0,5; 1)^T - 0,5(3; 2,5)^T = (-1; -0,25)^T, I(x^1) = 2,31.$$

8⁰. Сравним значения функции в т. x^1 и в т. x^0 : поскольку условие $I(x^{k+1}) < I(x^k)$ для $k = 0$ не выполняется, уменьшим величину продвижения t_0 в 2 раза, т.е. зададим $t_0 = 0,5/2 = 0,25$, и переходим к повторению шагов 7,8.

7⁰¹. Вычислим x^1 : $x^1 = (0,5; 1)^T - 0,25(3; 2,5)^T = (-0,25; -0,375)^T$,
 $I(x^1) = 0,171$.

8⁰¹. Сравним $I(x^1)$ и $I(x^0)$: поскольку $I(x^1) = 0,171 < I(x^0) = 2$, то переходим к шагу 9.

9⁰. Проверим выполнение условий окончания поиска $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| < \varepsilon_2$,
 $\|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} < \varepsilon_2$: поскольку $|I(x^1) - I(x^0)| = 1,829 > \varepsilon_2 = 0,15$, то полагаем $k := k + 1 = 0 + 1 = 1$ и переходим к шагу 3.

3¹. Вычислим значения градиента функции в т. x^1 : $\nabla I(x^1) = (-0,625; 0,51)^T$.

4¹. Вычислим норму $\|\nabla I(x^1)\|_{R^2}$ градиента функции в т. x^1 и проверим выполнение условия $\|\nabla I(x^1)\|_{R^2} < \varepsilon_1$ окончания поиска: $\|\nabla I(x^1)\|_{R^2} = 0,81 > \varepsilon_1 = 0,1$; поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 5.

5¹. Проверим выполнение условия окончания поиска $k \geq M$: $k = 1 < M = 10$, поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 6.

6¹. Зададим величину продвижения t_1 по выбранному направлению поиска локального минимума: $t_1 = 0,25$.

7¹. Вычислим новую точку последовательности $x^2 = x^1 - t_1 \nabla I(x^1)$:

$$x^2 = (-0,25; 0,375)^T - 0,25(-0,625; -0,51)^T = (-0,094; 0,25)^T,$$

$$I(x^2) = 0,056.$$

8¹. Сравним значения функции в т. x^2 и в т. x^1 : поскольку условие $I(x^2) = 0,056 < I(x^1) = 0,171$ для $k = 1$ выполняется, то переходим к шагу 9.

9¹. Проверим выполнение условий окончания поиска $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| < \varepsilon_2$,
 $\|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} < \varepsilon_2$: поскольку $|I(x^2) - I(x^1)| = 0,115 < \varepsilon_2 = 0,15$, а $\|x^2 - x^1\|_{R^n} = 0,2 > \varepsilon_2 = 0,15$, то полагаем $k := k + 1 = 1 + 1 = 2$ и переходим к шагу 3.

3². Вычислим значения градиента функции в т. x^2 : $\nabla I(x^2) = (-0,126; 0,406)^T$.

4². Вычислим норму $\|\nabla I(x^2)\|_{R^2}$ градиента функции в т. x^2 и проверим выполнение условия $\|\nabla I(x^2)\|_{R^2} < \varepsilon_1$ окончания поиска: $\|\nabla I(x^2)\|_{R^2} = 0,425 > \varepsilon_1 = 0,1$; поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 5.

5². Проверим выполнение условия окончания поиска $k \geq M: k = 2 < M = 10$, поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 6.

6². Зададим величину продвижения t_2 по выбранному направлению поиска локального минимума: $t_2 = 0,25$.

7². Вычислим новую точку последовательности $x^3 = x^2 - t_2 \nabla I(x^2)$:

$$x^3 = (-0,094; 0,25)^T - 0,25(-0,126; 0,406)^T = (-0,063; 0,15)^T,$$

$$I(x^3) = 0,021.$$

8². Сравним значения функции в т. x^3 и в т. x^2 : поскольку условие $I(x^3) = 0,021 < I(x^2) = 0,056$ для $k = 2$ выполняется, то переходим к шагу 9.

9¹. Проверим выполнение условий окончания поиска $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| < \varepsilon_2$, $\|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} < \varepsilon_2$: поскольку условия $|I(x^3) - I(x^2)| = 0,035 < \varepsilon_2 = 0,15$ и $\|x^3 - x^2\|_{R^n} = 0,105 < \varepsilon_2 = 0,15$ выполняются впервые, то полагаем $k := k + 1 = 2 + 1 = 3$ и переходим к шагу 3.

3³. Вычислим значения градиента функции в т. x^3 : $\nabla I(x^3) = (-0,102; 0,237)^T$.

4³. Вычислим норму $\|\nabla I(x^3)\|_{R^2}$ градиента функции в т. x^3 и проверим выполнение условия $\|\nabla I(x^3)\|_{R^2} < \varepsilon_1$ окончания поиска: $\|\nabla I(x^3)\|_{R^2} = 0,257 > \varepsilon_1 = 0,1$; поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 5.

5³. Проверим выполнение условия окончания поиска $k \geq M: k = 3 < M = 10$, поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 6.

6³. Зададим величину продвижения t_3 по выбранному направлению поиска локального минимума: $t_3 = 0,25$.

7³. Вычислим новую точку последовательности $x^4 = x^3 - t_3 \nabla I(x^3)$:

$$x^4 = (-0,063; 0,15)^T - 0,25(-0,102; 0,237)^T = (-0,038; 0,091)^T,$$

$$I(x^4) = 0,0076.$$

8³. Сравним значения функции в т. x^4 и в т. x^3 : поскольку условие $I(x^4) = 0,0076 < I(x^3) = 0,021$ для $k = 3$ выполняется, то переходим к шагу 9.

9³. Проверим выполнение условий окончания поиска $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| < \varepsilon_2$, $\|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} < \varepsilon_2$: поскольку оба условия $|I(x^4) - I(x^3)| = 0,015 < \varepsilon_2 = 0,15$ и $\|x^4 - x^3\|_{R^n} = 0,064 < \varepsilon_2 = 0,15$ выполнены при $k = 2, 3$, то расчет окончен и найдена точка локального минимума $x^* = x^4 = (-0,038; 0,091)^T$ целевой функции, $I(x^*) = I(x^4) = 0,0076$.

Анализ полученного решения.

Функция $I(x) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2$ является дважды дифференцируемой, поэтому проведем проверку достаточных условий минимума функции в т. $x^4 = (-0,038; 0,091)^T$ с использованием матрицы Гессе и критерия Сильвестра [7]. Проанализируем матрицу Гессе, элементы которой вычислены в т. $x^4 = (-0,038; 0,091)^T$:

$$H = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix},$$

матрица Гессе положительно определена $H > 0$, поскольку оба ее угловых минора $\Delta_1 = 4 > 0$ и $\Delta_2 = 7 > 0$ положительны. Следовательно, т. $x^4 = (-0,038; 0,091)^T$ есть найденное приближение точки локального минимума $x^* = (0, 0)^T$, а значение $I(x^4) = 0,0076$ есть найденное приближение значения целевой функции $I(x^*) = 0$. Заметим, что условие $H > 0$ есть одновременно условие строгой выпуклости функции $I(x) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2$ на R^2 ; следовательно, $x^4 = (-0,038; 0,091)^T$, $I(x^4) = 0,0076$ есть найденные численным методом приближения точки глобального минимума $I(x)$. ■

4.2. МЕТОД НАИСКОРЕЙШЕГО ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

Точки последовательности $\{x^k\}$, как и в методе *градиентного спуска*, вычисляются по правилу

$$x^{k+1} = x^k - t_k \nabla I(x^k), k = 0, 1, \dots,$$

т. x^0 задается пользователем, а величина t_k продвижения по выбранному направлению спуска определяется для каждого значения k из условия

$$\varphi(t_k) = I(x^k - t_k \nabla I(x^k)) \rightarrow \min_{t_k}$$

Решение задачи одномерной минимизации функции $\varphi(t_k)$ по переменной t_k осуществляется численными методами, например методом параболической интерполяции, или когда ищется

$$\min_{t_k \in [a, b]} \varphi(t_k) = \min_{t_k \in [a, b]} I(x^k - t_k \nabla I(x^k)),$$

а границы интервала $[a, b]$ задаются пользователем [7].

Алгоритм.

Шаг 1. Задать x^0 , $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M – предельное число итераций, найти градиент функции (если это возможно) в произвольной точке

$$\nabla I(x) = \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial I(x)}{\partial x_n} \right)^T.$$

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla I(x^k)$.

Шаг 4. Проверить выполнение условия окончания поиска $\|\nabla I(x^k)\|_{R^n} \leq \varepsilon_1$:

а) если условие выполняется, то расчет закончен, и точка локального минимума целевой функции определена $x^* = x^k$, $I(x^*) = I(x^k)$;

б) если условие не выполняется, то перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить условие окончания поиска $k \geq M$:

а) если условие выполняется, то расчет законче, и точка локального минимума целевой функции определена $x^* = x^k$, $I(x^*) = I(x^k)$;

б) если условие не выполняется, то перейти к шагу 6.

Шаг 6. На этом шаге к основному алгоритму подключить вспомогательный алгоритм решения задачи

$$\varphi(t_k) = I(x^k - t_k \nabla I(x^k)) \rightarrow \min_{t_k}$$

задать все необходимые параметры для этого алгоритма и определить величину продвижения t_k^* по выбранному направлению поиска локального минимума целевой функции.

Шаг 7. Вычислить $x^{k+1} = x^k - t_k \nabla I(x^k)$.

Шаг 8. Проверить выполнение условий окончания поиска локального минимума $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| < \varepsilon_2$, $\|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} < \varepsilon_2$:

а) если оба условия выполняются при текущем значении k и $k - 1$, то расчет окончен, и точка локального минимума целевой функции определена $x^* = x^{k+1}$, $I(x^*) = I(x^{k+1})$;

б) если хотя бы одно из условий не выполняется, положить $k := k + 1$ и перейти к шагу 3.

Оценки скорости сходимости получены только для сильно выпуклых функций, когда последовательность $\{x^k\}$ сходится к точке минимума функции $I(x)$ со скоростью геометрической прогрессии (линейная сходимость): $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \frac{M-m}{M+m} \|x^k - x^*\|$, где M и m – оценки наибольшего и наименьшего собственных значений матрицы Гессе $H(x)$ функции $I(x)$ [8].

Пример 4.2. Определить локальный минимум функции

$$I(x^*) = \min_{x \in R^n} (I(x) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2)$$

методом наискорейшего спуска.

1. Зададим $x^0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, M$: $x^0 = (0,5; 1)^T$; $\varepsilon_1 = 0,1$; $\varepsilon_2 = 0,15$; $M = 10$. Определим градиент функции в произвольной точке $\nabla I(x) = \{4x_1 + x_2; x_1 + 2x_2\}^T$.

2. Положим $k = 0$.

3⁰. Вычислим значения градиента функции в т. x^0 : $\nabla I(x^0) = (3; 2,5)^T$.

4⁰. Вычислим норму $\|\nabla I(x^0)\|_{R^2}$ градиента функции в т. x^0 и проверим выполнение условия $\|\nabla I(x^0)\|_{R^2} < \varepsilon_1$ окончания поиска: $\|\nabla I(x^0)\|_{R^2} = 3,9 > \varepsilon_1 = 0,1$; поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 5.

5⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска $k \geq M: k = 0 < M = 10$, поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 6.

6⁰. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи

$$\varphi(t_0^*) = I(x^0 - t_0^* \nabla I(x^0)) = \min_{t_0} \varphi(t_0)$$

методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим $t_0^*: t_0^* = 0,24$.

7⁰. Вычислим новую точку последовательности $x^1 = x^0 - t_0^* \nabla I(x^0)$:

$$x^1 = (0,5; 1)^T - 0,24(3; 2,5)^T = (-0,22; 0,4)^T, I(x^1) = 0,1688.$$

8⁰. Проверим выполнение условий окончания поиска $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| < \varepsilon_2$, $\|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} < \varepsilon_2$: поскольку $|I(x^1) - I(x^0)| = 1,8312 > \varepsilon_2 = 0,15$, то полагаем $k := k + 1 = 0 + 1 = 1$ и переходим к шагу 3.

3¹. Вычислим значения градиента функции в т. $x^1: \nabla I(x^1) = (-0,48; 0,58)^T$.

4¹. Вычислим норму $\|\nabla I(x^1)\|_{R^2}$ градиента функции в т. x^1 и проверим выполнение условия $\|\nabla I(x^1)\|_{R^2} < \varepsilon_1$ окончания поиска минимума целевой функции: $\|\nabla I(x^1)\|_{R^2} = 0,7529 > \varepsilon_1 = 0,1$; поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 5.

5¹. Проверим выполнение условия окончания поиска $k \geq M: k = 1 < M = 10$, поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 6.

6¹. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи

$$\varphi(t_1^*) = I(x^1 - t_1^* \nabla I(x^1)) = \min_{t_1} \varphi(t_1)$$

методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим $t_1^*: t_1^* = 0,546$.

7¹. Вычислим новую точку последовательности $x^2 = x^1 - t_1^* \nabla I(x^1)$:

$$x^2 = (-0,22; 0,4)^T - 0,546(-0,48; 0,58)^T = (-0,042; 0,0833)^T,$$

$$I(x^2) = 0,014.$$

8¹. Проверим выполнение условий окончания поиска $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| < \varepsilon_2$, $\|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} < \varepsilon_2$: поскольку $|I(x^2) - I(x^1)| = 0,1548 > \varepsilon_2 = 0,15$, то полагаем $k := k + 1 = 1 + 1 = 2$ и переходим к шагу 3.

3². Вычислим значения градиента функции в т. x^2 :

$$\nabla I(x^2) = (0,2516; 0,2087)^T.$$

4². Вычислим норму $\|\nabla I(x^2)\|_{R^2}$ градиента функции в т. x^2 и проверим выполнение условия $\|\nabla I(x^2)\|_{R^2} < \varepsilon_1$ окончания поиска: $\|\nabla I(x^2)\|_{R^2} = 0,3269 > \varepsilon_1 = 0,1$; поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 5.

5². Проверим выполнение условия окончания поиска $k \geq M$: $k = 2 < M = 10$, поскольку условие не выполняется, переходим к шагу 6.

6². Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи

$$\varphi(t_2^*) = I(x^2 - t_2^* \nabla I(x^2)) = \min_{t_2} \varphi(t_2)$$

методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим t_2^* : $t_2^* = 0,24$.

7². Вычислим новую точку последовательности $x^3 = x^2 - t_2^* \nabla I(x^2)$:

$$x^3 = (-0,042; 0,0833)^T - 0,24(0,2516; 0,2087)^T = (-0,0183; 0,0332)^T,$$

$$I(x^3) = 0,0012.$$

8². Проверим выполнение условий окончания поиска $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| < \varepsilon_2$, $\|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} < \varepsilon_2$: поскольку условия $|I(x^3) - I(x^2)| = 0,0128 < \varepsilon_2 = 0,15$, $\|x^3 - x^2\|_{R^n} = 0,0785 < \varepsilon_2 = 0,15$ выполняются впервые, то полагаем $k := k + 1 = 2 + 1 = 3$ и переходим к шагу 3.

3³. Вычислим значения градиента функции в т. $x^3 = (-0,0183; 0,0332)^T$: $\nabla I(x^3) = (0,04; 0,048)^T$.

4³. Вычислим норму $\|\nabla I(x^3)\|_{R^2}$ градиента функции в т. x^3 и проверим выполнение условия $\|\nabla I(x^3)\|_{R^2} < \varepsilon_1$ окончания поиска: $\|\nabla I(x^3)\|_{R^2} =$

$= 0,0626 < \varepsilon_1 = 0,1$; поскольку условие выполняется, расчет окончен, и найден локальный минимум целевой функции с заданной точностью – $x^* = x^3 = (-0,0183; 0,0332)^T$, $I(x^*) = I(x^3) = 0,0012$. ■

4.3. МЕТОД ПОКООРДИНАТНОГО СПУСКА

Стратегия решения задачи состоит в построении последовательности точек $\{x^k\}$, $k = 0, 1, \dots$, таких, что $I(x^{k+1}) < I(x^k)$, $k = 0, 1, \dots$. Точки последовательности $\{x^k\}$ вычисляются по циклам в соответствии с правилом

$$x^{jk+1} = x^{jk} - t_k \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_{k+1}} \right)_{x=x^{jk}} \cdot e_{k+1},$$

где j – номер цикла вычислений; $j = 0, 1, 2, \dots$; k – номер итерации внутри цикла, $k = 0, 1, \dots, n - 1$; e_{k+1} – единичный вектор, $(k + 1)$ -я проекция которого равна 1; т. x^{j0} задается пользователем, величина шага t_k выбирается из условия

$$I \left(x^{jk} - t_k \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_{k+1}} \right)_{x=x^{jk}} \cdot e_{k+1} \right) - I(x^{jk}) < 0.$$

Если выбранное при текущем t_k не выполняется, шаг уменьшается вдвое, и т. $x^{jk} - t_k \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_{k+1}} \right)_{x=x^{jk}} \cdot e_{k+1}$ вычисляется заново. При фиксированном j за одну итерацию с номером k изменяется только одна проекция т. x^{jk} , имеющая номер $k + 1$, а в течение всего цикла с номером j , т.е. начиная с $k = 0$ и кончая $k = n - 1$, изменяются все n проекций т. x^{j0} . После этого т. x^{jn} присваивается номер $x^{j+1,0}$ и она берется за начальную точку для вычислений в $j + 1$ -м цикле.

Расчет заканчивается в т. x^{jk} при выполнении по крайней мере одного из трех критериев окончания счета: $\|\nabla I(x^{jk})\| < \varepsilon_1$, или $j \geq M$, или двукратного выполнения неравенств $|I(x^{jk+1}) - I(x^{jk})| < \varepsilon_2$, $\|x^{jk+1} - x^{jk}\| < \varepsilon_2$.

Полученные в результате вычисления точки могут быть записаны как элементы последовательности

$$\{x^l\} = \{x^0 = x^{00}, x^1 = x^{01}, \dots, x^n = x^{0n} = x^{10}, x^{n+1} = x^{11}, x^{n+2} = x^{12}, \dots\}.$$

Алгоритм.

Шаг 1. Задать x^{00} , $\varepsilon > 0$, $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, предельное число M циклов счета, кратное n , где n – размерность вектора x ; определить компоненты градиента $\nabla I(x)$ для произвольной точки.

Шаг 2. Задать номер цикла $j = 0$.

Шаг 3. Проверить выполнение условия окончания поиска минимума функции $j \geq M$:

а) если $j \geq M$, то расчет окончен, и точка локального минимума целевой функции определена $x^* = x^{jk}$, $I(x^*) = I(x^{jk})$;

б) иначе перейти к шагу 4.

Шаг 4. Задать $k = 0$.

Шаг 5. Проверить выполнение условия $k \leq n - 1$:

а) если $k \leq n - 1$, то перейти к шагу 6;

б) если $k = n$, то положить $j := j + 1$ и $x^{j+1,k} = x^{jn}$ и перейти к шагу 3.

Шаг 6. Вычислить $\nabla I(x^{jk})$.

Шаг 7. Проверить выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{jk})\| < \varepsilon_1$:

а) если условие выполняется, то расчет окончен, и найден локальный минимум целевой функции $x^* = x^{jk}$, $I(x^*) = I(x^{jk})$;

б) иначе, перейти к шагу 8.

Шаг 8. Задать t_k .

Шаг 9. Вычислить т. x^{jk+1} : $x^{jk+1} = x^{jk} - t_k \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_{k+1}} \right)_{x=x^{jk}} e_{k+1}$.

Шаг 10. Проверить выполнение условия $I(x^{jk+1}) - I(x^{jk}) < 0$:

- а) если условие выполнено, то перейти к шагу 11;
- б) иначе, положить $t_k = t_k/2$ и перейти к шагу 9.

Шаг 11. Проверить выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^{jk+1}) - I(x^{jk})| < \varepsilon_2; \|x^{jk+1} - x^{jk}\| < \varepsilon_2$:

- а) если в двух последовательных циклах с номерами j и $j - 1$ оба условия выполняются, то расчет закончить, и $x^* = x^{jk+1}, I(x^*) = I(x^{jk+1})$;
- б) если хотя бы одно из условий не выполнено, положить $k := k + 1$ и перейти к шагу 5.

Пример 4.3. Определить локальный минимум функции

$$I(x^*) = \min_{x \in R^n} (I(x) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2)$$

методом покоординатного спуска.

1. Зададим $x^{00}, \varepsilon_1, \varepsilon_2, M: x^{00} = (0,5; 1)^T, \varepsilon_1 = 0,1; \varepsilon_2 = 0,15, M = 10$.

Определим градиент функции в произвольной точке

$$\nabla I(x) = \{4x_1 + x_2; x_1 + 2x_2\}^T.$$

2. Зададим $j = 0$.

3⁰. Проверим выполнение условия $j \geq M: j = 0 < M = 10$.

4⁰. Зададим $k = 0$.

5⁰⁰. Проверим выполнение условия $k \leq n - 1: k = 0 < (n - 1 = 1)$, так как условие выполняется, то переходим к шагу 6.

6⁰⁰. Вычислим $\nabla I(x^{00}): \nabla I(x^{00}) = (3; 2,5)^T$.

7⁰⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{00})\| < \varepsilon_1$: поскольку $\|\nabla I(x^{00})\| = 3,8 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется и переходим к шагу 8.

8⁰⁰. Зададим $t_0 = 0,5$.

9⁰⁰. Вычислим $x^{01} = x^{00} - t_0 \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_1} \right)_{x=x^{00}} e_1$:

$$\frac{\partial I(x^{00})}{\partial x_1} = (4x_1 + x_2)|_{x^{00}} = 2 + 1 = 3, e_1 = (1, 0)^T.$$

$$x^{01} = (0, 5; 1)^T - 0,5(3; 2, 5)^T(1, 0)^T = (-1, 1)^T.$$

10⁰⁰. Проверим выполнение условия $I(x^{01}) - I(x^{00}) < 0$: так как $I(x^{01}) - I(x^{00}) = 2 - 2 = 0$, то условие уменьшения значения целевой функции в т. x^{01} не выполняется, полагаем $t_0 = \frac{0,5}{2} = 0,25$ и переходим к шагу 9.

9⁰⁰. Вычислим x^{01} с шагом $t_0 = 0,25$:

$$x^{01} = (0, 5; 1)^T - 0,25 \cdot (3; 2, 5)^T \cdot (1; 0) = (-0,25; 1)^T, I(x^{01}) = 0,875.$$

10⁰⁰. Проверим выполнение условия $I(x^{01}) - I(x^{00}) < 0$:

так как $I(x^{01}) - I(x^{00}) = 0,875 - 2 = -1,125 < 0$, то переходим к шагу 11.

11⁰⁰. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $\|x^{01} - x^{00}\| \leq \varepsilon_2$, $|I(x^{01}) - I(x^{00})| < \varepsilon_2$: так как $|I(x^{01}) - I(x^{00})| = 1,125 > \varepsilon_2 = 0,15$, то условие окончания поиска не выполняется, полагаем $k := k + 1 = 0 + 1 = 1$ и переходим к шагу 5.

5⁰¹. Проверим выполнение условия $k \leq n - 1$: $k = 1 = (n - 1 = 1)$, так как условие выполняется, то переходим к шагу 6.

6⁰¹. Вычислим $\nabla I(x^{01})$: $\nabla I(x^{01}) = (0; 1,75)^T$.

7⁰¹. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{01})\| < \varepsilon_1$: поскольку $\|\nabla I(x^{01})\| = 1,75 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется и переходим к шагу 8.

8⁰¹. Зададим $t_1 = 0,5$.

9⁰¹. Вычислим x^{02} с шагом $t_1 = 0,5$ — $x^{02} = x^{01} - t_1 \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_2} \right)_{x=x^{01}} e_2$:

$$x^{02} = (-0,25; 1)^T - 0,5 \cdot (0; 1,75)^T \cdot (0; 1) = (-0,25; 0,125)^T,$$

$$I(x^{02}) = 0,1094.$$

10⁰¹. Проверим выполнение условия $I(x^{02}) - I(x^{01}) < 0$:

так как $I(x^{02}) - I(x^{01}) = 0,1094 - 0,875 = -0,7656 < 0$, условие выполняется и переходим к шагу 11.

11⁰¹. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $\|x^{02} - x^{01}\| \leq \varepsilon_2$, $|I(x^{02}) - I(x^{01})| < \varepsilon_2$: так как $|I(x^{02}) - I(x^{01})| = 0,7656 > \varepsilon_2 = 0,15$, то условие окончания поиска не выполняется, полагаем $k := k + 1 = 1 + 1 = 2$ и переходим к шагу 5.

5⁰². Проверим выполнение условия $k \leq n - 1$: $k = 2 > (n - 1 = 1)$, так как условие не выполняется, то зададим $j = 1$, $x^{10} = x^{02}$, переходим к шагу 3.

3¹. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $j \geq M$: так как $j = 1 < M = 10$, то условие окончания поиска не выполняется, переходим к шагу 4.

4¹. Зададим $k = 0$.

5¹⁰. Проверяем выполнение условия $k \leq n - 1$: так как $k = 0 < (n - 1 = 1)$, то условие выполняется и переходим к шагу 6.

6¹⁰. Вычислим $\nabla I(x^{10})$: $\nabla I(x^{10}) = (-0,875; 0)^T$.

7¹⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{02})\| < \varepsilon_1$: поскольку $\|\nabla I(x^{01})\| = 0,875 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется и переходим к шагу 8.

8¹⁰. Зададим $t_0 = 0,25$.

9¹⁰. Вычислим x^{11} с шагом $t_1 = 0,25 - x^{11} = x^{10} - t_1 \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_1} \right)_{x=x^{10}} e_1$:

$$x^{11} = (-0,25; 0,125)^T - 0,25 \cdot (-0,875; 0)^T \cdot (1; 0)^T = (-0,0312; 0,125)^T,$$

$$I(x^{11}) = 0,0137.$$

10¹⁰. Проверим выполнение условия $I(x^{11}) - I(x^{10}) < 0$: так как $I(x^{11}) - I(x^{10}) = -0,0957 < 0$, то условие выполняется и переходим к шагу 11.

11¹⁰. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $\|x^{11} - x^{10}\| \leq \varepsilon_2$, $|I(x^{11}) - I(x^{10})| < \varepsilon_2$: так как $|I(x^{11}) - I(x^{10})| = 0,0957 < \varepsilon_2 = 0,15$, $\|x^{11} - x^{10}\| = 0,2188 > \varepsilon_2 = 0,15$, то условие окончания поиска не выполняется, полагаем $k := k + 1 = 0 + 1 = 1$ и переходим к шагу 5.

5¹¹. Проверяем выполнение условия $k \leq n - 1$: так как $(k = 1) = (n - 1 = 1)$, то условие выполняется и переходим к шагу 6.

6¹¹. Вычислим $\nabla I(x^{11})$: $\nabla I(x^{11}) = (0; 0,2188)^T$.

7¹¹. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{11})\| < \varepsilon_1$: поскольку $\|\nabla I(x^{11})\| = 0,2188 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется и переходим к шагу 8.

8¹¹. Зададим $t_1 = 0,25$.

9¹¹. Вычислим $x^{12} = x^{11} - t_1 \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_1} \right)_{x=x^{11}} e_1$ с шагом $t_1 = 0,25$:

$$x^{12} = (-0,0312; 0,125)^T - 0,25 \cdot (0; 0,2188)^T \cdot (0; 1)^T = (-0,0313; 0,0731)^T, \\ I(x^{12}) = 0,0047.$$

10¹¹. Проверим выполнение условия $I(x^{12}) - I(x^{11}) < 0$: так как $I(x^{12}) - I(x^{11}) = -0,009 < 0$, то условие выполняется и переходим к шагу 11.

11¹¹. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $\|x^{12} - x^{11}\| \leq \varepsilon_2$, $|I(x^{12}) - I(x^{11})| < \varepsilon_2$: так как $|I(x^{12}) - I(x^{11})| = 0,009 < \varepsilon_2 = 0,15$, $\|x^{12} - x^{11}\| = 0,0547 < \varepsilon_2 = 0,15$, то условия окончания поиска выполняются впервые, полагаем $k := k + 1 = 1 + 1 = 2$ и переходим к шагу 5.

5¹². Проверим выполнение условия $k \leq n - 1$: $k = 2 > (n - 1 = 1)$, так как условие не выполняется, то зададим $j = 2$, $x^{20} = x^{12}$ и переходим к шагу 3.

3²⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $j \geq M$: так как $j = 1 < M = 10$, то условие окончания поиска не выполняется, переходим к шагу 4.

4²⁰. Зададим $k = 0$.

5²⁰. Проверяем выполнение условия $k \leq n - 1$: так как $k = 0 < (n - 1 = 1)$, то условие выполняется и переходим к шагу 6.

6²⁰. Вычислим $\nabla I(x^{20})$: $\nabla I(x^{20}) = (-0,0547; 0,1094)^T$.

7²⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{20})\| < \varepsilon_1$: поскольку $\|\nabla I(x^{20})\| = 0,1223 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется и переходим к шагу 8.

8²⁰. Зададим $t_0 = 0,25$.

9²⁰. Вычислим $x^{21} = x^{20} - t_0 \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_1} \right)_{x=x^{20}} e_1$ с шагом $t_0 = 0,25$:

$$\begin{aligned} x^{21} &= (-0,0313; 0,0703)^T - 0,25 \cdot (-0,0547; 0,1094)^T \cdot (1; 0)^T = \\ &= (-0,0176; 0,0703)^T, \end{aligned}$$

$$I(x^{21}) = 0,0043.$$

10²¹. Проверим выполнение условия $I(x^{21}) - I(x^{20}) < 0$: так как $I(x^{21}) - I(x^{20}) = -0,0004 < 0$, то условие выполняется и переходим к шагу 11.

11²¹. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $\|x^{21} - x^{20}\| \leq \varepsilon_2$, $|I(x^{21}) - I(x^{20})| < \varepsilon_2$: так как $|I(x^{21}) - I(x^{20})| = 0,0004 < \varepsilon_2 = 0,15$, $\|x^{21} - x^{20}\| = 0,0137 < \varepsilon_2 = 0,15$, то условия окончания поиска выполняются в двух последовательных циклах; расчет закончен, и найден локальный минимум целевой функции с заданной точностью $x^* = x^{21} = (-0,0176; 0,0703)^T$, $I(x^*) = I(x^{21}) = 0,0043$. ■

4.4. МЕТОД ГАУССА–ЗЕЙДЕЛЯ

Стратегия решения задачи состоит в построении последовательности точек $\{x^k\}$, $k = 0, 1, \dots$, таких, что $I(x^{k+1}) < I(x^k)$, $k = 0, 1, \dots$. Точки последовательности $\{x^k\}$ вычисляются по циклам в соответствии с правилом

$$x^{jk+1} = x^{jk} - t_k \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_{k+1}} \right)_{x=x^{jk}} \cdot e_{k+1},$$

где j – номер цикла вычислений; $j = 0, 1, 2, \dots$; k – номер итерации внутри цикла, $k = 0, 1, \dots, n - 1$; e_{k+1} – единичный вектор, $(k + 1)$ -я проекция кото-

рого равна 1; т. x^{00} задается пользователем, величина шага t_k выбирается из решения следующей задачи:

$$\varphi(t_k^*) = I\left(x^{jk} - t_k^* \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_{k+1}}\right)_{x=x^{jk}} \cdot e_{k+1}\right) = \min_{t_k} \varphi(t_k).$$

Эта задача является задачей одномерной минимизации функции $\varphi(t_k) = I\left(x^{jk} - t_k \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_{k+1}}\right)_{x=x^{jk}} \cdot e_{k+1}\right)$ и может быть решена с использованием численных методов, например методом параболической интерполяции.

Алгоритм.

Шаг 1. Задать x^{00} , $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, предельное число M циклов счета, кратное n , где n – размерность вектора x ; определить компоненты градиента $\nabla I(x)$ для произвольной точки.

Шаг 2. Задать номер цикла $j = 0$.

Шаг 3. Проверить выполнение условия окончания поиска минимума функции $j \geq M$:

а) если $j \geq M$, то расчет окончен, и найдена точка локального минимума целевой функции с заданной точностью $x^* = x^{jk}$, $I(x^*) = I(x^{jk})$;

б) если $j < M$, то перейти к шагу 4.

Шаг 4. Задать $k = 0$.

Шаг 5. Проверить выполнение условия $k \leq n - 1$:

а) если $k \leq n - 1$, то перейти к шагу 6;

б) если $k = n$, то положить $j := j + 1$ и перейти к шагу 3.

Шаг 6. Вычислить $\nabla I(x^{jk})$.

Шаг 7. Проверить выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{jk})\| < \varepsilon_1$:

а) если условие выполняется, то расчет окончен, и $x^* = x^{jk}$, $I(x^*) = I(x^{jk})$;

б) иначе, перейти к шагу 8.

Шаг 8. Подключить вспомогательный алгоритм решения задачи

$$\varphi(t_k^*) = I\left(x^{jk} - t_k^* \frac{\partial I(x^{jk})}{\partial x_{k+1}} \cdot e_{k+1}\right) = \min_{t_k} \varphi(t_k)$$

методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определить t_k^* .

Шаг 9. Вычислить $x^{jk+1} = x^{jk} - t_k^* \frac{\partial I(x^{jk})}{\partial x_{k+1}} \cdot e_{k+1}$.

Шаг 10. Проверить выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^{jk+1}) - I(x^{jk})| < \varepsilon_2$; $\|x^{jk+1} - x^{jk}\| < \varepsilon_2$:

а) если в двух последовательных циклах с номерами j и $j - 1$ оба условия выполняются, то расчет закончен, и найдена точка локального минимума целевой функции с заданной точностью $x^* = x^{jk+1}$, $I(x^*) = I(x^{jk+1})$;

б) если хотя бы одно из условий не выполнено, положить $k := k + 1$ и перейти к шагу 5.

Пример 4.3. Определить локальный минимум функции

$$I(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} (I(x) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2)$$

методом Гаусса–Зейделя.

1. Зададим x^{00} , ε_1 , ε_2 , M : $x^{00} = (0,5; 1)^T$, $\varepsilon_1 = 0,1$; $\varepsilon_2 = 0,15$, $M = 10$.

Определим градиент функции в произвольной точке

$$\nabla I(x) = \{4x_1 + x_2; x_1 + 2x_2\}^T.$$

2. Зададим $j = 0$.

3⁰. Проверим выполнение условия $j \geq M$: $j = 0 < M = 10$.

4⁰. Зададим $k = 0$.

5⁰⁰. Проверим выполнение условия $k \leq n - 1$: $k = 0 < (n - 1 = 1)$, так условие выполняется, то переходим к шагу 6.

6⁰⁰. Вычислим $\nabla I(x^{00})$: $\nabla I(x^{00}) = (3; 2,5)^T$.

7⁰⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{00})\| < \varepsilon_1$: поскольку $\|\nabla I(x^{00})\| = 3,8 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется и переходим к шагу 8.

8⁰⁰. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи

$$\varphi(t_0^*) = I\left(x^{j0} - t_0^* \frac{\partial I(x^{j0})}{\partial x_1} \cdot e_1\right) = \min_{t_0} \varphi(t_0)$$

методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим t_0^* : $t_0^* = 0,25$.

9⁰⁰. Вычислим $x^{01} = x^{00} - t_0^* \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_1}\right)_{x=x^{00}} \cdot e_1$:

$$x^{01} = (0,5; 1)^T - 0,25 \cdot (3; 2,5)^T \cdot (1; 0) = (-0,25; 1)^T, I(x^{01}) = 0,875.$$

10⁰¹. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $\|x^{01} - x^{00}\| \leq \varepsilon_2$, $|I(x^{01}) - I(x^{00})| < \varepsilon_2$: так как $|I(x^{01}) - I(x^{00})| = 1,125 > \varepsilon_2 = 0,15$, то условие окончания поиска не выполняется, полагаем $k := k + 1 = 0 + 1 = 1$ и переходим к шагу 5.

5⁰¹. Проверим выполнение условия $k \leq n - 1$: $k = 1 = (n - 1 = 1)$, так как условие выполняется, то переходим к шагу 6.

6⁰¹. Вычислим $\nabla I(x^{01})$: $\nabla I(x^{01}) = (0; 1,75)^T$.

7⁰¹. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{01})\| < \varepsilon_1$: поскольку $\|\nabla I(x^{01})\| = 1,75 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется и переходим к шагу 8.

8⁰¹. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи

$$\varphi(t_1^*) = I\left(x^{01} - t_1^* \frac{\partial I(x^{01})}{\partial x_2} \cdot e_2\right) = \min_{t_1} \varphi(t_1)$$

методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим t_1^* : $t_1^* = 0,5$.

9⁰¹. Вычислим $x^{02} = x^{01} - t_1^* \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_2}\right)_{x=x^{01}} \cdot e_2$:

$$x^{02} = (-0,25; 1)^T - 0,5 \cdot (0; 1,75)^T \cdot (0; 1) = (-0,25; 0,125)^T,$$

$$I(x^{02}) = 0,1094.$$

10⁰¹. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $\|x^{02} - x^{01}\| \leq \varepsilon_2$, $|I(x^{02}) - I(x^{01})| < \varepsilon_2$: так как $|I(x^{02}) - I(x^{01})| = 0,7656 > \varepsilon_2 = 0,15$, то условие окончания поиска не выполняется, полагаем $k := k + 1 = 1 + 1 = 2$ и переходим к шагу 5.

5⁰¹. Проверим выполнение условия $k \leq n - 1$: $k = 2 > (n - 1 = 1)$, так как условие не выполняется, то полагаем $j = 1$, $x^{10} = x^{02}$ и переходим к шагу 3.

3¹⁰. Проверим выполнение условия $j \geq M$: $j = 1 < M = 10$.

4¹⁰. Зададим $k = 0$.

5¹⁰. Проверим выполнение условия $k \leq n - 1$: $k = 0 < (n - 1 = 1)$, так условие выполняется, то переходим к шагу 6.

6¹⁰. Вычислим $\nabla I(x^{10})$: $\nabla I(x^{10}) = (-0,875; 0)^T$.

7¹⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{10})\| < \varepsilon_1$: поскольку $\|\nabla I(x^{10})\| = 0,875 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется и переходим к шагу 8.

8¹⁰. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи

$$\varphi(t_0^*) = I\left(x^{10} - t_0^* \frac{\partial I(x^{10})}{\partial x_1} \cdot e_1\right) = \min_{t_0} \varphi(t_0)$$

методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим t_0^* : $t_0^* = 0,25$.

9¹⁰. Вычислим $x^{11} = x^{10} - t_0^* \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_1}\right)_{x=x^{10}} \cdot e_1$:

$$x^{11} = (-0,25; 0,125)^T - 0,25 \cdot (-0,875; 0)^T \cdot (1; 0) = (-0,0313; 0,125)^T,$$

$$I(x^{11}) = 0,0137.$$

10¹⁰. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $\|x^{11} - x^{10}\| < \varepsilon_2$, $|I(x^{11}) - I(x^{10})| < \varepsilon_2$: так как $|I(x^{11}) - I(x^{10})| = 0,0957 < \varepsilon_2 = 0,15$, $\|x^{11} - x^{10}\| = 0,2188 > \varepsilon_2 = 0,15$, то условия оконча-

ния поиска не выполняются, полагаем $k := k + 1 = 0 + 1 = 1$ и переходим к шагу 5.

5¹¹. Проверим выполнение условия $k \leq n - 1$: $k = 1 = (n - 1 = 1)$, так как условие выполняется, то переходим к шагу 6.

6¹¹. Вычислим $\nabla I(x^{11})$: $\nabla I(x^{11}) = (0; 0,2188)^T$.

7¹¹. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{11})\| < \varepsilon_1$: поскольку $\|\nabla I(x^{11})\| = 0,2188 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется и переходим к шагу 8.

8¹¹. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи

$$\varphi(t_1^*) = I\left(x^{11} - t_1^* \frac{\partial I(x^{11})}{\partial x_2} \cdot e_2\right) = \min_{t_1} \varphi(t_1)$$

методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим t_1^* : $t_1^* = 0,5$.

9¹¹. Вычислим $x^{12} = x^{11} - t_1^* \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_2}\right)_{x=x^{11}} \cdot e_2$:

$$x^{12} = (-0,0313; 0,125)^T - 0,5 \cdot (0; 0,2188)^T \cdot (0; 1) = (-0,0313; 0,0156)^T,$$

$$I(x^{12}) = 0,0017.$$

10¹¹. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $\|x^{12} - x^{11}\| < \varepsilon_2$, $|I(x^{12}) - I(x^{11})| < \varepsilon_2$: так как $|I(x^{12}) - I(x^{11})| = 0,012 < \varepsilon_2 = 0,15$, $\|x^{12} - x^{11}\| = 0,1094 < \varepsilon_2 = 0,15$, то условия окончания поиска выполняются в одном цикле, полагаем $k := k + 1 = 1 + 1 = 2$ и переходим к шагу 5.

5¹². Проверим выполнение условия $k \leq n - 1$: $k = 2 > (n - 1 = 1)$, так как условие не выполняется, то полагаем $j = 2$, $x^{20} = x^{12}$ и переходим к шагу 3.

3²⁰. Проверим выполнение условия $j \geq M$: $j = 2 < M = 10$.

4²⁰. Зададим $k = 0$.

5²⁰. Проверим выполнение условия $k \leq n - 1$: $k = 0 < (n - 1 = 1)$, так условие выполняется, то переходим к шагу 6.

6²⁰. Вычислим $\nabla I(x^{20})$: $\nabla I(x^{20}) = (-0,1094; 0)^T$.

7²⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^{20})\| < \varepsilon_1$: поскольку $\|\nabla I(x^{20})\| = 0,1094 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется и переходим к шагу 8.

8²⁰. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи

$$\varphi(t_0^*) = I\left(x^{20} - t_0^* \frac{\partial I(x^{20})}{\partial x_1} \cdot e_1\right) = \min_{t_0} \varphi(t_0)$$

методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим t_0^* : $t_0^* = 0,25$.

9²⁰. Вычислим $x^{21} = x^{20} - t_1^* \left(\frac{\partial I(x)}{\partial x_1}\right)_{x=x^{20}} \cdot e_1$:

$$x^{21} = (-0,0313; 0,0156)^T - 0,25 \cdot (-0,1094; 0)^T \cdot (1; 0) = (-0,0039; 0,0156)^T, \\ I(x^{21}) = 0,0002.$$

10²⁰. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $\|x^{21} - x^{20}\| < \varepsilon_2$, $|I(x^{21}) - I(x^{20})| < \varepsilon_2$: так как $|I(x^{21}) - I(x^{20})| = 0,0015 < \varepsilon_2 = 0,15$, $\|x^{21} - x^{20}\| = 0,0273 < \varepsilon_2 = 0,15$ и условия окончания поиска выполняются дважды в циклах $j = 1$ и $j = 2$, то расчет окончен, и найдена точка локального минимума целевой функции с заданной точностью $x^* = x^{21} = (-0,0039; 0,0156)^T$, $I(x^*) = I(x^{21}) = 0,0002$. ■

4.5. МЕТОД ФЛЕТЧЕРА–РИВСА

Стратегия метода Флетчера–Ривса состоит в построении последовательности точек $\{x^k\}$, $k = 0, 1, \dots$, таких, что $I(x^{k+1}) < I(x^k)$, а точки последовательности $\{x^k\}$ вычисляются по правилу:

$$x^{k+1} = x^k + t_k d^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

при $k = 0$ направление спуска $d^0 = -\nabla I(x^0)$, при $k > 0$ – $d^k = -\nabla I(x^k) + \beta_{k-1} d^{k-1}$, т.е. направление спуска учитывает с коэффициентом β_{k-1} направле-

ние предыдущего спуска. Направления спуска при $k > 0$ вычисляются следующим образом:

$$d^1 = -\nabla I(x^1) + \beta_0 d^0 = -\nabla I(x^1) - \beta_0 \nabla I(x^0);$$

$$d^2 = -\nabla I(x^2) + \beta_1 d^1 = -\nabla I(x^2) - \beta_1 \nabla I(x^1);$$

.....

а коэффициенты β_{k-1} , $k = 1, 2, \dots$ рассчитываются по формулам:

$$\beta_{k-1} = \frac{\|\nabla I(x^k)\|_{R^n}^2}{\|\nabla I(x^{k-1})\|_{R^n}^2}, \quad k = 1, 2, 3, \dots,$$

$$\beta_0 = \frac{\|\nabla I(x^1)\|_{R^n}^2}{\|\nabla I(x^0)\|_{R^n}^2},$$

$$\beta_1 = \frac{\|\nabla I(x^2)\|_{R^n}^2}{\|\nabla I(x^1)\|_{R^n}^2}, \dots$$

Точка x^0 задается пользователем, величина продвижения t_k по выбранному направлению спуска, как и в методе наискорейшего спуска, находится из решения следующей задачи одномерной оптимизации:

$$\varphi(t_k^*) = I(x^k + t_k^* d^k) = \min_{t_k} \varphi(t_k).$$

Решение задачи одномерной оптимизации может осуществляться методами одномерной минимизации, например методом параболической интерполяции [7].

Алгоритм.

Шаг 1. Задать x^0 , $\varepsilon_1, \varepsilon_2, M$ — предельное число итераций; найти градиент функции $\nabla I(x)$ для произвольной точки.

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla I(x^k)$.

Шаг 4. Проверить выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^k)\| < \varepsilon_1$:

а) если условие выполняется, то расчет окончен, и решение задачи получено – определена точка локального минимума целевой функции $x^* = x^k$, $I(x^*) = I(x^k)$;

б) в противном случае перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить выполнение условия окончания поиска минимума функции $k \geq M$:

а) если неравенство выполняется, расчет окончен, и определена точка локального минимума целевой функции $x^* = x^k$, $I(x^*) = I(x^k)$;

б) в противном случае при $k = 0$ перейти к шагу 6, а при $k \geq 1$ перейти к шагу 7.

Шаг 6. Определить $d^0 = -\nabla I(x^0)$ и перейти к шагу 9.

Шаг 7. Вычислить коэффициент $\beta_{k-1} = \frac{\|\nabla I(x^k)\|_{R^n}^2}{\|\nabla I(x^{k-1})\|_{R^n}^2}$.

Шаг 8. Определить направление спуска $d^k = -\nabla I(x^k) + \beta_{k-1}d^{k-1}$.

Шаг 9. Определить t_k^* из решения задачи одномерной оптимизации:

$$\varphi(t_k^*) = I(x^k + t_k^*d^k) = \min_{t_k} \varphi(t_k)$$

методом параболической интерполяции или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB.

Шаг 10. Вычислить $x^{k+1} = x^k + t_k^*d^k$.

Шаг 11. Проверить выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| < \varepsilon_2$, $\|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} < \varepsilon_2$:

а) в случае выполнения обоих условий в двух последовательных итерациях с номерами $k - 1$ и k расчет окончен, и получено решение задачи оптимизации – $x^* = x^{k+1}$, $I(x^*) = I(x^{k+1})$;

б) если не выполняется хотя бы одно из условий, положить $k := k + 1$ и перейти к шагу 3.

Пример 4.4. Определить локальный минимум функции

$$I(x) = [(x_2 + 1)^2 + x_1^2] \cdot [x_1^2 + (x_2 - 1)^2] \rightarrow \min_{x \in R^2}.$$

методом Флетчера–Ривса.

1. Зададим x^0 , ε_1 , ε_2 , M : $x^0 = (0,5; 0,1)^T$, $\varepsilon_1 = 0,1$; $\varepsilon_2 = 0,15$, $M = 10$;
найти градиент функции $\nabla I(x)$ для произвольной точки:

$$a = x_2 + 1, b = x_2 - 1,$$

$$\nabla I(x) = \{2x_1(a^2 + 2x_1^2 + b^2); 2b(a^2 + x_1^2) + 2a(x_1^2 + b^2)\}^T.$$

2. Положим $k = 0$.

3⁰. Вычислим $\nabla I(x^0)$: $\nabla I(x^0) = (2,5; -0,296)^T$.

4⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^0)\|_{R^2} < \varepsilon_1$: так как $\|\nabla I(x^0)\|_{R^2} = 2,5373 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется, перейдем к шагу 5.

5⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $k \geq M$: так как $k = 0 < M = 10$, то условие не выполняется, при $k = 0$ перейдем к шагу 6.

6⁰. Определим $d^0 = -\nabla I(x^0) = -(2,5; -0,296)^T$ и перейдем к шагу 9.

9⁰. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи одномерной оптимизации

$$\varphi(t_0^*) = I(x^0 + t_0^*d^0) = \min_{t_0} \varphi(t_0)$$

методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим значение t_0^* : $t_0^* = 0,2$.

10⁰. Вычислим $x^1 = x^0 + t_0^*d^0$:

$$x^1 = (0,5; 0,1)^T - 0,2 \cdot (2,5; -0,296)^T = (-0,004; 0,1592)^T,$$

$$I(x^1) = 0,95.$$

11⁰. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^1) - I(x^0)| < \varepsilon_2$, $\|x^1 - x^0\|_{R^2} < \varepsilon_2$: так как $|I(x^1) - I(x^0)| = 0,5976 > \varepsilon_2 =$

$= 0,15$, то одно из условий окончания поиска минимума функции не выполняется; положим $k := k + 1 = 1$ и перейдем к шагу 3.

3¹. Вычислим $\nabla I(x^1)$: $\nabla I(x^1) = (-0,0164; -0,6207)^T$.

4¹. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^1)\|_{R^2} < \varepsilon_1$: так как $\|\nabla I(x^1)\|_{R^2} = 0,621 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется, перейдем к шагу 5.

5¹. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $k \geq M$: так как $k = 1 < M = 10$, то условие окончания поиска минимума функции не выполняется; $k = 1$ и, следовательно, перейдем к шагу 7.

7¹. Вычислить коэффициент $\beta_0 = \frac{\|\nabla I(x^1)\|_{R^2}^2}{\|\nabla I(x^0)\|_{R^2}^2}$: $\beta_0 = \frac{0,3855}{6,438} = 0,06$.

8¹. Определим направление спуска в т. x^1 :

$$\begin{aligned} d^1 &= -\nabla I(x^1) + \beta_0 d^0 = (-0,0164; -0,6207)^T - 0,06 \cdot (1; -3)^T = \\ &= (-0,1345; 0,6384)^T. \end{aligned}$$

9¹. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи одномерной оптимизации

$$\varphi(t_1^*) = I(x^1 + t_1^* d^1) = \min_{t_k} \varphi(t_k)$$

методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим значение t_1^* : $t_1^* = 1,2$.

10¹. Вычислим $x^2 = x^1 + t_1^* d^1$:

$$\begin{aligned} x^2 &= (-0,004; 0,1592)^T + 1,2 \cdot (-0,1345; 0,6384)^T = (-0,1654; 0,9252)^T; \\ I(x^2) &= 0,123. \end{aligned}$$

11¹. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^2) - I(x^1)| < \varepsilon_2$, $\|x^2 - x^1\|_{R^2} < \varepsilon_2$: так как $|I(x^2) - I(x^1)| = 0,827 > \varepsilon_2 = 0,15$, то одно из условий окончания поиска минимума функции не выполняется; положим $k := k + 1 = 2$ и перейдем к шагу 3.

3². Вычислим $\nabla I(x^2)$: $\nabla I(x^2) = (-1,2459; -0,4314)^T$.

4². Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^2)\|_{R^2} < \varepsilon_1$: так как $\|\nabla I(x^2)\|_{R^2} = 1,32 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется, перейдем к шагу 5.

5². Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $k \geq M$: так как $k = 2 < M = 10$, то условие окончания поиска минимума функции не выполняется; $k = 2$ и, следовательно, перейдем к шагу 7.

7². Вычислим коэффициент $\beta_1 = \frac{\|\nabla I(x^2)\|_{R^2}^2}{\|\nabla I(x^1)\|_{R^2}^2}$: $\beta_1 = \frac{1,7384}{0,3855} = 4,51$.

8². Определим направление спуска в т. x^2 :

$$\begin{aligned} d^2 &= -\nabla I(x^2) + \beta_1 d^1 = -(-1,2459; -0,4314)^T + 4,51 \cdot (-0,1345; 0,6384)^T = \\ &= (0,6394; 3,3103)^T. \end{aligned}$$

9². Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи одномерной оптимизации $\varphi(t_2^*) = I(x^1 + t_2^* d^1) = \min_{t_2} \varphi(t_2)$ методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим значение t_2^* : $t_2^* = 0,03$.

10². Вычислим $x^3 = x^2 + t_2^* d^2$:

$$\begin{aligned} x^3 &= (-0,1654; 0,9252)^T + 0,03 \cdot (-1,2459; -0,4314)^T = (-0,1462; 1,0246)^T; \\ I(x^3) &= 0,0905. \end{aligned}$$

11². Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^3) - I(x^2)| < \varepsilon_2$, $\|x^3 - x^2\|_{R^2} < \varepsilon_2$: так как $|I(x^3) - I(x^2)| = 0,0324 < \varepsilon_2 = 0,15$, $\|x^3 - x^2\|_{R^2} = 0,1011 < \varepsilon_2 = 0,15$, то условия окончания поиска выполняются впервые при $k = 2$; положим $k := k + 1 = 3$ и перейдем к шагу 3.

3³. Вычислим $\nabla I(x^3)$: $\nabla I(x^3) = (-1,2111; 0,2913)^T$.

4³. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^3)\|_{R^2} < \varepsilon_1$: так как $\|\nabla I(x^3)\|_{R^2} = 1,2457 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется, перейдем к шагу 5.

5³. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $k \geq M$: так как $k = 3 < M = 10$, то условие окончания поиска минимума функции не выполняется; $k = 3$ и, следовательно, перейдем к шагу 7.

$$7^3. \text{ Вычислим коэффициент } \beta_2 = \frac{\|\nabla I(x^3)\|_{R^2}^2}{\|\nabla I(x^2)\|_{R^2}^2}: \beta_2 = \frac{1,5516}{1,7384} = 0,8926.$$

8³. Определим направление спуска в т. x^3 :

$$d^3 = -\nabla I(x^3) + \beta_2 d^2 = -(-1,2111; 0,2913)^T + 0,8926 \cdot (0,6394; 3,3103)^T = (1,7819; 2,6634)^T.$$

9³. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи одномерной оптимизации $\varphi(t_3^*) = I(x^2 + t_3^* d^3) = \min_{t_3} \varphi(t_3)$ методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим значение t_3^* : $t_3^* = 0,02$.

10³. Вычислим $x^4 = x^3 + t_3^* d^3$:

$$x^4 = (-0,1462; 1,0246)^T + 0,02 \cdot (1,7819; 2,6634)^T = (-0,1106; 1,0778)^T; \\ I(x^4) = 0,0791.$$

11³. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^4) - I(x^3)| < \varepsilon_2$, $\|x^4 - x^3\|_{R^2} < \varepsilon_2$: так как $|I(x^4) - I(x^3)| = 0,0324 < \varepsilon_2 = 0,15$, $\|x^4 - x^3\|_{R^2} = 0,1011 < \varepsilon_2 = 0,15$, то условия окончания поиска выполняются дважды (при $k = 2, 3$); расчет окончен, и с заданной точностью ($\varepsilon_1 = 0,1$; $\varepsilon_2 = 0,15$) получено решение задачи оптимизации – $x^* = x^4 = (-0,1106; 1,0778)^T$, $I(x^*) = I(x^4) = 0,0791$ (точное решение $x^* = (0; 1)^T$, $I(x^*) = 0$.)

Далее решим задачу оптимизации из примера 6.6 с другим начальным приближением $x^0 = (-0,1; -0,5)^T$. ■

Пример 4.5. Определить локальный минимум функции

$$I(x) = [(x_2 + 1)^2 + x_1^2] \cdot [x_1^2 + (x_2 - 1)^2] \rightarrow \min_{x \in R^2}$$

методом Флетчер–Ривса.

1. Зададим x^0 , ε_1 , ε_2 , M : $x^0 = (-0,1; -0,5)^T$, $\varepsilon_1 = 0,1$; $\varepsilon_2 = 0,15$, $M = 10$; найти градиент функции $\nabla I(x)$ для произвольной точки:

$$a = x_2 + 1, b = x_2 - 1,$$

$$\nabla I(x) = \{2x_1(a^2 + 2x_1^2 + b^2); 2b(a^2 + x_1^2) + 2a(x_1^2 + b^2)\}^T.$$

2. Положим $k = 0$.

3⁰. Вычислим $\nabla I(x^0)$: $\nabla I(x^0) = (-0,504; -0,758)^T$.

4⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^0)\|_{R^2} < \varepsilon_1$: так как $\|\nabla I(x^0)\|_{R^2} = 0,9098 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска минимума функции не выполняется, перейдем к шагу 5.

5⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $k \geq M$: так как $k = 0 < M = 10$, то условие не выполняется, при $k = 0$ перейдем к шагу 6.

6⁰. Определим $d^0 = -\nabla I(x^0) = -(-0,504; 1,48)^T$ и перейдем к шагу 9.

9⁰. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи одномерной оптимизации $\varphi(t_0^*) = I(x^0 + t_0^*d^0) = \min_{t_0} \varphi(t_0)$ методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим значение t_0^* : $t_0^* = 0,3$

10⁰. Вычислим $x^1 = x^0 + t_0^*d^0$:

$$x^1 = (-0,1; -0,5)^T - 0,3 \cdot (-0,504; 1,48)^T = (0,0512; -0,944)^T,$$

$$I(x^1) = 0,0218.$$

11⁰. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^1) - I(x^0)| < \varepsilon_2$, $\|x^1 - x^0\|_{R^2} < \varepsilon_2$: так как $|I(x^1) - I(x^0)| = 0,5658 > \varepsilon_2 = 0,15$, то одно из условия окончания поиска минимума функции не выполняются; положим $k := k + 1 = 1$ и перейдем к шагу 3.

3¹. Вычислим $\nabla I(x^1)$: $\nabla I(x^1) = (0,3878; 0,4012)^T$.

4¹. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^1)\|_{R^2} < \varepsilon_1$: так как $\|\nabla I(x^1)\|_{R^2} = 0,558 > \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска не выполняется, перейдем к шагу 5.

5¹. Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $k \geq M$: так как $k = 1 < M = 10$, то условие окончания поиска минимума функции не выполняется; $k = 1$ и, следовательно, перейдем к шагу 7.

7¹. Вычислим коэффициент $\beta_0 = \frac{\|\nabla I(x^1)\|_{R^2}^2}{\|\nabla I(x^0)\|_{R^2}^2}$: $\beta_0 = 0,1274$.

8¹. Определим направление спуска в т. x^1 :

$$d^1 = -\nabla I(x^1) + \beta_0 d^0 = -(0,3878; 0,4012)^T - 0,1274 \cdot (-0,504; 1,48)^T = (-0,3236; -0,5897)^T.$$

9¹. Подключаем вспомогательный алгоритм решения задачи одномерной оптимизации $\varphi(t_1^*) = I(x^1 + t_1^* d^1) = \min_{t_1} \varphi(t_1)$ методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим значение t_1^* : $t_1^* = 0,1$.

10¹. Вычислим $x^2 = x^1 + t_1^* d^1$:

$$x^2 = (0,0512; -0,944)^T + 0,1 \cdot (-0,3236; -0,5897)^T = (0,0188; -1,003)^T;$$

$$I(x^2) = 0,0015.$$

11¹. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^2) - I(x^1)| < \varepsilon_2$, $\|x^2 - x^1\|_{R^2} < \varepsilon_2$: так как

$$|I(x^2) - I(x^1)| = 0,0203 < \varepsilon_2 = 0,15, \quad \|x^2 - x^1\|_{R^2} = 0,0672 < 0,15,$$

то условия окончания поиска минимума функции выполняются впервые; положим $k := k + 1 = 2$ и перейдем к шагу 3.

3². Вычислим $\nabla I(x^2)$: $\nabla I(x^2) = (-0,0238; -0,0253)^T$.

4². Проверим выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^2)\|_{R^2} < \varepsilon_1$: так как $\|\nabla I(x^2)\|_{R^2} = 0,0347 < \varepsilon_1 = 0,1$, то условие окончания поиска выполняется; расчет окончен, и с заданной точностью ($\varepsilon_1 = 0,1$; $\varepsilon_2 = 0,15$) получено решение задачи оптимизации – $x^* = x^2 = (0,0188; -1,003)^T$, $I(x^*) = I(x^2) = 0,0015$ (точное решение $x^* = (0; -1)^T, I(x^*) = 0$.) ■

4.6. МЕТОД ДЭВИДОНА–ФЛЕТЧЕРА–ПАУЭЛЛА

Стратегия метода Дэвидона–Флетчера–Пауэлла состоит в построении последовательности точек $\{x^k\}$, $k = 0, 1, 2, \dots$, таких, что $I(x^{k+1}) < I(x^k)$. Точки последовательности вычисляются по правилу

$$x^{k+1} = x^k - t_k A^k \nabla I(x^k), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

где A^k – есть матрица размера $n \times n$, которая вычисляется следующим образом:

$$A^{k+1} = A^k + A_c^k, \quad A^0 = E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$A_c^k = \frac{\Delta x^k (\Delta x^k)^T}{(\Delta x^k)^T \Delta g^k} - \frac{A^k \Delta g^k (\Delta g^k)^T A^k}{(\Delta g^k)^T A^k \Delta g^k},$$

$$\Delta x^k = x^{k+1} - x^k, \quad \Delta g^k = \nabla I(x^{k+1}) - \nabla I(x^k).$$

Точка x^0 задается пользователем, величина продвижения t_k по выбранному направлению спуска, как и в методе наискорейшего спуска, находится из решения задачи одномерной оптимизации:

$$\varphi(t_k^*) = I(x^k - t_k^* A^k \nabla I(x^k)) = \min_{t_k} \varphi(t_k)$$

методами одномерной минимизации, например методом параболической интерполяции [7].

Алгоритм

Шаг 1. Задать x^0 , $\varepsilon_1, \varepsilon_2, M$ – предельное число итераций; найти градиент функции $\nabla I(x)$ для произвольной точки.

Шаг 2. Положить $k = 0, A^0 = E$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla I(x^k)$.

Шаг 4. Проверить выполнение условия окончания поиска минимума функции $\|\nabla I(x^k)\| < \varepsilon_1$:

а) если условие выполняется, то расчет окончен, и решение задачи получено – $x^* = x^k, I(x^*) = I(x^k)$;

б) в противном случае перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить выполнение условия окончания поиска минимума функции $k \geq M$:

а) если неравенство выполняется, расчет окончен и $x^* = x^k, I(x^*) = I(x^k)$;

б) в противном случае при $k = 0$ перейти к шагу 10, а при $k \geq 1$ перейти к шагу 6.

Шаг 6. Вычислить $\Delta g^k = \nabla I(x^{k+1}) - \nabla I(x^k)$.

Шаг 7. Вычислить $\Delta x^k = x^{k+1} - x^k$.

Шаг 8. Выполнить матричные вычисления и определить матрицу A_c^k :

$$A_c^k = \frac{\Delta x^k (\Delta x^k)^T}{(\Delta x^k)^T \Delta g^k} - \frac{A^k \Delta g^k (\Delta g^k)^T A^k}{(\Delta g^k)^T A^k \Delta g^k}.$$

Шаг 9. Вычислить $A^{k+1} = A^k + A_c^k$.

Шаг 10. Определить $d^k = -A^k \nabla I(x^k)$.

Шаг 11. Определить t_k^* из решения следующей задачи одномерной оптимизации: $\varphi(t_k^*) = I(x^k + t_k^* d^k) = \min_{t_k} \varphi(t_k)$ методом параболической интерполяции или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB.

Шаг 12. Вычислить $x^{k+1} = x^k - t_k^* \cdot A^k \cdot \nabla I(x^k)$.

Шаг 13. Проверить выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^{k+1}) - I(x^k)| < \varepsilon_2, \|x^{k+1} - x^k\|_{R^n} < \varepsilon_2$:

а) в случае выполнения обоих условий в двух последовательных итерациях с номерами $k - 1$ и k расчет окончен, и получено решение задачи оптимизации – $x^* = x^{k+1}, I(x^*) = I(x^{k+1})$;

б) если не выполняется хотя бы одно из условий, положить $k := k + 1$ и перейти к шагу 3.

Пример 4.6. Определить локальный минимум функции

$$I(x) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2$$

методом Дэвидона–Флетчера–Пауэлла.

Решение.

1. Зададим $x^0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, M$: $x^0 = (0,5; 1)^T, \varepsilon_1 = 0,1; \varepsilon_2 = 0,15; M = 10$.

Найдем градиент функции в произвольной точке $\nabla I(x) = (4x_1 + x_2; x_1 + 2x_2)^T$.

2. Положим $k = 0, A^0 = E$.

3⁰. Вычислим $\nabla I(x^0)$: $\nabla I(x^0) = (3; 2,5)^T$.

4⁰. Проверим выполнение условия окончания поиска $\|\nabla I(x^0)\| < \varepsilon_1$:

$$\|\nabla I(x^0)\| = 3,9 > \varepsilon_1 = 0,1.$$

5⁰. Проверим выполнение условия $k \geq M$: $k = 0 < M = 10$; так как условие окончания поиска не выполняется и $k = 0$, то переходим к шагу 10.

10⁰. Определим $d^0 = -A^0 \cdot \nabla I(x^0)$:

$$d^0 = -E \cdot \nabla I(x^0) = -\nabla I(x^0) = -(3; 2,5)^T.$$

11⁰. Определим t_0^* из решения задачи одномерной оптимизации $\varphi(t_0^*) = I(x^0 + t_0^*d^0) = \min_{t_0} \varphi(t_0)$ методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим значение t_0^* : $t_0^* = 0,24$.

12⁰. Вычислим $x^1 = x^0 + t_0^*d^0$:

$$x^1 = (0,5; 1)^T - 0,24 \cdot (3; 2,5)^T = (-0,22; 0,4)^T.$$

13⁰. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^1) - I(x^0)| < \varepsilon_2, \|x^1 - x^0\| < \varepsilon_2$: $|I(x^1) - I(x^0)| = 1,83 > 0,15$, так как условия не выполняются, полагаем $k := k + 1 = 0 + 1 = 1$ и переходим к шагу 3.

3¹. Вычислим $\nabla I(x^1)$: $\nabla I(x^1) = (-0,48; 0,58)^T$.

4¹. Проверим выполнение условия окончания поиска $\|\nabla I(x^1)\| < \varepsilon_1$:

$\|\nabla I(x^1)\| = 0,75 > \varepsilon_1 = 0,1$; так как условие не выполняется, то переходим к шагу 5.

5¹. Проверим выполнение условия $k \geq M$: $k = 1 < M = 10$; так как условие окончания поиска не выполняется и $k > 0$, то переходим к шагу 6.

6⁰. Вычислим $\Delta g^0 = \nabla I(x^1) - \nabla I(x^0)$:

$$\Delta g^0 = (-0,48; 0,58)^T - (3; 2,5)^T = (-3,48; -1,92)^T.$$

7⁰. Вычислим $\Delta x^0 = x^1 - x^0$:

$$\Delta x^0 = (-0,22; 0,4)^T - (0,5; 1)^T = (-0,72; -0,6)^T.$$

8⁰. Вычислим $A_c^0 = \frac{\Delta x^0 (\Delta x^0)^T}{(\Delta x^0)^T \Delta g^0} - \frac{A^0 \Delta g^0 (\Delta g^0)^T A^0}{(\Delta g^0)^T A^0 \Delta g^0}$:

$$A_c^0 = \frac{(-0,72; -0,6)^T (-0,72; -0,6)}{(-0,72; -0,6) (-3,48; -1,92)^T} - \frac{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} (-3,48; -1,92)^T (-3,48; -1,92) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}{(-3,48; -1,92) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} (-3,48; -1,92)^T}$$
$$= \begin{pmatrix} -0,625 & -0,305 \\ -0,305 & -0,134 \end{pmatrix}.$$

9⁰. Вычислим $A^1 = A^0 + A_c^0$:

$$A^1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{pmatrix} -0,625 & -0,305 \\ -0,305 & -0,134 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 0,375 & -0,305 \\ -0,305 & 0,866 \end{bmatrix}.$$

10¹. Определим $d^1 = -A^1 \cdot \nabla I(x^1)$:

$$d^1 = - \begin{bmatrix} 0,375 & -0,305 \\ -0,305 & 0,866 \end{bmatrix} \cdot (-0,48; 0,58)^T = (0,356; -0,648)^T.$$

11¹. Определим t_1^* из решения задачи одномерной оптимизации $\varphi(t_1^*) = I(x^1 + t_1^* d^1) = \min_{t_1} \varphi(t_1)$ методом параболической интерполяции (или одним из эффективных методов одномерной минимизации из пакета прикладных программ MATLAB) и определим значение t_1^* : $t_1^* = 0,618$.

12¹. Вычислим $x^2 = x^1 + t_1^* d^1$:

$$x^2 = (-0,22; 0,4)^T + 0,618 \cdot (0,356; -0,648)^T = (0,00; 0,00)^T.$$

13¹. Проверим выполнение условий окончания поиска минимума функции $|I(x^2) - I(x^1)| < \varepsilon_2$, $\|x^2 - x^1\| < \varepsilon_2$: $|I(x^2) - I(x^1)| = 0,17 > \varepsilon_2 = 0,15$; так как условия не выполняются, полагаем $k := k + 1 = 1 + 1 = 2$ и переходим к шагу 3.

3². Вычислим $\nabla I(x^2)$: $\nabla I(x^2) = (0,00; 0,00)^T$.

4². Проверим выполнение условия окончания поиска $\|\nabla I(x^2)\| < \varepsilon_1$:

$\|\nabla I(x^2)\| = 0,00 < \varepsilon_1 = 0,1$; так как условие выполняется, то расчет окончен, и найдена точка локального минимума целевой функции $x^* = x^2 = (0,00; 0,00)^T$, $I(x^*) = I(x^2) = 0$. Следует заметить, что уже на второй итерации было получено решение задачи оптимизации. ■

5. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ УСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ

5.1. ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ПОИСКА УСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА

Сформулируем общую постановку задачи условной оптимизации биотехнологических систем со смешанными ограничениями. Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $I(x) = I(x_1, x_2, \dots, x_n)$ и функции ограничений $g_j(x) = 0, j = 1, 2, \dots, m; g_j(x) \leq 0, j = m + 1, \dots, p$, определяющие множество X допустимых решений; требуется определить локальный минимум целевой функции $I(x_1, x_2, \dots, x_n)$ на множестве X допустимых решений, т.е. найти такую $x^* \in X$, что

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x),$$

где $X = \{x | g_j(x) = 0, j = \overline{1, m}, m < n; g_j(x) \leq 0, j = \overline{m + 1, p}\}$.

Применение необходимых и достаточных условий условного экстремума, изложенных в работе [7], эффективно для решения ограниченного числа практических задач, в которых вытекающие из этих условий соотношения имеют аналитическое решение. Для решения большинства практических задач используются численные методы, которые можно разделить на две группы.

1. Методы, использующие преобразование задачи условной оптимизации в последовательность задач безусловной оптимизации путем введения в рассмотрение вспомогательных функций (методы внешних штрафов, барьеров, множителей).

2. Методы непосредственного решения задачи условной оптимизации, основанные на движении из одной допустимой точки, где выполнены все ограничения, к другой допустимой точке с лучшим значением целевой функции

(методы проекции градиента, метод возможных направлений Зойтендейка). Методы второй группы мы рассматривать не будем.

В рамках методов первой группы можно выделить несколько подходов к решению задачи условной оптимизации. В методе *внешних штрафов* к целевой функции исходной задачи добавляется функция, интерпретируемая как штраф за нарушение каждого из ограничений; метод генерирует последовательность точек, которая сходится к решению исходной задачи.

В методе барьеров (внутренних штрафов) к целевой функции исходной задачи добавляется функция, не позволяющая генерируемым точкам выходить за пределы допустимой области X .

В методе множителей Лагранжа штрафная функция добавляется не к целевой функции исходной задачи, а к ее функции Лагранжа.

Рассмотрим более подробно эти методы.

5.2. МЕТОДЫ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЙ БЕЗУСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Постановка задачи:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x),$$

где $X = \{x \mid g_j(x) = 0, j = \overline{1, m}, m < n; g_j(x) \leq 0, j = \overline{m+1, p}\}$.

5.2.1. Метод внешних штрафов

Стратегия поиска. Идея метода заключается в сведении решения задачи на условный экстремум к решению последовательности задач поиска безусловного минимума вспомогательной функции $F(x, r^k)$:

$$F(x, r^k) = I(x) + P(x, r^k) \rightarrow \min_{x \in R^n},$$

где $P(x, r^k)$ – штрафная функция (добавка); r^k – параметр штрафа, задаваемый на каждой k -й итерации.

Идея метода связана с возможностью применения эффективных и надежных методов поиска безусловного экстремума, изложенных в главе 4.

Штрафные добавки $P(x, r^k)$ в этом методе конструируются исходя из анализа следующих условий:

$$P(x, r^k) = \begin{cases} 0 & \text{при выполнении ограничений,} \\ > 0 & \text{при нарушении ограничений,} \end{cases}$$

причем при нарушении ограничений и $r^k \rightarrow \infty$ справедливо $P(x, r^k) \rightarrow \infty$; чем больше r^k , тем больше штраф за нарушение ограничений.

Для ограничений типа равенств используется квадратичный штраф (рис. 5.1, а), а для ограничений типа неравенств – квадрат срезки (рис. 5.1, б):

$$P(x, r^k) = \frac{r^k}{2} \left\{ \sum_{j=1}^m [g_j(x)]^2 + \sum_{j=m+1}^p [g_j^+(x)]^2 \right\},$$

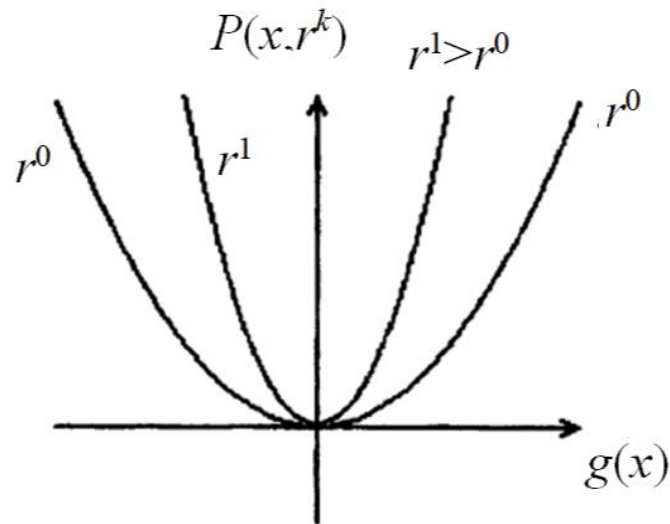
где $g_j^+(x)$ – срезка функции, вычисляемая как

$$g_j^+(x) = \max\{0, g_j(x)\} = \begin{cases} g_j(x), & \text{если } g_j(x) > 0, \\ 0, & \text{если } g_j(x) \leq 0. \end{cases}$$

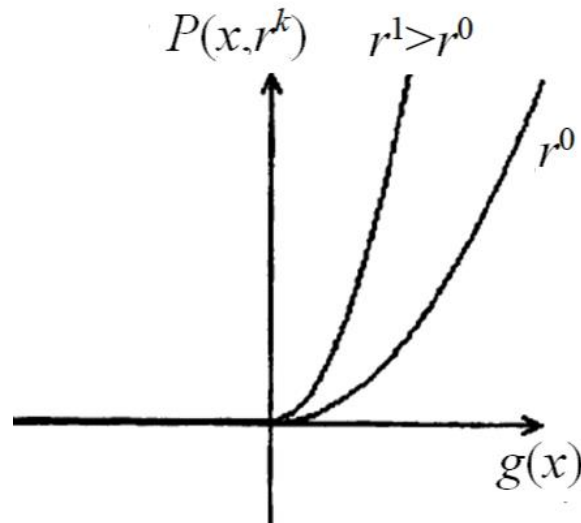
Начальная точка поиска условного экстремума задается обычно вне множества допустимых решений; на каждой k -й итерации ищется т. $\hat{x}(r^k)$ минимума вспомогательной функции $F(x, r^k)$ при заданном параметре штрафа r^k с помощью одного из эффективных и надежных методов поиска безусловного экстремума, изложенных в главе 4.

Обычно выбирается $r^0 = 0,01; 0,1; 1$, а $C \in [4; 10]$, иногда начинают с $r^0 = 0$.

Найденная на k -й итерации т. $\hat{x}(r^k)$ используется в качестве начальной на следующей $k + 1$ -й итерации, выполняемой при возрастающем значении параметра штрафа $r^{k+1} = C \cdot r^k$; при неограниченном возрастании значения параметра штрафа r^k последовательность $\hat{x}(r^k)$ стремится к точке условного минимума x^* .



a)



б)

Рис. 5.1. Штрафные добавки к исходной целевой функции $I(u)$ за нарушение ограничений:

a – квадратичный штраф за нарушение ограничений типа равенств;
б – квадрат срезки функции за нарушение ограничений типа неравенств

Алгоритм.

Шаг 1. Положить $k = 0$; задать начальную т. x^0 , начальное значение параметра штрафа $r^0 > 0$, число $C > 1$ для увеличения параметра штрафа, малое число ε для остановки алгоритма.

Шаг 2. Составить вспомогательную функцию

$$F(x, r^k) = I(x) + \frac{r^k}{2} \left\{ \sum_{j=1}^m [g_j(x)]^2 + \sum_{j=m+1}^p [g_j^+(x)]^2 \right\}.$$

Шаг 3. Найти т. $\hat{x}(r^k)$ безусловного минимума функции $F(x, r^k)$ по x с помощью одного из эффективных и надежных методов поиска безусловного экстремума (нулевого или первого порядка) из пакета прикладных программ MATLAB:

$$F(\hat{x}(r^k), r^k) = \min_{x \in R^n} F(x, r^k).$$

При этом необходимо задать все требуемые выбранным методом параметры; вычислить значение штрафной добавки $P(\hat{x}(r^k), r^k)$.

Шаг 4. Проверить выполнение условия окончания поиска:

а) если $P(\hat{x}(r^k), r^k) \leq \varepsilon$, процесс поиска закончить:

$$x^* = \hat{x}(r^k), I(x^*) = I(\hat{x}(r^k));$$

б) если $P(\hat{x}(r^k), r^k) > \varepsilon$, положить $r^{k+1} = C \cdot r^k$, $x^{k+1} = \hat{x}(r^k)$, $k := k + 1$ и перейти к шагу 2.

Замечания.

1. При решении последовательности задач на безусловный экстремум процедура расчетов завершается при некотором конечном значении параметра штрафа r^k ; при этом приближенное решение, как правило, не лежит в множестве X допустимых решений, т.е. ограничения задачи нарушены с заданной точностью. Это является одним из недостатков метода. С ростом значений параметра штрафа r^k генерируемые алгоритмом точки приближаются к решению исходной задачи извне множества X допустимых решений.

2. На практике для получения решения исходной задачи на условный экстремум с требуемой точностью достаточно бывает решить относительно небольшое число вспомогательных задач; при этом нет необходимости решать их с высокой точностью.

Пример 5.1. Решить задачу на условный минимум:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x) = \min_{x \in X} (x_1^2 + x_2^2),$$

где $X = \{x \mid g_1(x) = x_1 - 1 = 0; g_2(x) = x_1 + x_2 - 2 \leq 0\}$.

1. Получим аналитическое решение сформулированной задачи.

2. Составим вспомогательную функцию $F(x, r^k)$:

$$F(x, r^k) = x_1^2 + x_2^2 + \frac{r^k}{2} \{ [x_1 - 1]^2 + [\max\{0; x_1 + x_2 - 2\}]^2 \}.$$

3. Найдем безусловный минимум вспомогательной функции $F(x, r^k)$ с помощью необходимых и достаточных условий:

$$\frac{\partial F(x, r^k)}{\partial x_1} = 0 = \begin{cases} 2x_1 + r^k(x_1 - 1) + r^k(x_1 + x_2 - 2), & x_1 + x_2 - 2 > 0, \\ 2x_1 + r^k(x_1 - 1), & x_1 + x_2 - 2 \leq 0, \end{cases}$$

$$\frac{\partial F(x, r^k)}{\partial x_2} = 0 = \begin{cases} 2x_2 + r^k(x_1 + x_2 - 2), & x_1 + x_2 - 2 > 0, \\ 2x_2, & x_1 + x_2 - 2 \leq 0. \end{cases}$$

Рассмотрим два случая.

1. Пусть $x_1 + x_2 - 2 > 0$; вычитая второе уравнение из первого, получим

$$x_2 = x_1 + \frac{r^k}{2}(x_1 - 1),$$

и далее после подстановки x_2 в первое уравнение получаем расчетные формулы для определения стационарных точек вспомогательной функции $F(x, r^k)$:

$$\hat{x}_1(r^k) = \frac{(r^k)^2 + 6r^k}{(r^k)^2 + 6r^k + 4}, \quad \hat{x}_2(r^k) = \frac{(r^k)^2 + 4r^k}{(r^k)^2 + 6r^k + 4}.$$

Анализ показывает, что при всех $r^k > 0$ мы получим неравенство $\hat{x}_1(r^k) + \hat{x}_2(r^k) - 2 = \frac{-2r^k - 8}{(r^k)^2 + 6r^k + 4} < 0$, противоречащее условию $x_1 + x_2 - 2 > 0$ для рассматриваемого случая.

2. Пусть $x_1 + x_2 - 2 \leq 0$; тогда $\hat{x}_2 = 0$, а $\hat{x}_1(r^k) = \frac{r^k}{2+r^k}$, т.е. мы получили аналитическое решение задачи

$$F(x, r^k) = x_1^2 + x_2^2 + \frac{r^k}{2} \{ [x_1 - 1]^2 + [\max\{0; x_1 + x_2 - 2\}]^2 \} \rightarrow \min_{x \in R^2},$$

позволяющее рассчитывать $\hat{x}(r^k) = \left(\hat{x}_1(r^k) = \frac{r^k}{2+r^k}, \hat{x}_2 = 0 \right)^T$ для любого r^k .

Положим $k = 0$, зададим $\varepsilon = 0,0001$ начальное значение параметра штрафа $r^0 = 1$, вычислим по формуле $\hat{x}_1(r^0 = 1) = \frac{r^0}{2+r^0} = \frac{1}{2+1} = \frac{1}{3}$; $\hat{x}_2 = 0$; затем при $k = 1$ увеличим параметр штрафа, например в 2 раза, т.е. примем $r^1 = 2$

вновь вычислим по формуле $\hat{x}_1(r^1 = 1) = \frac{r^1}{2+r^1} = \frac{2}{2+2} = \frac{1}{2}$; $\hat{x}_2 = 0$; и т.д. увеличиваем k и r^k до тех пор, пока не выполнится условие окончания поиска $P(\hat{x}(r^k), r^k) \leq \varepsilon = 0,0001$. Результаты последовательных приближений сведены в табл. 5.1.

Таким образом, мы получили решение задачи на условный минимум с заданной точностью $\varepsilon = 0,0001$:

$$x^* = \hat{x}^4 = (0,998; 0)^T, I(x^*) = I(\hat{x}^4 = (0,998; 0)^T) = 0,996. \blacksquare$$

5.1. Результат решения задачи безусловной оптимизации методом внешних штрафов

k	r^k	$\hat{x}_1(r^k)$	$\hat{x}_2(r^k)$	$I(x, r^k)$	$P(\hat{x}(r^k), r^k)$
0	1	1/3	0	0,1111	0,14881
1	2	1/2	0	0,25	0,125
2	10	5/6	0	0,6944	0,0231
3	100	50/51	0	0,9612	0,0004
4	1000	500/501	0	0,996	$3,98 \cdot 10^{-6}$

Пример 5.2. Решить задачу на условный минимум:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x) = \min_{x \in X} (3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2),$$

где $X = \{x \mid x_1 \geq 0; x_2 \geq 0; x_1 + x_2 \geq 4\}$.

Перепишем задачу на условный минимум в канонической форме:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x) = \min_{x \in X} (3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2),$$

где $X = \left\{ \begin{array}{l} x \mid g_1(x) = -x_1 \leq 0; g_2(x) = -x_2 \leq 0; \\ g_3(x) = 4 - x_1 - x_2 \leq 0. \end{array} \right\}$.

Все вычисления будем проводить в соответствии с приведенным выше алгоритмом решения задачи на условный минимум.

1. Положим $k = 0$; зададим начальную т. $x^0 = (0, 0)^T$, начальное значение параметра штрафа $r^0 = 1$, число $C = 10$ для увеличения параметра штрафа, малое число $\varepsilon = 0,01$ для остановки алгоритма.

2⁰. Составим вспомогательную функцию $F(x, r^0)$:

$$F(x, r^0) = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2 + \frac{r^0}{2} \{[\max \{0; -x_1\}]^2 + [\max \{0; -x_2\}]^2 + [\max \{0; 4 - x_1 - x_2\}]^2\}.$$

3⁰. Найдем т. $\hat{x}(r^0)$ безусловного минимума функции $F(x, r^k)$, т.е.

$$F(\hat{x}(r^0), r^0) = \min_{x \in R^2} F(x, r^0),$$

с помощью одного из эффективных и надежных методов поиска безусловного экстремума (нулевого или первого порядка) из пакета прикладных программ MATLAB: $r^0 = 1$, $\hat{x}_1(r^0) = 0,46$; $\hat{x}_2(r^0) = 0,15$; вычислим значение штрафной добавки $P(\hat{x}(r^0), r^0) = 5,75$.

4⁰. Проверим условие окончания поиска: поскольку $P(\hat{x}(r^0), r^0) = 5,75 > \varepsilon = 0,01$, то положим $r^1 = C \cdot r^0 = 10 * 1 = 10$, $x^{1,0} = \hat{x}(r^0) = (0,46; 0,15)$, $k := k + 1 = 0 + 1 = 1$ и перейти к шагу 2.

2¹. Составим вспомогательную функцию $F(x, r^1)$:

$$F(x, r^1) = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2 + \frac{r^1}{2} \{[\max \{0; -x_1\}]^2 + [\max \{0; -x_2\}]^2 + [\max \{0; 4 - x_1 - x_2\}]^2\}.$$

3¹. Найдем т. $\hat{x}(r^1)$ безусловного минимума функции $F(x, r^1)$, т.е.

$$F(\hat{x}(r^1), r^1) = \min_{x \in R^2} F(x, r^1):$$

$$r^1 = 10, \hat{x}_1(r^1) = 1,94; \hat{x}_2(r^1) = 0,65;$$

вычислим значение штрафной добавки $P(\hat{x}(r^1), r^1) = 9,94$.

4¹. Проверим условие окончания поиска: поскольку $P(\hat{x}(r^1), r^1) = 9,94 > \varepsilon = 0,01$, то положим $r^2 = C \cdot r^1 = 10 * 10 = 100$, $x^{2,0} = \hat{x}(r^1) = (1,94; 0,65)$, $k := k + 1 = 1 + 1 = 2$ и перейти к шагу 2.

2². Составим вспомогательную функцию $F(x, r^2)$:

$$F(x, r^2) = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2 + \frac{r^2}{2} \{[\max \{0; -x_1\}]^2 + [\max \{0; -x_2\}]^2 + [\max \{0; 4 - x_1 - x_2\}]^2\}.$$

3². Найдем т. $\hat{x}(r^2)$ безусловного минимума функции $F(x, r^2)$, т.е.

$$F(\hat{x}(r^2), r^2) = \min_{x \in R^2} F(x, r^2):$$

$$r^2 = 100, \hat{x}_1(r^2) = 2,84; \hat{x}_2(r^2) = 0,95;$$

вычислим значение штрафной добавки $P(\hat{x}(r^2), r^2) = 2,205$.

4². Проверим условие окончания поиска: поскольку $P(\hat{x}(r^2), r^2) = 2,205 > \varepsilon = 0,01$, то положим $r^3 = C \cdot r^2 = 10 * 100 = 1000$, $x^3 = \hat{x}(r^2) = (2,84; 0,95)$, $k := k + 1 = 2 + 1 = 3$ и перейти к шагу 2.

2³. Составим вспомогательную функцию $F(x, r^3)$:

$$F(x, r^3) = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2 + \frac{r^3}{2} \{ [\max \{0; -x_1\}]^2 + [\max \{0; -x_2\}]^2 + [\max \{0; 4 - x_1 - x_2\}]^2 \}.$$

3³. Найдем т. $\hat{x}(r^3)$ безусловного минимума функции $F(x, r^3)$, т.е.

$$F(\hat{x}(r^3), r^3) = \min_{x \in R^2} F(x, r^3):$$

$$r^3 = 1000, \hat{x}_1(r^3) = 2,98; \hat{x}_2(r^3) = 0,99;$$

вычислим значение штрафной добавки $P(\hat{x}(r^3), r^3) = 0,45$.

4³. Проверим условие окончания поиска: поскольку $P(\hat{x}(r^3), r^3) = 0,45 > \varepsilon = 0,01$, то положим $r^4 = C \cdot r^3 = 10 * 10^3 = 10^4$, $x^4 = \hat{x}(r^3) = (2,98; 0,99)$, $k := k + 1 = 3 + 1 = 4$ и перейти к шагу 2.

2⁴. Составим вспомогательную функцию $F(x, r^4)$:

$$F(x, r^4) = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2 + \frac{r^4}{2} \{ [\max \{0; -x_1\}]^2 + [\max \{0; -x_2\}]^2 + [\max \{0; 4 - x_1 - x_2\}]^2 \}.$$

3⁴. Найдем т. $\hat{x}(r^4)$ безусловного минимума функции $F(x, r^4)$, т.е.

$$F(\hat{x}(r^4), r^4) = \min_{x \in R^2} F(x, r^4):$$

$$r^4 = 10^4, \hat{x}_1(r^4) = 2,998; \hat{x}_2(r^4) = 0,9995;$$

вычислим значение штрафной добавки $P(\hat{x}(r^4), r^4) = 0,03$.

4⁴. Проверим условие окончания поиска: поскольку $P(\hat{x}(r^4), r^{34}) = 0,03 > \varepsilon = 0,01$, то положим $r^4 = C \cdot r^3 = 10 \cdot 10^4 = 10^5$, $x^4 = \hat{x}(r^4) = (2,998; 0,9995)$, $k := k + 1 = 4 + 1 = 5$ и перейти к шагу 2.

2⁵. Составим вспомогательную функцию $F(x, r^5)$:

$$F(x, r^3) = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2 + \frac{r^5}{2} \{[\max\{0; -x_1\}]^2 + [\max\{0; -x_2\}]^2 + [\max\{0; 4 - x_1 - x_2\}]^2\}.$$

3⁵. Найдем т. $\hat{x}(r^5)$ безусловного минимума функции $F(x, r^5)$, т.е. $F(\hat{x}(r^5), r^5) = \min_{x \in R^2} F(x, r^5)$:

$$r^5 = 10^5, \hat{x}_1(r^5) = 2,9991; \hat{x}_2(r^5) = 1,0006;$$

вычислим значение штрафной добавки $P(\hat{x}(r^5), r^5) = 0,0045$.

4⁵. Проверим условие окончания поиска: поскольку $P(\hat{x}(r^5), r^5) = 0,0045 < \varepsilon = 0,01$, процесс поиска закончим и запишем полученное решение задачи на условный минимум: $x^* = \hat{x}(r^5) = (2,9991; 1,0006)^T$, $I(x^*) = I(\hat{x}(r^5)) = 43,9934$.

Результаты последовательных приближений сведены в табл. 5.2. ■

5.2. Результат решения задачи безусловной оптимизации методом внешних штрафов

k	r^k	$\hat{x}_1(r^k)$	$\hat{x}_2(r^k)$	$I(x, r^k)$	$P(\hat{x}(r^k), r^k)$
0	1	0,46	0,15	1,0233	5,75
1	10	1,94	0,65	18,4473	9,94
2	100	2,84	0,95	39,5013	2,205
3	10^3	2,98	0,99	43,3425	0,45
4	10^4	2,998	0,9995	43,945	0,03
5	10^5	2,9991	1,0006	43,9934	0,0045

5.2.2. Метод барьерных функций

Постановка задачи:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x),$$

где $X = \{x \mid g_j(x) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m\}$.

Стратегия поиска. Идея метода заключается в сведении решения задачи на условный экстремум к решению последовательности задач поиска безусловного минимума вспомогательной функции $F(x, r^k)$:

$$F(x, r^k) = I(x) + P(x, r^k) \rightarrow \min_{x \in R^n},$$

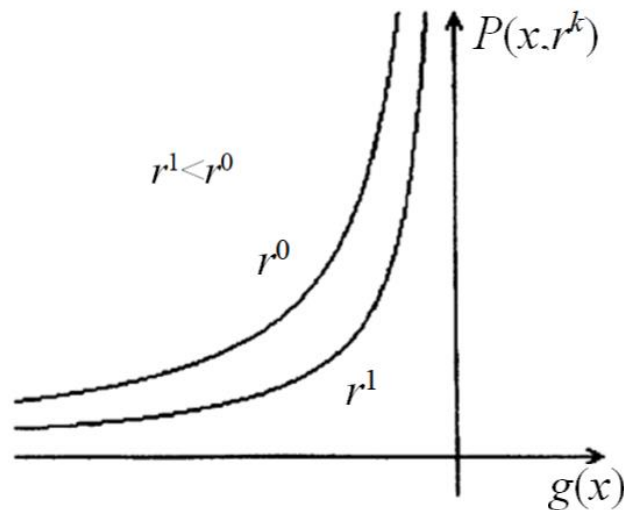
где $P(x, r^k)$ – штрафная функция (добавка); r^k – параметр барьера, задаваемый на каждой k -й итерации. В качестве барьерных функций, как правило, используются:

а) обратная барьерная функция – $P(x, r^k) = -r^k \sum_{j=1}^m 1/g_j(x)$ (рис. 5.2, а);

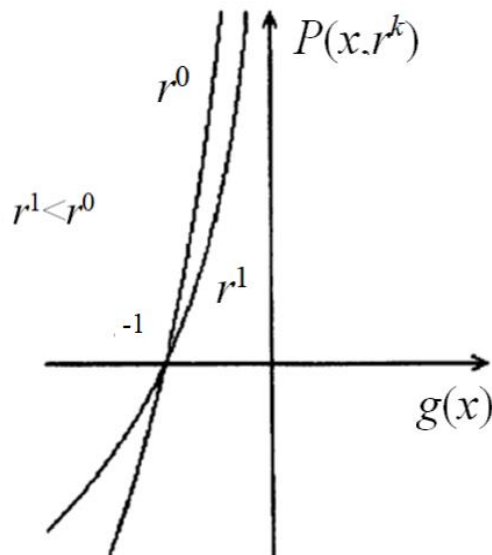
б) логарифмическая барьерная функция – $P(x, r^k) = -r^k \sum_{j=1}^m \ln[-g_j(x)]$ (рис. 5.2, б).

Обе штрафные добавки (функции) определены и непрерывны внутри множества X , т.е. на множестве $\{x \mid g_j(x) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m\}$, и стремятся к бесконечности при приближении к границе этого множества изнутри; поэтому они называются барьерными функциями.

Начальная т. x^0 задается внутри множества X ; на каждой k -й итерации ищется т. $\hat{x}(r^k)$ минимума вспомогательной функции $F(x, r^k)$ при заданном параметре r^k с помощью одного из эффективных и надежных методов поиска безусловного экстремума (нулевого или первого порядка). Полученная т. $\hat{x}(r^k)$ используется в качестве начальной точки на следующей итерации, выполняемой при уменьшающемся значении параметра штрафа, т.е. $r^{k+1} = r^k / C$, где $C > 1$ (обычно выбирается $r^0 = 1; 10; 100$, а параметр $C = 10; 12; 16$); при $r^k \rightarrow +0$ последовательность точек $\hat{x}(r^k)$ стремится к точке условного минимума x^* изнутри допустимой области X .



а)



б)

Рис. 5.2. Барьерные добавки к исходной целевой функции $I(u)$:
a – обратная барьерная функция; *б* – логарифмическая барьерная функция

Алгоритм.

Шаг 1. Положить $k = 0$, задать начальную т. x^0 внутри области X ; начальное значение параметра штрафа $r^k \geq 0$; число $C > 1$ для уменьшения параметра штрафа; малое число $\varepsilon > 0$ для остановки алгоритма.

Шаг 2^k. Составить вспомогательную функцию:

$$F(x, r^k) = I(x) - r^k \sum_{j=1}^m \frac{1}{g_j(x)} \text{ или } F(x, r^k) = I(x) - r^k \sum_{j=1}^m \ln[-g_j(x)].$$

Шаг 3^k . Найти т. $\hat{x}(r^k)$ безусловного минимума функции $F(x, r^k)$ по x с помощью одного из эффективных и надежных методов поиска безусловного экстремума (нулевого или первого порядка) из пакета прикладных программ MATLAB:

$$F(\hat{x}(r^k), r^k) = \min_{x \in R^n} F(x, r^k).$$

При этом необходимо задать все требуемые выбранным методом параметры, обеспечить проверку на принадлежность найденной т. $\hat{x}(r^k)$ множеству X допустимых значений, т.е. множеству $\{x \mid g_j(x) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m\}$; вычислить значение штрафной добавки $P(\hat{x}(r^k), r^k) = -r^k \sum_{j=1}^m \frac{1}{g_j(x)}$ или $P(\hat{x}(r^k), r^k) = -r^k \sum_{j=1}^m \ln[-g_j(x)]$.

Шаг 4^k . Проверить условие окончания поиска:

а) если $P(\hat{x}(r^k), r^k) \leq \varepsilon$, процесс поиска закончить:

$$x^* = \hat{x}(r^k), I(x^*) = I(\hat{x}(r^k));$$

б) если $P(\hat{x}(r^k), r^k) > \varepsilon$, положить $r^{k+1} = r^k / C$, $x^{k+1} = \hat{x}(r^k)$, $k := k + 1$ и перейти к шагу 2.

Замечания.

Так как большинство методов поиска безусловного экстремума использует дискретные шаги, то вблизи границы шаг может привести в точку вне допустимой области X ; поэтому на шаге 3 требуется явная проверка того, что точка не покинула допустимую область X . При отсутствии надлежащей проверки можно прийти к ложному успеху, т.е. к уменьшению вспомогательной функции $F(x, r^k)$ в точке, где она теоретически не определена.

Процедура поиска обычно завершается при некотором достаточно малом r^k , отличном от нуля; при этом полученное приближенное решение принадлежит множеству X допустимых решений, т.е. множеству $\{x \mid g_j(x) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m\}$.

Пример 5.3. Решить задачу на условный минимум:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x) = \min_{x \in X} \left(\frac{1}{3} (x_1 + 1)^3 + x_2 \right),$$

где $X = \{x \mid g_1(x) = 1 - x_1 \leq 0; g_2(x) = -x_2 \leq 0\}$.

1. Получим аналитическое решение сформулированной задачи.
2. Составим вспомогательную функцию $F(x, r^k)$:

$$F(x, r^k) = \frac{1}{3} (x_1 + 1)^3 + x_2 \underbrace{-r^k \left\{ \frac{1}{1-x_1} - \frac{1}{x_2} \right\}}_{P(x, r^k)}.$$

3. Найдем безусловный минимум вспомогательной функции $F(x, r^k)$ с помощью необходимых и достаточных условий:

$$\frac{\partial F(x, r^k)}{\partial x_1} = (x_1 + 1)^2 - \frac{r^k}{(1-x_1)^2} = 0;$$

$$\frac{\partial F(x, r^k)}{\partial x_2} = 1 - \frac{r^k}{x_2^2} = 0.$$

Решение этой системы, лежащее внутри множества

$$X = \{x \mid g_1(x) = 1 - x_1 \leq 0; g_2(x) = -x_2 \leq 0\},$$

имеет вид

$$\hat{x}_1(r^k) = \sqrt{1 + \sqrt{r^k}}, \hat{x}_2(r^k) = \sqrt{r^k}.$$

Таким образом, мы получили аналитическое решение задачи

$$F(x, r^k) = \frac{1}{3} (x_1 + 1)^3 + x_2 \underbrace{-r^k \left\{ \frac{1}{1-x_1} - \frac{1}{x_2} \right\}}_{P(x, r^k)} \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^2},$$

позволяющее рассчитывать $\hat{x}(r^k) = (\hat{x}_1(r^k) = \sqrt{1 + \sqrt{r^k}}, \hat{x}_2 = \sqrt{r^k})^T$ для любого r^k .

Положим $k = 0$, зададим $\varepsilon = 0,01$, начальное значение параметра штрафа $r^0 = 1$, вычислим по формулам $\hat{x}_1(r^0 = 1) = \sqrt{1 + \sqrt{1}} = 1,4142$; $\hat{x}_2(r^0 = 1) = \sqrt{1} = 1$ и значение штрафной надбавки $P(x, r^0) = 3,4142$; затем при $k = 2$ уменьшим параметр штрафа, например в 2 раза, т.е. примем $r^1 = 0,5$ вновь

вычислим по формулам $\hat{x}_1(r^1 = 0,5) = \sqrt{1 + \sqrt{0,5}} = 1,3065$; $\hat{x}_2 = \sqrt{0,5} = 0,7071$; $P(x, r^k) = 4,6762$; и т.д. увеличиваем k и уменьшаем r^k до тех пор, пока не выполнится условие окончания поиска $P(\hat{x}(r^k), r^k) \leq \varepsilon = 0,01$. Результаты последовательных приближений сведены в табл. 5.3.

5.3. Результат решения задачи безусловной оптимизации методом барьерных функций

k	r^k	$\hat{x}_1(r^k)$	$\hat{x}_2(r^k)$	$I(x, r^k)$	$P(\hat{x}(r^k), r^k)$
0	1	1,4142	1	5,69	3,4142
1	0,5	1,3065	0,7071	4,7976	4,6762
2	0,1	1,1473	0,3162	3,6164	0,9952
3	0,01	1,0488	0,1	2,9667	0,3049
4	0,001	1,0157	0,0316	2,7615	0,0954
5	10^{-4}	1,005	0,01	2,6967	0,03
6	10^{-5}	1,0016	0,0032	2,6762	0,0095

Таким образом, мы получили решение задачи на условный минимум с заданной точностью $\varepsilon = 0,01$:

$$x^* = \hat{x}^6 = (1,0016; 0,0032)^T, I(x^*) = I(\hat{x}^6) = 2,6762. \blacksquare$$

Пример 5.4. Решить задачу на условный минимум:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x) = \min_{x \in X} ((x_1 - 4)^2 + (x_2 - 4)^2),$$

где $X = \{x \mid g_1(x) = x_1 + x_2 - 5 \leq 0\}$.

1. Получим аналитическое решение сформулированной задачи.
2. Составим вспомогательную функцию $F(x, r^k)$:

$$F(x, r^k) = (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 4)^2 - \underbrace{r^k \ln(5 - x_1 - x_2)}_{P(x, r^k)}.$$

3. Найдем безусловный минимум вспомогательной функции $F(x, r^k)$ с помощью необходимых и достаточных условий:

$$\frac{\partial F(x, r^k)}{\partial x_1} = 2(x_1 - 4) + \frac{r^k}{5 - x_1 - x_2} = 0,$$

$$\frac{\partial F(x, r^k)}{\partial x_2} = 2(x_2 - 4) + \frac{r^k}{5 - x_1 - x_2} = 0.$$

Вычитая из первого уравнения второе, получим $x_1 = x_2$ и с учетом этого приходим к уравнению $2x_1^2 - 13x_1 + 20 - \frac{r^k}{2} = 0$; его корни $x_{1,2} = \frac{13 \pm \sqrt{9+4r^k}}{4}$.

Проанализируем полученные корни на предмет выполнения ограничения задачи: корень $\hat{x}_1 = \frac{13 + \sqrt{9+4r^k}}{4} = \hat{x}_2$ не удовлетворяет ограничению $x_1 + x_2 - 5 \leq 0$ при $r^k > 0$; поэтому $\hat{x}_1 = \frac{13 - \sqrt{9+4r^k}}{4} = \hat{x}_2$.

Матрица Гессе

$$H(\hat{x}(r^k), r^k) = \begin{pmatrix} 2 + \frac{r^k}{(5-x_1-x_2)^2} & \frac{r^k}{(5-x_1-x_2)^2} \\ \frac{r^k}{(5-x_1-x_2)^2} & 2 + \frac{r^k}{(5-x_1-x_2)^2} \end{pmatrix} > 0,$$

т.е. достаточные условия минимума функции в т. $\hat{x}_1 = \frac{13 - \sqrt{9+4r^k}}{4} = \hat{x}_2$ выполняются и $x^* = \hat{x}(r^k)$; при $r^k \rightarrow 0$ имеем $x^* = (2,5; 2,5)^T$; $I(x^*) = 4,5$.

Положим $k = 0$, зададим $\varepsilon = 0,001$, начальное значение параметра штрафа $r^0 = 100$, вычислим по формулам $\hat{x}_1 = \frac{13 - \sqrt{9+4r^k}}{4} = \hat{x}_2$ и значение штрафной надбавки $P(x, r^0)$, если $|P(x, r^0)| > \varepsilon = 0,001$, то уменьшаем параметр барьера при $k = 2$ – $r^1 = r^0/C$ и вновь вычислим по формуле значения $\hat{x}_1 = \frac{13 - \sqrt{9+4r^k}}{4} = \hat{x}_2$, и т.д. увеличиваем k и уменьшаем r^k до тех пор, пока не выполнится условие окончания поиска $P(\hat{x}(r^k), r^k) \leq \varepsilon = 0,001$. Результаты последовательных приближений сведены в табл. 5.4.

Таким образом, мы получаем решение задачи на условный минимум с заданной точностью $\varepsilon = 0,001$:

$$x^* = \hat{x}^6 = (2,4999; 2,4999)^T, I(x^*) = I(\hat{x}^6) = 4,501. \blacksquare$$

Пример 5.5. Решить задачу на условный минимум:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x) = \min_{x \in X} \left(\frac{4}{x_1} + \frac{9}{x_2} \right),$$

где $X = \{x \mid g_1(x) = x_1 + x_2 \leq 6; x_1 \geq 0, x_2 \geq 0\}$.

Перепишем задачу на условный экстремум в каноническом виде:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x) = \min_{x \in X} \left(\frac{4}{x_1} + \frac{9}{x_2} \right),$$

где $X = \{x \mid g_1(x) = x_1 + x_2 - 6 \leq 0; -x_1 \leq 0, -x_2 \leq 0\}$.

1. Положим $k = 0$; зададим начальную т. $x^0 = (1; 1)^T$, начальное значение параметра штрафа $r^0 = 100$, число $C = 10$ для уменьшения параметра штрафа, малое число $\varepsilon = 0,01$ для остановки алгоритма.

2⁰. Составим вспомогательную функцию $F(x, r^0)$ с использованием обратных функций:

$$F(x, r^0) = \frac{4}{x_1} + \frac{9}{x_2} - r^0 \left[\frac{1}{x_1 + x_2 - 6} - \frac{1}{x_1} - \frac{1}{x_2} \right].$$

3⁰. Найдем т. $\hat{x}(r^0)$ безусловного минимума функции $F(x, r^0)$, т.е.

$$F(\hat{x}(r^0), r^0) = \min_{x \in R^2} F(x, r^0),$$

с помощью одного из эффективных и надежных методов поиска безусловного экстремума (нулевого или первого порядка) из пакета прикладных программ MATLAB: $r^0 = 100$, $\hat{x}(r^0) = (1,9971; 2,0446)^T$; вычислим значение штрафной добавки $|P(\hat{x}(r^0), r^0)| = 150$.

5.4. Результат решения задачи безусловной оптимизации методом барьерных функций

k	r^k	$\hat{x}_1(r^k)$	$\hat{x}_2(r^k)$	$I(x, r^k)$	$P(\hat{x}(r^k), r^k)$
0	100	-1,8059	-1,8059	67,4178	-215,314
1	10	1,5	1,5	12,5	-6,9315
2	1	2,3486	2,3486	5,4541	1,1948
3	0,1	2,4835	2,4835	4,5994	0,3412
4	0,01	2,4983	2,4983	4,51	0,057
5	10^{-3}	2,4998	2,4998	4,501	0,008
6	10^{-4}	2,4999	2,4999	4,5001	0,001

4⁰. Проверим условие окончания поиска: поскольку $P(\hat{x}(r^0), r^0) = 150 > \varepsilon = 0,01$, то положим $r^1 = \frac{r^0}{c} = \frac{100}{10} = 10$, $x^{1,0} = \hat{x}(r^0) = (1,99716; 2,0446)$, $k := k + 1 = 0 + 1 = 1$ и перейти к шагу 2.

2¹. Составим вспомогательную функцию $F(x, r^1)$:

$$F(x, r^1) = \frac{4}{x_1} + \frac{9}{x_2} - r^1 \left[\frac{1}{x_1 + x_2 - 6} - \frac{1}{x_1} - \frac{1}{x_2} \right].$$

3¹. Найдем т. $\hat{x}(r^1)$ безусловного минимума функции $F(x, r^1)$, т.е.

$$F(\hat{x}(r^1), r^1) = \min_{x \in \mathbb{R}^2} F(x, r^1),$$

с помощью одного из эффективных и надежных методов поиска безусловного экстремума (нулевого или первого порядка) из пакета прикладных программ MATLAB: $r^1 = 10$, $\hat{x}(r^1) = (1,9933; 2,3221)^T$; вычислим значение штрафной добавки $|P(\hat{x}(r^1), r^1)| = 15$.

4¹. Проверим условие окончания поиска: поскольку $P(\hat{x}(r^1), r^1) = 15 > \varepsilon = 0,01$, то положим

$$r^2 = r^1/c = 10/10 = 1, x^{2,0} = \hat{x}(r^1) = (1,99716; 2,0446),$$

$k := k + 1 = 1 + 1 = 2$ и перейти к шагу 2.

2². Составим вспомогательную функцию $F(x, r^2)$:

$$F(x, r^2) = \frac{4}{x_1} + \frac{9}{x_2} - r^2 \left[\frac{1}{x_1 + x_2 - 6} - \frac{1}{x_1} - \frac{1}{x_2} \right].$$

3². Найдем т. $\hat{x}(r^2)$ безусловного минимума функции $F(x, r^2)$, т.е.

$$F(\hat{x}(r^2), r^2) = \min_{x \in \mathbb{R}^2} F(x, r^2),$$

с помощью одного из эффективных и надежных методов поиска безусловного экстремума (нулевого или первого порядка) из пакета прикладных программ MATLAB: $r^2 = 1$, $\hat{x}(r^2) = (2,0969; 2,9654)^T$; вычислим значение штрафной добавки $|P(\hat{x}(r^2), r^2)| = 1,881$.

4². Проверим условие окончания поиска: поскольку $P(\hat{x}(r^2), r^2) = 1,881 > \varepsilon = 0,01$, то положим $r^3 = \frac{r^2}{c} = \frac{1}{10} = 0,1$, $x^{3,0} = \hat{x}(r^2) = (2,0969; 2,9654)$, $k := k + 1 = 2 + 1 = 3$ и перейти к шагу 2.

2³. Составим вспомогательную функцию $F(x, r^4)$:

$$F(x, r^4) = \frac{4}{x_1} + \frac{9}{x_2} - r^4 \left[\frac{1}{x_1 + x_2 - 6} - \frac{1}{x_1} - \frac{1}{x_2} \right].$$

3³. Найдем т. $\hat{x}(r^4)$ безусловного минимума функции $F(x, r^4)$, т.е.

$$F(\hat{x}(r^4), r^4) = \min_{x \in R^2} F(x, r^4),$$

с помощью одного из эффективных и надежных методов поиска безусловного экстремума (нулевого или первого порядка) из пакета прикладных программ MATLAB: $r^4 = 0,01$, $\hat{x}(r^4) = (2,5903; 3,4097)^T$; вычислим значение штрафной добавки $|P(\hat{x}(r^4), r^4)| = 0$.

4³. Проверим условие окончания поиска: поскольку $P(\hat{x}(r^4), r^4) = 0 < \varepsilon = 0,01$, то процесс поиска закончим и запишем полученное решение задачи на условный минимум:

$$x^* = \hat{x}(r^4) = (2,5903; 3,4097)^T,$$

$$I(x^*) = I(\hat{x}(r^4)) = 4,1838. \blacksquare$$

5.2.3. Комбинированный метод штрафных функций

Постановка задачи:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x),$$

где $X = \{x \mid g_j(x) = 0, j = \overline{1, m}, m < n; g_j(x) \leq 0, j = \overline{m+1, p}\}$.

Стратегия поиска.

Для ограничений типа равенств применяется метод внешних штрафов, а для ограничений-неравенств – метод барьерных функций. Задача на условный минимум сводится к решению последовательности задач поиска минимума смешанной вспомогательной функции:

$$F(x, r^k) = I(x) + \frac{1}{2r^k} \sum_{j=1}^m [g_j(x)]^2 - r^k \sum_{j=m+1}^p \frac{1}{g_j(x)}$$

или

$$F(x, r^k) = I(x) + \frac{1}{2r^k} \sum_{j=1}^m [g_j(x)]^2 - r^k \sum_{j=m+1}^p \ln[-g_j(x)],$$

где $r^k \geq 0$ – параметр барьера (штрафа).

Начальная точка задается так, чтобы ограничения-неравенства строго выполнялись: $g_j(x) \leq 0, j = \overline{m+1, p}$. На каждой k -й итерации ищется т. $\hat{x}(r^k)$ минимума смешанной вспомогательной функции при заданном параметре r^k с помощью одного из методов безусловной оптимизации; при этом полученная т. $\hat{x}(r^k)$ используется в качестве начальной на следующей итерации, выполняемой при уменьшающемся значении параметра барьера. При $r^k \rightarrow +0$ последовательность точек $\hat{x}(r^k)$ стремится к т. x^* условного экстремума.

Алгоритм.

Шаг 1. Положить $k = 0$; задать начальную т. x^0 так, чтобы $g_j(x) \leq 0, j = \overline{m+1, p}$; начальное значение параметра барьера (штрафа) $r^0 > 0$; число $C > 1$ для уменьшения параметра барьера; малое число ε для остановки алгоритма.

Шаг 2^k . Составить смешанную вспомогательную функцию

$$F(x, r^k) = I(x) + \underbrace{\frac{1}{2r^k} \sum_{j=1}^m [g_j(x)]^2 - r^k \sum_{j=m+1}^p \frac{1}{g_j(x)}}_{P(x, r^k)}$$

или $F(x, r^k) = I(x) + \underbrace{\frac{1}{2r^k} \sum_{j=1}^m [g_j(x)]^2 - r^k \sum_{j=m+1}^p \ln[-g_j(x)]}_{P(x, r^k)}$.

Шаг 3^k . Найти т. $\hat{x}(r^k)$ минимума функции $F(x, r^k)$ с помощью одного из эффективных и надежных методов (нулевого или первого порядка) поиска безусловного минимума из пакета прикладных программ MATLAB с проверкой выполнения справедливости неравенств: $g_j(x) \leq 0, j = \overline{m+1, p}$. При этом необходимо задать все требуемые выбранным методом параметры; в качестве начальной точки взять $\hat{x}(r^k)$.

Шаг 4^k . Проверить условие окончания поиска:

а) если $|P(\hat{x}(r^k), r^k)| \leq \varepsilon$, процесс поиска закончить:

$$x^* = \hat{x}(r^k), I(x^*) = I(\hat{x}(r^k));$$

б) если $|P(\hat{x}(r^k), r^k)| > \varepsilon$, положить $r^{k+1} = r^k / C$, $x^{k+1} = \hat{x}(r^k)$, $k := k + 1$ и перейти к шагу 2.

Замечания.

Авторы комбинированного метода штрафных функций А. Фиакко и Г. Мак-Кормик [Fiacco A. V., McCormick G. P.] рекомендуют в качестве r^0 и C выбирать следующие значения – $r^0 = 1, C = 4$; можно использовать разные параметры для внешних штрафов и барьеров.

Пример 5.5. Решить задачу на условный минимум:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x) = \min_{x \in X} (x_1^2 + x_2^2),$$

где $X = \{x | g_1(x) = x_1 - 1 = 0; g_2(x) = x_1 + x_2 - 2 \leq 0\}$.

1. Получим аналитическое решение сформулированной задачи; положим $k = 0, r^0 = 1, C = 4, \varepsilon = 0,01$.

2⁰. Составим смешанную вспомогательную функцию:

$$F(x, r^k) = x_1^2 + x_2^2 + \underbrace{\frac{1}{2r^k} (x_1 - 1)^2 - r^k \ln[-(x_1 + x_2 - 2)]}_{P(x, r^k)}.$$

3⁰. Найдем безусловный минимум функции $F(x, r^k)$ с использованием необходимых условий экстремума первого порядка:

$$\frac{\partial F(x, r^k)}{\partial x_1} = 2x_1 + \frac{1}{r^k} (x_1 - 1) - \frac{r^k}{x_1 + x_2 - 2} = 0,$$

$$\frac{\partial F(x, r^k)}{\partial x_2} = 2x_2 - \frac{r^k}{x_1 + x_2 - 2} = 0.$$

Вычитая первое уравнение из второго, получим

$$x_2 = x_1 + \frac{1}{2r^k} (x_1 - 1) = \frac{x_1(1+2r^k)-1}{2r^k},$$

а x_1 находится в результате решения квадратного уравнения:

$$\left[4 + \frac{3}{r^k} + \frac{1}{2(r^k)^2}\right] x_1^2 - \left[4 + \frac{5}{r^k} + \frac{1}{(r^k)^2}\right] x_1 + \frac{1}{2(r^k)^2} + \frac{2}{r^k} - r^k = 0.$$

При $r^0 = 1$ имеем $x_2 = \frac{3x_1-1}{2}$ и $7,5x_1^2 - 10x_1 + 1,5 = 0$; отсюда получаем:

$x_{1,1} = 1,161; x_{1,2} = 1,2415; x_{2,1} = 0,1722; x_{2,2} = -0,2416$.

Для первой пары корней ограничение $x_1 + x_2 - 2 \leq 0$ не выполняется, т.е. они лежат в недопустимой области. Поэтому $\hat{x}_1(1) = 0,1722$; $\hat{x}_2(1) = -0,2416$.

4⁰. Проверим условие окончания поиска, для чего вычислим величину штрафной добавки: $|P(x, r^0)| = 0,3847$; так как $|P(\hat{x}(r^0), r^0)| = 0,3847 > \varepsilon = 0,01$, положим $r^1 = 1/4$, $k := 0 + 1 = 1$ и перейти к шагу 2.

2¹. Составим смешанную вспомогательную функцию:

$$F(x, r^1) = x_1^2 + x_2^2 + \underbrace{\frac{1}{2(0,25)} (x_1 - 1)^2 - 0,25 * \ln[-(x_1 + x_2 - 2)]}_{P(x, r^1)}.$$

3¹. Найдем безусловный минимум функции $F(x, r^k)$ с использованием необходимых условий экстремума первого порядка.

При $r^1 = 1/4 = 0,25$ имеем $x_2 = 3x_1 - 2$, а x_1 находится в результате решения квадратного уравнения $24x_1^2 - 40x_1 + 15,75 = 0$. Отсюда получаем $x_{1,1} = 1,0287$; $x_{1,2} = 1,0861$; $x_{2,1} = 0,6378$; $x_{2,2} = -0,0866$.

Первая пара корней не лежит в допустимой области; поэтому $\hat{x}_1(0,25) = 0,6378$; $\hat{x}_2(0,25) = -0,0866$.

4¹. Проверим условие окончания поиска, для чего вычислим величину штрафной добавки: $|P(x, r^1)| = 0,1697$; так как $|P(\hat{x}(r^1), r^1)| = 0,1697 > \varepsilon = 0,01$, положим $r^2 = 1/16 = 0,0625$, $k := 1 + 1 = 2$ и перейти к шагу 2.

2². Составим смешанную вспомогательную функцию:

$$F(x, r^2) = x_1^2 + x_2^2 + \underbrace{\frac{4}{2(0,25)} (x_1 - 1)^2 - \frac{0,25}{4} * \ln[-(x_1 + x_2 - 2)]}_{P(x, r^2)}.$$

3². Найдем безусловный минимум функции $F(x, r^k)$ с использованием необходимых условий экстремума первого порядка:

При $r^2 = 1/16 = 0,0625$ имеем $x_2 = 9x_1 - 8$, а x_1 находится в результате решения квадратного уравнения $180x_1^2 - 340x_1 + 159,9375 = 0$. Отсюда получаем $x_{1,1} = 1,003$; $x_{1,2} = 1,0274$; $x_{2,1} = 0,8858$; $x_{2,2} = -0,0274$.

Первая пара корней не лежит в допустимой области; поэтому $\hat{x}_1(0,0625) = 0,8858$; $\hat{x}_2(0,0625) = -0,0274$.

4². Проверим условие окончания поиска, для чего вычислим величину штрафной добавки: $|P(\hat{x}(r^2), r^2)| = 0,0961$; так как $|P(\hat{x}(r^2), r^2)| = 0,0961 > \varepsilon = 0,01$, положим $r^3 = 1/64 = 0,0156$, $k := 2 + 1 = 3$ и перейти к шагу 2.

2³. Составим смешанную вспомогательную функцию:

$$F(x, r^3) = x_1^2 + x_2^2 + \underbrace{\frac{4}{2(0,0625)} (x_1 - 1)^2 - \frac{0,0625}{4} * \ln[-(x_1 + x_2 - 2)]}_{P(x, r^3)}.$$

3³. Найдем безусловный минимум функции $F(x, r^k)$ с использованием необходимых условий экстремума первого порядка.

При $r^3 = 1/64 = 0,0156$ имеем $x_2 = 33x_1 - 32$, а x_1 находится в результате решения квадратного уравнения $2244x_1^2 - 4420x_1 + 2175,984 = 0$. Отсюда получаем $x_{1,1} = 1,0002$; $x_{1,2} = 1,0076$; $x_{2,1} = 0,9695$; $x_{2,2} = -0,0076$.

Первая пара корней не лежит в допустимой области; поэтому $\hat{x}_1(0,0156) = 0,9695$; $\hat{x}_2(0,0156) = -0,0076$.

4³. Проверим условие окончания поиска, для чего вычислим величину штрафной добавки: $|P(\hat{x}(r^3), r^3)| = 0,0293$; так как $|P(\hat{x}(r^3), r^3)| = 0,0293 > \varepsilon = 0,01$, положим $r^4 = 1/256 = 0,0039$, $k := 3 + 1 = 4$ и перейти к шагу 2.

2⁴. Составим смешанную вспомогательную функцию:

$$F(x, r^4) = x_1^2 + x_2^2 + \underbrace{\frac{4}{2(0,0156)} (x_1 - 1)^2 - \frac{0,0156}{4} * \ln[-(x_1 + x_2 - 2)]}_{P(x, r^4)}.$$

3⁴. Найдем безусловный минимум функции $F(x, r^4)$ с использованием необходимых условий экстремума первого порядка.

При $r^4 = 1/256 = 0,0039$ имеем $x_2 = 129x_1 - 128$, а x_1 находится в результате решения квадратного уравнения $33540x_1^2 - 66820x_1 + 33279,996 = 0$. Отсюда получаем $x_{1,1} = 1,0000$; $x_{1,2} = 1,0019$; $x_{2,1} = 0,99223$; $x_{2,2} = -0,00198$.

Первая пара корней не лежит в допустимой области; поэтому $\hat{x}_1(0,0039) = 0,99223$; $\hat{x}_2(0,0039) = -0,00198$.

4⁴. Проверим условие окончания поиска, для чего вычислим величину штрафной добавки: $|P(\hat{x}(r^4), r^4)| = 0,0077$; так как $|P(\hat{x}(r^4), r^4)| = 0,007 < \varepsilon = 0,01$, процесс поиска закончить: $x^* = \hat{x}(r^4) = (0,9922; -0,002)^T$, $I(x^*) = 0,9845$.

Численные результаты расчета последовательных приближений приведены в табл. 5.5.

5.5. Результат решения задачи безусловной оптимизации комбинированным методом штрафных функций

k	r^k	$\hat{x}_1(r^k)$	$\hat{x}_2(r^k)$	$I(x, r^k)$	$P(\hat{x}(r^k), r^k)$
0	1	0,1722	-0,2416	0,088	-0,3846
1	1/4	0,6378	-0,0866	0,4143	0,1697
2	1/16	0,8858	-0,0274	0,7854	0,0960
3	1/64	0,9595	-0,0078	0,9399	0,0293
4	1/256	0,9922	-0,0023	0,9845	0,0077

Таким образом, мы получили решение задачи на условный минимум комбинированным методом штрафных функций:

$$x^* = \hat{x}^4 = (0,9922; -0,0023)^T, I(x^*) = I(\hat{x}^6) = 0,9845. \blacksquare$$

Пример 5.6. Решить задачу на условный минимум:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x) = \min_{x \in X} (x_1 + x_2),$$

где $X = \{x | g_1(x) = x_1^2 - x_2 = 0; g_2(x) = -x_1 \leq 0\}$.

1. Получим аналитическое решение сформулированной задачи; положим $k = 0, r^0 = 1, C = 4, \varepsilon = 0,01$.

2⁰. Составим смешанную вспомогательную функцию:

$$F(x, r^k) = x_1 + x_2 + \underbrace{\frac{1}{2r^k} (x_1^2 - x_2)^2 - r^k \ln x_1}_{P(x, r^k)}$$

3⁰. Найдем безусловный минимум функции $F(x, r^k)$ с использованием необходимых условий экстремума первого порядка:

$$\frac{\partial F(x, r^k)}{\partial x_1} = 1 + \frac{2x_1(x_1^2 - x_2)}{r^k} - \frac{r^k}{x_1} = 0,$$

$$\frac{\partial F(x, r^k)}{\partial x_2} = 1 - \frac{(x_1^2 - x_2)}{r^k} = 0.$$

Решая систему алгебраических уравнений, получим:

$$x_2 = x_1^2 - r^k, 2x_1^2 + x_1 - r^k = 0, x_1 = \frac{-1 \pm \sqrt{1+8r^k}}{4}.$$

При $r^0 = 1$ получаем $x_{1,1} = -1, x_{1,2} = \frac{1}{2}$; первый корень $x_{1,1}$ не лежит в допустимой области. Поэтому $\hat{x}_1(1) = x_{1,2} = \frac{1}{2}$; $\hat{x}_2(1) = -\frac{3}{4}$.

4⁰. Проверим условие окончания поиска, для чего вычислим величину штрафной добавки: $|P(x, r^0)| = 1,1931$; так как $|P(\hat{x}(r^0), r^0)| = 1,1931 > \varepsilon = 0,01$, положим $r^1 = 1/4, k := 0 + 1 = 1$ и перейти к шагу 2.

2¹. Составим смешанную вспомогательную функцию:

$$F(x, r^k) = x_1 + x_2 + \underbrace{\frac{1}{2r^k}(x_1^2 - x_2)^2 - r^k \ln x_1}_{P(x, r^k)}.$$

3¹. Найдем безусловный минимум функции $F(x, r^k)$ с использованием необходимых условий экстремума первого порядка.

При $r^1 = 1/4$ получаем $x_{1,1} = 0,183, x_{1,2} = -0,683$; второй корень $x_{1,2}$ не лежит в допустимой области. Поэтому $\hat{x}_1\left(\frac{1}{4}\right) = x_{1,1} = 0,183$; $\hat{x}_2\left(\frac{1}{4}\right) = -0,2165$.

4¹. Проверим условие окончания поиска, для чего вычислим величину штрафной добавки: $|P(x, r^1)| = 0,5496$; так как $|P(\hat{x}(r^1), r^1)| = 0,5496 > \varepsilon = 0,01$, положим $r^2 = 1/16, k := 1 + 1 = 2$ и перейти к шагу 2.

2². Составим смешанную вспомогательную функцию:

$$F(x, r^k) = x_1 + x_2 + \underbrace{\frac{1}{2r^k}(x_1^2 - x_2)^2 - r^k \ln x_1}_{P(x, r^k)}.$$

3². Найдем безусловный минимум функции $F(x, r^k)$ с использованием необходимых условий экстремума первого порядка.

При $r^2 = \frac{1}{16}$ получаем $x_{1,1} = 0,0562$, $x_{1,2} = -0,5562$; второй корень $x_{1,2}$ не лежит в допустимой области. Поэтому $\hat{x}_1\left(\frac{1}{16}\right) = x_{1,1} = 0,0562$; $\hat{x}_2\left(\frac{1}{16}\right) = -0,0593$.

4². Проверим условие окончания поиска, для чего вычислим величину штрафной добавки: $|P(x, r^2)| = 0,2112$; так как $|P(\hat{x}(r^2), r^2)| = 0,2112 > \varepsilon = 0,01$, положим $r^3 = 1/64$, $k := 2 + 1 = 3$ и перейти к шагу 2.

2³. Составим смешанную вспомогательную функцию:

$$F(x, r^k) = x_1 + x_2 + \underbrace{\frac{1}{2r^k}(x_1^2 - x_2)^2 - r^k \ln x_1}_{P(x, r^k)}.$$

3³. Найдем безусловный минимум функции $F(x, r^k)$ с использованием необходимых условий экстремума первого порядка.

При $r^3 = \frac{1}{64}$ получаем $x_{1,1} = 0,0152$, $x_{1,2} = -0,5152$; второй корень $x_{1,2}$ не лежит в допустимой области. Поэтому $\hat{x}_1\left(\frac{1}{64}\right) = x_{1,1} = 0,0152$; $\hat{x}_2\left(\frac{1}{64}\right) = -0,0154$.

4³. Проверим условие окончания поиска, для чего вычислим величину штрафной добавки: $|P(x, r^3)| = 0,0733$; так как $|P(\hat{x}(r^3), r^3)| = 0,0733 > \varepsilon = 0,01$, положим $r^4 = 1/256$, $k := 3 + 1 = 4$ и перейти к шагу 2.

2⁴. Составим смешанную вспомогательную функцию:

$$F(x, r^k) = x_1 + x_2 + \underbrace{\frac{1}{2r^k}(x_1^2 - x_2)^2 - r^k \ln x_1}_{P(x, r^k)}.$$

3⁴. Найдем безусловный минимум функции $F(x, r^k)$ с использованием необходимых условий экстремума первого порядка.

При $r^4 = \frac{1}{256}$ получаем $x_{1,1} = 0,0039$, $x_{1,2} = -0,5039$; второй корень $x_{1,2}$ не лежит в допустимой области. Поэтому $\hat{x}_1\left(\frac{1}{256}\right) = x_{1,1} = 0,0039$; $\hat{x}_2\left(\frac{1}{256}\right) = -0,0039$.

4⁴. Проверим условие окончания поиска, для чего вычислим величину штрафной добавки: $|P(x, r^4)| = 0,0236$; так как $|P(\hat{x}(r^4), r^4)| = 0,0236 > \varepsilon = 0,01$, положим $r^5 = 1/1024$, $k := 4 + 1 = 5$ и перейти к шагу 2.

2⁵. Составим смешанную вспомогательную функцию:

$$F(x, r^k) = x_1 + x_2 + \underbrace{\frac{1}{2r^k}(x_1^2 - x_2)^2 - r^k \ln x_1}_{P(x, r^k)}$$

3⁵. Найдем безусловный минимум функции $F(x, r^k)$ с использованием необходимых условий экстремума первого порядка.

При $r^5 = \frac{1}{1024}$ получаем $x_{1,1} = 0,001$, $x_{1,2} = -0,501$; второй корень $x_{1,2}$ не лежит в допустимой области. Поэтому $\hat{x}_1\left(\frac{1}{1024}\right) = x_{1,1} = 0,001$; $\hat{x}_2\left(\frac{1}{1024}\right) = -0,001$.

4⁵. Проверим условие окончания поиска, для чего вычислим величину штрафной добавки: $|P(x, r^5)| = 0,0073$; так как $|P(\hat{x}(r^5), r^5)| = 0,0073 < \varepsilon = 0,01$, то процесс поиска закончить:

$$x^* = \hat{x}(r^5) = (0,001; -0,001)^T, I(x^*) = 0,002.$$

Численные результаты расчета последовательных приближений приведены в табл. 5.6.

5.6. Результат решения задачи безусловной оптимизации комбинированным методом штрафных функций

k	r^k	$\hat{x}_1(r^k)$	$\hat{x}_2(r^k)$	$I(x, r^k)$	$P(\hat{x}(r^k), r^k)$
0	1	0,5	-0,75	1,25	1,1931
1	1/4	0,1830	-0,2165	0,3995	0,5496
2	1/16	0,0562	-0,0593	0,1155	0,2112
3	1/64	0,0152	-0,0154	0,0306	0,0733
4	1/256	0,0039	-0,0039	0,0078	0,0236
5	1/1024	0,001	-0,001	0,002	0,0073

Таким образом, мы получили решение задачи на условный минимум комбинированным методом штрафных функций:

$$x^* = \hat{x}^5 = (0,001; -0,001)^T, I(x^*) = I(\hat{x}^5) = 0,002. \blacksquare$$

5.2.4. Метод множителей Лагранжа

Постановка задачи:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x),$$

где $X = \{x \mid g_j(x) = 0, j = \overline{1, m}, m < n; g_j(x) \leq 0, j = \overline{m+1, p}\}$.

Стратегия поиска.

Стратегия аналогична используемой в методе внешних штрафов, только штрафная функция добавляется не к целевой функции, а к классической функции Лагранжа; в результате задача на условный минимум сводится к решению последовательности задач поиска безусловного минимума модифицированной функции Лагранжа:

$$L(x, \lambda^k, \mu^k, r^k) = I(x) + \sum_{j=1}^m \lambda_j^k g_j(x) + \frac{r^k}{2} \sum_{j=1}^m [g_j(x)]^2 + \\ + \frac{1}{2r^k} \sum_{j=m+1}^p \{[\max\{0; \mu_j^k + r^k g_j(x)\}]^2 - (\mu_j^k)^2\},$$

где $\lambda^k = (\lambda_1^k, \lambda_2^k, \dots, \lambda_m^k)^T$, $\mu^k = ((\mu_1^k, \mu_2^k, \dots, \mu_m^k)^T)$ – векторы множителей; r^k – параметр штрафа; k – номер итерации.

Задается начальная т. x^0 для решения задачи $\min_{x \in X} L(x, \lambda^k, \mu^k, r^k)$ при заданных λ^k, μ^k, r^k на каждой итерации. Полученная т. $x^*(\lambda^k, \mu^k, r^k)$ используется в качестве начальной на следующей итерации, выполняемой при возрастающем значении параметра штрафа r^{k+1} и пересчитанных по определенным формулам множителей λ^{k+1}, μ^{k+1} .

Алгоритм.

Шаг 1. Положить $k = 0$; задать начальную т. x^0 ; начальное значение параметра штрафа $r^0 > 0$; число $C > 1$ для увеличения параметра штрафа; началь-

ные значения множителей λ^0, μ^0 ; малое число $\varepsilon > 0$ для остановки алгоритма.

Шаг 2. Составить модифицированную функцию Лагранжа:

$$L(x, \lambda^k, \mu^k, r^k) = I(x) + \sum_{j=1}^m \lambda_j^k g_j(x) + \underbrace{\frac{r^k}{2} \sum_{j=1}^m [g_j(x)]^2}_{P(x, \mu^k, r^k)} + \underbrace{\frac{1}{2r^k} \sum_{j=m+1}^p \{[\max\{0; \mu_j^k + r^k g_j(x)\}]^2 - (\mu_j^k)^2\}}_{P(x, \mu^k, r^k)}.$$

Шаг 3. Найти т. $\hat{x}(\lambda^k, \mu^k, r^k)$ безусловного минимума функции Лагранжа по x с помощью одного из эффективных и надежных методов (нулевого или первого порядка) поиска безусловного минимума из пакета прикладных программ MATLAB (при этом задать все требуемые выбранным методом параметры, а в качестве начальной точки взять x^k):

$$L(\hat{x}, \lambda^k, \mu^k, r^k) = \min_{x \in R^n} L(x, \lambda^k, \mu^k, r^k).$$

Шаг 4. Вычислить

$$P(\hat{x}(\lambda^k, \mu^k, r^k), \mu^k, r^k) = \frac{r^k}{2} \sum_{j=1}^m [g_j(x)]^2 + \frac{1}{2r^k} \sum_{j=m+1}^p \{[\max\{0; \mu_j^k + r^k g_j(x)\}]^2 - (\mu_j^k)^2\}$$

и проверить выполнение условия окончания поиска:

а) если $|P(x^*(\lambda^k, \mu^k, r^k), \mu^k, r^k)| \leq \varepsilon$, поиск решения задачи закончить: $x^* = \hat{x}(\lambda^k, \mu^k, r^k)$, $I(x^*) = I(\hat{x}(\lambda^k, \mu^k, r^k))$;

б) если $|P(\hat{x}(\lambda^k, \mu^k, r^k), \mu^k, r^k)| > \varepsilon$, положить: $r^{k+1} = C \cdot r^k$; $\lambda_j^{k+1} = \lambda_j^k + r^k g_j(\hat{x}(\lambda^k, \mu^k, r^k))$, $j = \overline{1, m}$ (пересчет множителей для ограничений-равенств); $\mu_j^{k+1} = \max\{0, \mu_j^k + r^k g_j(x^*(\lambda^k, \mu^k, r^k))\}$, $j = \overline{m+1, p}$ (пересчет множителей для ограничений-неравенств); $k := k + 1$ и перейти к шагу 2.

Замечания.

1. Обычно выбирают $r^0 = 0,1; 1$, $C \in [4,10]$; иногда выбирают $\lambda^0 = \mu^0 = 0$, в этом случае первая вспомогательная задача минимизации совпадает с первой вспомогательной задачей, решаемой в методе внешних штрафов.

2. Для достижения сходимости не следует устремлять r^k к бесконечности. Доказано, что минимум модифицированной функции Лагранжа, начиная с некоторого r^k , совпадает с минимумом в исходной задаче; поэтому методом множителей удастся найти условный минимум за меньшее число итераций, чем методом внешних штрафов.

Пример 5.7. Решить задачу на условный минимум:

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x) = \min_{x \in X} (x_1^2 + x_2^2),$$

где $X = \{x \mid g_1(x) = x_1 - 1 = 0; g_2(x) = x_1 + x_2 - 2 \leq 0\}$.

1. Получим аналитическое решение сформулированной задачи; положим $k = 0, r^0 = 1, r^1 = 2, C = 10, \varepsilon = 0,001$.

2⁰. Составим модифицированную функцию Лагранжа:

$$L(x, \lambda^k, \mu^k, r^k) = x_1^2 + x_2^2 + \lambda^k(x_1 - 1) + \frac{r^k}{2}(x_1 - 1)^2 + \\ + \frac{1}{2r^k} \{[\max\{0; \mu^k + r^k(x_1 + x_2 - 2)\}]^2 - (\mu^k)^2\}.$$

3⁰. Найдем т. $\hat{x}(\lambda^k, \mu^k, r^k)$ безусловного минимума функции Лагранжа по x с помощью одного из эффективных и надежных методов (нулевого или первого порядка) поиска безусловного минимума из пакета прикладных программ MATLAB:

$$L(\hat{x}, \lambda^k, \mu^k, r^k) = \min_{x \in R^n} L(x, \lambda^k, \mu^k, r^k).$$

Поскольку модифицированная функция Лагранжа $L(x, \lambda^k, \mu^k, r^k)$ задана аналитически, то минимум этой функции будем находить с использованием необходимых и достаточных условий экстремума (минимума) функции многих переменных:

$$\frac{\partial L(\hat{x}, \lambda^k, \mu^k, r^k)}{\partial x_1} = 0 = \begin{cases} 2x_1 + \lambda^k + r^k(x_1 - 1), \mu^k + r^k(x_1 + x_2 - 2) < 0, \\ 2x_1 + \lambda^k + r^k(x_1 - 1) + \mu^k + r^k(x_1 + x_2 - 2), \\ \mu^k + r^k(x_1 + x_2 - 2) > 0, \end{cases}$$

$$\frac{\partial L(\hat{x}, \lambda^k, \mu^k, r^k)}{\partial x_2} = 0 = \begin{cases} 2x_2, \mu^k + r^k(x_1 + x_2 - 2) < 0, \\ 2x_2 + \mu^k + r^k(x_1 + x_2 - 2), \mu^k + r^k(x_1 + x_2 - 2) > 0. \end{cases}$$

Рассмотрим два случая:

1) пусть $\mu^k + r^k(x_1 + x_2 - 2) < 0$; тогда $\hat{x}_2 = 0$, $\hat{x}_1(\lambda^k, r^k) = \frac{r^k - \lambda^k}{2 + r^k}$;

2) пусть $\mu^k + r^k(x_1 + x_2 - 2) > 0$; тогда

$$\hat{x}_1(\lambda^k, \mu^k, r^k) = \frac{2r^k - 2\mu^k - 2\lambda^k - r^k\lambda^k + (r^k)^2}{4 + 6r^k + (r^k)^2},$$

$$\hat{x}_2(\lambda^k, \mu^k, r^k) = \frac{\hat{x}_1(\lambda^k, \mu^k, r^k)(2 + r^k) + \lambda^k - r^k}{2}.$$

Положим $\lambda^0 = 0$, $\mu^0 = 1$, $r^0 = 1$.

По формуле для первого случая $\hat{x}_1(\lambda^k, r^k) = \frac{r^k - \lambda^k}{2 + r^k}$ получим: $\hat{x}_1(\lambda^0, r^0) = \frac{1 - 0}{2 + 1} = \frac{1}{3} = 0,3333$, $\hat{x}_2 = 0$; при этом условие $\mu^0 + r^0(\hat{x}_1(\lambda^0, r^0) + \hat{x}_2(\lambda^0, r^0) - 2) = 1 + 1(-1,667) = -0,667 < 0$ выполняется.

По формулам для второго случая получим:

$$\hat{x}_1(\lambda^0, \mu^0, r^0) = \frac{2 - 2 - 0 - 0 + 1}{4 + 6 + 1} = \frac{1}{11} = 0,0909;$$

$$\hat{x}_2(\lambda^0, \mu^0, r^0) = \frac{\frac{1}{11} - 3 + 0 - 1}{2} = -0,3636;$$

при этом

$$\begin{aligned} \mu^0 + r^0(\hat{x}_1(\lambda^0, \mu^0, r^0) + \hat{x}_2(\lambda^0, \mu^0, r^0) - 2) &= 1 + 1(-2,27) = \\ &= -1,27 < 0, \end{aligned}$$

что противоречит условию $\mu^k + r^k(x_1 + x_2 - 2) > 0$ для второго случая.

4⁰. Вычислим $P(\hat{x}(\lambda^0, \mu^0, r^0), \mu^0, r^0) =$

$$\begin{aligned} &= \frac{r^0}{2} (\hat{x}_1 - 1)^2 + \frac{1}{2r^0} \{[\max\{0; \mu^0 + r^0(\hat{x}_1 + \hat{x}_2 - 2)\}]^2 - (\mu^0)^2\} = \\ &= \frac{1}{2} (0,3333 - 1)^2 + \frac{1}{2} \{[\max\{0; 1 + 1(0,3333 + 0 - 2)\}]^2 - (1)^2\} = \\ &= 0,2222 + \frac{1}{2} \{0 - (1)^2\} = 0,2222 - 0,5 = -0,2778. \end{aligned}$$

Так как $|P(\hat{x}(\lambda^0, \mu^0, r^0), \mu^0, r^0)| = 0,2778 > \varepsilon = 0,001$, положим $r^1 = 2$;

выполним пересчет множителей

$$\lambda^1 = \lambda^0 + r^0 g_1(\hat{x}_1(\lambda^0, \mu^0, r^0)) = 0 + 1(0,3333 - 1) = -0,6667$$

$$\text{и } \mu^1 = \max\{0, \mu^0 + r^0 g_2(x^*(\lambda^0, \mu^0, r^0))\} = \max\{0, \mu^0 + r^0[\hat{x}_1(\lambda^0, \mu^0, r^0) + \hat{x}_2(\lambda^0, \mu^0, r^0) - 2]\} = \max\{0; -0,6667\} = 0, k := k + 1 = 0 + 1 = 1$$

и перейдем к шагу 2.

2¹. Составим модифицированную функцию Лагранжа:

$$\begin{aligned} L(x, \lambda^1, \mu^1, r^1) &= x_1^2 + x_2^2 + (\lambda^1 = -0,6667)(x_1 - 1) + \frac{(r^1 = 2)}{2}(x_1 - 1)^2 + \\ &+ \frac{1}{2 \cdot (r^1 = 2)} \{[\max\{0; (\mu^1 = 0) + (r^1 = 2)(x_1 + x_2 - 2)\}]^2 - (\mu^1 = 0)^2\} = \\ &= x_1^2 + x_2^2 + (-0,6667)(x_1 - 1) + 1 \cdot (x_1 - 1)^2 + \\ &+ \frac{1}{4} \{[\max\{0; 0 + 2(x_1 + x_2 - 2)\}]^2 - 0\}. \end{aligned}$$

3¹. Найдем т. $\hat{x}(\lambda^1, \mu^1, r^1)$ безусловного минимума функции Лагранжа

$$L(x, \lambda^1, \mu^1, r^1) \text{ по } x: \text{ по формуле } \hat{x}_1(\lambda^1, r^1) = \frac{r^1 - \lambda^1}{2 + r^1} = \frac{2 - (-0,6667)}{2 + 2} = 0,6667 \text{ получим: } \hat{x}_1(\lambda^1, r^1) = 0,6667; \hat{x}_2 = 0.$$

4¹. Вычислим $P(\hat{x}(\lambda^1, \mu^1, r^1), \mu^1, r^1) =$

$$\begin{aligned} &= \frac{r^1}{2} (\hat{x}_1 - 1)^2 + \frac{1}{2r^1} \{[\max\{0; \mu^1 + r^1(\hat{x}_1 + \hat{x}_2 - 2)\}]^2 - (\mu^1)^2\} = \\ &= 1 \cdot (0,6667 - 1)^2 + \frac{1}{2r^1} \{[\max\{0; 0 + 2(0,6667 + 0 - 2)\}]^2 - 0\} = 0,1111. \end{aligned}$$

Так как $|P(\hat{x}(\lambda^1, \mu^1, r^1), \mu^1, r^1)| = 0,1111 > \varepsilon = 0,001$, положим $r^2 = 10$; выполним пересчет множителей

$$\lambda^2 = \lambda^1 + r^1 g_1(\hat{x}_1(\lambda^2, \mu^2, r^2)) = -0,6667 + 2(0,6667 - 1) = -1,3333$$

и $\mu^2 = \max\{0, \mu^1 + r^1 g_2(x^*(\lambda^1, \mu^1, r^1))\} = \max\{0, \mu^1 + r^1[\hat{x}_1(\lambda^1, \mu^1, r^1) + \hat{x}_2(\lambda^1, \mu^1, r^1) - 2]\} = \max\{0; -0,6667\} = 0, k := k + 1 = 1 + 1 = 2$ и перейдем к шагу 2.

2². Составим модифицированную функцию Лагранжа:

$$\begin{aligned} L(x, \lambda^2, \mu^2, r^2) &= x_1^2 + x_2^2 + (\lambda^2 = -1,3333)(x_1 - 1) + \frac{(r^2 = 10)}{2}(x_1 - 1)^2 + \\ &+ \frac{1}{2 \cdot (r^2 = 10)} \{[\max\{0; (\mu^2 = 0) + (r^2 = 10)(x_1 + x_2 - 2)\}]^2 - (\mu^2 = 0)^2\} = \\ &= x_1^2 + x_2^2 + (-1,3333)(x_1 - 1) + 10 \cdot (x_1 - 1)^2 + \\ &+ \frac{1}{4} \{[\max\{0; 0 + 2(x_1 + x_2 - 2)\}]^2 - 0\}. \end{aligned}$$

3². Найдем т. $\hat{x}(\lambda^2, \mu^2, r^2)$ безусловного минимума функции Лагранжа $L(x, \lambda^2, \mu^2, r^2)$ по x : по формуле $\hat{x}_1(\lambda^2, r^2) = \frac{r^2 - \lambda^2}{2 + r^2} = \frac{10 - (-1,3333)}{2 + 10} = 0,9444$ получим: $\hat{x}_1(\lambda^2, r^2) = 0,9444$; $\hat{x}_2 = 0$.

$$\begin{aligned} 4^2. \text{ Вычислим } P(\hat{x}(\lambda^2, \mu^2, r^2), \mu^2, r^2) &= \\ &= \frac{r^2}{2} (\hat{x}_1 - 1)^2 + \frac{1}{2r^2} \{[\max\{0; \mu^2 + r^2(\hat{x}_1 + \hat{x}_2 - 2)\}]^2 - (\mu^2)^2\} = \\ &= 5 \cdot (0,9444 - 1)^2 + \frac{1}{2 \cdot 10} \{[\max\{0; 0 + 10(0,9444 + 0 - 2)\}]^2 - 0\} = 0,0154. \end{aligned}$$

Так как $|P(\hat{x}(\lambda^2, \mu^2, r^2), \mu^2, r^2)| = 0,0154 > \varepsilon = 0,001$, положим $r^3 = 100$; выполним пересчет множителей

$$\begin{aligned} \lambda^3 &= \lambda^2 + r^2 g_1(\hat{x}_1(\lambda^2, \mu^2, r^2)) = \\ &= -1,3333 + 10 \cdot (0,9444 - 1) = -1,8889 \end{aligned}$$

$$\text{и } \mu^3 = \max\{0, \mu^2 + r^2 g_2(x^*(\lambda^2, \mu^2, r^2))\} = \max\{0, \mu^2 + r^2[\hat{x}_1(\lambda^2, \mu^2, r^2) + \hat{x}_2(\lambda^2, \mu^2, r^2) - 2]\} = \max\{0; -0,6667\} = 0, k := k + 1 = 2 + 1 = 3$$

и перейдем к шагу 2.

2³. Составим модифицированную функцию Лагранжа:

$$\begin{aligned} L(x, \lambda^3, \mu^3, r^3) &= x_1^2 + x_2^2 + (\lambda^3 = -1,3393)(x_1 - 1) + \frac{(r^3 = 100)}{2} (x_1 - 1)^2 + \\ &+ \frac{1}{2 \cdot (r^3 = 100)} \{[\max\{0; (\mu^3 = 0) + (r^3 = 100)(x_1 + x_2 - 2)\}]^2 - (\mu^3 = 0)^2\} = \\ &= x_1^2 + x_2^2 + (-1,3393)(x_1 - 1) + 50 \cdot (x_1 - 1)^2 + \\ &+ \frac{1}{200} \{[\max\{0; 0 + 100(x_1 + x_2 - 2)\}]^2 - 0\}. \end{aligned}$$

3³. Найдем т. $\hat{x}(\lambda^3, \mu^3, r^3)$ безусловного минимума функции Лагранжа $L(x, \lambda^3, \mu^3, r^3)$ по x : по формуле $\hat{x}_1(\lambda^3, r^3) = \frac{r^3 - \lambda^3}{2 + r^3} = \frac{100 - (-1,8889)}{2 + 100} = 0,9989$ получим: $\hat{x}_1(\lambda^3, r^3) = 0,9989$; $\hat{x}_2 = 0$.

$$\begin{aligned} 4^3. \text{ Вычислим } P(\hat{x}(\lambda^3, \mu^3, r^3), \mu^3, r^3) &= \frac{r^3}{2} (\hat{x}_1 - 1)^2 + \\ &+ \frac{1}{2r^3} \{[\max\{0; \mu^3 + r^3(\hat{x}_1 + \hat{x}_2 - 2)\}]^2 - (\mu^3)^2\} = 50 \cdot (0,9989 - 1)^2 + \\ &+ \frac{1}{2 \cdot 100} \{[\max\{0; 0 + 100(0,9989 + 0 - 2)\}]^2 - 0\} = 5,93 \cdot 10^{-5}. \end{aligned}$$

Так как $|P(\hat{x}(\lambda^3, \mu^3, r^3), \mu^3, r^3)| = 5,93 \cdot 10^{-5} < \varepsilon = 0,001$, поиск решения задачи закончить:

$$x^* = \hat{x}(\lambda^3, \mu^3, r^3) = (0,9989; 0)^T; I(x^*) = I(\hat{x}(\lambda^3, \mu^3, r^3)) = 0,9978.$$

Численные результаты расчета последовательных приближений приведены в табл. 5.7.

5.7. Результат решения задачи безусловной оптимизации методом множителей

k	r^k	λ^k	μ^k	\hat{x}_1 (λ^k, μ^k, r^k)	\hat{x}_2 (λ^k, μ^k, r^k)	$I(\hat{x}, r^k)$	$P(\hat{x}(\lambda^k, \mu^k, r^k), \mu^2, r^2)$
0	1	0	1	0,3333	0	0,1111	-0,2777
1	2	-0,6667	0	0,6667	0	0,4445	0,1111
2	10	-1,3333	0	0,9444	0	0,892	0,0154
3	100	-1,3393	0	0,9989	0	0,9978	$5,93 \cdot 10^{-5}$

Таким образом, мы получили решение задачи на условный минимум методом множителей:

$$x^* = \hat{x}^3 = (0,9989; 0)^T, I(x^*) = I(\hat{x}^3) = 0,9978. \blacksquare$$

6. ПОСТАНОВКА И МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

В данном разделе рассматриваются основные подходы к постановке и решению задач оптимизации при проектировании биотехнологических процессов и систем в условиях неопределенности, позволяющие найти оптимальные режимы функционирования и оптимальные конструкции биотехнологического оборудования, гарантирующие сохранение работоспособности производства, несмотря на возможные случайные изменения неопределенных факторов в процессе эксплуатации производства. При постановке задач оптимизации при проектировании биотехнологических систем в условиях неопределенности будем учитывать следующие факторы.

Предположим при проектировании, что в процессе эксплуатации производства невозможно получить более достоверную информацию относительно неопределенных параметров и тем самым повысить точность математических моделей биотехнологических процессов и систем (уравнений кинетики биохимических реакций, материального и теплового балансов), т.е. будем рассматривать одноэтапные задачи оптимизации.

Ограничения в задаче оптимизации могут быть жесткими и «мягкими» (вероятностными): жесткие ограничения должны безусловно выполняться для всех возможных состояний биотехнологических процессов и систем при эксплуатации производства; «мягкие» ограничения должны выполняться либо в среднем, либо с заданной вероятностью.

6.1. ОСНОВНЫЕ ПОДХОДЫ К ПОСТАНОВКЕ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

При проектировании биотехнологических систем должны быть удовлетворены требования технического задания на проектирование (проектные ограничения). Охарактеризуем эти требования.

Ограничения, связанные с безопасностью биотехнологического производства: например, температура в биологическом реакторе должна быть меньше некоторой заданной величины, иначе микроорганизмы могут быть повреждены; концентрации некоторых веществ могут быть ограничены исходя из условий оптимального осуществления биотехнологического процесса.

Экологические ограничения: биотехнологическая система не должна наносить вред окружающей среде; в связи с этим требуется наложить ограничения на максимальную величину концентраций вредных веществ в выходных потоках биотехнологических систем.

Ограничения на производительность: производительность биотехнологической системы должна быть не ниже заданной.

Удовлетворение проектных ограничений усложняется наличием некоторой неопределенности (неточности) в математических моделях (уравнениях кинетики биохимических реакций, материального и теплового балансов), используемых в технологических расчетах при проектировании биотехнологических систем.

Обычно неполнота наших знаний о биотехнологическом процессе сводится к тому, что некоторые параметры в математических моделях при проектировании мы знаем недостоверно (неточно); о них только известно, что они принадлежат некоторой области Ξ неопределенности. Различают внутренние и внешние неопределенные параметры. Внутренние параметры характеризуют переменные состояния биотехнологической системы; это могут быть константы

скорости биохимической реакции, коэффициенты массо- и теплопередачи, диффузии веществ и т.д. Внешние параметры – переменные состояния внешней среды по отношению к биотехнологической системе; это могут быть, например, переменные состояния входных потоков (температура, объемная скорость, концентрации веществ).

Таким образом, при проектировании биотехнологических систем, как правило, используются неточные математические модели, включающие неопределенные внутренние и внешние факторы, характеризующие переменные состояния биотехнологической системы и внешней среды, и поэтому возникает проблема создания (проектирования) работоспособных (гибких) биотехнологических процессов и систем. На стадии проектирования биотехнологических процессов и систем, как правило, используются статические математические модели, и в этом случае задача оптимизации при проектировании биотехнологической системы формулируется как задача статической оптимизации:

$$\hat{I}(d^*, u^*, y, \xi) = \min_{d, u} \hat{I}(d, u, y, \xi);$$

$$\varphi(d, u, y, \xi) = 0;$$

$$\hat{g}_j(d, u, y, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m,$$

где $\hat{I}(\cdot)$ – целевая функция; d – вектор конструктивных переменных биотехнологической системы (геометрические размеры технологического оборудования); u – режимные (управляющие) переменные биотехнологической системы; y – переменные состояния биотехнологической системы; ξ – вектор неопределенных параметров биотехнологической системы.

Так как размерность вектора y равна размерности вектора φ (уравнений материального и теплового балансов биотехнологической системы), то для фиксированных (известных) d, u и ξ можем рассматривать выражение $\varphi(d, u, y, \xi) = 0$ как систему нелинейных уравнений для определения y ; следовательно, y есть неявная функция переменных d, u и ξ , т.е. $y = y(d, u, \xi)$. Явный

вид функций $y = y(d, u, \xi)$, как правило, неизвестен, поэтому для каждой совокупности d, u и ξ переменные y находятся численным решением системы нелинейных уравнений (фактически это расчет уравнений материального и теплового баланса биотехнологической системы). Подставив $y = y(d, u, \xi)$ в выражения для $\hat{I}(d, u, y, \xi)$ и ограничения $\hat{g}_j(d, u, \xi)$, исключим переменные y из выражений для целевой функции и ограничений типа неравенств; в результате получим оптимизационную задачу вида:

$$I(d^*, u^*, \xi) = \min_{d, u} I(d, u, \xi), \quad (6.1)$$

$$g_j(d, u, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m, \quad (6.2)$$

где $I(d, u, \xi) \equiv \hat{I}(d, u, y(d, u, \xi), \xi)$,

$g_j(d, u, \xi) \equiv \hat{g}_j(d, u, y(d, u, \xi), \xi)$; $\varphi(d, u, y(d, u, \xi), \xi) = 0$.

Область в пространстве d, u , в которой выполняются ограничения (6.2), называется допустимой областью задачи оптимизации биотехнологической системы. Оптимальные режимы u^* , найденные решением задачи (6.1), (6.2), реализуются с помощью системы автоматической стабилизации; переменные состояния $y(d, u, \xi)$ определяются решением системы нелинейных алгебраических уравнений $\varphi(d, u, y, \xi) = 0$ при фиксированных значениях d, u и ξ . На практике область неопределенности Ξ задается в виде многомерного прямоугольника:

$$\Xi = \{\xi: \xi^- \leq \xi \leq \xi^+\},$$

где ξ^-, ξ^+ — значения нижних и верхних границ компонент вектора ξ .

Сформулированная задача (6.1), (6.2) не определена, поскольку значения параметров ξ неизвестны. В связи с этим традиционная процедура проектирования биотехнологической системы включает задание некоторых средних (номинальных) значений $\xi = \xi^N$, с использованием которых может быть решена задача (6.1), (6.2) и определяется вектор d^N . Поскольку при этом нельзя гарантировать выполнение ограничений для всех $\xi \in \Xi$, далее на основе рекомендаций специалистов вводятся коэффициенты η_i запаса технического ресурса биотехнологической системы:

$$\eta_i = \frac{\hat{d}_i - d_i^N}{d_i^N},$$

на основании которых рассчитываются эмпирические значения конструктивных переменных \hat{d}_i биотехнологической системы. Эмпирические конструктивные размеры технологического оборудования часто бывают завышенными, что приводит к существенному удорожанию конструкции проектируемой биотехнологической системы.

В связи с этим требуется сформулировать задачу оптимального проектирования биотехнологической системы с учетом неопределенности исходных данных для проектирования, решение которой позволит обеспечить научно обоснованный подход к определению запаса технического ресурса создаваемой конструкции биотехнологической системы, обеспечивающий ее работоспособность (гибкость) в условиях неопределенности.

Рассмотрим известный пример биотехнологической системы, состоящей из биореактора и теплообменника с рециклом (рис. 6.1), приведенный в книге [9]. На технологической схеме не показан побудитель расхода (насос, компрессор), обеспечивающий рецикл в биотехнологической системе.

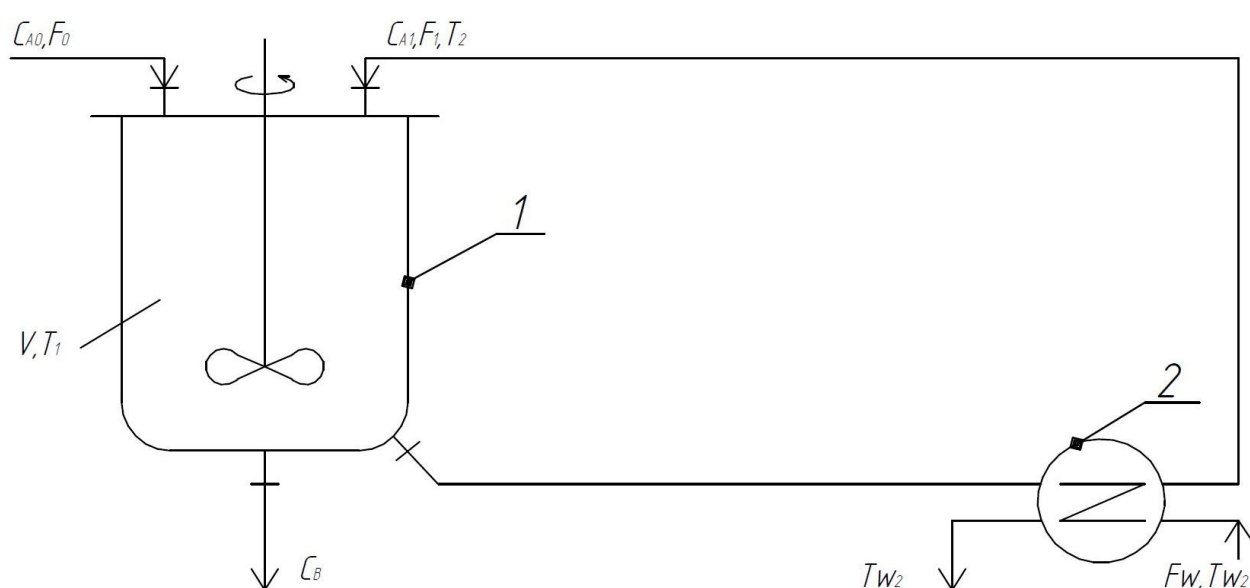


Рис. 6.1. Биотехнологическая система, состоящая из биореактора (1) и теплообменника (2)

В биореакторе объемом V протекает экзотермическая биохимическая реакция первая порядка $A \xrightarrow{k_1} B$. Рецикл с расходом F_1 используется для поддержания температуры T_1 в биореакторе 1; противоточный теплообменник 2 служит для охлаждения рециклического потока F_1 до температуры T_2 холодной водой

с объемным расходом F_w . Запишем уравнения материального и теплового балансов для биореактора 1:

$$\left(\frac{c_{A_0}-c_{A_1}}{c_{A_0}}\right)F_0 = \frac{k_1 \exp\left(-\frac{E}{RT_1}\right)c_{A_1}V}{c_{A_0}} = \hat{k}_1 \exp\left(-\frac{E}{RT_1}\right)c_{A_1}V;$$

$$\left(\frac{c_{A_0}-c_{A_1}}{c_{A_0}}\right)F_0(-\Delta\hat{H}) = F_0c_p\rho(T_1 - T_0) + Q_{\text{ТП}};$$

где $\hat{k}_1 = k_1/c_{A_0}$, $\Delta\hat{H} = c_{A_0}\Delta H$, $(-\Delta H)$ – теплота реакции, кДж/кмоль; $Q_{\text{ТП}}$ – количество тепла, отбираемого от реакционной массы рециклическому потоку.

Запишем уравнение теплового баланса для теплообменника 2:

$$Q_{\text{ТП}} = F_1c_p\rho(T_1 - T_2) = F_wc_w\rho_w(T_{w_2} - T_{w_1});$$

и уравнение теплопередачи от реакционной массы рециклическому потоку в биореакторе 1:

$$Q_{\text{ТП}} = K_{\text{T}}S \left((T_1 - T_{w_2})(T_2 - T_{w_1}) \right) \left(\ln \frac{T_1 - T_{w_2}}{T_2 - T_{w_1}} \right)^{-1},$$

где c_{A_0}, T_0, F_0 – концентрация вещества A , (кмоль/м³), во входном потоке; температура (К) и объемный расход (м³/ч) входного потока; $\hat{k}_1 = \frac{k_1}{c_{A_0}}$ – эффективная константа скорости реакции (м³/(кмоль·ч)); V, T_1, c_{A_1} – объем биореактора (м³), температура в реакторе (К) и концентрация вещества A (кмоль/м³) в выходном потоке соответственно; $(-\Delta H)$ – теплота реакции (кДж/кмоль); F_1 – объемный расход рецикла (м³/ч); T_2 – температура рецикла (К); c_p, c_{pw} – теплоемкости рециклического потока и охлаждающей воды (кДж/(кг·К)), соответственно; ρ, ρ_w – плотности смеси в реакторе и потока охлаждающей

воды ($\text{кг}/\text{м}^3$); T_{w_1}, T_{w_2}, F_w – входная и выходная температура (К) и расход охлаждающей воды ($\text{м}^3/\text{ч}$) соответственно; S – поверхность теплообменника (м^2); K_T – коэффициент теплопередачи ($\text{кДж}/(\text{м}^2\text{ч К})$).

Целевая функция проектирования биотехнологической системы имеет вид

$$I(d, u, \xi) = 691,2 V^{0,7} + 873 S^{0,6} + 1,76 F_w + 7056 F_1.$$

Целевая функция $I(V, S, \xi)$ включает капитальные затраты на биореактор I и теплообменник 2 (первые два члена) и эксплуатационные затраты на охлаждающую воду и подачу рециклического потока в биореактор (последние два члена). Конструктивными параметрами d биотехнологической системы являются объем V биореактора I и площадь поверхности S теплообмена в теплообменнике 2 .

Обсудим далее вид ограничений (6.2) в задаче оптимизации при проектировании биотехнологической системы. В задаче оптимизации требуется, чтобы степень превращения α в биореакторе $\alpha = \frac{c_{A_0} - c_{A_1}}{c_{A_0}}$ была не меньше заданной ($\alpha_{\text{зад}} = 0,9$), а температура в биореакторе T_1 не должна быть ниже 293 К и превышать 323 К по условию технологического регламента. Кроме того, в теплообменнике минимальная разность температур между холодным и горячим потоками не должна быть меньше 11,1 К; при этом требуется, чтобы на выходе теплообменника температура горячего потока была меньше, а температура холодного потока была больше соответствующих температур на входе в теплообменник 2 . Таким образом, ограничения (6.2) в задаче оптимизации можно записать в виде:

$$\begin{aligned} -\frac{c_{A_0} - c_{A_1}}{c_{A_0}} + 0,9 &\leq 0; \\ 393 &\leq T_1 \leq 323; \\ -(T_2 - T_{w_1}) + 11,1 &\leq 0; \\ T_2 - T_1 &\leq 0; \end{aligned}$$

$$-T_{w_2} + T_{w_1} \leq 0.$$

Кроме того, имеются ограничения на выходную температуру T_{w_2} и температуру T_2 рециклического потока (они не записаны в числе ограничений).

Если принять допущение о том, что для вычисления величины $Q_{\text{ТП}}$ можно использовать следующее приближение:

$$Q_{\text{ТП}} = K_T S [(T_1 - T_{w_2}) + (T_2 - T_{w_1})] / 2,$$

то в нашем случае удастся аналитически исключить переменные состояния биотехнологической системы из уравнений материального и теплового балансов, выразив их как функции режимных u и конструктивных d переменных следующим образом:

$$\alpha = \frac{\hat{k}_1 c_{A_0} V \exp(-E/RT_1)}{F_0 + \hat{k}_1 c_{A_0} V \exp(-E/RT_1)};$$

$$T_2 = 2(-H)F_0\alpha/(K_T S) - 2F_0 c_p (T_1 - T_0)/(K_T S) - (T_1 - T_{w_2}) + T_{w_1};$$

$$F_1 = Q_{\text{ТП}} / (c_p (T_1 - T_2)); F_w = Q_{\text{ТП}} / (c_{pw} (T_{w_2} - T_{w_1})).$$

Подставив полученные выражения для переменных состояния в целевую функцию $I(d, u, \xi)$ и функции ограничения $g_j(d, u, \xi)$, получим явные выражения для критерия оптимальности проектирования и ограничений в задаче оптимизации (6.1), (6.2).

Теперь определим неопределенные параметры задачи оптимального проектирования. Нам известно, что при эксплуатации биотехнологической системы объемный расход F_0 и температуры T_0 входного потока в реактор и T_{w_1} охлаждающей воды могут изменяться в некоторых (известных) пределах. Кроме того, можно предположить, что значения эффективной константы скорости \hat{k}_1 и коэффициента теплопередачи K_T известны неточно и могут находиться в некоторых (известных) пределах. Следовательно, в демонстрируемом примере в качестве неопределенных параметров можно рассмотреть следующие: $\xi = \{F_0, T_0, T_{w_1}, \hat{k}_1, K_T\}^T$; здесь параметры \hat{k}_1, K_T являются внутренними неопре-

деленными параметрами биотехнологической системы, а параметры F_0, T_0, T_{w_1} – внешними неопределенными параметрами.

Вообще говоря, другие параметры, например $c_{A,0}, \Delta H$ и E , также могут быть отнесены к разряду неопределенных. Выбор множества параметров, которые должны рассматриваться как неопределенные, очень важен, поскольку невключение некоторых параметров в число неопределенных может значительно повлиять на результаты анализа работоспособности (гибкости) биотехнологической системы. К сожалению, не существует строгих правил выбора множества неопределенных параметров; большую помощь здесь может оказать анализ чувствительности математической модели биотехнологической системы, поскольку с его помощью можно выбрать параметры, оказывающие наиболее сильное влияние на эффективность функционирования биотехнологической системы.

Остающиеся переменные состояния биотехнологической системы $y = \{T_1, T_{w_2}, c_{A_1}, T_2, F_1, F_w\}^T$ являются изменяемыми переменными. В данной задаче имеется четыре ограничения-равенства; таким образом, задача имеет две степени свободы и, следовательно, мы можем выбрать две управляющие переменные, например $u = \{T_1, T_{w_2}\}^T$, тогда вектор переменных состояния имеет вид $y = \{c_{A_1}, T_2, F_1, F_w\}^T$.

К сожалению, мы не сможем решить сформулированную в примере задачу оптимизации при проектировании биотехнологической системы, поскольку не знаем, какие значения примут неопределенные параметры $\xi = \{F_0, T_0, T_{w_1}, \hat{k}_1, K_T\}^T$ при эксплуатации производства. Если использовать номинальные значения неопределенных параметров, то можно решить эту задачу оптимизации и найти значения объема \hat{V} биореактора 1 и площадь \hat{S} поверхности теплообмена в теплообменнике 2. Однако при эксплуатации биотехнологической системы величины объемного расхода F_0 и температура T_0 входного по-

тока, температура охлаждающей воды T_{w1} могут принять значения, отличные от номинальных; кроме того, эффективная константа скорости \hat{k}_1 биохимической реакции и коэффициент теплопередачи K_T также могут отличаться от номинальных значений, что не гарантирует удовлетворение всех ограничений задачи оптимизации в постановке (6.1), (6.2). Например, температура в биореакторе может стать больше, чем 323 К, что приведет к гибели микроорганизмов. Поэтому важно найти решение, которое будет гарантировать удовлетворение всех ограничений для всех значений неопределенных параметров $\xi = \{F_0, T_0, T_{w1}, \hat{k}_1, K_T\}^T$ из, вообще говоря, известной области неопределенности Ξ .

Задача оптимизации при проектировании биотехнологической системы формулируется при следующих предположениях. В жизненном цикле системы рассматриваются две стадии – стадия проектирования и стадия эксплуатации производства; имеются требования технического задания на проектирование биотехнологической системы, связанные с качеством выпускаемой продукции, экономикой производства, безопасностью эксплуатации и экологической безопасностью производства, которые могут быть записаны в форме (6.2); имеются два типа переменных – конструктивные переменные d (размеры технологического оборудования и переменные, задающие структуру производства) и режимные (управляющие) переменные u (температура, давление, объемный расход и др.). На стадии эксплуатации производства конструктивные переменные остаются постоянными, а управляющие переменные, вообще говоря, могут изменяться; поэтому при формулировании задач оптимизации при проектировании биотехнологических систем необходимо использовать возможность настройки управляющих переменных для удовлетворения требований технического задания на проектирование биотехнологической системы.

Будем называть биотехнологическую систему гибкой и соответствующую ей конструкцию допустимой, если при ее эксплуатации можно удовлетворить все ограничения (жесткие и мягкие) при условии, что неопределенные парамет-

ры могут принимать любые значения из некоторой (известной) области неопределенности.

В постановке задачи оптимизации при проектировании биотехнологической системы необходимо сформулировать целевую функцию (критерий оптимальности) и ограничения; в качестве целевой функции (критерия оптимальности) будем использовать некоторую оценку эффективности будущей работы биотехнологической системы в процессе эксплуатации производства; а в качестве ограничений будут использоваться условия, гарантирующие работоспособность (гибкость) биотехнологической системы в процессе эксплуатации производства. В качестве оценки будущей работы биотехнологической системы в процессе эксплуатации производства будем использовать одну из следующих величин.

1. Среднее значение критерия, которое он может принять в процессе эксплуатации производства; пусть значение критерия $\varphi(d, u, \xi)$ оценивает эффективность будущей работы биотехнологической системы (приведенные затраты на производство, себестоимость продукции, прибыль от производства биотехнологической продукции и т.д.) при известном значении неопределенных параметров ξ . Поскольку математическое ожидание $M_{\xi}[\varphi(d, u, \xi)]$ дает среднее значение функции $\varphi(d, u, \xi)$ в процессе эксплуатации производства, то в постановке задачи оптимизации при проектировании биотехнологической системы будем использовать математическое ожидание $M_{\xi}[\varphi(d, u, \xi)]$.

2. Наихудшее значение критерия оптимальности, которое он может принять в процессе эксплуатации производства (стратегия наихудшего случая); в этом случае для оценки будущей работы биотехнологической системы в процессе эксплуатации производства будет использоваться величина

$$\max_{\xi \in \Xi} \varphi(d, u, \xi).$$

Решив задачу оптимизации с этим критерием в постановке (6.1), (6.2), мы можем гарантировать, что значение критерия оптимальности биотехнологиче-

ской системы в процессе эксплуатации производства будет не хуже величины, полученной решением задачи оптимизации.

3. Верхняя граница для критерия оптимальности, которая не может быть нарушена с заданной доверительной вероятностью $P_{\text{дов}}$. В этом случае задача оптимизации при проектировании биотехнологической системы можно записать в виде

$$\begin{aligned} & \min_{d,u,z} z \\ & \Pr\{\varphi(d, u, \xi) - z \leq 0\} \geq P_{\text{дов}}, \\ & g_j(d, u, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m. \end{aligned}$$

В данной задаче в качестве целевой функции выбирается верхняя граница критерия оптимальности с доверительной вероятностью $P_{\text{дов}}$. Пусть $[d^*, u^*, z^*]$ есть решение этой задачи, и найденные значения d^*, u^* (характеризующие конструкцию и режим функционирования биотехнологической системы) гарантируют, что в ходе эксплуатации производства целевая функция $\varphi(d^*, u^*, \xi)$ будет меньше, чем z^* с вероятностью $P_{\text{дов}}$.

6.2. ПОСТАНОВКА ОДНОЭТАПНЫХ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Характерным свойством одноэтапной задачи оптимизации является допущение о постоянстве режимных (управляющих) переменных u^* при эксплуатации биотехнологической системы, найденных решением задачи оптимизации при проектировании биотехнологической системы.

Пусть все неопределенные параметры имеют вероятностную природу. Тогда условие гибкости биотехнологической системы можно записать в форме следующего логического условия:

$$\forall \xi \in \Xi \forall j [g_j(d, u, \xi) \leq 0], \text{ где } j = 1, 2, \dots, m.$$

Используя соотношение эквивалентности [9], логическое условие гибкости биотехнологической системы можно заменить следующими m неравенствами:

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(d, u, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m.$$

Сформулируем одноэтапные задачи оптимизации с жесткими ограничениями, используя различные критерии оптимальности.

1. Критерий оптимальности $I(d, u) = M_{\xi}[\varphi(d, u, \xi)]$ – среднее значение критерия $\varphi(d, u, \xi)$, которое он может принять в процессе эксплуатации производства; объединяя эту целевую функцию с условием гибкости, получим постановку задачи оптимизации при проектировании биотехнологической системы с учетом неопределенности:

$$I(d^*, u^*) = \min_{d, u \in H} \{I(d, u) = M_{\xi}[\varphi(d, u, \xi)]\}, \quad (6.3)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(d, u, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m, \quad (6.4)$$

где область H имеет вид $H = \{d, u \mid h_l(d, u) \leq 0, l = 1, 2, \dots, p\}$ (она не зависит от ξ).

2. Стратегия наихудшего случая: в этом случае в качестве критерия оптимальности используется величина $\max_{\xi \in \Xi} \varphi(d, u, \xi)$. В этом случае одноэтапная задача оптимизации при проектировании биотехнологической системы при наличии неопределенности имеет вид

$$I(d^*, u^*) = \min_{d, u \in H} \left\{ I(d, u) = \max_{\xi \in \Xi} \varphi(d, u, \xi) \right\}, \quad (6.5)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(d, u, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m. \quad (6.6)$$

Задачи (6.3), (6.4) и (6.5), (6.6) имеют решение, если выполняется логическое условие вида

$$\exists d, u \forall \xi \in \Xi \forall j [g_j(d, u, \xi) \leq 0], \text{ где } j = 1, 2, \dots, m,$$

которое можно преобразовать к аналитическому виду [10]:

$$\exists d, u \max_{\xi \in \Xi} \max_{j=1,2,\dots,m} g_j(d, u, \xi) \leq 0.$$

С использованием эквивалентных соотношений [9] последнее неравенство можно преобразовать к аналитическому виду:

$$\chi(d) = \min_{d, u \in H} \max_{\xi \in \Xi} \max_{j=1,2,\dots,m} g_j(d, u, \xi) \leq 0. \quad (6.7)$$

Полученное неравенство представляет собой условие работоспособности (гибкости) биотехнологической системы, выполнение которого гарантирует возможность удовлетворения всех ограничений (6.2) для всех значений $\xi \in \Xi$.

Сформулируем одноэтапные задачи оптимизации с мягкими ограничениями; рассмотрим два случая, в которых будут использоваться вероятностные ограничения.

1. Предположим, что при проектировании биотехнологической системы имеется полная информация относительно функции распределения вероятностей для вектора ξ неопределенных параметров. Для этого случая можно сформулировать следующую задачу оптимизации:

$$I(d^*, u^*) = \min_{d, u \in H} I(d, u), \quad (6.8)$$

$$\Pr\{g_j(d, u, \xi) \leq 0\} \geq P_{\text{доб}}, j = 1, 2, \dots, m, \quad (6.9)$$

где $\Pr\{g_j(d, u, \xi) \leq 0\} = \int_{\Omega_j} P(\xi) d\xi$ – вероятность выполнения ограничения $g_j(d, u, \xi) \leq 0$, где $P(\xi)$ – функция плотности вероятности для ξ ; $\Omega_j = \{\xi | g_j(d, u, \xi) \leq 0, \xi \in \Xi\}$. Левая часть равенства (6.9) есть вероятность попадания случайной точки ξ в допустимую область Ω_j .

В качестве целевой функции $I(d, u)$ для задачи оптимизации при проектировании биотехнологической системы мы можем использовать либо среднее значение первоначального показателя $\varphi(d, u, \xi)$ эффективности работы биотехнологической системы при эксплуатации производства, либо наихудшее значение первоначального показателя $\max_{\xi \in \Xi} \varphi(d, u, \xi)$.

Если в задаче оптимизации при проектировании биотехнологической системы используется целевая функция $M_{\xi}[\varphi(d, u, \xi)]$, тогда ищем такую конструкцию биотехнологической системы и режим ее функционирования, для которых средняя (по ξ) величина первоначального показателя $\varphi(d, u, \xi)$

эффективности работы биотехнологической системы при эксплуатации производства минимальна. Если в задаче оптимизации при проектировании биотехнологической системы используется целевая функция $\max_{\xi \in \Xi} \varphi(d, u, \xi)$, то при решении задачи оптимизации находим минимальное (наихудшее по ξ) значение первоначального показателя $\varphi(d, u, \xi)$ эффективности работы биотехнологической системы при эксплуатации производства.

Рассмотрим теперь формулировку, в которой в качестве критерия в задаче оптимизации при проектировании биотехнологической системы будет использоваться верхняя граница первоначального показателя эффективности работы биотехнологической системы при эксплуатации производства с доверительной вероятностью $P_{\text{дов}}$. Как и в предыдущей задаче оптимизации, будем считать, что каждое ограничение задачи должно выполняться с вероятностью, не меньшей, чем $P_{\text{дов}}$. В этом случае математическая формулировка задачи с вероятностными ограничениями будет иметь следующий вид:

$$\min_{d, u \in H, z} z, \quad (6.10)$$

$$\Pr\{\varphi(d, u, \xi) - z \leq 0\} \geq P_{\text{дов}}, \quad (6.11)$$

$$\Pr\{g_j(d, u, \xi) \leq 0\} \geq P_{\text{дов}}, j = 1, 2, \dots, m. \quad (6.12)$$

В задаче (6.10) – (6.12) определяем наименьшее значение z^* переменной z , для которой условия (6.11), (6.12) выполняются с заданной вероятностью $P_{\text{дов}}$; решением задачи (6.10) – (6.12) является точка $[d^*, u^*, z^*]$.

Используя ту же целевую функцию, можно свести задачу оптимизации с жесткими ограничениями к следующей задаче оптимизации со смешанными ограничениями:

$$\min_{d, u \in H, z} z, \quad (6.10)$$

$$\Pr\{\varphi(d, u, \xi) - z \leq 0\} \geq P_{\text{дов}}, \quad (6.11)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(d, u, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m. \quad (6.12)$$

Рассмотрим задачу со смешанными ограничениями, в которой m_1 ограничений являются жесткими, а остальные $(m - m_1)$ – «мягкими»; сформулируем задачу оптимизации при проектировании биотехнологических систем для данного случая. Она имеет следующий вид:

$$I(d^*, u^*) = \min_{d, u \in H} \{I(d, u) = M_{\xi}[\varphi(d, u, \xi)]\}, \quad (6.13)$$

$$\Pr\{g_j(d, u, \xi) \leq 0\} \geq P_{\text{дов}}, j = 1, 2, \dots, m_1, \quad (6.14)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(d, u, \xi) \leq 0, j = m_1 + 1, 2, \dots, m. \quad (6.15)$$

6.3. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ОДНОЭТАПНЫХ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

При прямом решении одноэтапных задач оптимизации при проектировании биотехнологических систем основная трудность состоит в необходимости вычисления многомерных интегралов (математического ожидания и вероятностных ограничений) на каждой итерации поискового численного метода оптимизации; операция вычисления многомерных интегралов является крайне трудоемкой операцией уже при размерности вектора неопределенных параметров больше трех. Это делает решение одноэтапных задач оптимизации при большой размерности вектора неопределенных параметров весьма затруднительным даже на самых современных компьютерах. Поэтому важной становится задача развития методов решения одноэтапных задач оптимизации, в которых число аппроксимационных точек многомерного интеграла невелико.

Рассмотрим методы решения задач одноэтапной оптимизации с жесткими ограничениями, когда плотности распределения вероятностей для неопределенных параметров неизвестны. В этом случае математическое ожидание в целевой функции задачи оптимизации заменяют на некоторую усредненную величину и решают следующую задачу:

$$I(d^*, u^*) = \min_{d, u \in H} \{I(d, u) = \sum_{i \in I_1} \gamma_i \varphi(d, u, \xi^i)\}, \quad (6.16)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(d, u, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m, \quad (6.17)$$

где γ_i – весовой коэффициент; ξ^i ($i \in I_1$) – аппроксимационные точки, выбранные априори из инженерных соображений; I_1 – множество аппроксимационных точек.

Аппроксимационные точки ξ^i ($i \in I_1$) и весовые коэффициенты γ_i задаются ЛПР исходя из системы его предпочтений; как правило, число аппроксимационных точек в этом случае невелико, и поэтому процедура вычисления значения критерия оптимальности не является трудоемкой.

При использовании стратегии наихудшего случая, когда в качестве целевой функции берется наихудшее значение первоначального показателя $\varphi(d, u, \xi)$ эффективности работы биотехнологической системы при эксплуатации производства – $\max_{\xi \in \Xi} \varphi(d, u, \xi)$. В этом случае формулируется и решается следующая задача:

$$I(d^*, u^*) = \min_{d, u \in H} \left\{ I(d, u) = \max_{\xi \in \Xi} \varphi(d, u, \xi) \right\}, \quad (6.18)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(d, u, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m. \quad (6.19)$$

Решение этой задачи дает верхнюю оценку оптимального значения целевой функции; получив решение задачи (6.18), (6.19) – (d^*, u^*) , $I(d^*, u^*)$ можно гарантировать, что какая бы целевая функция в одноэтапной задаче не использовалась, ее оптимальное значение будет не больше, чем $I(d^*, u^*)$.

Введем дополнительную переменную z и преобразуем задачу (6.18), (6.19) к виду

$$\min_{d, u, z} z, \quad (6.20)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} \varphi(d, u, \xi) \leq z, \quad (6.21)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(d, u, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m. \quad (6.22)$$

Задачи (6.16), (6.17), (6.18), (6.19), (6.20) – (6.22) являются задачами полубесконечного программирования, для решения которых разработаны эффективные методы решения [9 – 13].

В задаче полубесконечного программирования число поисковых переменных конечно, а число ограничений бесконечно; отсюда и название этого класса задач. Введем понятие множества критических точек:

$$S^p = \{ \xi^i : \xi^i \in \Xi, i \in I^p \},$$

где I^p – множество индексов точек ξ^i .

Рассмотрим алгоритм внешней аппроксимации [13] для решения задачи вида

$$I(x^*) = \min_{x \in X} I(x), \quad (6.23)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(x, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m, \quad (6.24)$$

где $\Xi = \{ \xi : \xi^- \leq \xi \leq \xi^+ \}$, векторы ξ и x имеют размерности n_ξ и n_x соответственно.

Алгоритм.

Шаг 1. Положить начальное значение числа итераций $k = 1$; задать начальные значения x^0 и начальное множество S^0 критических точек.

Шаг 2^k . Решить задачу нелинейного программирования:

$$I^k(\hat{x}) = \min_{x \in X} I(x), \quad (6.25)$$

где $X = \{ x \mid g_j(x, \xi^i) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m, \forall \xi^i \in S^{k-1} \}$.

Пусть \hat{x}^k – решение этой задачи.

Шаг 3^k . Решить m задач

$$\max_{\xi \in \Xi} g_j(\hat{x}^k, \xi) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m. \quad (6.26)$$

Пусть $\hat{\xi}_j^k$ – решения этих задач, $j = 1, 2, \dots, m$.

Шаг 4^k . Проверить выполнение условий

$$g_j(\hat{x}^k, \hat{\xi}_j^k) \leq 0, j = 1, 2, \dots, m. \quad (6.27)$$

Если все эти условия выполняются, решение получено: $x^* = \hat{x}^k$, $I(x^*) = I(\hat{x}^k)$; в противном случае перейти к шагу 5.

Шаг 5^k . Сформировать множество R^k , которое содержит все точки $\hat{\xi}_j^k$, в которых условия (6.27) нарушаются:

$$R^k = \{ \hat{\xi}_j^k \mid g_j(\hat{x}^k, \hat{\xi}_j^k) > 0, j = 1, 2, \dots, m \}.$$

Шаг 6^k . Сформировать новое множество критических точек:

$$S^k = S^{k-1} \cup R^k.$$

Шаг 7^k . Положить $k := k + 1$ и перейти к шагу 2.

Замечания к алгоритму.

На первом шаге можно не задавать множество S^0 критических точек, а определять его, решая m задач (6.26) для x^0 ; пусть $\hat{\xi}_j^0$ – решение этой задачи, тогда

$$S^0 = \{ \hat{\xi}_j^0 \mid g_j(x^0, \hat{\xi}_j^0) > 0, j = 1, 2, \dots, m \}.$$

При решении практических задач полубесконечного программирования условие (6.27) записывается в виде $g_j(\hat{x}^k, \hat{\xi}_j^k) \leq \varepsilon_j, j = 1, 2, \dots, m$, где ε_j – достаточно малые числа.

Рассмотрим методы решения задач одноэтапной оптимизации с «мягкими» ограничениями при проектировании биотехнологической системы с учетом неопределенности. В этих задачах требуется, чтобы каждое ограничение выполнялось с заданной доверительной вероятностью, а в качестве целевой функции используется либо математическое ожидание, либо верхняя граница первоначального показателя эффективности $\varphi(d, u, \xi)$ работы биотехнологической системы при эксплуатации производства с доверительной вероятностью $P_{\text{дов}}$.

Математическая постановка задачи имеет следующий вид:

$$I(d^*, u^*) = \min_{d, u \in H} \sum_{j \in J_1} \gamma_j \varphi(d, u, \xi^j), \quad (6.28)$$

$$\Pr\{g_j(d, u, \xi) \leq 0\} \geq P_{\text{дов}}, j = 1, 2, \dots, m. \quad (6.29)$$

Решение задач одноэтапной оптимизации (методы и алгоритмы) с «мягкими» ограничениями достаточно подробно рассматриваются в учебном пособии [10]. Однако они слишком сложны для решения практических задач.

Опишем один из возможных эвристических подходов к решению одноэтапной задачи оптимизации (6.28), (6.29), предварительно переведя ее в эквивалентную форму:

$$I(d_{\alpha^*}, u_{\alpha^*}) = \min_{\alpha \in \Lambda} \left(\min_{d, u} \sum_{i \in J_1} \omega_i \varphi(u, d, y, \xi^i) \mid g_{\lambda}(d, u, y, \xi) \leq \alpha_{\lambda}, \lambda = \overline{1, m} \right),$$

$$\Lambda = \{ \alpha \mid \forall \lambda \Pr [g_{\lambda}(d_{\alpha}, u_{\alpha}, y, \xi) \leq 0] \geq P_{\text{дов}}, \lambda = \overline{1, m} \}.$$

В этой задаче вероятностные ограничения (6.29) заменены на жесткие ограничения вида $g_{\lambda}(d, u, y, \xi) \leq \alpha_{\lambda}, \lambda = \overline{1, m}$, где $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ – скалярные переменные ($\alpha_{\lambda} < 0, \lambda = \overline{1, m}$), а далее подбираются минимальные значения $|\alpha_{\lambda}^*|, \lambda = \overline{1, m}$ и соответствующие им конструктивные параметры d_{α^*} и управления u_{α^*} , такие, при которых выполняются вероятностные ограничения (6.29).

Алгоритм.

Шаг 1. Задать начальный номер итерации $v = 0$, совокупность аппроксимационных точек $\xi^i, i \in J_1, \xi^i \in S_1$, значения доверительной вероятности $P_{\text{дов}}$, точности ε решения задачи оптимизации, начальные приближения d^0, u^0 и $\alpha^0 = (\alpha_1^0, \alpha_2^0, \dots, \alpha_m^0)$.

Шаг 2. Решить вспомогательную задачу с жесткими ограничениями

$$I(d^*, u^*) = \min_{d, u \in H} \sum_{j \in J_1} \gamma_j \varphi(d, u, \xi^j),$$

$$g_{\lambda}(d, u, y, \xi) \leq \alpha_{\lambda}, \lambda = \overline{1, m},$$

например, методом последовательного квадратичного программирования и определить $d^v = d_{\alpha^v}, u^v = u_{\alpha^v}$.

Шаг 3. В точке $d^{(v)}, u^{(v)}$ проверить выполнение вероятностных ограничений $-\Pr [g_{\lambda}(d^v, u^v, \xi) \leq 0] \geq P_{\text{дов}}, \lambda = \overline{1, m}$ с использованием метода Монте-

Карло и генератора псевдослучайных чисел $\xi_k, k = \overline{1, n_\xi}$ с равномерным законом распределения.

Если вероятностные ограничения не выполняются с заданной вероятностью $P_{\text{дов}}$, т.е. $\alpha_\lambda^v \notin \Lambda, \lambda = \overline{1, m}$, то производим «ужесточение» ограничений посредством увеличения значений скалярных переменных, т.е. $|\alpha_\lambda^{v+1}| = |\alpha_\lambda^v + \Delta\alpha_\lambda|, \lambda = \overline{1, m}$; число итераций увеличить на 1, т.е. $v := v + 1$ и перейти к шагу 2, иначе перейти к шагу 4.

Шаг 4. Проверить выполнение условия окончания поиска $|\Delta\alpha_\lambda^v| \leq \varepsilon$: если оно выполняется, то решение получено: $d^* = d_{\alpha^v}, u^* = u_{\alpha^v}$, иначе уменьшить значения скалярных переменных, т.е. $|\alpha_\lambda^{v+1}| = |\alpha_\lambda^v - \Delta\alpha_\lambda|$ и перейти к шагу 2.

Таким образом, подбираются минимальные значения $|\hat{\alpha}_\lambda|, \lambda = \overline{1, m}$, и соответствующие им конструктивные параметры $d_{\hat{\alpha}_\lambda}$ и режимные (управляющие) переменные $u_{\hat{\alpha}_\lambda}$, такие, при которых выполняются вероятностные ограничения (6.29) с заданной доверительной вероятностью $P_{\text{дов}}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Освоение магистрантами теоретических и практических разделов настоящего учебного пособия, являющегося систематическим введением в современную теорию и практику системного анализа, принятия решений и оптимизации при выполнении технологических и проектных работ в биотехнологическом секторе техники, экономики, предприятий и фирм, выпускающих или предоставляющих продукцию и услуги биотехнологического профиля, позволит ему сформировать соответствующие компетенции, необходимые для решения задач профессиональной деятельности производственно-технологического, научно-исследовательского, проектного и организационно-управленческого типов.

Изложенные в пособии модели и методы системного анализа, включающие процедуры проведения экспертизы и экспертного оценивания, детерминированные методы принятия решений и принятия решений в условиях неопределенности; численные методы и алгоритмы условной оптимизации, постановки и методы решения одноэтапных задач оптимизации при проектировании биотехнологических процессов и систем в условиях неопределенности предназначены для решения этой сложной и многогранной задачи. Каждый раздел учебного пособия включает широкий диапазон примеров: от получения и обработки экспертной информации, постановок задач безусловной и условной оптимизации до методов поиска и получения решения этих задач.

Учебное пособие будет также полезным магистрантам и аспирантам, выполняющим научные исследования, аналитические и технологические работы,

проектные и прикладные работы в биотехнологическом секторе науки, техники и экономики.

В соответствии с ФГОС по направлению 19.04.01 «Биотехнология» и программе магистратуры «Промышленная биотехнология и биоинженерия» выпускники магистратуры

должны знать:

– основные особенности и специфику построения (био)технологических процессов, технологий биосинтеза, биотрансформации, биодеструкции, биологической переработки отходов, биологической очистки, особенности моделирования, масштабирования и оптимизации биотехнологических схем и процессов; основные принципы организации биотехнологического производства, его иерархической структуры, методы оценки эффективности производства;

владеть:

– навыками выбора, анализа и оценивания исходных данных для расчета и проектирования оборудования и технологического процесса;

– типовыми и инновационными методами инженерных и технологических расчетов (био)технологических процессов и оборудования, расчетами материальных и энергетических балансов, норм расхода сырья, материалов, энергии, полупродуктов и целевых продуктов;

– навыками моделирования и оптимизации процессов и аппаратов биотехнологического производства;

уметь:

– использовать современные программные средства, базы данных и программные оболочки для имитации, оптимизации и проектирования (био)технологических процессов и систем;

– систематизировать и обобщать информацию по использованию ресурсов предприятия, путям повышения эффективности производства, участвовать в мероприятиях по повышению экономической эффективности производства.

Соответствующие знания, умения и навыки они в полной мере могут почерпнуть из настоящего учебного пособия, которое может быть полезно также для повышения квалификации преподавателей вузов и специалистов, самостоятельно изучающих и использующих методы системного анализа, принятия решений и поисковой оптимизации при выполнении проектных и прикладных работ в биотехнологическом секторе науки, техники, экономики, предприятий и фирм, выпускающих или предоставляющих продукцию и услуги биотехнологического профиля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Николаев, В. И.** Системотехника: методы и приложения / В. И. Николаев, В. М. Брук. – Л. : Машиностроение. Ленингр. отд-ние. 1985. – 199 с.
2. **Рыков, А. С.** Системный анализ: модели и методы принятия решений и поисковой оптимизации / А. С. Рыков. – М. : Издательский дом МИСиС, 2009. – 608 с.
3. **Дорохов, И. Н.** Системный анализ процессов химической технологии / И. Н. Дорохов, В. В. Меньшиков. – М. : Наука, 2005. – 504 с.
4. **Рыков, А. С.** Системный анализ: модели и методы принятия решений и поисковой оптимизации / А. С. Рыков. – М. : Издательский дом МИСиС, 2009. – 608 с.
5. **Бейли, Дж.** Основы биохимической инженерии : в 2-х ч. / Дж. Бейли, Д. Оллис ; пер в англ. – М. : Мир, 1989. – 692 с. ; Ч. 2. – 590 с.
6. **Бесков, В. С.** Общая химическая технология и основы промышленной экологии : учебник / В. С. Бесков, В. С. Сафронов. – М. : Химия, 1999. – 472 с.
7. **Кофман, А.** Введение в теорию нечетких множеств / А. Кофман. – М. : Радио и связь, 1982. – 432 с.
8. **Системный анализ и оптимизация биотехнологических производств** / Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий, Е. И. Акулинин и др. – Тамбов : Издательский центр ФГБОУ ВО «ТГТУ», 2019. – 160 с.
9. **Моисеев, Н. Н.** Методы оптимизации / Н. Н. Моисеев, Ю. П. Иванилов, Е. М. Столярова. – М. : Наука, 1978.
10. **Островский, Г. М.** Технические системы в условиях неопределенности: анализ гибкости и оптимизации : учебное пособие / Г. М. Островский, Ю. М. Волин. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний. 2008. – 319 с.

11. **Островский, Г. М.** Оптимизация технических систем / Г. М. Островский, Н. Н. Зиятдинов, Т. В. Лаптева. – М. : КНОРУС, 2012. – 432 с.

12. **Reemstead, R.** Numerical methods for semi-infinite programming : A Survey. In semi-infinite programming / R. Reemtsen and J.-J. Ruckman (Ed's). – Dordrecht : Kluwer academic publishers, 1998.

13. **Hettich, R.** Semi-infinite programming: Theory, methods and applications / R. Hettich, K. O. Kortanek // SIAM Review. – 1993. – V. 35. – P. 380 – 429.

14. **Maine, P. Q.** An outer approximation algorithm for computer-aided design problem / P. Q. Maine, E. Polak, R. Traham // J. Optim. Theory Appl. – V. 28. – P. 331 – 351.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
ПРЕДИСЛОВИЕ	4
1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ЗАДАЧИ СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА В БИОХИМИЧЕСКОЙ ИНЖЕНЕРИИ	6
1.1. Система	7
1.2. Цель и целеобразование	9
1.3. Методика и принципы системного анализа	10
1.4. Биотехнологические системы	13
1.5. Основные понятия и задачи теории принятия решений	24
2. МЕТОДЫ ЭКСПЕРТНОГО ОЦЕНИВАНИЯ	31
2.1. Предпосылки применения методов экспертного оценивания	31
2.2. Методы проведения экспертизы	33
2.3. Качественные экспертные оценки	36
2.4. Организация экспертного оценивания и отбор экспертов	37
2.5. Методы опроса экспертов	39
2.6. Методы обработки экспертной информации	43
3. ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЕ МЕТОДЫ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ	69
3.1. Постановки многокритериальных задач принятия решений	69
3.2. Принципы оптимальности в задачах принятия решений	73
3.3. Примеры решения многокритериальных задач принятия решений ...	79
3.4. Принятие решений в условиях неопределенности	103
4. ЭФФЕКТИВНЫЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ БЕЗУСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ	119
4.1. Метод градиентного спуска с постоянным шагом	119
4.2. Метод наискорейшего градиентного спуска	124

4.3. Метод покоординатного спуска	129
4.4. Метод Гаусса–Зейделя	135
4.5. Метод Флетчера–Ривса	141
4.6. Метод Дэвидона–Флетчера–Пауэлла	150
5. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ УСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ	154
5.1. Принципы построения численных методов поиска условного экстремума	154
5.2. Методы последовательной безусловной оптимизации	155
5.2.1. Метод внешних штрафов	155
5.2.2. Метод барьерных функций	164
5.2.3. Комбинированный метод штрафных функций	172
5.2.4. Метод множителей Лагранжа	181
6. ПОСТАНОВКА И МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ	188
6.1. Основные подходы к постановке задач оптимизации при проектировании биотехнологических систем в условиях неопределенности	189
6.2. Постановка одноэтапных задач оптимизации при проектировании биотехнологических систем	199
6.3. Методы решения одноэтапных задач оптимизации при проектировании биотехнологических систем	203
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	209
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	212

Учебное электронное издание

ДВОРЕЦКИЙ Станислав Иванович
ДВОРЕЦКИЙ Дмитрий Станиславович
АКУЛИНИН Евгений Игоревич
ТЕМНОВ Михаил Сергеевич

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ В БИОТЕХНОЛОГИИ: МЕТОДЫ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ И ПОИСКОВОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Учебное пособие

Редактор Л. В. Комбарова
Графический и мультимедийный дизайнер Т. Ю. Зотова
Обложка, упаковка, тиражирование Л. В. Комбаровой

ISBN 978-5-8265-2750-4



Подписано к использованию 07.03.2024.
Тираж 50 шт. Заказ № 28

Издательский центр ФГБОУ ВО «ТГТУ»
392000, г. Тамбов, ул. Советская, д. 106, к. 14
Телефон 8(4752) 63-81-08
E-mail: izdatelstvo@tstu.ru