

Python для задач химической технологии

Лабораторная работа №4

Минимизация функций

Задание 1

Найдите минимум следующих функций, используя методы минимизации, доступные в функции `scipy.optimize.minimize()`. Начальное приближение: $x_0 = [0, 0]$.

1. Функция Экли:

$$f(x, y) = -20 \exp \left[-0.2 \sqrt{0.5 (x^2 + y^2)} \right] - \exp [0.5 (\cos (2\pi x) + \cos (2\pi y))] + e + 20$$

2. Функция Била:

$$f(x, y) = (1.5 - x + xy)^2 + (2.25 - x + xy^2)^2 + (2.625 - x + xy^3)^2$$

3. Функция Гольдшейна-Прайса:

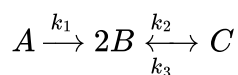
$$f(x, y) = \left[1 + (x + y + 1)^2 (19 - 14x + 3x^2 - 14y + 6xy + 3y^2) \right] \cdot \left[30 + (2x - 3y)^2 (18 - 32x + 12x^2 + 48y - 36xy + 27y^2) \right]$$

4. Функция Матьяса:

$$f(x, y) = 0.26 (x^2 + y^2) - 0.48xy$$

Задание 2

Пусть дана схема химических превращений:



Необходимо определить с помощью генетического алгоритма и метода Нелдера-Мида (можно воспользоваться функцией `scipy.optimize.minimize()`, указав соответствующее значение опционального аргумента `method`) константы скоростей реакций: k_1 , k_2 и k_3 , если известно, что к моменту времени $t = 1(\text{с})$ концентрации компонентов равны: $C_A = 0.1423$; $C_B = 1.5243$; $C_C = 0.5956$ моль/л.

Начальные условия: $C_A(0) = 1.0$; $C_B = 0.0$; $C_C = 0.5$ моль/л.

Область поиска для всех констант ограничьте интервалом $[0; 2]$.