

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра материаловедения,
технологии и управления качеством

Синёв И.В., Симаков В.В.

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Учебное пособие

для студентов 2 курса
направления подготовки бакалавриата
22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов»,
профиля подготовки «Нанотехнологии, диагностика и синтез
современных материалов»,
института физики

Авторы

Синёв Илья Владимирович – к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры материаловедения, технологии и управления качеством, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского.

Симаков Вячеслав Владимирович – д.т.н., доцент, профессор кафедры материаловедения, технологии и управления качеством, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1 Методы локальной оптимизации	4
1.1 Минимум функции одного переменного	4
1.2 Минимизация функций многих переменных	8
1.2.1 Спуск по координатам	8
1.2.2 Метод градиентного спуска	11
1.2.3 Метод тяжелого шара	13
1.3 Численная оптимизация местоположения склада торговой сети	14
1.3.1 Метод спуска по координатам	14
1.3.2 Метод градиентного спуска	27
2 Аппроксимация функций	35
2.1 Точечное квадратичное аппроксимирование функций.	35
2.2 Аппроксимирование функций полиномом второй степени $p_2(x)$	37
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	43

ВВЕДЕНИЕ

Численные методы являются основой решения комплексных задач, возникающих в ходе развития материаловедения и новейших областей техники и технологии. Использование ЭВМ при решении научных и технических задач позволяет провести детальное математическое моделирование процессов и систем, которое существенно сокращает потребность в натурных экспериментах, а в ряде случаев может их заменить.

Важным аспектом алгоритмов численных методов является гарантирование нахождения приближенного решения с заданной точностью за конечное число математических операций. При этом для численных методов характерна множественность возможных методов решения.

В пособии излагаются основы численных методов решения задач алгебры, математического анализа, оптимизации, обыкновенных дифференциальных уравнений. Рассмотрены алгоритмы и возможности их применения для приближенного решения различных классов математических задач. В пособии изложен материал, необходимый студентам для приобретения навыков применения численных методов для решения задач теоретического и прикладного характера в области профессиональной деятельности. Наибольшее внимание уделяется фундаментальным разделам численных методов – численному решению систем линейных алгебраических уравнений, методам оптимизации и разностным методам решения задач математической физики.

Теоретический материал изложен сжато, но при этом большое внимание уделено рекомендациям по практическому применению рассмотренных алгоритмов. Изложение материала проиллюстрировано рядом примеров направленных на развитие практических навыков применения численных методов для решения конкретных задач. Предполагается, что при изучении данного курса студенты знакомы с основами высшей математики и владеют навыками программирования.

1 Методы локальной оптимизации

Оптимизация – это задача нахождения экстремума (минимума или максимума) целевой функции в некоторой области конечномерного векторного пространства, ограниченной набором линейных и/или нелинейных равенств и/или неравенств.

Во многих практически важных случаях для целевой функции многих переменных $f(\mathbf{x})$ задача оптимизации может быть сформулирована в виде:

$$f(\mathbf{x}) \rightarrow \min,$$

где $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ – вектор неизвестных (управляющих параметров); \min – минимальное значение функции в ограниченной или неограниченной области изменения неизвестных.

Для нахождения абсолютного минимума целевой функции $f(\mathbf{x})$ существует только один способ: найти все локальные минимумы этой функции, сравнить их и выбрать из них тот, в котором функция принимает наименьшее значение.

1.1 Минимум функции одного переменного

Для функции одной переменной $f(x)$, задача нахождения минимума эквивалента задачи нахождения корней уравнения:

$$\frac{df(x)}{dx} = 0 \quad (1)$$

Эта одномерная задача нередко возникает в практических приложениях. Кроме того, большинство методов решения многомерных задач сводится к поиску одномерного минимума.

Предположим, что $f(x)$ задана и кусочно-непрерывна на отрезке $x \in [a, b]$, и имеет на этом отрезке (включая его концы) только один локальный минимум. Построим итерационный процесс, сходящийся к этому минимуму.

Вычислим значение функции на концах отрезка $x = a$ и $x = b$, а также в двух внутренних точках $x_1 < x_2$. Так как функция $f(x)$ имеет минимум на отрезке $x \in [a, b]$, то справедливо утверждение:

$$f(a) \geq f(x_1), \quad f(x_2) \leq f(b)$$

Сравним все четыре значения функции между собой $f(a)$, $f(x_1)$, $f(x_2)$ и $f(b)$ и выберем среди них наименьшее.

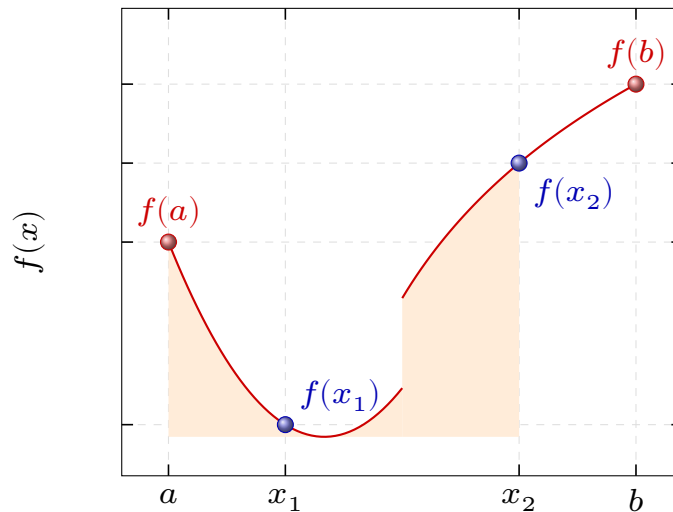


Рисунок 1 – График кусочно-непрерывной функции $y = f(x)$, имеющей минимум на отрезке $x \in [a, b]$

Из рисунка 1 видно, что наименьшее значение функция достигает в точке $x = x_1$:

$$f(x_1) < f(a) < f(x_2) < f(b)$$

Очевидно, что минимум функции $f(x)$ расположен в одном из прилегающих к точке $x = x_1$ отрезков, то есть минимум находится либо в пределах отрезка $[a, x_1]$, либо в $[x_1, x_2]$ (рисунок 1, выделенная область).

Поэтому на первом шаге итерационного процесса отбрасывается отрезок $[x_2, b]$, и для поиска минимума функции $f(x)$ рассматривается отрезок $[a, x_2]$, при этом область поиска минимума функции сужается:

$$|a - x_2| < |a - b|, \quad \text{так как} \quad x_2 < b.$$

Полагая $b = x_2$, на новом отрезке $[a, b]$ вновь необходимо выбрать две внутренние точки, вычислить в них и на концах отрезка значения функции $f(x)$, и сделать следующий шаг итерационного процесса.

Критерием остановки итерационного процесса является условие выполнения неравенства, которое гарантирует малость размера области поиска ми-

нимума по сравнению с заранее заданной погрешность метода:

$$(b - a) \leq \epsilon,$$

где ϵ – погрешность метода.

Симметричный метод поиска минимума функции одной переменной $f(x)$ основан на выборе внутренних точек x_1 и x_2 отрезка $[a, b]$, которые равноудалены от концов этого отрезка. Например, если точки x_1 и x_2 делят отрезок $[a, b]$ на три равные части (рисунок 2), то координаты этих точек могут быть определены из соотношений:

$$x_1 = a + \frac{b - a}{3} = \frac{2a + b}{3}, \quad x_2 = b - \frac{b - a}{3} = \frac{a + 2b}{3}.$$

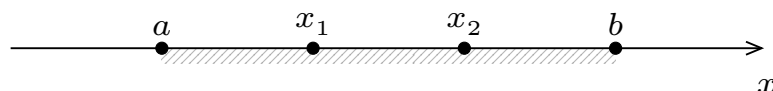


Рисунок 2 – Схематическое изображение точек деления отрезка $[a, b]$

Оценка длины отрезка после первого итерационного шага составит:

$$\ell_1 = (b - a) - \frac{b - a}{3} = \frac{2}{3} \cdot (b - a),$$

после второго шага:

$$\ell_2 = \ell_1 - \frac{\ell_1}{3} = \frac{2}{3} \cdot \ell_1 = \left(\frac{2}{3}\right)^2 \cdot (b - a),$$

а после k -ого итерационного шага:

$$\ell_k = \left(\frac{2}{3}\right)^k \cdot (b - a).$$

Таким образом, чтобы погрешность вычисления ℓ_k была менее ϵ , для числа итераций k справедлива оценка:

$$\left(\frac{2}{3}\right)^k \cdot (b - a) \leq \epsilon \quad \rightarrow \quad k = \left\lceil \frac{\ln(b - a) - \ln(\epsilon)}{\ln(3) - \ln(2)} \right\rceil$$

Симметричный метод поиска минимума функции является аналогом метода дихотомии для нахождения корня уравнения $f(x) = 0$. Метод применим

к не дифференцируемым функциям и всегда сходится. Следует отметить, что если на отрезке $[a, b]$ функция $f(x)$ имеет несколько локальных минимумов, то итерационный процесс сойдется к одному из этих минимумов, но не обязательно к наименьшему.

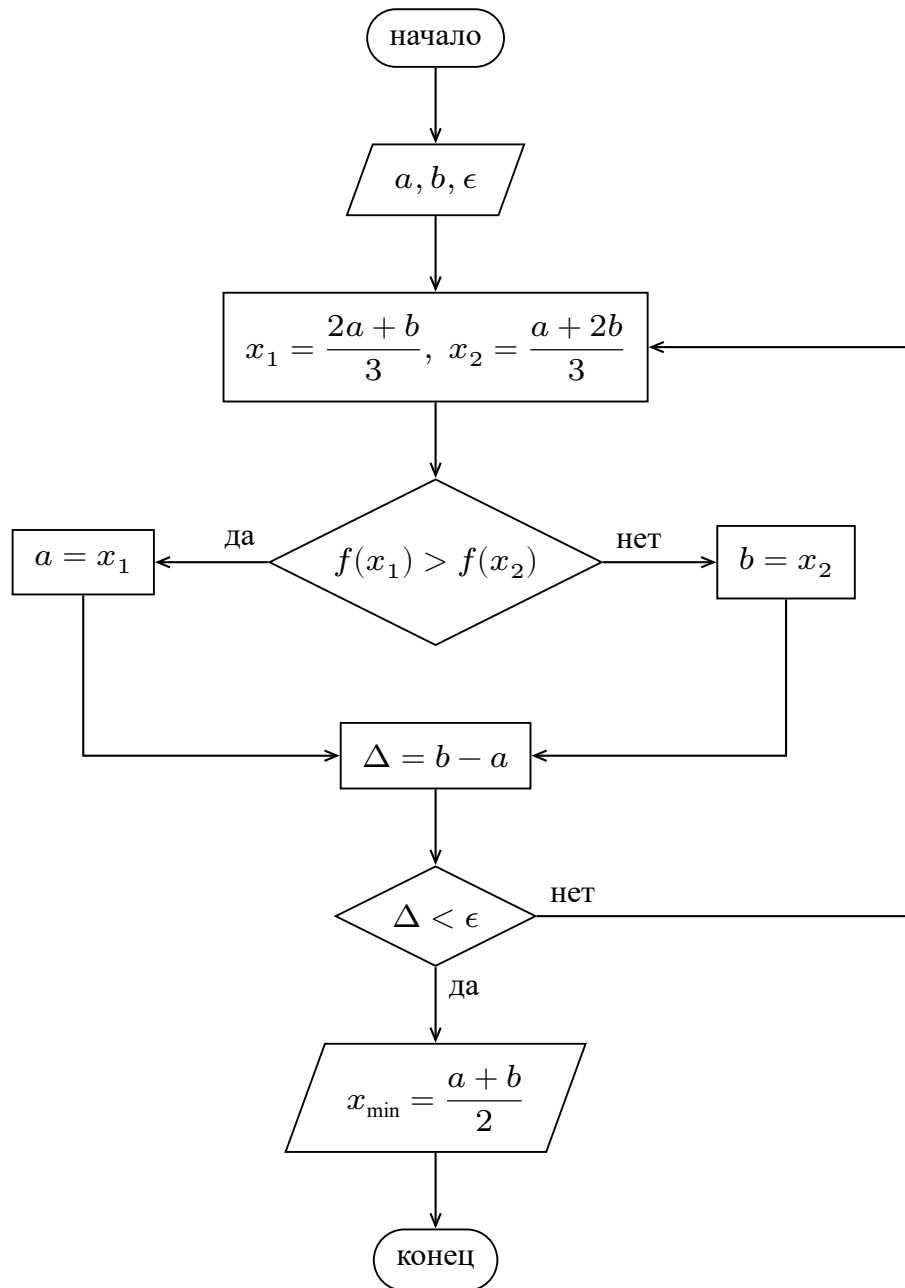


Рисунок 3 – Блок-схема алгоритма нахождения минимума функции одного переменного $x_{\min} = \arg \left(\min_{a \leq x \leq b} f(x) \right)$

1.2 Минимизация функций многих переменных

Задача безусловной минимизации (оптимизации) состоит в нахождении минимума или максимума функции $f(x)$ в отсутствие каких-либо ограничений на область изменения переменных задачи $x \in (-\infty, +\infty)$.

Большинство практических задач оптимизации содержит ограничения, которые обусловлены технико-экономическим смыслом решаемой задачи, однако многие алгоритмы решения задач с ограничениями предполагают сведение ее к последовательности задач безусловной оптимизации.

1.2.1 Спуск по координатам

Идея метода по координатного спуска заключается в том, что задача поиска минимума функции $f(x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow \min$ разделяется на серию задач *одномерной минимизации* этой функции вдоль направления одной из координатных осей:

$$\begin{aligned} f(\textcolor{red}{x}_1, x_2 = \texttt{const}, \dots, x_n = \texttt{const}) &\rightarrow \min \\ f(x_1 = \texttt{const}, \textcolor{red}{x}_2, \dots, x_n = \texttt{const}) &\rightarrow \min \\ \vdots & \\ f(x_1 = \texttt{const}, x_2 = \texttt{const}, \dots, \textcolor{red}{x}_n) &\rightarrow \min \end{aligned}$$

- 1) Выбирают нулевое приближение $\mathbf{x}_0 = (x_{10}, x_{20}, \dots, x_{n0})$ и определяют область поиска минимума функции:

[illegible]

- 2) Фиксируют (считают постоянными) значения всех координат кроме x_1 . Тогда функция $f(\mathbf{x})$ будет зависеть только от одной переменной x_1 :

$$f_1(x_1) = f(x_1, x_{20} = \text{const}, \dots, x_{n0} = \text{const})$$

- 3) Используя метод одномерной минимизации, находится минимум функции

одной переменной $f_1(x_1) \rightarrow \min$, который можно обозначить через m_1 .

$$m_1 = \arg \left(\min_{a_1 \leq x_1 \leq b_1} f_1(x_1) \right)$$

- 4) Сделан переход из начальной точки x_0 в точку “частного” минимума по направлению, параллельному оси x_1 :

$$(x_{10}, x_{20}, \dots, x_{n0}) \rightarrow (m_1, x_{20}, \dots, x_{n0}),$$

и значение функции уменьшается:

$$f(x_{10}, x_{20}, \dots, x_{n0}) > f(m_1, x_{20}, \dots, x_{n0})$$

- 5) Затем из новой точки $(m_1, x_{20}, \dots, x_{n0})$ осуществляется спуск по направлению, параллельному оси x_2 , то есть находится минимум функции $f_2(x_2)$:

$$f_2(x_2) = f(m_1, x_2, x_{30} = \text{const}, \dots, x_{n0} = \text{const}),$$

который обозначим m_2 :

$$m_2 = \arg \left(\min_{a_2 \leq x_2 \leq b_2} f_2(x_2) \right)$$

- 6) Таким образом, сделан переход во вторую точку “частного” минимума по направлению, параллельному оси x_2 :

$$(m_1, x_{20}, \dots, x_{n0}) \rightarrow (m_1, m_2, \dots, x_{n0}),$$

и значение функции уменьшается:

$$f(m_1, x_{20}, \dots, x_{n0}) > f(m_1, m_2, \dots, x_{n0})$$

- 7) Процесс спуска по координатам повторяется для всех остальных переменных задачи x_3, x_4, \dots, x_n , а переход в точку $x_m = (m_1, m_2, \dots, m_n)$ завершает цикл спусков.
- 8) Конечную точку цикла спусков можно принять за нулевое приближение $x_0 = x_m$ и повторить цикл спусков по координатам x_1, x_2, \dots, x_n до тех пор, пока, не выполнено условие останова итерационного процесса (рисунок 4).

Практически можно задать некоторое число $\epsilon > 0$, связанное с выбранной

точностью вычислений, и проводить итерации до тех пор, пока на k -ой итерации не будут выполнены одно или несколько неравенств вида:

$$\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}\| < \epsilon_1, \quad \|f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_{k-1})\| < \epsilon_2 \quad (2)$$

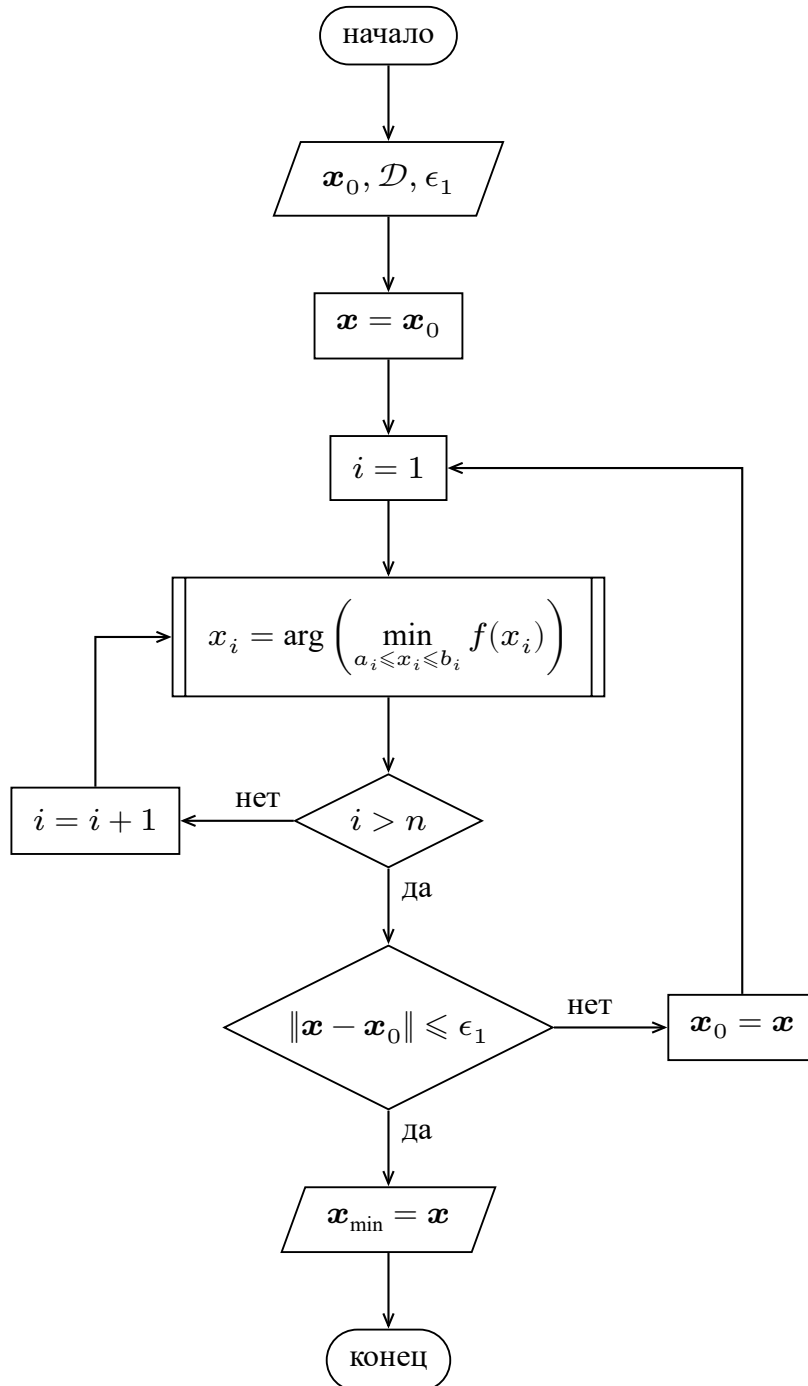


Рисунок 4 – Блок-схема алгоритма нахождения минимума функции $f(\mathbf{x})$ многих переменных методом спуска по координатам

1.2.2 Метод градиентного спуска

Градиентный спуск – метод нахождения локального экстремума (минимума или максимума) функции многих переменных $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ с помощью движения вдоль градиента этой функции. Это наиболее простой в реализации из всех методов локальной оптимизации, но имеет относительно малую (линейную) скорость сходимости.

Градиент ∇ это вектор, указывающий направление наибольшего возрастания некоторой функции f , значение которой меняется от одной точки пространства к другой (скалярного поля), а по величине (модулю) равный скорости роста этой величины в этом направлении. Компонентами вектора градиента являются частные производные f по всем её аргументам:

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right) \quad (3)$$

Для случая трёхмерного пространства градиентом скалярной функции $f(x, y, z)$ называется векторная функция:

$$\text{grad } f = \nabla f,$$

где ∇ – векторный дифференциальный оператор набла, компоненты которого являются частными производными по координатам:

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Следует отметить, что оператор набла не принадлежит тому же пространству, что и обычные векторы, а говоря точнее, скалярное и векторное произведение для него определено с некоторыми отличиями. Оператор ∇ действует на те скалярные поля, что стоят от него справа, и не действует на стоящие от него слева. Поэтому скалярное и векторное произведение с участием ∇ *не коммутативны* и не антикоммутативные, как это свойственно для таких произведений обычных векторов.

Минимизация целевой функции $f(x)$ сводится к итерационному процессу последовательного выбора нового вектора неизвестных x_{k+1} , такого чтобы значение функции в новой точки было меньше чем в предыдущих:

$$f(x_0) > f(x_1) > \dots > f(x_k) > f(x_{k+1}) > \dots$$

Предполагая, что новый вектор неизвестных мало отличается от предыдущего ($\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k \approx 0$), можно воспользоваться линейным приближением для разложения в ряд Тейлора целевой функции:

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) = f(\mathbf{x}_k) + (\nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k), \quad (4)$$

где k – номер итерационного шага процесса; \mathbf{x}_k – значение неизвестных на k -ой итерации.

Если в качестве нового вектора неизвестных выбрать:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \lambda \cdot \nabla f(\mathbf{x}_k), \quad (5)$$

то из (4) получим:

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) = f(\mathbf{x}_k) - \lambda \cdot \|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|^2 \rightarrow f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq f(\mathbf{x}_k) \quad (6)$$

где $\lambda > 0$ – малое положительное число (параметр метода), имеющий смысл скорости градиентного спуска; $\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\| \geq 0$ – норма вектора градиента (неотрицательное число):

$$\|\nabla f\| = \sqrt{(\nabla f, \nabla f)}$$

Таким образом, выбор нового вектора неизвестных \mathbf{x}_{k+1} в соответствии с выражением (5), гарантирует монотонное убывание целевой функции $f(\mathbf{x})$ в каждой итерации. Поэтому основная идея метода градиентного спуска заключается в том, чтобы последовательно идти в направлении наибольшего уменьшения целевой функции, которое задаётся антиградиентом $-\nabla f(\mathbf{x})$.

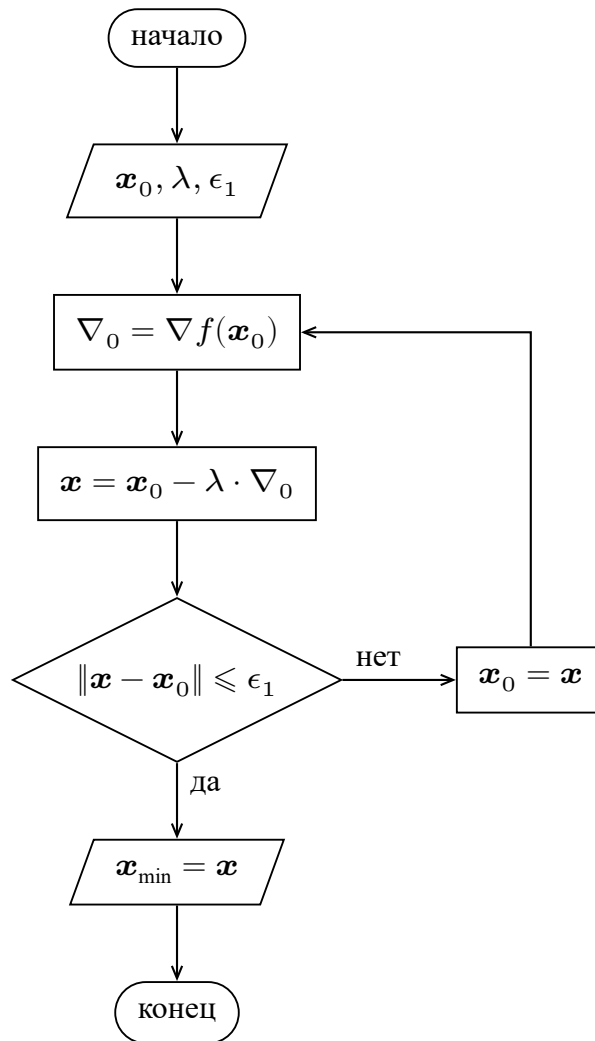


Рисунок 5 – Блок-схема алгоритма нахождения минимума функции $f(x)$ многих переменных методом градиентного спуска

1.2.3 Метод тяжелого шара

Поиск минимума функции многих переменных $f(x)$ методом “тяжелого шара” основан на аналогии движения материальной частицы массой m в консервативном силовом поле $F(x)$ в вязкой среде.

В соответствии с принципом минимальной энергии тело смещается в положение, которое минимизирует общую потенциальную энергию системы $f(x) \rightarrow \min$. Поэтому если предположить, что функция $f(x)$ является потенциальной энергией частицы в консервативном силовом поле $F(x) = -\nabla f(x)$, и частица перемещается в пространстве x минимизируя свою энергию, то урав-

нение движения этой частицы можно записать в виде:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = v \\ m \frac{dv}{dt} = F - \alpha \cdot v \end{cases}$$

где x – положение частицы в выбранной системе координат; v и α – скорость и коэффициент вязкого трения частицы в среде, соответственно.

Этот метод используется в методе стохастического градиентного спуска и в качестве расширения алгоритмов обратного распространения ошибок для обучения искусственных нейронных сетей.

Поиск минимума данным методом начинается с задания начальных условий, которые, как правило, формулируются в виде:

$$\begin{cases} x(0) = x_0 \\ v(0) = v_0 \end{cases},$$

где x_0 – начальное приближения для поиска минимума функции; v_0 – “начальная скорость” в пространстве неизвестных.

Масса частицы m и коэффициент вязкого трения α являются эвристическими параметрами метода и выбираются произвольным образом, отражающим специфику решаемой задачи.

1.3 Численная оптимизация местоположения склада торговой сети

Рассмотрим задачу нахождения координат расположения склада готовой продукции (распределительного центра), таких чтобы суммарное расстояние от склада до потребителей продукции (магазинов торговой сети) было минимальным.

1.3.1 Метод спуска по координатам

Будем полагать, что магазины торговой сети находятся в городах, которые имеют определенные местоположения заданные их географическими координатами.

Географические координаты определяют местоположение точки на поверхности Земли, и строятся по принципу сферических координат. Центр системы географических координат помещается в центр Земли, а положение точки в пространстве определяется расстоянием r от центра Земли, широтой ϕ и

долготой λ (рисунок 6):

- 1) широта ϕ – угол между местным направлением зенита и плоскостью экватора, отсчитываемый в обе стороны от экватора.
- 2) долгота λ – двугранный угол между плоскостью меридиана, проходящего через данную точку, и плоскостью начального нулевого меридиана.

Радиус-вектор \mathbf{r} точки A , находящейся на поверхности Земли, имеет в декартовой системе координат компоненты:

$$\mathbf{r} = (r_x, r_y, r_z),$$

где $r_{x,y,z}$ – компоненты вектора \mathbf{r} , то есть проекции этого вектора на оси декартовой системы координат:

$$\begin{cases} r_x = \mathcal{R} \cdot \cos(\phi) \cdot \cos(\lambda) \\ r_y = \mathcal{R} \cdot \cos(\phi) \cdot \sin(\lambda) \\ r_z = \mathcal{R} \cdot \sin(\phi) \end{cases},$$

\mathcal{R} – радиус планеты Земля.

Таким образом, для определения местоположения *на поверхности Земли*, достаточно задать широту ϕ и долготу λ географического объекта.

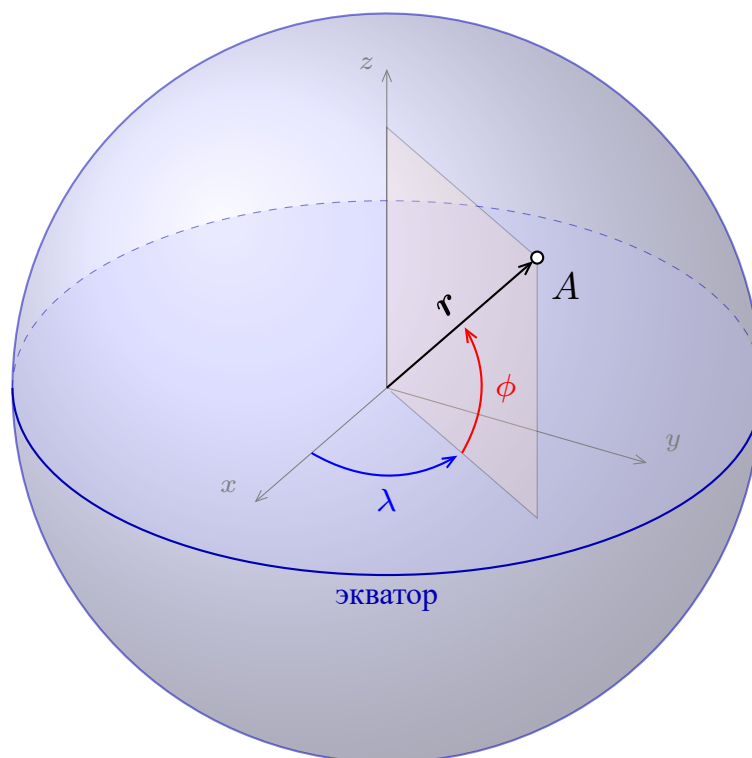


Рисунок 6 – Географическая система координат на поверхности Земли

Кратчайшее расстояние между двумя точками A и B находящимися на сферической поверхности Земли равно длине дуги большого круга. Если известны географические координаты точек $A(\phi_a, \lambda_a)$ и $B(\phi_b, \lambda_b)$, то расстояние на поверхности Земли между этими точками составляет (рисунок 7):

$$d_{AB} = \mathcal{R} \cdot \alpha, \quad (7)$$

где α – центральный угол между радиус-векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} точек A и B , лежащих на поверхности Земли.

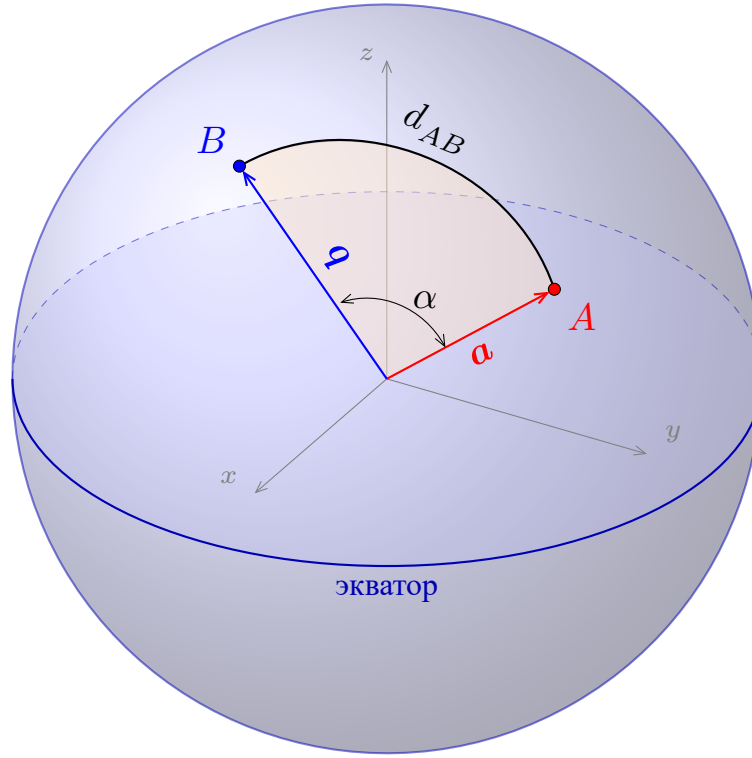


Рисунок 7 – Расстояние d_{AB} (длина дуги) на поверхности сферы между точками A и B

Косинус угла α между векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} можно определить, воспользовавшись геометрическим свойством скалярного произведения этих векторов:

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \|\mathbf{a}\| \cdot \|\mathbf{b}\| \cdot \cos(\alpha) \quad \rightarrow \quad \cos(\alpha) = \frac{(\mathbf{a}, \mathbf{b})}{\|\mathbf{a}\| \cdot \|\mathbf{b}\|}, \quad (8)$$

где $\|\mathbf{a}\| = \|\mathbf{b}\| = \mathcal{R}$ – длины радиус-векторов, с учетом постоянства радиуса Земли.

С алгебраической точки зрения, *скалярное произведение векторов* – это операция над двумя векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} , результатом которой является число (скаляр), значение которого не зависит от выбранной системы координат, то есть скалярное произведение является *инвариантом*:

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = a_x \cdot b_x + a_y \cdot b_y + a_z \cdot b_z, \quad (9)$$

где $a_{x,y,z}$ и $b_{x,y,z}$ – компоненты векторов в декартовой системе координат:

$$\mathbf{a} = \begin{cases} a_x = \mathcal{R} \cdot \cos(\phi_a) \cdot \cos(\lambda_a) \\ a_y = \mathcal{R} \cdot \cos(\phi_a) \cdot \sin(\lambda_a) \\ a_z = \mathcal{R} \cdot \sin(\phi_a) \end{cases} \quad (10)$$

$$\mathbf{b} = \begin{cases} b_x = \mathcal{R} \cdot \cos(\phi_b) \cdot \cos(\lambda_b) \\ b_y = \mathcal{R} \cdot \cos(\phi_b) \cdot \sin(\lambda_b) \\ b_z = \mathcal{R} \cdot \sin(\phi_b) \end{cases} \quad (11)$$

Косинус угла (8) между векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} с учетом (10) и (11):

$$\begin{aligned} \cos(\alpha) = & \cos(\phi_a) \cos(\lambda_a) \cdot \cos(\phi_b) \cos(\lambda_b) + \\ & \cos(\phi_a) \sin(\lambda_a) \cdot \cos(\phi_b) \sin(\lambda_b) + \\ & \sin(\phi_a) \cdot \sin(\phi_b) \end{aligned}$$

или

$$\cos(\alpha) = \cos(\phi_a) \cos(\phi_b) \cdot \left(\cos(\lambda_a) \cdot \cos(\lambda_b) + \sin(\lambda_a) \cdot \sin(\lambda_b) \right) + \sin(\phi_a) \sin(\phi_b)$$

Воспользовавшись формулой для разности углов тригонометрических функций (косинуса):

$$\cos(\lambda_a) \cdot \cos(\lambda_b) + \sin(\lambda_a) \cdot \sin(\lambda_b) = \cos(\lambda_a - \lambda_b)$$

окончательно получим:

$$\cos(\alpha) = \cos(\phi_a) \cos(\phi_b) \cdot \cos(\Delta\lambda) + \sin(\phi_a) \sin(\phi_b),$$

где $\Delta\lambda = \lambda_a - \lambda_b$ – разность долготы географических координат точек A и B , соответственно.

Таким образом, кратчайшее расстояние на поверхности Земли между двумя точками (7) может быть найдено из соотношения:

$$d_{AB} = \mathcal{R} \cdot \arccos(\cos(\phi_a) \cos(\phi_b) \cdot \cos(\Delta\lambda) + \sin(\phi_a) \sin(\phi_b)), \quad (12)$$

1) С помощью картографических веб сервисов (например, [Яндекс.Карты](#), [кар-](#)

ты Google, и т.п.). определим географические координаты всех городов, в которых находятся магазины торговой сети. Полученные данные представим в таблице 1.

Таблица 1 – Географические координаты магазинов торговой сети

Город	Географические координаты	
	широта ϕ	долгота λ
Москва	55.66352	37.62964
Саратов	51.53440	46.03121
Воронеж	56.67071	39.16190

- 2) Построим целевую функцию $f(\phi, \lambda)$ – суммарное расстояние вдоль поверхности Земли от склада до магазинов в городах Москва, Саратов и Воронеж:

$$f(\phi, \lambda) = d_1(\phi, \lambda) + d_2(\phi, \lambda) + d_3(\phi, \lambda),$$

где ϕ и λ – географическая широта и долгота местоположения склада; d_1 , d_2 и d_3 – расстояние вдоль поверхности Земли (12) между складом и городами Москва, Саратов и Воронеж, соответственно:

$$d_1(\phi, \lambda) = \mathcal{R} \cdot \arccos(\cos(\phi) \cos(\phi_1) \cdot \cos(\lambda - \lambda_1) + \sin(\phi) \sin(\phi_1))$$

$$d_2(\phi, \lambda) = \mathcal{R} \cdot \arccos(\cos(\phi) \cos(\phi_2) \cdot \cos(\lambda - \lambda_2) + \sin(\phi) \sin(\phi_2))$$

$$d_3(\phi, \lambda) = \mathcal{R} \cdot \arccos(\cos(\phi) \cos(\phi_3) \cdot \cos(\lambda - \lambda_3) + \sin(\phi) \sin(\phi_3))$$

где $\phi_1 = 55.66352$ и $\lambda_1 = 37.62964$ – широта и долгота города Москва; $\phi_2 = 51.53440$ и $\lambda_2 = 46.03121$ – широта и долгота города Саратов; $\phi_3 = 56.67071$ и $\lambda_3 = 39.16190$ – широта и долгота города Воронеж (таблица 1).

- 3) Для решения задачи оптимизации целевой функции *методом по координатного спуска* определим область поиска минимума функции $r(\phi, \lambda)$.

Например, в качестве границ области можно выбрать экстремальные значения широты и долготы городов, в которых расположены магазины торговой

сети:

$$\begin{cases} \phi_{\inf} = \min(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = \phi_2 = 51.53440 \\ \phi_{\sup} = \max(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = \phi_3 = 56.67071 \\ \lambda_{\inf} = \min(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \lambda_1 = 37.62964 \\ \lambda_{\sup} = \max(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \lambda_2 = 46.03121 \end{cases}$$

Таким образом, минимум целевой функции будем искать в области \mathcal{D} :

$$\mathcal{D} = \begin{cases} \phi_{\inf} \leq \phi \leq \phi_{\sup} \\ \lambda_{\inf} \leq \lambda \leq \lambda_{\sup} \end{cases} = \begin{cases} 51.53440 \leq \phi \leq 56.67071 \\ 37.62964 \leq \lambda \leq 46.03121 \end{cases}$$

- 4) Критерием прекращения итерационного поиска минимума целевой функции считать условие выполнения одного из неравенств:

$$\epsilon_1 \geq \xi, \quad f(\phi_k, \lambda_k) \geq f(\phi_{k-1}, \lambda_{k-1}) \quad (13)$$

где $\epsilon_1 = 0.1$ – заданная точность определения местоположения склада;
 ξ – изменение местоположения склада на текущем k шаге итерационного процесса:

$$\xi = \sqrt{(\phi_k - \phi_{k-1})^2 + (\lambda_k - \lambda_{k-1})^2}; \quad (14)$$

ϕ_k и λ_k – значение географических координат склада на k -ом шаге итерационного процесса.

- 5) В качестве начального местоположения склада (ϕ_0, λ_0) выберем любую произвольную точку внутри области поиска минимума целевой функции, например:

$$\begin{cases} \phi_0 = 52.0 \\ \lambda_0 = 44.0 \end{cases}.$$

- 6) Считаем постоянными значения долготы склада $\lambda = \lambda_0 = \text{const}$ и рассматриваем вспомогательную функцию только одной переменной ϕ :

$$f_1(\phi) = f(\phi, \lambda_0) = f(\phi, 44.0)$$

Находим минимум вспомогательной функции одной переменной $f_1(\phi)$, ис-

пользуя метод одномерной минимизации:

$$\phi_{\min} = \arg \left(\min_{\phi_{\inf} \leq \phi \leq \phi_{\sup}} f_1(\phi) \right) = 54.66658$$

где ϕ_{\min} – положение “частного” минимума функции $f(\phi, 44.0)$.

Считаем постоянными значения широты склада $\phi = \phi_{\min} = \text{const}$ и рассматриваем вторую вспомогательную функцию только одной переменной λ :

$$f_2(\lambda) = f(\phi_{\min}, \lambda) = f(54.66658, \lambda)$$

Находим минимум функции одной переменной $f_2(\lambda)$, используя метод одномерной минимизации:

$$\lambda_{\min} = \arg \left(\min_{\lambda_{\inf} \leq \lambda \leq \lambda_{\sup}} f_2(\lambda) \right) = 39.49103$$

где λ_{\min} – положение “частного” минимума функции $f(54.66658, \lambda)$.

- 7) Определяем изменение местоположения склада (14) в результате проведенных итерационных процессов (рисунок 8):

$$\begin{aligned} \xi &= \sqrt{(\phi_{\min} - \phi_0)^2 + (\lambda_{\min} - \lambda_0)^2} = \\ &= \sqrt{(54.66658 - 52.0)^2 + (39.49103 - 44.0)^2} = \\ &= 5.23846 \end{aligned}$$

Находим значение целевой функции в начальной $f(\phi_0, \lambda_0)$ и конечной точки $f(\phi_{\min}, \lambda_{\min})$ точках местоположения склада:

$$\begin{aligned} f(\phi_0, \lambda_0) &= f(52.0, 44.0) &= 1338.696 \\ f(\phi_{\min}, \lambda_{\min}) &= f(54.66658, 39.49103) &= 944.004 \end{aligned}$$

Сравниваем величину текущего “шага” ξ и заданную точность расчетов ϵ_1 , а также значения целевой функции $f(\phi, \lambda)$ в начальной и конечной точки итерационного процесса:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 = 0.1 &< \xi = 5.23846 \\ f(\phi_{\min}, \lambda_{\min}) = 944.004 &< f(\phi_0, \lambda_0) = 1338.696 \end{aligned}$$

Критерий остановки итерационного процесса (13) не выполняется, следова-

тельно, итерационный процесс продолжаем!

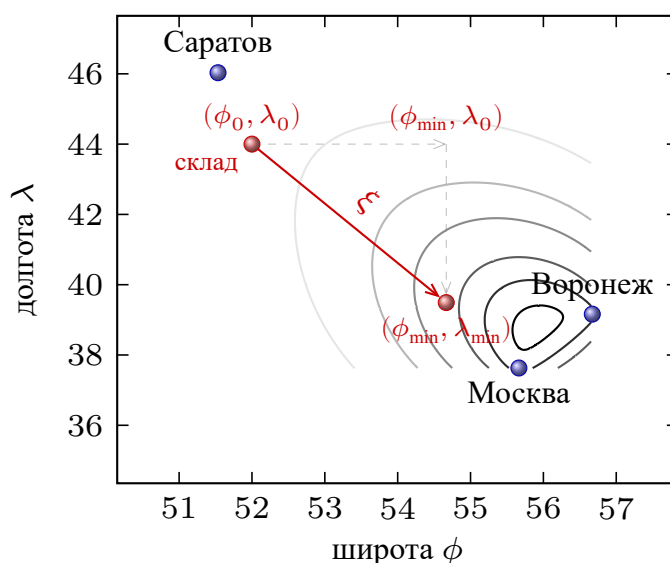


Рисунок 8 – Рельеф целевой функции $f(\phi, \lambda)$ и траектория поиска местоположения склада (ϕ, λ) торговой сети (маркерами обозначены города)

- 8) За новое местоположение склада торговой сети принимается положение “частного” минимума целевой функции на предыдущем шаге итерационного процесса:

$$\begin{cases} \phi_0 = \phi_{\min} = 54.66658 \\ \lambda_0 = \lambda_{\min} = 39.49103 \end{cases}$$

- 9) Считаем постоянными значения долготы склада $\lambda = \lambda_0 = \text{const}$ и рассматриваем вспомогательную функцию только одной переменной ϕ :

$$f_1(\phi) = f(\phi, \lambda_0) = f(\phi, 39.49103)$$

Находим минимум вспомогательной функции одной переменной $f_1(\phi)$, используя метод одномерной минимизации:

$$\phi_{\min} = \arg \left(\min_{\phi_{\inf} \leq \phi \leq \phi_{\sup}} f_1(\phi) \right) = 55.94734$$

где ϕ_{\min} – положение “частного” минимума функции $f(\phi, 39.49103)$.

Считаем постоянными значения широты склада $\phi = \phi_{\min} = \text{const}$ и рассмат-

риваем вторую вспомогательную функцию только одной переменной λ :

$$f_2(\lambda) = f(\phi_{\min}, \lambda) = f(55.94734, \lambda)$$

Находим минимум функции одной переменной $f_2(\lambda)$, используя метод одномерной минимизации:

$$\lambda_{\min} = \arg \left(\min_{\lambda_{\inf} \leq \lambda \leq \lambda_{\sup}} f_2(\lambda) \right) = 38.88818$$

где λ_{\min} – положение “частного” минимума функции $f(55.94734, \lambda)$.

- 10) Определяем изменение местоположения склада (14) в результате проведенных итерационных процессов (рисунок 9):

$$\begin{aligned} \xi &= \sqrt{(\phi_{\min} - \phi_0)^2 + (\lambda_{\min} - \lambda_0)^2} = \\ &= \sqrt{(55.94734 - 54.66658)^2 + (38.88818 - 39.49103)^2} = \\ &= 1.41555 \end{aligned}$$

Находим значение целевой функции в начальной $f(\phi_0, \lambda_0)$ и конечной точки $f(\phi_{\min}, \lambda_{\min})$ точках местоположения склада:

$$\begin{aligned} f(\phi_0, \lambda_0) &= f(54.66658, 39.49103) = 944.004 \\ f(\phi_{\min}, \lambda_{\min}) &= f(55.94734, 38.88818) = 845.572 \end{aligned}$$

Сравниваем величину текущего “шага” ξ и заданную точность расчетов ϵ_1 , а также значения целевой функции $f(\phi, \lambda)$ в начальной и конечной точки итерационного процесса:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 = 0.1 &< \xi = 1.41555 \\ f(\phi_{\min}, \lambda_{\min}) = 845.572 &< f(\phi_0, \lambda_0) = 944.004 \end{aligned}$$

Критерий остановки итерационного процесса (13) не выполняется, следовательно, *итерационный процесс продолжаем!*

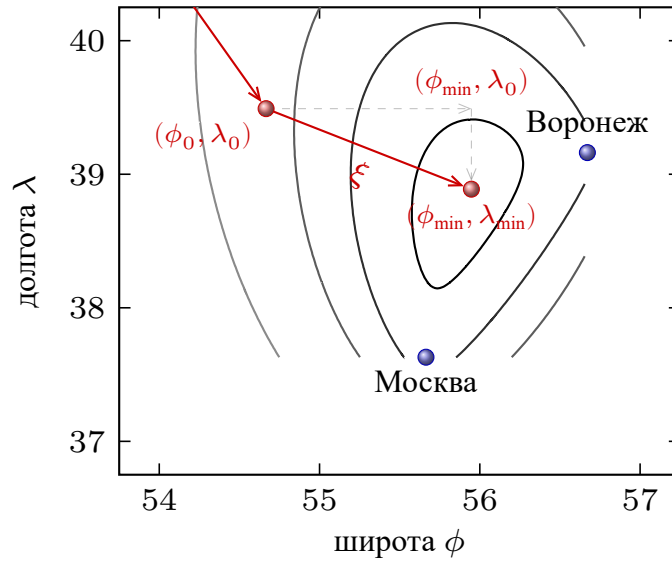


Рисунок 9 – Рельеф целевой функции $f(\phi, \lambda)$ и траектория поиска местоположения склада (ϕ, λ) торговой сети (маркерами обозначены города)

- 11) За новое местоположение склада торговой сети принимается положение “частного” минимума целевой функции на предыдущем шаге итерационного процесса:

$$\begin{cases} \phi_0 = \phi_{\min} = 55.94734 \\ \lambda_0 = \lambda_{\min} = 38.88818 \end{cases}$$

- 12) Считаем постоянными значения долготы склада $\lambda = \lambda_0 = \text{const}$ и рассматриваем вспомогательную функцию только одной переменной ϕ :

$$f_1(\phi) = f(\phi, \lambda_0) = f(\phi, 38.88818)$$

Находим минимум вспомогательной функции одной переменной $f_1(\phi)$, используя метод одномерной минимизации:

$$\phi_{\min} = \arg \left(\min_{\phi_{\inf} \leq \phi \leq \phi_{\sup}} f_1(\phi) \right) = 55.88973$$

где ϕ_{\min} – положение “частного” минимума функции $f(\phi, 38.88818)$.

Считаем постоянными значения широты склада $\phi = \phi_{\min} = \text{const}$ и рассматриваем вторую вспомогательную функцию только одной переменной λ :

$$f_2(\lambda) = f(\phi_{\min}, \lambda) = f(55.88973, \lambda)$$

Находим минимум функции одной переменной $f_2(\lambda)$, используя метод одномерной минимизации:

$$\lambda_{\min} = \arg \left(\min_{\lambda_{\inf} \leq \lambda \leq \lambda_{\sup}} f_2(\lambda) \right) = 38.83941$$

где λ_{\min} – положение “частного” минимума функции $f(55.88973, \lambda)$.

- 13) Определяем изменение местоположения склада (14) в результате проведенных итерационных процессов (рисунок 10):

$$\begin{aligned} \xi &= \sqrt{(\phi_{\min} - \phi_0)^2 + (\lambda_{\min} - \lambda_0)^2} = \\ &= \sqrt{(55.88973 - 55.94734)^2 + (38.83941 - 38.88818)^2} = \\ &= 0.07548 \end{aligned}$$

Находим значение целевой функции в начальной $f(\phi_0, \lambda_0)$ и конечной точки $f(\phi_{\min}, \lambda_{\min})$ точках местоположения склада:

$$\begin{aligned} f(\phi_0, \lambda_0) &= f(55.94734, 38.88818) = 845.572 \\ f(\phi_{\min}, \lambda_{\min}) &= f(55.88973, 38.83941) = 845.314 \end{aligned}$$

Сравниваем величину текущего “шага” ξ и заданную точность расчетов ϵ_1 , а также значения целевой функции $f(\phi, \lambda)$ в начальной и конечной точки итерационного процесса:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 = 0.1 &> \xi = 0.07548 \\ f(\phi_{\min}, \lambda_{\min}) &= 845.314 < f(\phi_0, \lambda_0) = 845.572 \end{aligned}$$

Критерий остановки итерационного процесса (13) выполняется, следовательно, *итерационный процесс прекращаем!*

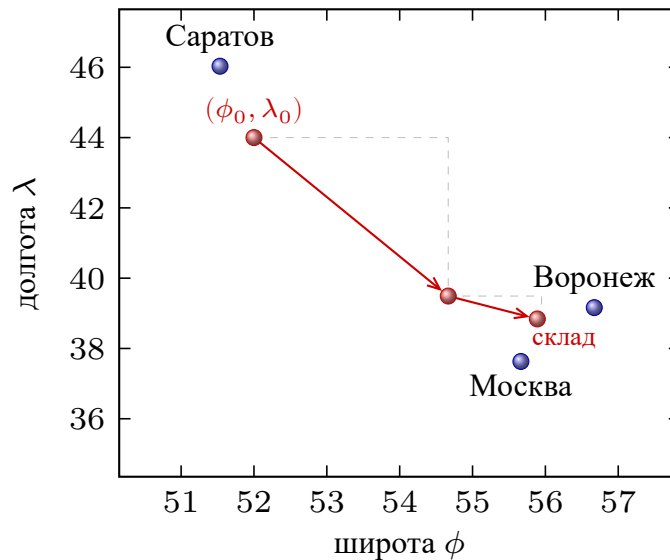


Рисунок 10 – Рельеф целевой функции $f(\phi, \lambda)$ и траектория поиска местоположения склада (ϕ, λ) торговой сети (маркерами обозначены города)

14) Полученные данные в процессе выполнения минимизации целевой функции методом по координатного спуска представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Траектория поиска местоположения склада торговой сети

Итерация	Местоположение склада		Шаг ξ	Расстояние $f(\phi, \lambda)$, км
	широта ϕ	долгота λ		
0	52.00000	44.00000	0.00000	1338.696
1	54.66658	39.49103	5.23846	944.004
2	55.94734	38.88818	1.41555	845.572
3	55.88973	38.83941	0.07548	845.314

На рисунке 11 представлена зависимость суммарного расстояния между складом и всеми магазинами от номера итерации k поиска минимума целевой функции:

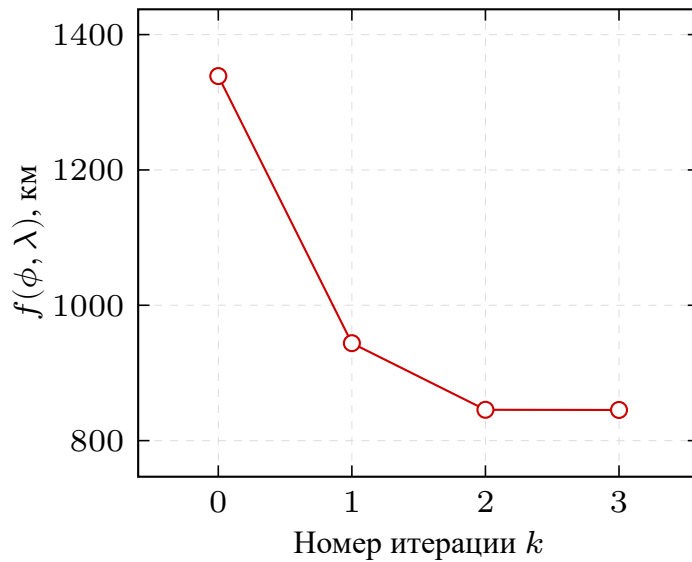


Рисунок 11 – Зависимость суммарного расстояния $f(\phi, \lambda)$ между складом и магазинами торговой сети от числа итераций

На рисунке представлена зависимость изменение местоположения склада ξ от номера итерации k процесса поиска минимума целевой функции:

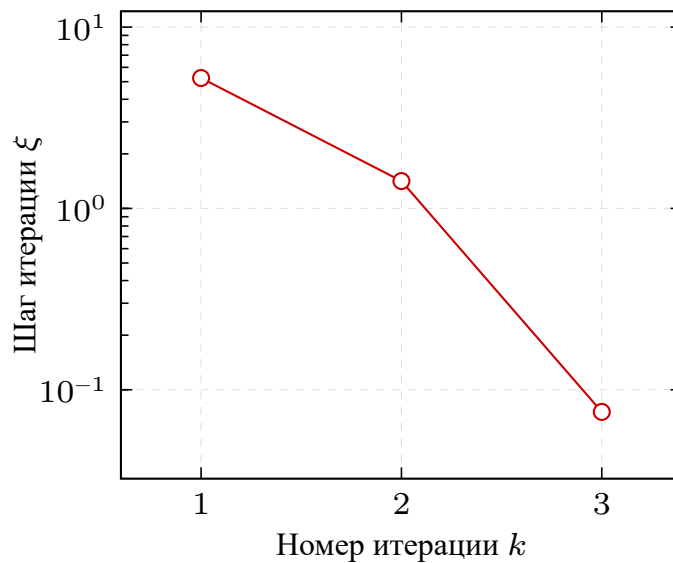
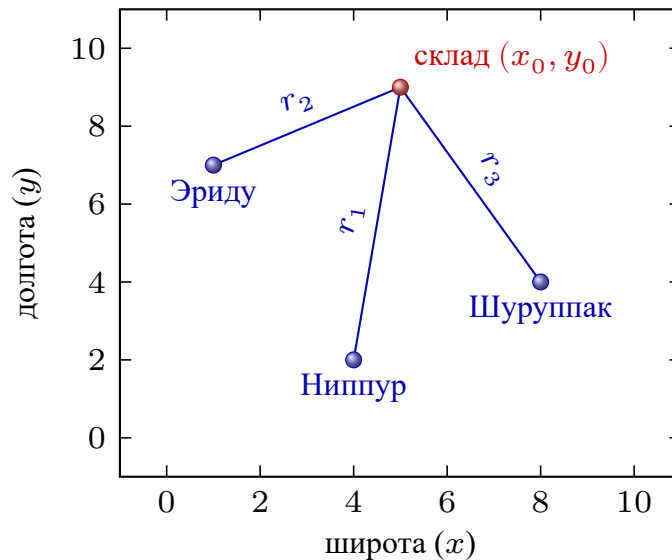


Рисунок 12 – Изменение местоположения склада ξ на k -ом шаге итерационного процесса

1.3.2 Метод градиентного спуска

Известны местоположение трех городов торговой сети в декартовой системе координат: **Ниппур** (4, 2), **Эриду** (1, 7) **Шуруппак** (8, 4).



1) Обозначим неизвестные:

x и y – положения склада по горизонтальной и вертикальной оси координат, соответственно.

2) Целевая функция – суммарное расстояние от склада до всех магазинов:

$$f = r_1 + r_2 + r_3,$$

где r_1, r_2 и r_3 – расстояние от *склада* до городов Ниппур, Эриду и Шуруппак, соответственно.

3) В выбранной декартовой системе координат и для нахождения расстояния от склада до каждого города воспользуемся теоремой **Пифагора Самосского**:

$$r_1 = \sqrt{(x_1 - x)^2 + (y_1 - y)^2}$$

$$r_2 = \sqrt{(x_2 - x)^2 + (y_2 - y)^2}$$

$$r_3 = \sqrt{(x_3 - x)^2 + (y_3 - y)^2},$$

где x_1 и y_1 – декартовы координаты города Ниппур; x_2 и y_2 – декартовы координаты города Эриду; x_3 и y_3 – декартовы координаты города Шуруппак. Таким образом, целевая функция – суммарное расстояние от склада до всех городов, с учетом данных задания о координатах городов (Ниппур, Эриду и

Шуруппак), запишется в виде:

$$f(x, y) = \sqrt{(4-x)^2 + (2-y)^2} + \sqrt{(1-x)^2 + (7-y)^2} + \sqrt{(8-x)^2 + (4-y)^2}$$

4) Определим градиент целевой функции $\nabla f(x, y)$:

$$\nabla f(x, y) = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y} \right)$$

Для этого найдем частные производные целевой функции от координат x и y положения склада:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} = & -\frac{4-x}{\sqrt{(4-x)^2 + (2-y)^2}} \\ & -\frac{1-x}{\sqrt{(1-x)^2 + (7-y)^2}} \\ & -\frac{8-x}{\sqrt{(8-x)^2 + (4-y)^2}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial y} = & -\frac{2-y}{\sqrt{(4-x)^2 + (2-y)^2}} \\ & -\frac{7-y}{\sqrt{(1-x)^2 + (7-y)^2}} \\ & -\frac{4-y}{\sqrt{(8-x)^2 + (4-y)^2}} \end{aligned}$$

5) Выбираем (в общем случае, произвольно) начальные координаты склада, например, $x_0 = 5$ и $y_0 = 9$, скорость градиентного спуска $\lambda = 2$ и точность расчёта $\epsilon_1 = 0.25$ (единиц измерения).

6) Текущее суммарное расстояние от склада до всех городов:

$$\begin{aligned} R_0 = f(5, 9) = & \sqrt{(4-5)^2 + (2-9)^2} \\ & + \sqrt{(1-5)^2 + (7-9)^2} \\ & + \sqrt{(8-5)^2 + (4-9)^2} = 17.37 \end{aligned}$$

Определим градиент целевой функции в начальной точке положения склада

(x_0, y_0) :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\substack{x=5 \\ y=9}} &= -\frac{4-5}{\sqrt{(4-5)^2 + (2-9)^2}} \\ &\quad -\frac{1-5}{\sqrt{(1-5)^2 + (7-9)^2}} \\ &\quad -\frac{8-5}{\sqrt{(8-5)^2 + (4-9)^2}} = 0.52 \end{aligned}$$

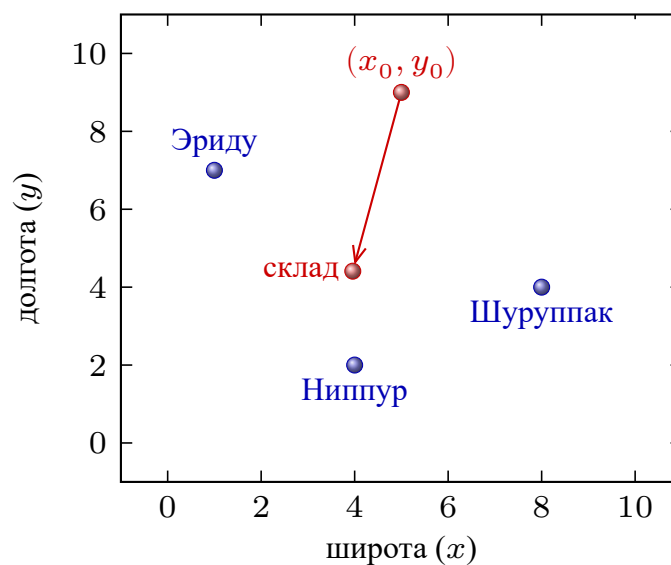
$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\substack{x=5 \\ y=9}} &= -\frac{2-9}{\sqrt{(4-5)^2 + (2-9)^2}} \\ &\quad -\frac{7-9}{\sqrt{(1-5)^2 + (7-9)^2}} \\ &\quad -\frac{4-9}{\sqrt{(8-5)^2 + (4-9)^2}} = 2.29 \end{aligned}$$

Зная градиент целевой функции в начальной точке $\nabla f(x_0, y_0) = (0.52, 2.29)$, определим новые координаты склада:

$$x_1 = x_0 - \lambda \cdot \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\substack{x=5 \\ y=9}} = 5 - 2 \cdot 0.52 = 3.96$$

$$y_1 = y_0 - \lambda \cdot \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\substack{x=5 \\ y=9}} = 9 - 2 \cdot 2.29 = 4.41$$

Новые координаты склада $(x_1 = 3.96; y_1 = 4.41)$.



Рассчитаем величину “шага” – расстояния между двумя последовательными положениями склада:

$$\xi = \sqrt{(5 - 3.96)^2 + (9 - 4.41)^2} = 4.71$$

Сравниваем величину текущего “шага” ξ и заданную точность расчетов ϵ_1 :

$$\xi = 4.71 > \epsilon_1 = 0.25$$

Величина текущего “шага” r больше заданной точности расчетов ϵ_1 , следовательно, *итерационный процесс продолжаем!*

7) Текущее суммарное расстояние от склада до всех городов:

$$\begin{aligned} R_1 = f(3.96, 4.41) = & \sqrt{(4 - 3.96)^2 + (2 - 4.41)^2} \\ & + \sqrt{(1 - 3.96)^2 + (7 - 4.41)^2} \\ & + \sqrt{(8 - 3.96)^2 + (4 - 4.41)^2} = 10.41 \end{aligned}$$

Суммарное расстояние уменьшилось:

$$R_1 = 10.41 < R_0 = 17.37.$$

Рассчитаем градиент целевой функции в новой точке положения склада $x_1 = 3.96$ и $y_1 = 4.41$:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\substack{x_1 = 3.96 \\ y_1 = 4.41}} = & -\frac{4 - 3.96}{\sqrt{(4 - 3.96)^2 + (2 - 4.41)^2}} \\ & -\frac{1 - 3.96}{\sqrt{(1 - 3.96)^2 + (7 - 4.41)^2}} \\ & -\frac{8 - 3.96}{\sqrt{(8 - 3.96)^2 + (4 - 4.41)^2}} = -0.26 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\substack{x_1 = 3.96 \\ y_1 = 4.41}} = & -\frac{2 - 4.41}{\sqrt{(4 - 3.96)^2 + (2 - 4.41)^2}} \\ & -\frac{7 - 4.41}{\sqrt{(1 - 3.96)^2 + (7 - 4.41)^2}} \\ & -\frac{4 - 4.41}{\sqrt{(8 - 3.96)^2 + (4 - 4.41)^2}} = 0.44 \end{aligned}$$

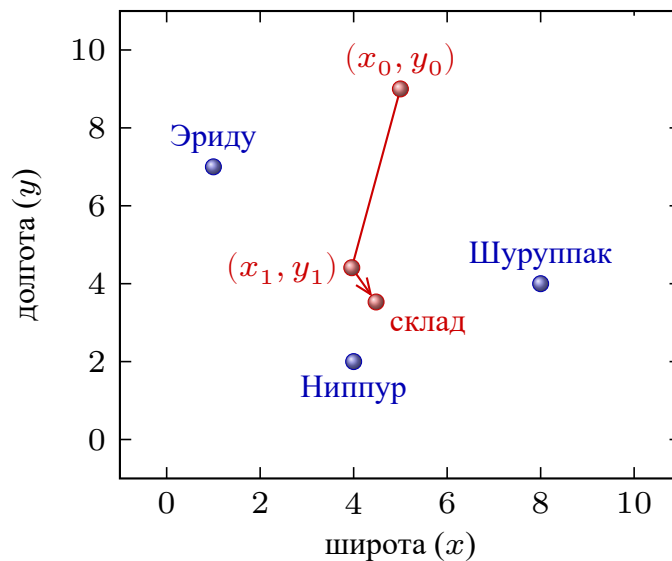
Зная градиент целевой функции в текущей точке $\nabla f(x_1, y_1) = (-0.26, 0.44)$,

определим новые координаты склада:

$$x_2 = x_1 - \lambda \cdot \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\substack{x=3.96 \\ y=4.41}} = 3.96 - 2 \cdot (-0.26) = 4.48$$

$$y_2 = y_1 - \lambda \cdot \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\substack{x=3.96 \\ y=4.41}} = 4.41 - 2 \cdot 0.44 = 3.53$$

Новые координаты склада ($x_2 = 4.48, y_2 = 3.53$).



Рассчитаем величину “шага” – расстояния между двумя последовательными положениями склада:

$$\xi = \sqrt{(3.96 - 4.48)^2 + (4.41 - 3.53)^2} = 1.03$$

Сравниваем величину текущего “шага” ξ и заданную точность расчетов ϵ_1 :

$$\xi = 1.03 > \epsilon_1 = 0.25$$

Величина текущего “шага” ξ больше заданной точности расчетов ϵ_1 , следовательно, *итерационный процесс продолжаем!*

8) Текущее суммарное расстояние от склада до всех городов:

$$\begin{aligned} R_2 = f(4.48, 3.53) &= \sqrt{(4 - 4.48)^2 + (2 - 3.53)^2} \\ &+ \sqrt{(1 - 4.48)^2 + (7 - 3.53)^2} \\ &+ \sqrt{(8 - 4.48)^2 + (4 - 3.53)^2} = 10.07 \end{aligned}$$

Рассчитаем градиент целевой функции в новой точке положения склада $x_2 = 4.48$ и $y_2 = 3.53$:

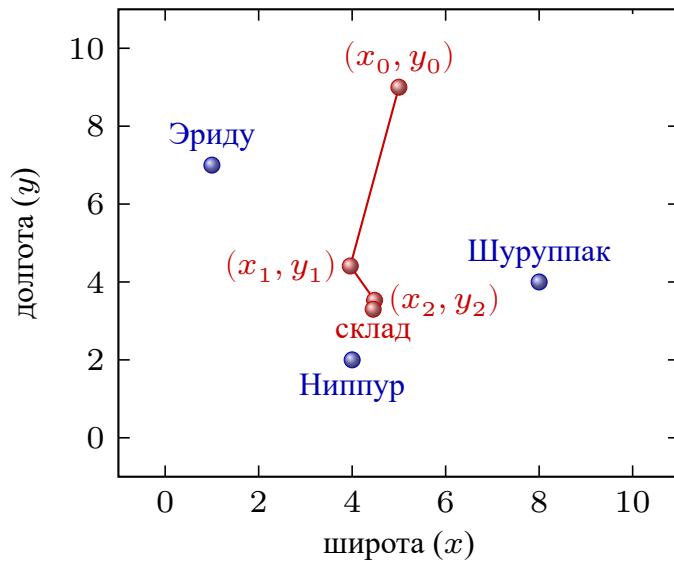
$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\substack{x_2 = 4.48 \\ y_2 = 3.53}} &= -\frac{4 - 4.48}{\sqrt{(4 - 4.48)^2 + (2 - 3.53)^2}} \\ &- \frac{1 - 4.48}{\sqrt{(1 - 4.48)^2 + (7 - 3.53)^2}} \\ &- \frac{8 - 4.48}{\sqrt{(8 - 4.48)^2 + (4 - 3.53)^2}} = 0.02 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\substack{x_2 = 4.48 \\ y_2 = 3.53}} &= -\frac{2 - 3.53}{\sqrt{(4 - 4.48)^2 + (2 - 3.53)^2}} \\ &- \frac{7 - 3.53}{\sqrt{(1 - 4.48)^2 + (7 - 3.53)^2}} \\ &- \frac{4 - 3.53}{\sqrt{(8 - 4.48)^2 + (4 - 3.53)^2}} = 0.11 \end{aligned}$$

Зная градиент целевой функции в текущей точке $\nabla f(x_2, y_2) = (0.02, 0.11)$, определяют новое географическое положение склада:

$$\begin{aligned} x_3 &= x_2 - \lambda \cdot \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\substack{x=4.48 \\ y=3.53}} = 4.48 - 2 \cdot 0.02 = 4.45 \\ y_3 &= y_2 - \lambda \cdot \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\substack{x=4.48 \\ y=3.53}} = 3.53 - 2 \cdot 0.11 = 3.30 \end{aligned}$$

Новые координаты склада ($x_0 = 4.45, y_0 = 3.30$).



Рассчитаем величину “шага” ξ – расстояния между двумя последовательными положениями склада:

$$\xi = \sqrt{(4.48 - 4.45)^2 + (3.53 - 3.30)^2} = 0.23$$

Сравниваем величину текущего “шага” ξ и заданную точность расчетов ϵ_1 :

$$\xi = 0.23 < \epsilon_1 = 0.25$$

Величина текущего “шага” ξ меньше заданной точности расчетов ϵ_1 , поэтому итерационный процесс поиска положения склада *прекращаем!*

9) Определим минимальное расстояние от склада до всех городов:

$$\begin{aligned} R_4 = f(4.45, 3.30) = & \sqrt{(1 - 4.45)^2 + (7 - 3.30)^2} \\ & + \sqrt{(4 - 4.45)^2 + (2 - 3.30)^2} \\ & + \sqrt{(8 - 4.45)^2 + (4 - 3.30)^2} = 10.05 \end{aligned}$$

Таким образом, с заданной точностью определены оптимальные координаты склада ($x_{\min} = 4.45$, $y_{\min} = 3.30$), при которых общее расстояние от всех городов до склада будет минимальным и составит $R_{\min} = 10.05$:

2 Аппроксимация функций

Задача о приближении функции ставится следующим образом: данную функцию $f(x)$ необходимо заменить обобщенным полиномом $p_m(x)$ заданного порядка m так, чтобы отклонение (в известном смысле) функции $f(x)$ от обобщенного полинома $p_m(x)$ на указанном множестве $x = \{x\}$ было наименьшим. При этом полином $p_m(x)$ в общем случае называется аппроксимирующим.

Если множество x состоит из отдельных точек $x \in \{x_0, x_1, x_2, \dots, x_n\}$ (узлов), то приближение называется *точечным*. Если x есть отрезок $x_a < x < x_b$, то приближение называется *интегральным*. Для практики важным является приближение функций алгебраическими и тригонометрическими полиномами.

В случае постановки задачи поиска аппроксимирующей функции, которая обеспечивает погрешность не хуже заданной, необходимо подбирать и структуру этой функции. Эта задача значительно сложнее предыдущей и подходы в её решении основываются на переборе различных функций $p_m(x)$ и сравнении мер близости результатов расчета с исходными данными.

2.1 Точечное квадратичное аппроксимирование функций

На практике часто бывает, что заданный порядок m приближающего полинома $p_m(x)$ меньше числа узлов аппроксимации $m < n$, в которых известно значение функции $y_i = f(x_i)$ ($i = 0, 1, 2, \dots, n$). В этом случае обычно используют точечный метод наименьших квадратов и рассматривается алгебраический полином степени m вида:

$$p_m(x) = c_0 + c_1 \cdot x + c_2 \cdot x^2 + \dots + c_m \cdot x^m = \sum_{j=0}^m c_j \cdot x^j. \quad (15)$$

В качестве меры отклонения $\|r\|$ полинома $p_m(x)$ от известной функции $y(x)$ на множестве точек $\{x_0, x_1, x_2, \dots, x_n\}$, как правило, принимается сумма квадратов отклонений полинома от этой функции на заданной системе точек:

$$\|r\| = \sum_{i=0}^n (p_m(x_i) - y_i)^2 \quad (16)$$

Следует отметить, что мера отклонения полинома от известной функции есть функция многих переменных $\|r\| = \rho(c_0, c_1, \dots, c_m)$, т.е. коэффициентов полинома c_i ($i = 0, 1, \dots, m$), которые необходимо подобрать так, чтобы вели-

чина меры отклонения была наименьшей $\|r\| \rightarrow \min$. Полученный полином называется аппроксимирующим для данной функции, а процесс построения этого полинома – точечной квадратичной аппроксимацией или точечным квадратичным аппроксимированием функции.

Для решения задачи точечного квадратичного аппроксимирования, т.е. определения числовых значений всех коэффициентов полинома $p_m(x)$, необходимо найти *положения минимума функции* многих переменных $\rho(c_0, c_1, \dots, c_m)$.

Определим частные производные от величины суммы квадратов отклонений и воспользовавшись условием экстремума функции многих переменных, составим систему уравнений вида:

$$\frac{\partial \rho}{\partial c_0} = \frac{\partial \rho}{\partial c_1} = \frac{\partial \rho}{\partial c_2} = \dots = \frac{\partial \rho}{\partial c_m} = 0$$

Для определения неизвестных коэффициентов полинома $c_0, c_1, c_2, \dots, c_m$ необходимо решить систему $m + 1$ уравнений с $m + 1$ неизвестными:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial c_0} = 2 \cdot \sum_{i=0}^n (c_0 + c_1 \cdot x_i + c_2 \cdot x_i^2 + \dots + c_m \cdot x_i^m - y_i) \cdot 1 = 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial c_1} = 2 \cdot \sum_{i=0}^n (c_0 + c_1 \cdot x_i + c_2 \cdot x_i^2 + \dots + c_m \cdot x_i^m - y_i) \cdot x_i = 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial c_2} = 2 \cdot \sum_{i=0}^n (c_0 + c_1 \cdot x_i + c_2 \cdot x_i^2 + \dots + c_m \cdot x_i^m - y_i) \cdot x_i^2 = 0 \\ \dots = \dots = 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial c_m} = 2 \cdot \sum_{i=0}^n (c_0 + c_1 \cdot x_i + c_2 \cdot x_i^2 + \dots + c_m \cdot x_i^m - y_i) \cdot x_i^m = 0 \end{array} \right.$$

Таким образом, задача точечной квадратичной аппроксимации функции сводится к решению системы линейных уравнений относительно неизвестных – коэффициентов полинома $\{c_0, c_1, c_2, \dots, c_m\}$:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{b} \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & \dots & a_{0m} \\ a_{10} & a_{11} & \dots & a_{1m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m0} & a_{m1} & \dots & a_{mm} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}, \quad (17)$$

где $\mathbf{A} = \{a_{k\ell}\}$ и $\mathbf{b} = \{b_k\}$ – квадратная матрица и вектор правых частей системы

линейных уравнений, соответственно:

$$a_{k\ell} = \sum_{i=0}^n x_i^k \cdot x_i^\ell, \quad b_k = \sum_{i=0}^n x_i^k \cdot y_i, \quad k, \ell = 0, 1, 2, \dots, m$$

Если среди узлов сетки $\{x_i\}$ нет совпадающих, а также степень полинома меньше чем число узлов аппроксимации $m < n$, то определитель системы не равен нулю $\det \mathbf{A} \neq 0$. Следовательно, эта система имеет единственное решение $\mathbf{c} = \{c_0, c_1, c_2, \dots, c_m\}$, а полином $p_m(x)$ с такими коэффициентами $\{c_i\}$ будет обладать минимальным квадратичным отклонением ρ_{\min} .

Зная коэффициенты аппроксимирующего полинома, можно вычислить величину $\|r\|$, например, для сравнения различных аппроксимирующих функций.

Следует отметить, что все коэффициенты $\{c_i\}$ полинома (15) находятся из решения системы уравнений (17), т.е. они связаны между собой. Поэтому если какой-либо коэффициент c_i вследствие его малости ($c_i \approx 0$) отбросить, то необходимо *пересчитывать все оставшиеся коэффициенты* полинома $p_m(x)$.

Кроме того, при изменении даже одного значения исходных данных $\{x_i, y_i\}$ все коэффициенты полинома (15) изменят свои значения, так как они полностью определяются исходными данными. Поэтому при повторении аппроксимации с несколько изменившимися данными (например, вследствие погрешностей измерения, помех, влияния неучтенных факторов и т.п.) получится другая аппроксимирующая функция, отличающаяся коэффициентами.

2.2 Аппроксимирование функций полиномом второй степени $p_2(x)$

Известна таблица данных некоторой функциональной зависимости $y(x)$:

Таблица 3 – Таблично заданная функциональная зависимость $y_i = f(x_i)$

i	0	1	2	3	4
x_i	−0.76	−0.48	−0.09	0.22	0.55
y_i	5.15	4.39	4.10	5.71	5.30

Необходимо аппроксимировать функцию $\{y_i\}$, заданную таблично, ал-

гебраическим полиномом второй степени $p_2(x)$:

$$p_2(x) = c_0 + c_1 \cdot x + c_2 \cdot x^2$$

- 1) Построим меру отклонения полинома $p_2(x)$ от таблично заданной функции $y_i = f(x_i)$ на множестве точек $\{x_0, x_1, x_2, x_3, x_4\}$:

$$\|r\| = \rho(c_0, c_1, c_2) = \sum_{i=0}^4 (c_0 + c_1 \cdot x_i + c_2 \cdot x_i^2 - y_i)^2,$$

где $y_i = f(x_i)$ – значение функции в точке x_i .

- 2) Запишем меру отклонения $\rho(c_0, c_1, c_2)$ в явном виде на основе данных из условия задачи:

$$\begin{aligned} \rho(c_0, c_1, c_2) = & (c_0 + c_1 \cdot (-0.76) + c_2 \cdot (-0.76)^2 - 5.15)^2 + \\ & (c_0 + c_1 \cdot (-0.48) + c_2 \cdot (-0.48)^2 - 4.39)^2 + \\ & (c_0 + c_1 \cdot (-0.09) + c_2 \cdot (-0.09)^2 - 4.10)^2 + \\ & (c_0 + c_1 \cdot (0.22) + c_2 \cdot (0.22)^2 - 5.71)^2 + \\ & (c_0 + c_1 \cdot (0.55) + c_2 \cdot (0.55)^2 - 5.30)^2 \end{aligned}$$

- 3) Определим частную производную от меры отклонений $\rho(c_0, c_1, c_2)$ по аргументу c_0 и приравняем её нулю:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial c_0} = & 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (-0.76) + c_2 \cdot (-0.76)^2 - 5.15) \cdot 1 + \\ & 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (-0.48) + c_2 \cdot (-0.48)^2 - 4.39) \cdot 1 + \\ & 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (-0.09) + c_2 \cdot (-0.09)^2 - 4.10) \cdot 1 + \\ & 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (0.22) + c_2 \cdot (0.22)^2 - 5.71) \cdot 1 + \\ & 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (0.55) + c_2 \cdot (0.55)^2 - 5.30) \cdot 1 = 0 \end{aligned}$$

Коэффициенты первой строки матрицы **A** и первый элемент вектора **b**:

$$a_{00} = 1 + 1 + 1 + 1 + 1 = 5$$

$$a_{01} = (-0.76) + (-0.48) + (-0.09) + (0.22) + (0.55) = -0.56$$

$$a_{02} = (-0.76)^2 + (-0.48)^2 + (-0.09)^2 + (0.22)^2 + (0.55)^2 = 1.18$$

$$b_0 = 5.15 + 4.39 + 4.10 + 5.71 + 5.30 = 24.65$$

- 4) Определим частную производную от меры отклонений $\rho(c_0, c_1, c_2)$ по аргументу c_1 и приравняем её нулю:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial c_1} = & 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (-0.76) + c_2 \cdot (-0.76)^2 - 5.15) \cdot (-0.76) + \\ & 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (-0.48) + c_2 \cdot (-0.48)^2 - 4.39) \cdot (-0.48) + \\ & 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (-0.09) + c_2 \cdot (-0.09)^2 - 4.10) \cdot (-0.09) + \\ & 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (0.22) + c_2 \cdot (0.22)^2 - 5.71) \cdot (0.22) + \\ & 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (0.55) + c_2 \cdot (0.55)^2 - 5.30) \cdot (0.55) = 0\end{aligned}$$

Коэффициенты второй строки матрицы **A** и второй элемент вектора **b**:

$$\begin{aligned}c_{10} &= (-0.76) + (-0.48) + (-0.09) + (0.22) + (0.55) = -0.56 \\ c_{11} &= (-0.76)^2 + (-0.48)^2 + (-0.09)^2 + (0.22)^2 + (0.55)^2 = 1.18 \\ c_{12} &= (-0.76)^3 + (-0.48)^3 + (-0.09)^3 + (0.22)^3 + (0.55)^3 = -0.38 \\ b_1 &= 5.15 \cdot (-0.76) + 4.39 \cdot (-0.48) + 4.10 \cdot (-0.09) + \\ & 5.71 \cdot (0.22) + 5.30 \cdot (0.55) = -2.24\end{aligned}$$

- 5) Определим частную производную от меры отклонений $\rho(c_0, c_1, c_2)$ по аргументу c_2 и приравняем её нулю:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial c_2} = & 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (-0.76) + c_2 \cdot (-0.76)^2 - 5.15) \cdot (-0.76)^2 + \\ & + 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (-0.48) + c_2 \cdot (-0.48)^2 - 4.39) \cdot (-0.48)^2 + \\ & + 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (-0.09) + c_2 \cdot (-0.09)^2 - 4.10) \cdot (-0.09)^2 + \\ & + 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (0.22) + c_2 \cdot (0.22)^2 - 5.71) \cdot (0.22)^2 + \\ & + 2 \cdot (c_0 + c_1 \cdot (0.55) + c_2 \cdot (0.55)^2 - 5.30) \cdot (0.55)^2 = 0\end{aligned}$$

Коэффициенты третьей строки матрицы **A** и третий элемент вектора **b**:

$$\begin{aligned}c_{20} &= (-0.76)^2 + (-0.48)^2 + (-0.09)^2 + (0.22)^2 + (0.55)^2 = 1.18 \\ c_{21} &= (-0.76)^3 + (-0.48)^3 + (-0.09)^3 + (0.22)^3 + (0.55)^3 = -0.38 \\ c_{22} &= (-0.76)^4 + (-0.48)^4 + (-0.09)^4 + (0.22)^4 + (0.55)^4 = 0.49 \\ b_2 &= 5.15 \cdot (-0.76)^2 + 4.39 \cdot (-0.48)^2 + 4.10 \cdot (-0.09)^2 + \\ & 5.71 \cdot (0.22)^2 + 5.30 \cdot (0.55)^2 = 5.94\end{aligned}$$

- 6) Таким образом, для определения неизвестных коэффициентов c_0, c_1, c_2 аппроксимирующего полинома $p_2(x)$ необходимо решить систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{pmatrix} 5 & -0.56 & 1.18 \\ -0.56 & 1.18 & -0.38 \\ 1.18 & -0.38 & 0.49 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 24.65 \\ -2.24 \\ 5.94 \end{pmatrix}$$

- 7) Решение этой системы линейных уравнений можно найти методом Гаусса:

$$\begin{cases} c_0 = 4.66 \\ c_1 = 0.80 \\ c_2 = 1.52 \end{cases}$$

Таким образом, аппроксимирующий полином имеет вид:

$$p_2(x) = 4.66 + 0.80 \cdot x + 1.52 \cdot x^2 \quad (18)$$

- 8) На одном графике представим диаграмму рассеяния (разброса) данных функции заданной таблично $y_i = f(x_i)$ (маркеры) и результаты вычислений аппроксимирующего алгебраического полинома второго порядка $p_2(x)$ (сплошная линия).

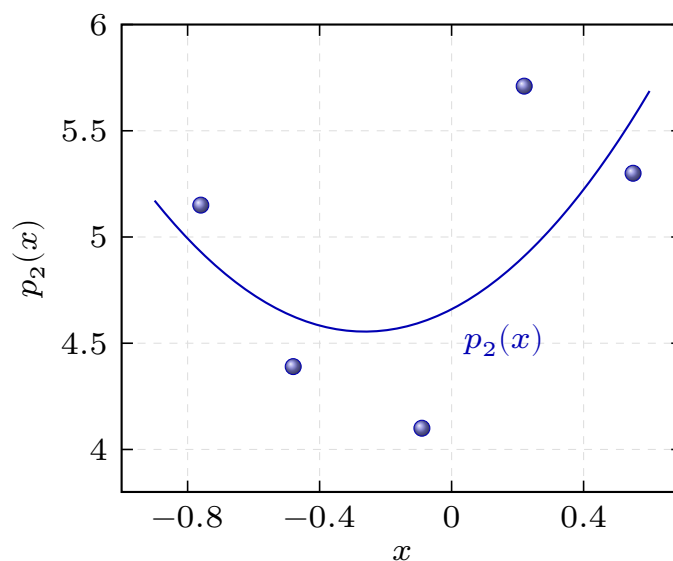


Рисунок 13 – График таблично заданной функции $y_i = f(x_i)$ (маркеры) и аппроксимирующего алгебраического полинома $p_2(x)$ (сплошная линия)

9) Рассчитаем значения аппроксимирующего полинома (18) и ошибку аппроксимации таблично заданной функции в узлах сетки $\{x_i\}$ (таблица 4):

$$\epsilon_i = y_i - p_2(x_i) \quad (19)$$

Таблица 4 – Рассчитанные значения аппроксимирующего полинома $p_2(x)$

i	0	1	2	3	4
x_i	-0.76	-0.48	-0.09	0.22	0.55
y_i	5.15	4.39	4.10	5.71	5.30
$p_2(x_i)$	4.93	4.63	4.60	4.91	5.56
ϵ_i	0.22	-0.24	-0.50	0.80	-0.26

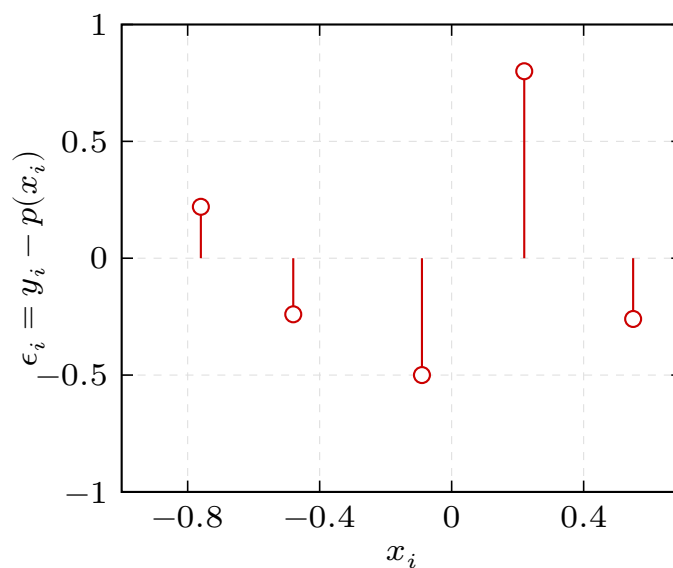


Рисунок 14 – Ошибка аппроксимации полиномом $p(x)$ функции заданной таблично $y_i = f(x_i)$

10) Рассчитаем среднее квадратичное отклонение δ полинома (18) от значений функции $\{y_i\}$ в узлах сетки $\{x_i\}$:

$$\delta = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=0}^{n-1} \epsilon_i^2 = \frac{0.05 + 0.06 + 0.25 + 0.64 + 0.07}{5} = 0.213, \quad (20)$$

где $n = 5$ – количество узлов сетки.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Самарский А. А. Введение в численные методы. – Лань, 2009. – 288 с.
- 2 Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы: учебное пособие для вузов // М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит. 1989. – 432 с.
- 3 Самарский А. А. и др. Задачи и упражнения по численным методам: Учебное пособие // М.: Эдиториал УРСС, 2000. – 208 с.
- 4 Калиткин Н. Н. Численные методы. 2 изд. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 592 с.
- 5 Калиткин Н. Н. Численные методы: Учебное пособие. – Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1978. – 511 с.
- 6 Демидович, Б.П. Численные методы анализа: приближение функций, дифференциальные и интегральные уравнения / Б.П. Демидович, И.А. Марон, Э.З. Шувалова ; под ред. Б.П. Демидович. – Изд. 3-е, перераб. – Москва : Главная редакция физико-математической литературы, 1967. – 368 с.
- 7 [Список математических символов \$\LaTeX\$](https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_mathematical_symbols_by_subject) –URL: https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_mathematical_symbols_by_subject
- 8 Бояршинов, М. Г. Вычислительные методы алгебры и анализа: учебное пособие / М. Г. Бояршинов. – Саратов : Вузовское образование, 2020. – 225 с. – ISBN 978-5-4487-0687-5. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/93065.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим до-ступа: для авторизир. пользователей. - DOI: <https://doi.org/10.23682/93065>
- 9 Олейникова, С. А. Численные методы решения оптимизационных задач: учебное пособие / С. А. Олейникова. – Воронеж : Воронежский государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2021. – 114 с. – ISBN 978-5-7731-0960-0. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/118626.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей
- 10 Гарифуллин, М. Ф. Численные методы интегрирования дифференциальных уравнений / М. Ф. Гарифуллин. – Москва : Техносфера,

2020. – 192 с. – ISBN 978-5-94836-597-8. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/99103.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей

- 11 Ахмадиев, Ф. Г. Математическое моделирование и методы оптимизации: учебное пособие / Ф. Г. Ахмадиев, Р. М. Гильфанов. – Москва : Ай Пи Ар Медиа, 2022. – 178 с. – ISBN 978-5-4497-1383-4. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/116448.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей
- 12 Рутта, Н. А. Методы и модели принятия оптимальных решений в экономике: учебное пособие для бакалавров / Н. А. Рутта. – Москва : Ай Пи Ар Медиа, 2022. – 87 с. – ISBN 978-5-4497-1534-0. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/118015.html> (дата обращения: 30.01.2022). – Режим доступа: для авторизир. пользователей