



Методи моделювання та оптимізації

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Перший (бакалаврський)</i>
Галузь знань	<i>13 Механічна інженерія</i>
Спеціальність	<i>132 Матеріалознавство</i>
Освітня програма	<i>Нанотехнології та комп'ютерний дизайн матеріалів</i>
Статус дисципліни	<i>Нормативна</i>
Форма навчання	<i>очна(денна)/змішана/дистанційна</i>
Рік підготовки, семестр	<i>III курс, весняний семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>2 кредити ECTS (18 годин лекцій, 18 годин лабораторних робіт, 24 годин СРС)</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік / МКР / Розрахункова робота</i>
Розклад занять	<i>http://rozklad.kpi.ua/Schedules/ViewSchedule.aspx</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лектор: к.т.н., доц. Степанов Олег Васильович, ostepanoff@iff.kpi.ua; +380 50 330 68 15; Лабораторні (комп'ютерний практикум): к.т.н., доц. Степанов Олег Васильович, ostepanoff@iff.kpi.ua; +380 50 330 68 15;</i>
Розміщення курсу	<i>GoogleClassroom: https://classroom.google.com/c/MjU0MDc2NzQ3NzM2; електронний кампус: https://ecampus.kpi.ua/</i>

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Математичне моделювання є сучасною концепцією, методи якої широко застосовуються при розробці, проектуванні та дослідженні систем, зокрема технічних. Математичні методи моделювання та оптимізації не залежать від галузі їх застосування і можуть застосовуватись в соціальних, правових, медичних, технічних та інших напрямках дослідження, оскільки оперують не окремими факторами а співвідношенням факторів. Математичне моделювання застосовують для встановлення та уточнення механізмів процесів, розробки алгоритмів конструкторських та технологічних розрахунків, імітації роботи систем та їх складових, оптимізації технологічних процесів, виробів, матеріалів, тощо. Таким чином математичні методи моделювання та оптимізації можуть розглядатися як універсальний засіб одержання та/або оброблення інформації, здатний замінити або доповнити натурний експеримент. Саме тому оволодіння математичними методами моделювання та оптимізації є невід'ємною частиною підготовки фахівців з вищою освітою.

Предметом вивчення дисципліни є методи моделювання та оптимізації: математичні методи відбору параметрів математичних, структурної та параметричної ідентифікації моделей, дослідження та оптимізації технічних, зокрема матеріалознавчих, систем на основі їх моделей.

Метою дисципліни є розвиток у студентів загальних та фахових компетентностей:

- *Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу;*
- *Здатність виявляти, ставити та вирішувати проблеми*

- Здатність використання інформаційних і комунікаційних технологій
- Здатність застосовувати відповідні кількісні математичні, фізичні і технічні методи і комп'ютерне програмне забезпечення для вирішення інженерних матеріалознавчих завдань;
- Здатності застосовувати системний підхід до вирішення інженерних матеріалознавчих проблем;
- Здатність застосовувати сучасні методи математичного та фізичного моделювання, дослідження структури, фізичних, механічних, функціональних та технологічних властивостей матеріалів для вирішення матеріалознавчих проблем;
- Здатність застосовувати сучасні підходи оптимізації та дизайну матеріалів для удосконалення їх властивостей залежно від умов експлуатації.

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

- Володіти логікою та методологію наукового пізнання
- Володіти засобами сучасних інформаційних та комунікаційних технологій та професійної діяльності
- Знати і використовувати методи фізичного і математичного моделювання при створенні нових та удосконаленні існуючих матеріалів, технологій їх виготовлення.
- Обирати і застосовувати придатні типові методи досліджень (аналітичні, розрахункові, моделювання, експериментальні); правильно інтерпретувати результати таких досліджень та робити висновки

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Дисципліна викладається у шостому семестрі підготовки за освітньо-професійною програмою бакалаврів, має систематизуючий узагальнюючий характер. Для успішного засвоєння дисципліни студент повинен оволодіти набором компетентностей та програмних результатів навчання дисциплін:

- Вища математика;
- Фізика;
- Інформатика, обчислювальна техніка, програмування та числові методи;
- Теоретична та прикладна механіка.

Результати вивчення дисципліни методи моделювання та оптимізації необхідні для вивчення дисциплін:

- Основи організації експерименту;
- Основи комп'ютерного дизайну матеріалів;
- У виконанні курсових та дипломних робіт (проектів) та як складова інтегральної компетентності підготовки за освітньо-професійною програмою.

3. Зміст навчальної дисципліни

Розділ 1. Математичне моделювання при створенні матеріалів та процесів їх обробки

Тема 1. Математичні моделі

Розділ 2. Розробка математичних моделей.

Тема 2. Основні етапи створення математичних моделей

Тема 3. Ідентифікація структури та параметрів моделей

Розділ 3. Методи безумовної оптимізації.

Тема 4. Оптимізація функції однієї змінної

Тема 5. Оптимізація багатомірної функції

Розділ 4. Методи умовної оптимізації.

Тема 6. Загальна задача нелінійного програмування. Задача лінійного програмування, симплекс-метод

Тема 7. Методи перетворення задач нелінійного програмування.

4. Навчальні матеріали та ресурси

4.1 Базова література

1. Степанов О. В. Математичне моделювання та оптимізація : навч. посіб. / Степанов О. В. – Київ : ІВЦ «Видавництво «Політехніка»», 2004. – 112 с.
2. Зайченко Ю. П. Дослідження операцій : підручник / Зайченко Ю. П. – Київ : Видавничий дім «Слово», 2006. – 816 с.
3. Математичне моделювання систем і процесів / Павленко П. М., Філоненко С. Ф., Чередніков О. М., Трейтяк В. В. – Київ : НАУ, 2017. – 408 с.

Базова література доступна в науково-технічній бібліотеці КПІ ім. Ігоря Сікорського, навчальний посібник [1] – в бібліотеці кафедри ВТМ та ПМ та в електронному репозиторії кафедри. Інші підручники доступні у відкритих електронних джерелах.

Додаткова література

1. Вагнер Г. Основы исследования операций : в 3-х томах / Вагнер Г. – Москва : Мир, 1972-73.
2. Клар Дж. Системология. Автоматизация решения системных задач / Клар Дж. – Москва : Радио и связь, 1990. – 544 с.
3. Федоткин И. М. Математическое моделирование технологических процессов / Федоткин И. М. – Київ : Вища школа, 1988. – 415 с.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни(освітнього компонента)

5.1 Лекції (36 годин)

Заняття 1. Вступ. Мета та програмні цілі дисципліни, рейтингова система оцінювання.

Математичні моделі. Основні положення теорії систем. Зв'язок математичного моделювання з завданнями дослідження, оптимізації та управління технічними системами, процесами та об'єктами. Класифікація математичних моделей. Мета створення математичних моделей та функції, які вони виконують. Формальні (емпірико-статистичні) та теоретичні (аксіоматичні) математичні моделі. Особливості порядку роботи з ними. [1], [2], [3].

Заняття 2. Зв'язок структури математичної моделі з особливостями системи, що моделюється: динамічні та статичні моделі, детерміновані та стохастичні моделі. Структурна ідентифікація моделей. Основні етапи створення математичних моделей. Простір ситуацій та цілей. Формування факторного простору. Вимоги до параметрів моделей. [1], [2], [3].

Заняття 3. Ідентифікація параметрів лінійних моделей Ідентифікація параметрів статичних моделей. Лінійні моделі. Метод найменших квадратів. Обмеження методу найменших квадратів. Вивід системи ідентифікації для лінійної статичної моделі з N-вимірним входом[1], [2]. Ідентифікація параметрів нелінійних моделей Ідентифікація параметрів статичних моделей. Нелінійні моделі. Можливості застосування методу найменших квадратів для ідентифікації лінійних моделей (функціональних та лінійних відносно параметрів ідентифікації). Засоби лінеаризації нелінійних моделей. [1], [2].

Заняття 4. Оптимізація. Загальна постановка задачі оптимізації. Класифікація оптимізаційних задач, та методів пошукової оптимізації. Задачі однопараметричної та багатопараметричної

оптимізації. [1]. Методи прямого пошуку: метод триточкового пошуку на рівних інтервалах, метод золотого перетину, метод Пауела. Методи, що базуються на понятті похідної при розв'язку задач однопараметричної оптимізації – метод дотичних, метод хорд, метод дихотомії.[1].

Заняття 5. Тематична контрольна робота 1. Застосування методів оптимізації функції однієї змінної (Додаток А). Прямі методи багатопараметричної оптимізації Багатопараметрична оптимізація. Необхідна умова існування екстремуму функції декількох невідомих. Оптимізація методами пошуку за симплексом та Хука-Дживса. [1], [3]. Прямі методи багатопараметричної оптимізації Оптимізація функції декількох змінних методом спряжених напрямків Пауела. Квадратична форма та її властивості. Перетворення квадратичної форми. Оптимізація функції декількох змінних методом спряжених напрямків Пауела. [1].

Заняття 6. Багатопараметрична оптимізація градієнтними методами. Градієнтні методи оптимізації функції декількох змінних. Необхідна та достатня умова оптимальності. Обмеження на використання градієнтних методів. [1]. Багатопараметрична оптимізація градієнтними методами. Метод Ньютона. Казіньютонівські методи. Можливість застосування градієнтних та ньютонівських методів для оптимізації експериментальної функції.[1].

Заняття 7. Тематична контрольна робота 2. Ідентифікація параметрів багатопараметричної нелінійної моделі та багатопараметрична оптимізація (Додаток А). Умовна оптимізація. Загальна задача математичного програмування. Метод множників Лагранжа. Умови та задача Куна-Таккера. Умови існування екстремума. (електронна презентація. [1].

Заняття 8. Задачі лінійного програмування. Умовна оптимізація у випадку лінійної функції та лінійних обмежень. Методи лінійного програмування. Симплекс метод. Фізичний зміст коефіцієнтів системи симплекс методу.[1]. Фізичний зміст коефіцієнтів системи симплекс методу. Оцінка стійкості одержаного розв'язку до зміни окремих параметрів вихідної моделі. Зворотня задача.[1], [2]. Використання методів безпосереднього пошуку та перетворення задачі у розв'язку задач умовної оптимізації. Метод комплексів, метод штрафних функцій. [1].

Заняття 9. Підсумкова лекція. Семестровий контроль - залік.

5.2 Лабораторні роботи (комп'ютерний практикум) (18 годин)

Мета лабораторних робіт:

- практично оволодіти реалізацією математичних методів моделювання та оптимізації в середовищі електронних таблиць (табличних процесорів загального призначення) та/або в середовищі сучасних систем діалогової математики
- напрацювати методики підготовки даних та оцінки одержаних результатів у розв'язанні задач оптимізації.

Зміст комп'ютерних практикумів

Заняття 1. Розв'язання систем лінійних рівнянь методом Гауса в середовищі електронних таблиць

Заняття 2. Ідентифікація параметрів лінійних моделей декількох змінних методом найменших квадратів

Заняття 3. Ідентифікація параметрів нелінійних моделей декількох змінних лінійних відносно параметрів ідентифікації

Заняття 4. Оптимізація функції однієї змінної методом золотого перетину

Заняття 5. Оптимізація функції однієї змінної методом квадратичної апроксимації Пауела

Заняття 6. Оптимізація функції декількох змінних методом пошуку за симплексом

Заняття 7. Оптимізація функції декількох змінних методом Ньютона

Заняття 8. Розв'язання стандартної задачі лінійного програмування

Заняття 9. Підсумкове заняття

6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студентів (загальна тривалість 24 годин) полягає у:

Самостійному опрацюванні лекційного матеріалу – всього 7 годин

Підготовці до комп'ютерних практикумів (0,5 години на практикум) – всього 4 години

Підготовці до ТКР (по 1,5 години) - всього 3 години

Виконанні розрахункової роботи – всього 4 годин

Підготовці до семестрового контролю – заліку – 6 годин.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Система вимог, які ставляться перед студентом:

- *Тему пропущеного лекційного заняття студент повинен опрацювати самостійно шляхом написання конспекту;*
- *Завдання пропущеного комп'ютерного практикуму студент має виконати в час, узгоджений з викладачем.*
- *У випадку пропуску заняття, коли виконується частина 1 МКР, у зв'язку з неможливістю її індивідуального виконання, студент одержує для самостійного виконання завдання, рівноцінне пропущеному.*
- *Під час усіх видів аудиторних занять забороняється використання мобільних телефонів у звуковому режимі, дозволяється обмежене використання месенджерів у беззвучному режимі. Під час комп'ютерних практикумів дозволяється застосування персональних комп'ютерів для пошуку інформації, використання власних ресурсів, тощо.*
- *Результати виконаних комп'ютерних практикумів оформлюються у вигляді звітів з застосуванням текстового редактора. Звіт включає текстовий та ілюстраційний матеріал, що підтверджує виконання завдання, може включати посилання на електронну таблицю, у якій виконано розрахунки, завершується висновком.*
- *Розрахункова робота оформлюється у вигляді звіту з посиланнями на електронні таблиці з виконаними розрахунками. Таблиці повинні містити коментарі, стосовно використаних методів, прийнятих рішень у вузлах алгоритмів.*
- *Заохочувальні бали можуть бути призначені за особливі досягнення – зокрема застосування власних програм для реалізації методів які вивчаються, що дає змогу досліджувати властивості самих методів.*
- *Політикою дедлайнів передбачається необхідність своєчасного виконання завдань. Конспект пропущеної лекції має бути виконаний і поданий на перевірку не пізніше 2-х тижнів з часу пропущеної лекції. У випадку пропуску лекції через тривалу хворобу – не більше 2-х тижнів після одужання. Звіти з практичних занять виконуються і подаються на перевірку не пізніше 2-х тижнів з моменту завершення. Усі письмові документи мають бути захищені до закінчення теоретичного навчання в семестрі.*
- *Усі учасники освітнього процесу: викладачі і студенти в процесі роботи вивчення*

дисципліни мають керуватись принципами академічної доброчесності, передбаченими «Кодексом честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут»» <https://kpi.ua/code>.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Оцінювання результатів навчання проводиться за рейтинговою системою, складеною відповідно до вимог «Положення про систему оцінювання результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського»

Поточне оцінювання включає оцінку:

- підготовки, виконання, оформлення звітів та захисту комп'ютерних практикумів;
- виконання розділів модульної контрольної роботи
- виконання індивідуального семестрового завдання (розрахункової роботи)

Повне виконання та захист результатів лабораторних робіт оцінюється в 5 балів (8 практикумів = 40 балів). Неповне виконання завдання, помилки в алгоритмах розрахунку, кінцевих результатах призводить до зниження оцінки на 1 або 2 бали.

Максимальна оцінка за кожну з тематичних контрольних робіт складає 15 балів (2 тематичні КР = 30 балів). Неповне виконання завдання, помилки у використанні алгоритмів, некоректна зупинка алгоритму призводить до зниження оцінки на 1-6 балів. Мінімальна позитивна оцінка з кожної тематичної контрольної роботи складає 8 балів.

Максимальна оцінка за повне виконання та захист розрахункової роботи (Додаток Б.) складає 30 балів, які розкладаються наступним чином: 1-ше та 2-ге завдання по 5 балів, 3-тє та 4-те – по 7 балів, 5-те завдання 6 балів. Помилки у виконанні знижують оцінку на 1-3 бали. Мінімальна позитивна оцінка за розрахунково-графічну роботу складає 17 балів.

Календарний контроль проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силябусу. Студенти, які на момент календарного контролю мають суму результатів поточного контролю, яка не менше 50% максимально можливої, одержують позитивну оцінку, у іншому випадку – негативну.

Семестровий контроль – залік. Згідно схеми PCO-1 «Положення про систему оцінювання результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського»:

Рейтингова оцінка складається з балів, отриманих студентом за результатами поточного контролю.

Рейтингова оцінка доводиться до здобувачів на передостанньому занятті з дисципліни в семестрі, але після захисту усіх звітів з комп'ютерних практикумів та розрахункової роботи. Здобувачі, які виконали умови допуску до заліку (не менше 24 балів за комп'ютерні практикуми та не менше 18 балів за розрахункову роботу) та мають рейтингову оцінку 60 і більше балів, отримують відповідну до набраного рейтингу оцінку без додаткових випробувань.

Зі здобувачами, які виконали умови допуску до заліку але мають рейтингову оцінку менше 60 балів, а також з тими здобувачами, хто бажає підвищити свою рейтингову оцінку, на останньому за розкладом занятті з дисципліни в семестрі проводиться семестровий контроль у вигляді залікової контрольної роботи. Задачі, що виносяться на залікову контрольну роботу є комбінацією завдань 1-ї та 2-ї частин МКР. Залікова контрольна робота оцінюється максимальною оцінкою 70 балів. Семестровий рейтинг обчислюється як сума оцінки за розрахункову роботу та оцінки за залікову контрольну роботу.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо

Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

9.1. Особливості навчання за змішаною або дистанційною формою.

Викладання дисципліни за змішаною або дистанційною формою навчання здійснюється з застосуванням платформи [google.classroom](https://classroom.google.com/) та середовища [google.meet](https://meet.google.com/).

Лекційні заняття проводяться в *on-line* режимі. Темі лекційних занять, демонстраційний матеріал у вигляді презентацій з текстовими коментарями, контрольні запитання надаються студентам заздалегідь. Лекційний час використовується у співвідношенні 1:1 відносно аудиторної форми. Студентам рекомендується для участі у заняттях в середовищі [google.meet](https://meet.google.com/) використовувати персональний комп'ютер чи планшет, з розміром екрану не менше 10". Відеокамери комп'ютерів мають бути увімкнені, мікрофони вимкнено. Студент застосовує мікрофон для відповіді на запитання викладача та для того, щоб задати запитання.

Комп'ютерні практикуми виконуються із застосуванням власних засобів комп'ютерної техніки студентів. Рекомендоване середовище виконання розрахунків – *on-line* електронні таблиці комплексу [google.docs](https://docs.google.com/). *On-line* підключення необхідне на початку заняття для одержання допуску до виконання комп'ютерного практикуму та одержання завдання. Викладач відповідає на запитання студентів одержані як із сеансу [google.meet](https://meet.google.com/) (голосом або через чат) так і через інші засоби електронного зв'язку.

Контрольні заходи проводяться у *on-line* режимі.

9.2. Зарахування результатів проходження дистанційних курсів

Враховуючи сучасний розвиток систем дистанційної освіти і різноманітність курсів, що пропонуються провідними університетами світу, студенти можуть оволодівати знаннями з окремих розділів навчальної дисципліни з використанням сервісів edx.org, coursera.org або prometeus.org.ua. Умови зарахування результатів проходження дистанційного навчання визначаються в індивідуальному порядку. Студент, що бажає зарахувати результати дистанційного навчання, має звернутись до викладача з інформацією про дистанційний курс та власні побажання щодо його перезарахування. Рішення про перезарахування може бути прийнято в будь-який час, до проведення підрахунку семестрового рейтингу і не може бути відмінене.

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено доцент каф. ВТМ та ПМ, к.т.н., доцент Степанов Олег Васильович

Ухвалено кафедрою ВТМ та ПМ (протокол № 10 від 8 липня 2022 р.)

Погоджено Методичною комісією НН Інституту матеріалознавства та зварювання ім. Є.О. Патона (протокол № 10/22 від 10 липня 2022 р.)

Завдання модульної контрольної роботи.

Тематична контрольна робота 1 виконується як розрахункова робота з пошуку екстремуму одновимірної функції заданим методом, починаючи з заданої точки, з заданою точністю. Для роботи пропонуються наступні методи:

- Тривиточкового пошуку на рівних інтервалах з встановленням інтервалу стохастичним методом Свенна.
- Золотого перетину
- Пауела з використанням квадратичної апроксимації
- Дотичних (Ньютона)
- Хорд з встановленням інтервалу стохастичним методом Свенна
- Дихотомії з встановленням інтервалу стохастичним методом Свенна

Процес розрахунку емулює експериментальну оптимізацію. Студент для початку роботи одержує початкове значення незалежної змінної X_0 та значення функції $F(X_0)$. Виходячи з заданого методу оптимізації та додаткових умов завдання (початковий крок, точність) студент може запросити у викладача значення функції у іншій точці $F(X_1)$. Таким чином, студент не знає аналітичного виразу функції і не може застосувати графічні методи або обчислення великої кількості значень функції.

Оцінюється слідування алгоритму заданого методу, одержання вірного розв'язку, своєчасне припинення розрахунків при досягненні заданої точності.

Тематична контрольна робота 2 виконується як розрахункова робота з пошуку екстремуму багатовимірної функції заданої таблицею – приклад завдання

Вихідні дані показують залежність однієї з властивостей 4-компонентного сплаву від кількості легувальних домішок (X_1, X_2, X_3). Кожен студент має власний набір даних.

Властивість задовільно апроксимується повними квадратами компонентів - рівнянням:

$$Y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{33}x_3^2 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3$$

Проведення нового експерименту є досить дорогим, тому необхідно знайти точку (склад матеріалу), в якій значення властивості відповідає мінімуму апроксимуючої моделі. Не існує ніяких обмежень на методи та засоби розрахунку. Усі кроки мають бути документовані: описати чому зробили саме так і який результат одержали.

Оцінюється а) правильне знаходження коефіцієнтів моделі і їх перевірка; б) правильний обґрунтований вибір методу оптимізації; в) правильне визначення початкової точки пошуку; г) правильно знайдений мінімум (і підтверджений з похибкою не гірше 0.05 за кожною змінною).

Завдання розрахункової роботи

Завдання #	XX	Студент	Прізвище І.П.					
1	Використовуючи знайти мінімум функції починаючи з точки	Метод трьохточкового пошуку на рівних інтервалах $Y=(\exp(X-3))/(X+3) - 4 \cdot X$ 1	з точністю 0.05					
2	Використовуючи знайти мінімум функції на інтервалі	Метод хорд $Y=(X-3)^2 + \ln(X+0.9)/(X+0.3)$ 1, 8.5	з точністю 0.05					
3	Використовуючи знайти мінімум функції починаючи з точки	Метод Хука-Дживса $Y=(X1-5)^2+(X2-2)^2+(X3-2)^2+X2 \cdot X3$ 0, 0, 0	з точністю 0.05 за кожним аргументом					
4	Використовуючи знайти мінімум функції починаючи з точки	Метод покоординатного спуску Гауса-Зейделя $Y=(X1-5)^2+(X2-5)^2+(X3-5)^2+(X1 \cdot X2)/(X2+X3)$ 0, 0, 1	з точністю 0.05 за кожним аргументом					
5	Використовуючи метод найменших квадратів за наведеною таблицею значень знайти параметри моделі:	$Y=C0+C1X1+C2X2+C3X3+C4X2X3$						
X1	3,00	1,00	2,00	1,00	1,00	2,00	3,00	3,00
X2	1,00	2,00	3,00	1,00	2,00	3,00	2,00	1,00
X3	2,00	2,00	1,00	2,00	1,00	3,00	1,00	3,00
Y	27,30	29,90	30,00	21,10	20,90	53,60	27,10	33,50