уравнений колебаний пружин // Вестник ЛГУ. Математика, механика, астрономия. – Л.: ЛГУ, 1962. – Вып. 27. – С. 119-134. **5.** *Григорьев А.Л., Дериенко А.И.* Универсальная математическая модель цилиндрической пружины // Високі технології в машинобудуванні. – Харків: НТУ «ХПІ», 2004. – Вип. 2 (9). – С. 257-264. **6.** *Лавинский В.И., Григорьев А.А.* Симметричная матричная линеаризованная модель колебаний винтового стержня. – II Університетська наук.-практ. конф. магістрантів. Тези доповідей. – Харків: НТУ «ХПІ», 2008. – Т. 1. – С. 64-66. **7.** *Захаров В.Е., Манаков С.В., и др.* Теория солитонов. – М.: Наука, 1980. **8.** *Тахтаджян Л.А., Фаддев Л.Д.* Гамильтонов поход в теории солитонов. – М.: Наука, 1986. **9.** *Филлипов А.Т.* Многоликий солитон. – М.: Наука, 1990. **10.** *Грунауэр А.А., Григорьев А.Л., Вештак И.А.* Определение функциональных зависимостей динамических характеристик пружины от закона ее ударного деформирования // Теория механизмов и машин. – Харьков: Вища школа,1987. – Вып. 42. – С. 40-49. **11.** *Дериенко А.И., Король С.А., Григорьев А.А.* Идентификация модели винтового бруса колебаний пружины для расчета спектра собственных частот // Вісник КДПУ. – Кременчук, 2008. – Вип. № 1 (48). – С. 46-50. **12.** *Грунауэр А.А., Тартаковский И.И., Григорьев А.Л.* О связи силы пружины с законом ее деформирования // Теория механизмов и машин. – Харьков: Вища школа, 1985. – Вып. 39. – С. 7-22. **13.** Справочник машиностроителя. В трех томах / Под ред. *Е.А.Чудакова*. – М: Гос. науч.- техн. изд-во машин. литературы, 1951. – Т. 3. – 1098 с. **14.** *Вихман Э.* Квантовая физика. – М.: Наука, 1983. – 415 с. **15.** *Хвингия М.В.* Вибрация пружин. – М.: Машиностроение, 1969.

Поступила в редколлегию 28.08.2009

УДК 519.7

В.М.ГРИЩЕНКО, канд.техн.наук, доц., НТУ «ХПІ»

УЗАГАЛЬНЕННЯ ФУНКЦІОНАЛУ ЛАГРАНЖА В ЗАДАЧАХ НЕЛІНІЙНОГО ПРОГРАМУВАННЯ

Розглядається модифікація функціоналу Лагранжа при рішенні задач умовного оптимального проектування конструкцій, яка систематизує існуючі підходи.

The modification of Lagrange functional in problem of optimum designing is consider.

1. Актуальність проблеми. В інженерній, організаторській діяльності, в економіці і багатьох інших сферах виникає безліч задач оптимізаційного характеру. Як правило, кожна з них має декілька можливих варіантів рішення. Зрозумілим є прагнення знайти «найкращий».

З точки зору математики ця проблема пов’язана з пошуком параметрів, які забезпечують досягнення системою екстремуму функціоналу цілі (extr). Широкий клас задач параметричної оптимізації зводиться до рішення задач нелінійного програмування (НП). Оптимізація (Opti) як один з нових напрямків сучасної математики інтенсивно розвивається. Незважаючи на значні ресурси затрачені багатьма науковцями не створено усталеного алгоритму чисельної оптимізації для достатньо широкого класу практичних задач, особливо з обмеженнями-нерівностями.

2. Постановка оптимізаційної задачі. В роботі розглядається задача параметричної оптимізації з обмеженнями типу рівності-нерівності, відомої як задача нелінійного програмування (НП). В загальному вигляді вона формулюється так:

$$f(x^*) = \min_{x\in\Omega} f(x); \tag{1}$$

$$\Omega = \{ x \in R_n \mid \boldsymbol{\omega}_j(x)=0 \ (j=1,2,...,m;\ m<n);\ \ \Omega_j(x) \le 0 \ (j=1,2,...,k;) \}, \tag{2}$$

де $x^T = \{x_1, x_2, ..., x_n\}$ – вектор параметрів проектування; Ω – область допустимих значень; $\boldsymbol{\omega}_j(x)=0$, $\Omega_j(x)\le 0$ – обмеження рівності – нерівності; $f(x), \boldsymbol{\omega}_j(x), \Omega_j(x)$ – неперервні функції.

Найбільш вагомим теоретичним результатом в задачах умовної оптимізації з обмеженнями-нерівностями є умови Куна-Такера, згідно з якими питання визначення точок-«кандидатів» на extr пов'язане з аналізом сформульованої системи нелінійних співвідношень. В даній роботі розглядається узагальнення форми функціоналу Лагранжа та змісту невизначених множників, яке в певній мірі систематизує підходи рішення цих задач.

3. Основні положення алгоритму. Задача НП добре відома, теоретичні та обчислювальні аспекти пошуку оптимального рішення викладені в багаточисленній учбовій та науковій літературі [1]. Коротко сформулюємо її суттєві моменти. Потрібно знайти точку x^*, яка задовольняє умовам (2) та такої, що для всякої іншої в невеликій околиці виконується умова

$$f(x^*) \le f(x).$$

Точка x^* може знаходитись як всередині області Ω, так і на границі.

Є один частинний випадок загальної задачі НП (1,2), коли система містить лише обмеження-рівності. Ця класична задача на умовний extr має класичне рішення з використанням невизначених множників Лагранжа і зводиться до еквівалентної на безумовний extr для функції Лагранжа виду

$$L(x,u) = f(x) + \sum_{j=1}^{m} u_j\, \boldsymbol{\omega}_j(x). \tag{3}$$

В ній з‘являються додаткові параметри u_j. Знак їх довільний. За допомогою методу множників по суті встановлюються необхідні умови, що дозволяють ідентифікувати точки extr . Необхідні умови приводять до системи $(n + m)$ рівнянь (умови Opti):

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = \frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^{m} u_j \frac{\partial \boldsymbol{\omega}_j}{\partial x_i} = 0 ; \quad (i = 1, 2, ..., n)$$
$$\frac{\partial L}{\partial u_j} = \boldsymbol{\omega}_j (x) = 0 . \qquad (j = 1, 2, ..., m) \tag{4}$$

Кожне рішення системи (4) з (n + m) невідомими ($x_1, x_2, \ldots, x_n, u_1, u_2, \ldots u_m$) розглядається як стаціонарна «підозріла» на extr f (x) точка, якість якої визначається подальшими дослідженнями. В прикладних задачах проектування надзвичайно важливу роль відіграють обмеження-нерівності, а з ними і рішення задачі (1, 2). Було б логічно побудувати рішення загальної задачі НП так, щоб і формально і по суті, воно відповідало схемі класичного варіанту Лагранжа. Кун і Такер запропонували підхід з множниками аналогічними лагранжевим для побудови критеріїв оптимальності на випадок загальної задачі НП як з обмеженнями типу рівності так і нерівності.

Для цього введено функціонал Лагранжа у вигляді

$$L (x, u, c) = f (x) + \sum_{j=1}^{m} u_j \, \boldsymbol{\omega}_j (x) + \sum_{j=1}^{k} c_j \, \Omega_j (x) . \tag{5}$$

Умови Opti (Куна-Такера) такі:

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = \frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^{m} u_j \frac{\partial \omega_j}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^{k} c_j \frac{\partial \Omega_j}{\partial x_i} = 0 \quad (i = 1, 2, ..., n); \tag{6}$$
$$\frac{\partial L}{\partial u_j} = \omega_j (x) = 0 \qquad (j = 1, 2, ..., m);$$
$$\Omega_j (x) \le 0 ; \qquad (j = 1, 2, ..., k);$$
$$c_j \, \Omega_j (x) = 0 ;$$
$$c_j \ge 0 .$$

Звернемо увагу на те, що якщо в класичній задачі множники Лагранжа u_j виступають як неперервні функції (з довільним знаком), то c_j – це розривні функції:

$c_j = 0$, якщо $\Omega_j(x) < 0$ (неактивне обмеження);
$c_j > 0$, якщо $\Omega_j(x) = 0$ (активне обмеження).

Таким чином, підозрілі на min точки в загальній задачі НП з обмеженнями-нерівностями повинні задовольняти дещо відмінним від класичних умовам (нерівностям Куна-Такера (6)).

Розглянемо деякі модифікації функціоналу L(x, u, c), які вирівнюють статус множників і приводять алгоритм рішення задачі НП з обмеженнями-нерівностями до звичної схеми, яка притаманна класичній задачі. З цією метою перерозподілимо функціональне навантаження співмножників c_j і Ω_j в L(x, u, c), представивши у вигляді, що відповідає характеру їх поведінки:

$$c_j = v_j\,(\mathrm{sign}\,\Omega_j + 1). \qquad (7)$$

Тобто виділимо неперервний множник v_j та розривну частину. При цьому вважатимемо, що sign 0 = 1. Тоді матимемо:

$$c_j\,\Omega_j(x) = v_j\,(\mathrm{sign}\Omega_j + 1)\,\Omega_j(x) = v_j\,(|\Omega_j(x)| + \Omega_j(x)).$$

У функціоналі відбулась суттєва зміна, а саме: всі обмеження, що визначають область Ω тепер задаються однотипово у вигляді рівності:

$$\boldsymbol{\omega}_j(x) = 0;\quad \boldsymbol{\theta}_j(x) = (|\Omega_j(x)| + \Omega_j(x)) = 0.$$

Останній запис еквівалентний умові-нерівності $\Omega_j(x) \le 0$. Характер поведінки функцій-обмежень $\Omega_j(x)$ та $\boldsymbol{\theta}_j(x)$ для одновимірного випадку показаний на рис. 1.

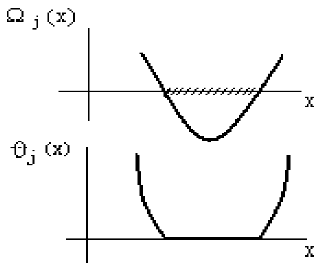


Рисунок 1 – Графіки функцій $\Omega_j(x)$ та $\boldsymbol{\theta}_j(x)$

Зміни, що відбулись у функціоналі уніфікують форму запису обмежень як рівності так і нерівності, але вносять в аналіз проблему розривності функцій $\boldsymbol{\theta}_j(x)$; зокрема, обчислення частинних похідних від $y = |\Omega_j(x)|$. Для залагодження цього питання перейдемо від класичного поняття похідної до її узагальненого значення. З цією метою розглянемо деяку обмежену область евклідового простору $D \subset R_n$, яка включає границю області допустимих значень $\Omega_j(x) \le 0$.

При цьому D^+, D^- – ті підобласті D, в яких $\Omega_j(x) \ge 0$ та $\Omega_j(x) < 0$ відповідно. Тоді $\dfrac{\partial y}{\partial x_m}$ називається узагальненою частинною похідною від y(x), якщо має місце тотожність [2]:

$$\int_D \frac{\partial y}{\partial x_m}\boldsymbol{\varphi}\,dx = -\int_D y\,\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x_m}\,dx, \qquad (8)$$

де φ – фінітна (локально сумована) і $\boldsymbol{\varphi}|_S = 0$; S – кусково-гладка поверхня, що обмежує D.

Обчислимо інтеграл, що стоїть у правій частині (8) для функції $y = |\Omega_j(x)|$:

$$-\int_D y\frac{\partial\varphi}{\partial x_m}dx = -\int_D |\Omega_j(x)|\frac{\partial\varphi}{\partial x_m}dx = \int_{D^-}\Omega_j(x)\frac{\partial\varphi}{\partial x_m}dx - \int_{D^+}\Omega_j(x)\frac{\partial\varphi}{\partial x_m}dx =$$

$$= -\int_{D^-}\frac{\partial\Omega_j}{\partial x_m}\varphi(x)\,dx + \int_{D^+}\frac{\partial\Omega_j}{\partial x_m}\varphi(x)\,dx = \int_{D^-}\mathrm{sign}\Omega_j\frac{\partial\Omega_j}{\partial x_m}\varphi(x)\,dx + \int_{D^+}\mathrm{sign}\Omega_j\frac{\partial\Omega_j}{\partial x_m}\varphi(x)\,dx =$$

$$= \int_D \mathrm{sign}\Omega_j\frac{\partial\Omega_j}{\partial x_m}\varphi(x)\,dx.$$

В перетвореннях використана формула про дивергенцію (Остроградського):

$$\int_D \frac{\partial f(x)}{\partial x_m} dx = \int_S f(x) \cos(\boldsymbol{\nu}, x_m)\, dS .$$

Приймаючи до уваги (8) узагальнене значення похідної від розривної функції $y = |\Omega_j(x)|$ буде таким

$$\frac{\partial}{\partial x_m} |\Omega_j(x)| = \mathrm{sign}\Omega_j \frac{\partial \Omega_j(x)}{\partial x_m} . \tag{9}$$

Таким чином, основні теоретичні результати загальної задачі НП (умови Куна-Такера) після введених змін будуть такими, коли обмеження-нерівності ($\Omega_j(x) \le 0$) узагальнюються шляхом заміни їх на еквівалентні обмеження-рівності $\boldsymbol{\theta}(x) = (|\Omega(x)| + \Omega(x)) = 0$, коли мають однаковий статус множники Лагранжа, і схема рішення задачі з обмеженнями-нерівностями буде відповідати класичній. Приведемо її.

Функціонал Лагранжа

$$L(x, u, v) = f(x) + \sum_{j=1}^{m} u_j\, \boldsymbol{\omega}_j(x) + \sum_{j=1}^{k} v_j\, (|\Omega_j(x)| + \Omega_j(x)) . \tag{10}$$

Необхідні умови Opti :

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = \frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^{m} u_j \frac{\partial \omega_j}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^{k} v_j \frac{\partial \Omega_j}{\partial x_i} (\mathrm{sign}\Omega_j(x) + 1) = 0, \quad (i = 1, 2, ..., n);$$

$$\frac{\partial L}{\partial u_j} = \omega_j(x) = 0, \qquad (j = 1, 2, ..., m);$$

$$\frac{\partial L}{\partial v_j} = |\Omega_j(x)| + \Omega_j(x) = 0, \;\rightarrow\; \text{або} \;\; \Omega_j(x) \le 0 \qquad (j = 1, 2, ..., k)$$

u_j, v_j – множники Лагранжа з однаковим статусом. Якщо стаціонарна точка відповідає умові $f(x) \rightarrow \min$, то $v_j > 0$, а обмеження грають таку ж роль як і штрафні функції. Якщо точка $x \in \Omega$ (тобто виконуються всі обмеження: $\boldsymbol{\omega}_j = 0$; $\Omega_j(x) \le 0$), то наслідком буде рівність $L(x,u,v) = f(x)$. Розглянемо особливості поведінки $L(x, v)$ на прикладах.

4. Модельні приклади та їх аналіз. В *першій задачі* розглядається одно параметрична задача НП з обмеженнями-нерівностями (рис. 2).

$$\begin{aligned} f(x) &= x^2 - 1 \qquad \rightarrow \min; \\ \Omega(x) &= 2 - x \le 0. \end{aligned} \tag{11}$$

$$L(x, v) = x^2 - 1 + v(|\Omega| + \Omega).$$

$$L^{+}(x, v) = x^2 - 1 + 2v(2 - x), \text{якщо } 2 - x > 0.$$

Умови Opti :

$$\frac{\partial L}{\partial x} = 2x - v(\mathrm{sign}(2-x)+1) = 0,$$
$$\frac{\partial L}{\partial v} = |2-x| + 2 - x = 0, \quad \text{або} \quad 2 - x \le 0. \tag{12}$$

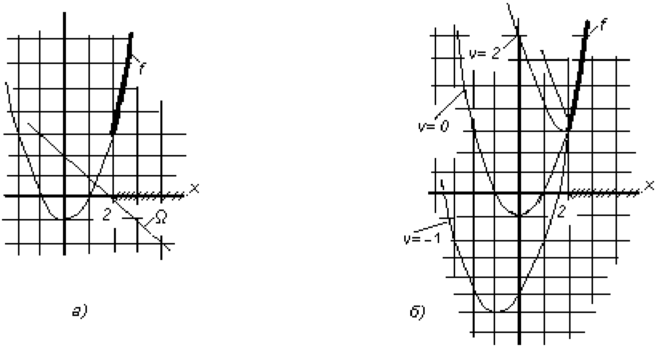


Рисунок 2 – Однопараметрична задача Opti.

Перевірці підлягають два рішення:

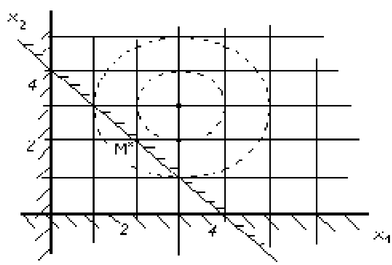
1) $2 - x < 0$ $\quad x = 0$ $\quad$ (відкидаємо, так як $x \notin \Omega$).

2) $2 - x = 0$ $\quad x^* = 2$.

$\mathrm{sign}(2-x^*) = \mathrm{sign}\,0 = +1$, $\quad v^* = +2 > 0$. $\quad (x^*,v^*) = (2,2)$ – стаціонарна точка, яка задовольняє умовам (12). Подальший аналіз показує, що це точка min. На рис. 2, б показані зовнішні штрафні функції $L^+(x,v)$ при різних v, а також оптимальна крива $L^+(x,v^*)$. Вона відрізняється від інших тим, що на зовнішній границі області Ω виконується умова $\frac{\partial L^+(x,v^*)}{\partial x}|_{x=x^*} = 0$, в той час як для інших функцій штрафу x_{min} може знаходитись поза областю обмежень. При чисельному рішенні в таких випадках частіше за все будується ітеропроцес «підтягування» точки x_{min} до області Ω шляхом варіювання величини v.

В якості *другого модельного прикладу* розглянуто 2-х параметричну задачу, постановка якої виглядає так:

$$f(x) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 3)^2 \to \min;$$
$$\Omega_1(x) = -x_1 \le 0,$$
$$\Omega_2(x) = -x_2 \le 0,$$
$$\Omega_3(x) = x_1 + x_2 - 4 \le 0.$$



Модифікована задача буде мати наступне розв'язання.

$$L(x,v) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 3)^2 + v_1(|-x_1| - x_1) +$$
$$+ v_2(|-x_2| - x_2) + v_3(|x_1 + x_2 - 4| + x_1 + x_2 - 4),$$

Умови Opti :

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = 2(x_1 - 3) - v_1(\mathrm{sign}(-x_1) + 1) + v_3(\mathrm{sign}(x_1 + x_2 - 4) + 1) = 0,$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_2} = 2(x_2 - 3) - v_2(\mathrm{sign}(-x_2) + 1) + v_3(\mathrm{sign}(x_1 + x_2 - 4) + 1) = 0,$$

$$\frac{\partial L}{\partial v_j} = 0 \quad \rightarrow \quad -x_1 \le 0; \;\; -x_2 \le 0; \;\; x_1 + x_2 - 4 \le 0.$$

Техніка аналітичного пошуку оптимального рішення аналогічна класичному підходу. Потрібно перевіряти варіанти:

1) $-x_1 < 0$; $-x_2 < 0$; $x_1 + x_2 - 4 < 0$; $\rightarrow$ (відкидаємо, так як $x \notin \Omega$).

2) $-x_1 = 0$; $-x_2 < 0$; $x_1 + x_2 - 4 < 0$;

3) $-x_1 < 0$; $-x_2 < 0$; $x_1 + x_2 - 4 = 0$; $\rightarrow$ та інші.

Зупинимось на варіанті 3. З умов Opti витікає :

$$\left\{\begin{array}{l} 2x_1 - 6 + 2v_3 = 0 \\ 2x_2 - 6 + 2v_3 = 0 \\ x_1 + x_2 \quad\quad = 4 \end{array}\right\} \quad \rightarrow \quad (x_1^*, x_2^*, v_3^*) = (2, 2, 1), \;\; v_3^* > 0.$$

Рішення існує. Це «підозріла» на min точка, що і підтверджує подальший аналіз. На завершення звернемо увагу на наступний аспект рішення задач НП [3]. Обмежень як типу рівності так і нерівності може бути багато. Відповідно до цього значною буде також кількість множників Лагранжа. Цю кількість можна скоротити до 1, якщо використати можливості R – функцій, які дозволяють ефективно обробляти складну геометричну інформацію. Так, область допустимих значень Ω, яка задається, наприклад, тільки обмеженнями-нерівностями може бути представленою однією R – функцією виду:

$$\Omega(x) = \Omega_1 \, V_0 \, \Omega_2 \, V_0 \, \ldots \, V_0 \, \Omega_k \le 0 \, .$$

Але цей аспект алгоритму задачі НП інша тема.

5. Висновки. В роботі розглянуто узагальнення форми запису функціоналу Лагранжа на обмеження типу нерівності. Використовуючи розривні функції, обмеження задаються лише у формі рівності. Умови Куна-Такера формально переходять в умови Лагранжа. При цьому вирівнюється статус всіх множників Лагранжа, а для рішення загальної задачі НП використовується класична схема. Зміни у формулювання задачі нелінійного програмування внесені, зокрема, з метою використання в алгоритмі чисельного пошуку extr функціоналу загального виду.

Список літератури: **1.** *Реклейтис Г., Рейвиндран А., Рэгсдел К.* Оптимизация в технике. Т. 1. – М.: Мир, 1986. **2.** *Михлик С.Г.* Линейные уравнения в частных производных. – М.: Высшая школа, 1977. **3.** *Грищенко В. М., Галаган Ю.М.* Алгоритм чисельної оптимізації конструкцій з урахуванням обмежень за допомогою R-функцій // Вісник НТУ «ХПІ». Тематичний випуск: Динаміка та міцність машин. – Харків: НТУ «ХПІ», 2006. – № 32. – С. 67-77.

Надійшла до редколегії 21.08.2009

УДК 539.3

S.GLADKOV, TU Dortmund;
M.STIEMER, Dr.rer.nat, TU Dortmund;
A.GROSSE-WOEHRMANN, TU Dortmund;
B.SVENDSEN, Dr.rer.nat., TU Dortmund

NUMERICAL MODELING OF PHASE-SEPARATION IN BINARY MEDIA BASED ON THE CAHN-HILLIARD EQUATION

У статті описано процедуру наближеного рішення рівняння Кана-Хіллярда в частинних похідних 4го порядку котра базується на явному методі Ейлера в часі та змішаній постановці з білінійними скінченими елементами в просторі. Наведено чисельні рішення для ідеалізованої моделі з двуямним потенціалом (в 2-х та 3-х просторових вимірах) та більш фізично релевантної моделі з логарифмічним потенціалом (тільки в 2-х просторових вимірах).

In the article numerical procedure for solution of the Cahn-Hilliard equation which is based on the forward Euler method in time and mixed (due to 4th order nature of differential operator) linear finite element formulation in space is described. Numerical examples consist of idealized model with double well potential (in 2 and 3 spatial dimensions) and more physically relevant model with logarithmic potential (in 2D only).

1. Introduction and motivation. During industrial hot forming processes such as extrusion, hot rolling or hot forging materials undergo mechanical deformation and recrystallization. For particular case of extrusion (Fig. 1) one can observe precipitate formation during the last, cooling stage of the extrusion process. Usually above mentioned phenomena influence each other in a complicated way, and it is exactly this influence of recrystallization/precipitate formation on a material's ductility and strength that effects the appeal of a hot forming method.

Precipitates form a separate phase in the alloy. A reliable simulation based prediction of forming results hence requires a coupled model for the evolution of both the mechanical fields and the evolution of areas covered by different phases.

While first attempts on the finite element simulation of phase-field models have recently been presented in [1, 2, 3, 4], their consideration in the context of a structural mechanical finite element simulation is a new issue [5, 6, 7, 8, 9, 10].