УДК.629.114.2.075

ВДОСКОНАЛЕННЯ СІМПЛЕКС МЕТОДУ ОПТИМІЗАЦІЇ НЕЛДЕРА-МІДА З АПРОБАЦІЄЙ В БАГАТОВИМІРНОМУ ФАКТОРНОМУ ПРОСТОРІ

Петров В.О. к.т.н.,
Таврійський державний агротехнологічний університет
Тел.: (0619) 42-57-97

Анотація **- Робота посвячена аналізу сукупності фундаментальних математичних і чисельних методів, орієнтованих на знаходження і ідентифікацію найкращих варіантів з безлічі альтернатив і дозволяють уникнути повного перебору і оцінювання можливих варіантів. У роботі представлена схема оптимізаційного пошуку в загальному вигляді та визначено ряд умов щоб представити завдання в придатній формі. Наведено класифікацію методів багатовимірної оптимізації, які, за своєю стратегією, носять ітераційний характер. Зазначено на переваги методів прямого пошуку, заснованих на обчисленні (визначенні) тільки значень цільової функції. Представлена еволюція симплекс методики для двовимірного пошуку на підставі демонстраційних схем (Симплекс - це сформований зразок в факторному просторі, що містить базову точку і кілька пробних точок.) і в тому числі більш досконалу стратегію прямого пошуку методом Нелдера-Міда. Пропонується вдосконалення методу Нелдера-Міда за рахунок наближення його до градієнтних методів. Для цього, при визначенні напрямку пошуку, необхідно враховувати вагову складову «якості» вершин симплекса щодо «гіршої» точки. Для цього формулу обчислення координат центру ваги потрібно проводити за модифікованою формулою.**

Ключові слова **– Методи оптимізації, параметри варіювання, симплекс, градієнт, вагова складова «якості», інтервал варіювання, цільова функція, ітерація.**

Постановка проблеми. У практичній діяльності дослідників, інженерів частіше буває більш корисно визначити не поведінку об'єктів в цілому, а знайти таке поєднання параметрів досліджуваного об'єкта, при якому функціональні показники об'єкта будуть оптимальними.

Методи оптимізації ефективно застосовуються в самих різних областях професійної діяльності. Особливо значних успіхів досягнуто при проектуванні та аналізі роботи глобальних технічних систем. Прискорені темпи впровадження оптимізаційних розробок в інженерну практику обумовлено значним поширенням і інтенсивним вдосконаленням засобів обчислювальної техніки.

Процес оптимізації полягає в основі всієї інженерної діяльності, оскільки класичні функції інженера полягають в тому, щоб, з одного боку, проектувати нові, більш ефективні і менш дорогі технічні системи, а, з іншого боку, розробляти методи підвищення якості функціонування існуючих систем.

В найбільш загальному сенсі теорія оптимізації являє собою сукупність фундаментальних математичних і чисельних методів, орієнтованих на знаходження і ідентифікацію найкращих варіантів з множини альтернатив і дозволяють уникнути повного перебору і оцінювання можливих варіантів.

Аналіз останніх досліджень. Вимірність інженерних задач досить велика, а логіка пошукових алгоритмів вимагає від проектувальника наявність фундаментальних математичних знань.

Розглянемо схему досліджень об'єкта в загальному вигляді (Рис.1).

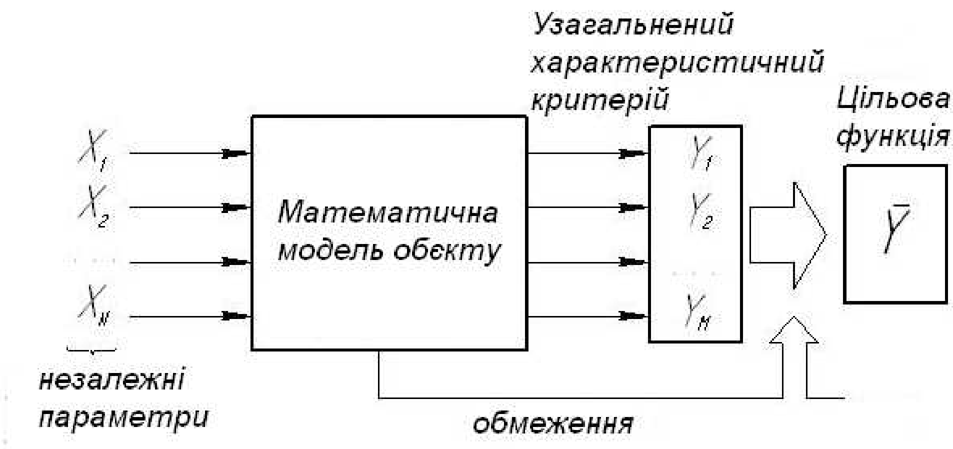

Рис. 1. Схема досліджень об'єкта

У загальному вигляді кількість параметрів може варіюватися від одного до декількох показників. Параметрів функціонування системи об'єкта теж може бути декілька.

Об'єкт може функціонувати в умовах обмеження. Математична модель об'єкта може бути або визначена у вигляді функціоналу, або задана неявно вираженими функціями, або може бути визначена емпіричним шляхом.

Щоб представити завдання в формі, придатній для оптимізаційного пошуку, необхідно виконати ряд умов:

1) Виявити, і, по можливості, мінімізувати кількість незалежних

змінних.

2) Визначити граничні значення системи (для кожного параметра визначити інтервал варіювання).

3) Розробити, виходячи з мети оптимізаційного дослідження, єдиний характеристичний критерій та, при цьому, переконатися в тому, що цільова функція, визначена на основі даного характеристичного критерію, унімодальна. Іншими словами, цільова функція має єдиний екстремум в області варіювання незалежних параметрів.

4) Необхідно мати математичну модель, яка описує зв'язок між змінними і характеристичними критеріями. Якщо цього немає, то, в принципі, оптимізаційні дослідження можна провести на основі безпосереднього експериментування з системою.

Формулювання цілей статті.

Метою статті є аналіз оптимізаційних методів багатовимірного пошуку на основі вдосконалення симплекс методу Нелдера-Міда за рахунок наближення його до градієнтних методів.

Основна частина.

Методи багатовимірної оптимізації за своєю стратегією носять ітераційний характер. Вони поділяються на:

1) Методи прямого пошуку, засновані на обчисленні (визначенні) тільки значень цільової функції.

2) Градієнтні методи, в яких використовуються точні значення похідних.

3) Методи другого порядку, в яких поряд з першими похідними використовуються також другі похідні функції.

Одним із методів оптимізації є пошук по квадратному зразку (Рис. 2)

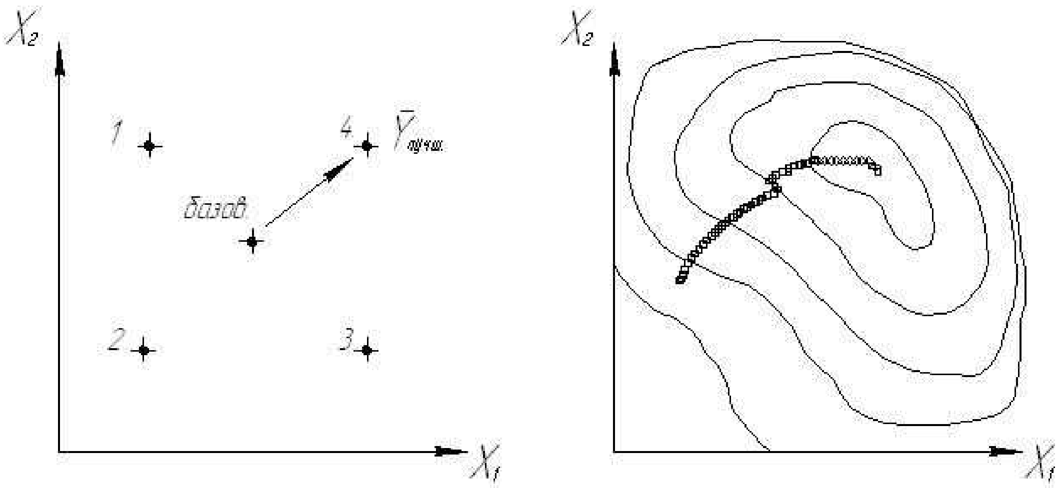

Рис. 2. Пошук по квадратному зразку

Квадратний зразок вимагає для однієї ітерації $2N + 1$ обчислень цільової функції.

Більш економно використання регулярного симплекса - зразка, що містить $N + 1$ точок. Для однієї ітерації достатньо обчислення цільовой Функції 1 раз (Рис. 3).

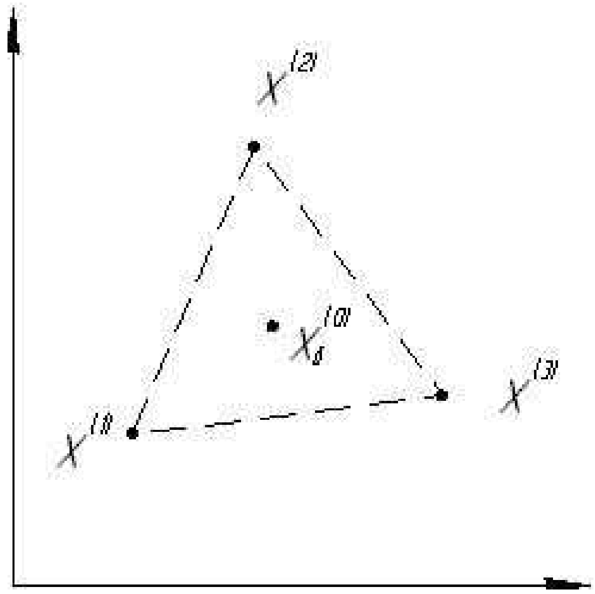

Рис. 3. Побудова регулярного симплекса в двовимірному просторі

$$X^{(i)} = \begin{cases} x_j^{(0)} + \delta_1, & если \quad j \neq i, \\ x_j^{(0)} + \delta_2, & если \quad j + i. \end{cases}$$

для $i = 1,2,3 \ldots N$.

Збільшення i залежать тільки від обраного масштабного множника α від розмірності факторного простору (Рис. 4).

$$\delta_1 = \left[\frac{\sqrt{(N+1)} + N - 1}{N\sqrt{2}} \right] \alpha,$$

$$\delta_2 = \left[\frac{\sqrt{(N+1)} - 1}{N\sqrt{2}} \right] \alpha,$$

при $\alpha = 1$ ребра симплекса мають одиничну довжину.

.

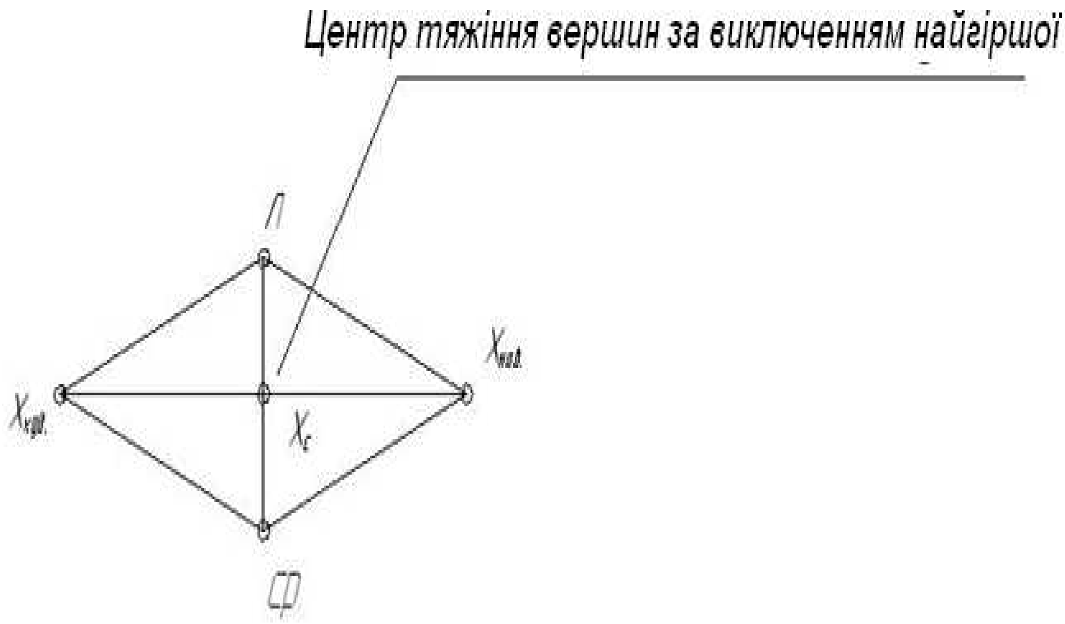

Рис. 4. Схема побудови нового симплекса

$$x_c = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N} x^{(i)} ,$$

$$x_{нов} = 2x_c - x_{худ}^{(j)} .$$

В результаті ітерацій маємо новий симплекс. Процедура триває до знаходження оптимуму.

Недоліком методу е низька швидкість просування до оптимуму що обумовлює велику кількість ітерацій.

Більш досконалою є стратегія прямого пошуку за методом Нелдера–Мида, автори якого відмовились від регулярності симплексу.

На відмінність від попереднього методу в цьому разі використовується інформація про «якість» нової точки. Значення цільової функції порівнюється з відповідними значеннями у вершинах симплексу, і, в залежності від результату порівняння на рівні пошуку, генерується ще одна, або декілька, нових точок.

Логіка методу відображена в роботі [2]. Алгоритм нараховує п’ять умовних переходів.

Протягом однієї ітерації можливі наступні варіанти перетворення форми симплексу (Рис.5):
1). розтягнення; 2). відбиття 1; 3). відбиття 2; 4). стискання 1; 5). стискання 2; 6). згортання 1; 7). згортання 2.

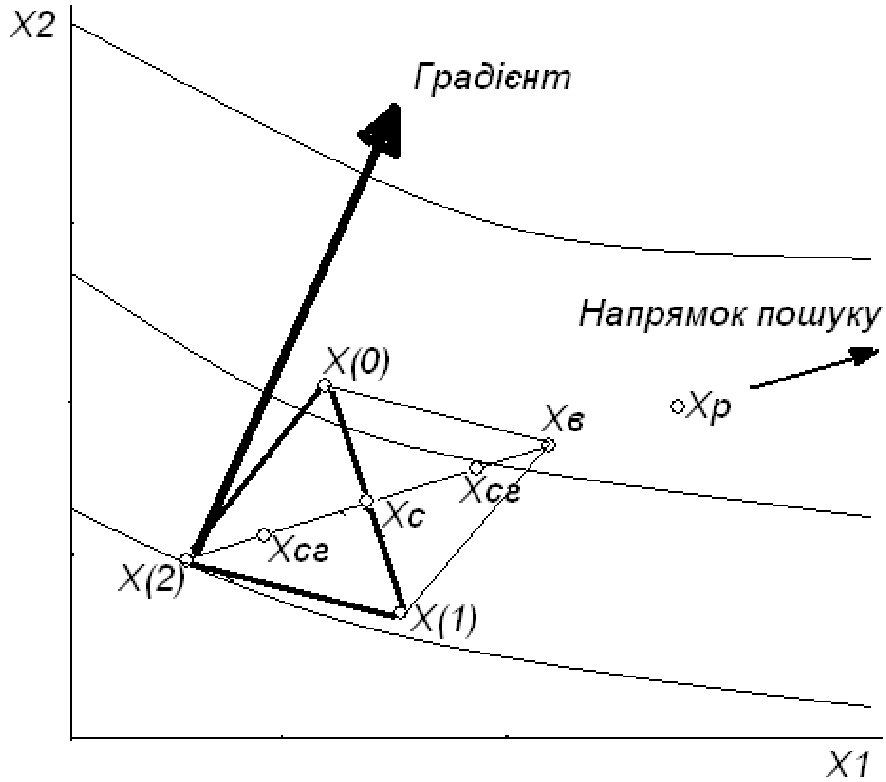

Рис. 5. Схема побудови нового симплекса Нелдера –Мида

Конформність симплексу забезпечує ефективність процедури пошуку оптимуму. Симплекси від ітерації до ітерації розтягуються в напрямку градієнта цільової функції, що значно пришвидшує пошук оптимуму. При наближенні до оптимуму алгоритм ефективно «гальмує» і стискається.

Для подальшого вдосконалення методу Нелдера-Міда є можливість наблизити його до градієнтних методів. Під час проведення ітерації пошук проходить в напряму від «найгіршої» точки до центру тяжіння всіх інших вершин симплексу.

Пропонується, при розрахунку координат центру тяжіння, враховувати вагову складову «якості» вершин симплексу стосовно «найгіршої» точки.

Для цього формулу обчислення координат центру тяжіння потрібно проводити за модифікованою формулою:

$$x_c - \frac{\sum_{i=0}^{N-1} x^i \left(F^N - F^i\right)}{\sum_{i=0}^{N-1} \left(F^N - F^i\right)}$$

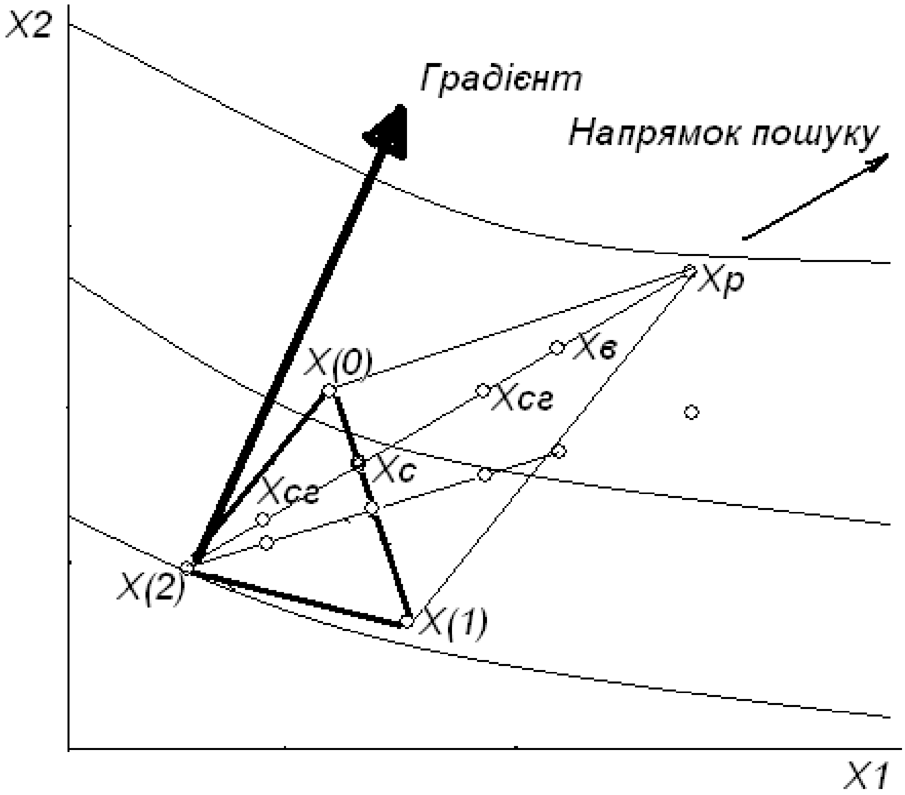

Рис. 6. Схема побудови нового модифікованого симплекса Нелдера –Мида

Як бачимо на рисунку 6 – напрямок пошуку модифікованого методу більш наближений до напрямку градієнта.

Для реалізації запропонованого методу можна надати такі рекомендації:

1. Потрібно створити наступні підпрограми:
   - перестановка двох строк масиву;
   - рангування строк масиву за значенням цільової функції;
   - розрахунку значення цільової функції;
   - розрахунку значення штрафної функції типу квадрату зрізки (якщо пошук потрібно проводити в умовах обмеження).
2. Зручно використовувати масив розміром $(N)* (N + 5)$

Ефективність алгоритму була перевірена із використанням пробної функції.

$$F_{\text{пробна}} = \sum_{i=1}^{N} C_i \cdot X_i$$

Метод впевнено працює у факторному просторі $N=2 \dots 5$.

У порівнянні з симплекс методом Нелдера-Міда, він сходиться в півтора рази швидше.

Висновки.

1. Модифікований метод достатньо простий і потребує тільки розрахунку цільової функції.

2. Метод надійно працює навіть у п'ятимірному факторному просторі і є достатньо ефективним та економічним.

3. Метод може бути застосований в різноманітних галузях інженерної практики як для пошуку оптимальних рішень, так і в якості складової програмного забезпечення адаптивних систем автоматизації.

Література

1. *Реклейтис Г.* Оптимизация в технике / Г.Реклейтис, А.Рейвиндран, К.Рэгсдел// в 2-х кн. Кн.1, М., Мир, 1986.
2. *Петров В.А.* Улучшение управляемости с/х МТА /В.А.Петров// Дис. Канд. техн. Наук.- Москва,1989.-178с.

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СИМПЛЕКС-МЕТОДА ОПТИМИЗАЦИИ НЕЛДЕРА-МИДА С АПОБАЦИЕЙ В МНОГОМЕРНОМ ФАКТОРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Петров В.А.

Аннотация

В работе сделан анализ совокупности фундаментальных математических и численных методов, ориентированных на нахождение и идентификацию наилучших вариантов из множества альтернатив и позволяющих избежать полного перебора и оценивания возможных вариантов. В работе представлена схема оптимизационного поиска в общем виде и определен ряд условий чтобы представить задачу в пригодной форме. Приведена классификация методов многомерной оптимизации, которые по своей стратегии носят итерационный характер. Указано на преимущества методов прямого поиска, основанных на вычислении (определении) только значений целевой функции. Представлена эволюция симплекс методики для двумерного поиска на основании демонстрационных схем

(Симплекс – это сформированный образец в факторном пространстве, содержащий базовую точку и несколько пробных точек.) и в том числе более совершенную стратегию прямого поиска по методу Нелдера–Мида. Предлагается усовершенствование метода Нелдера-Мида за счет приближения его к градиентным методам, для чего, при определении направления поиска учитывать весовую составляющую «качества» вершин симплекса относительно «худшй» точки. Для этого формулу вычисления координат центра тяжести нужно проводить по модифицированной формуле.

IMPROVEMENT OF THE NIELDER-MIDA SIMPLEX-METHOD OF OPTIMIZATION WITH APPROBATION IN A MULTIDIMENSIONAL FACTOR SPACE

V. Petrov

Summary

The paper analyzes the aggregate of fundamental mathematical and numerical methods aimed at finding and identifying the best variants from a variety of alternatives and avoiding a complete search and evaluation of possible options. The paper presents a scheme of optimization search in general form and defines a number of conditions to present the problem in a suitable form. The classification of multidimensional optimization methods is given, which, according to their strategy, are iterative in nature. The advantages of direct search methods based on the calculation (definition) of only the values of the objective function are pointed out. The evolution of a two-dimensional simplex procedure for the search based on the demonstration circuits (simplex - is formed by the space pattern in a factor comprising a base point and a number of sampling points.), And including an improved strategy for direct search method Nelder -Mida. Proposed improvements Nelder-Mead method due to its proximity to the gradient method, which, in determining the direction of the search to take into account the weight component of the "quality" of the vertices on the "worst" point. For this, the formula for calculating the coordinates of the center of gravity must be carried out using the modified formula.