

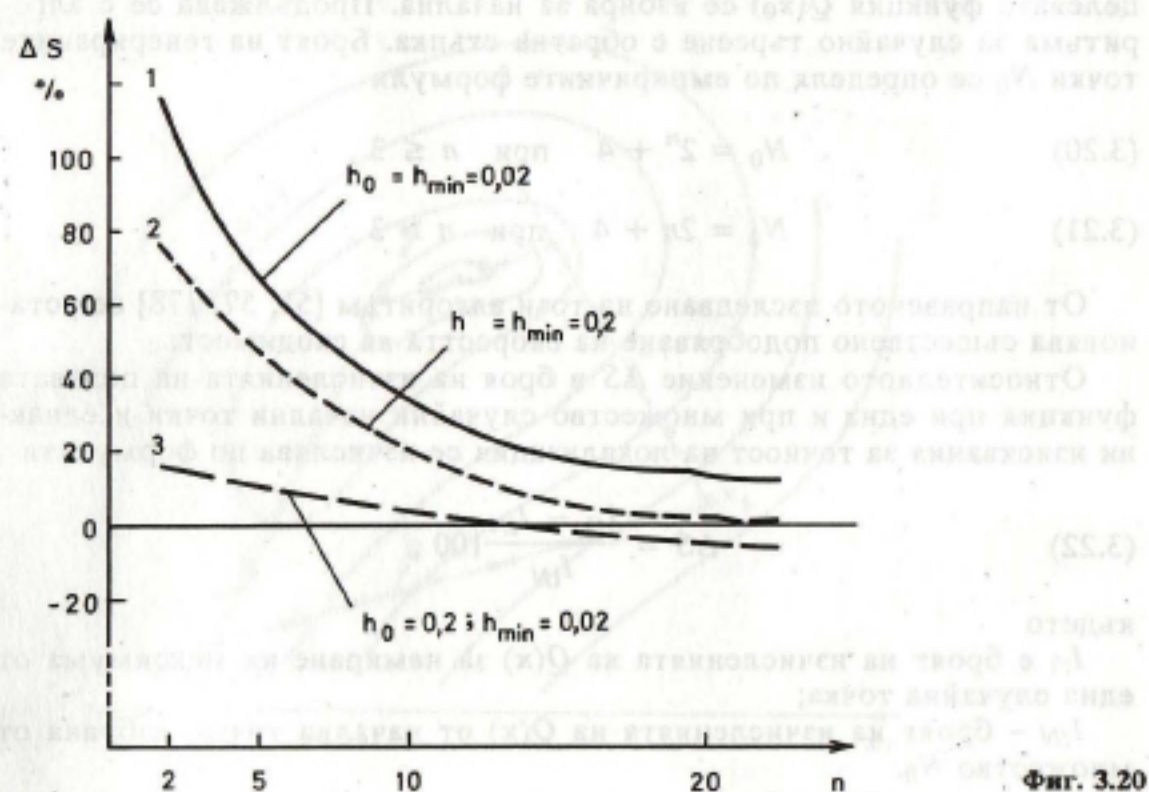
На фиг. 3.20 е показано ΔS в зависимост от различен брой управляващи параметри $n = 2, 5, 10$ и 20 и различни начални h_{0i} и крайни стъпки $h_{\min i}$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Кривите 1–3 са построени от осреднени резултати за I_{t1} и I_{tN} от по 20 търсения на екстремум за всяко n и за всяка целева функция. При всяко търсене е генерирана нова случайна начална точка или ново множество N_0 . От фиг. 3.20 се вижда, че скоростта на сходимост на случайното търсене с обратна стъпка се повишава при множество начални точки и постоянна стойност на параметъра на стъпката.

При голям брой управляващи параметри ($n > 10$) броят на точките N_0 , изчислен по (3.21), съществено се увеличава и ефективността намалява (крива 3). Ето защо се препоръчва $N_0 = n + 4$ при $n > 10$.

Скоростта на сходимост може да се повиши още повече, ако началният алгоритъм е случайно търсене с голям параметър на стъпката и начална точка, избрана от множество и долокализиране на екстремума с друг алгоритъм, например градиентен.

*
*
*

През последните години методите на случайното търсене се развива и намериха широко приложение за решаване на инженерни задачи. Те са предпочитани от изследователите, тъй като не изискват задаване или оценка на градиента на целевата функция. Критериите за спи-



Фиг. 3.20

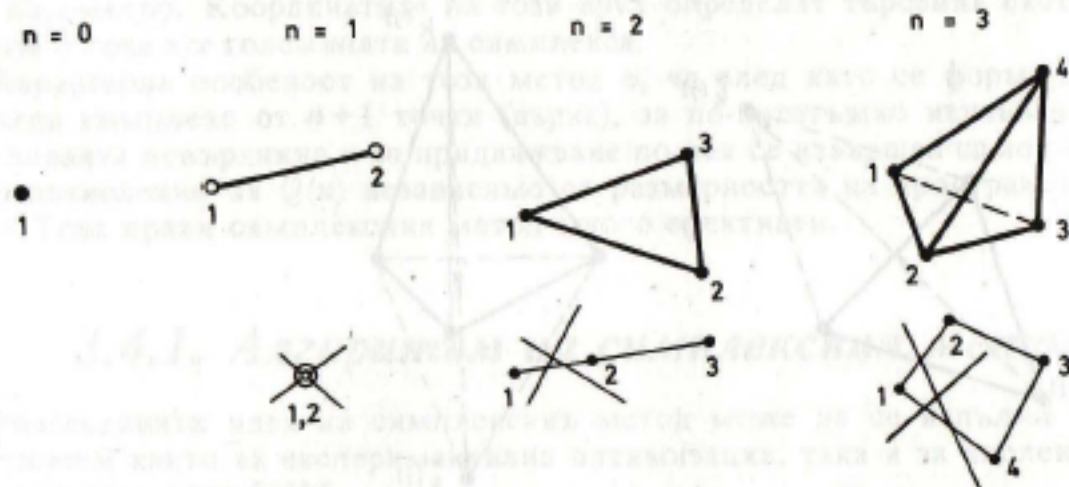
ране при тях са по-детерминирани, лесни са за програмиране, позволяват организиране на адаптивни алгоритми и алгоритми за търсене на глобален екстремум.

Според изследванията на Растрингин [39] методът на случайното търсене е по-ефективен при по-голям брой управляващи параметри ($n > 4$), тъй като независимо от броя им пространството се разделя винаги на две области – успешна и неуспешна, и вероятността да се попадне в едната или другата не зависи от n .

3.4. Симплексен метод за нелинейна оптимизация

Симплексният метод за оптимизация е метод за едновременно изучаване на целевата повърхнина и за движение към екстремума въз основа на изчисления на целевата функция в точки, които образуват симплекс в пространството на управляващите параметри.

В n -мерното Евклидово пространство симплексът е многостен, образуван от $n + 1$ точки (върха), нележащи едновременно в нито едно $(n-1)$ -мерно подпространство на n -мерното пространство. Симплексът в нуламерното пространство е точка, а в едномерното – две точки (отсечка), които не съвпадат. В двумерното пространство симплексът представлява триъгълник и трите точки не могат да лежат на една права линия, в тримерното симплексът има четири върха (пирамида), в четиримерното – пет върха и т.н. На фиг. 3.21 са показани симплекси до тримерно пространство. Задрасканите фигури не отговарят на условието за симплекс.



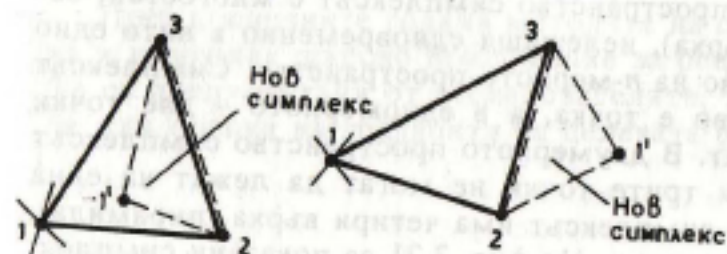
Фиг. 3.21

Регулярен симплекс се нарича симплекс с еднакви разстояния между върховете му.

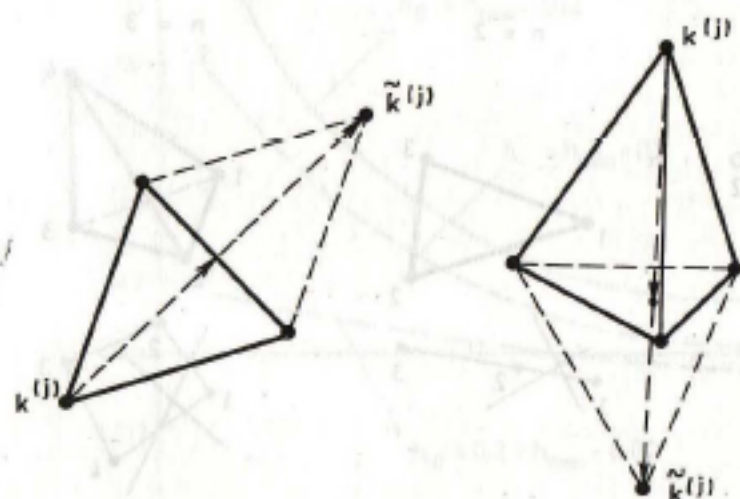
При оптимизацията се използва следното важно свойство на симплекса: от всеки симплекс може да се построи нов, ако се отхвърли само един връх и на негово място се добави нов (фиг. 3.22). Тъй като срещу всеки връх $k^{(j)}$ е разположена само една стена на симплекса, нов симплекс се построява, ако се добави нов връх (точка) $\tilde{k}^{(j)}$, симетрично отразен чрез срещуположната стена. За регулярните симплекси това отразяване е огледално спрямо срещуположната стена на симплекса.

Полученият симплекс заема нова област в n -мерното пространство. По този начин, като последователно се отхвърлят върхове и се добавят нови, симетрично отразени на тяхно място, симплексът се премества в пространството (фиг. 3.23).

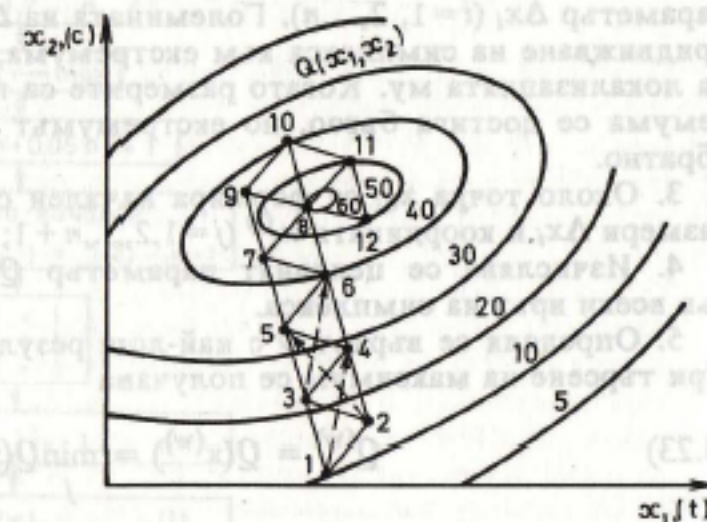
Въз основа на това свойство на симплекса Спендли, Хекст и Химсуърт са предложили ефективен метод за оптимизация [169]. Графичната интерпретация на метода е показана на фиг. 3.24.



Фиг. 3.22



Фиг. 3.23



Фиг. 3.24

При два управляващи параметъра е формиран начален симплекс 1, 2, 3. Във всеки връх на симплекса (точка) се определя $Q(x)$. Отхвърля се върхът 1 с най-лош резултат за целевата функция и се изчисляват координатите на нов връх 4 чрез симетрично отразяване на връх 1 спрямо страната 2 – 3. В т. 4 се определя $Q(x)$. След това се отразява връх 2 с най-лош резултат за симплекс 2, 3, 4. Получава се връх 5 и т.н. При това заместване на върховете от симплекса с най-лош резултат с нови върхове симплексът се премества последователно в посока на максимума. В областта на екстремума симплексът се зацикля, т.е. започва да се върти около една точка с максимална стойност на целевия параметър. Координатите на този връх определят търсения екстремум с точност големината на симплекса.

Характерна особеност на този метод е, че след като се формира начален симплекс от $n+1$ точки (върха), за по-нататъшно изучаване на целевата повърхнина и за придвижване по нея се извършва само по едно изчисление на $Q(x)$ независимо от размерността на пространството. Това прави симплексния метод много ефективен.

3.4.1. Алгоритъм на симплексния метод

Разгледаната идея на симплексния метод може да се изпълни в алгоритъм както за експериментална оптимизация, така и за числена оптимизация чрез ЕИМ.

1. Избира се начална точка в допустимото пространство на управляващите параметри x_{0i} ($i = 1, 2, \dots, n$), около която ще се формира симплекс.

2. Задават се условни размери на симплекса по всеки управляващ параметър Δx_i ($i = 1, 2, \dots, n$). Големината на Δx_i определя скоростта на придвижване на симплекса към екстремума, а също така и точността на локализацията му. Когато размерите са големи, областта на екстремума се достига бързо, но екстремумът се локализира неточно и обратно.

3. Около точка x_{0i} се формира начален симплекс от $n+1$ точки с размери Δx_i и координати $x_i^{(j)}$ ($j = 1, 2, \dots, n+1$; $i = 1, 2, \dots, n$).

4. Изчислява се целевият параметър $Q^{(j)} = Q(x^{(j)})$ ($j = 1, 2, \dots, n+1$) във всеки връх на симплекса.

5. Определя се върхът w с най-лош резултат за целевата функция. При търсене на максимум се получава

$$(3.23) \quad Q^{(w)} = Q(x^{(w)}) = \min_j Q(x^{(j)}).$$

Ако се получат няколко върха с най-лош резултат, избира се един от тях по случаен начин (вж. т. 7 и 9, фиг. 3.24).

6. Изчисляват се координатите на нов връх $x_i^{(k)}$ ($i = 1, 2, \dots, n$), който е симетрично отразен спрямо връх $x_i^{(w)}$.

7. В новополучения връх се изчислява целевата функция $Q^{(k)} = Q(x^{(k)})$.

8. Новополученият връх се приема за връх на симплекса на мястото на отразения.

9. Алгоритъмът се повтаря от т. 5. Ако се окаже, че в новия симплекс най-лошият резултат е в новополучения връх, за отразяване се приема този от следващите върхове, който е с най-лош резултат за целевата функция $x^{(w)}$. Например на фиг. 3.24 след отразяване на връх 7 в новополучения симплекс 8, 9, 10 най-лош резултат се получава в новия връх 10, затова се отразява връх 9.

10. Критерий за достигане на екстремума и спиране на търсенето е зациклянето на симплекса около един връх (т. 8, фиг. 3.24). В многомерното пространство това зацикляне може да се установи, когато един връх x^b с най-добър резултат за целевата функция Q^b остава непроменен след N_c последователни премествания на симплекса. N_c се определя по емпиричната формула

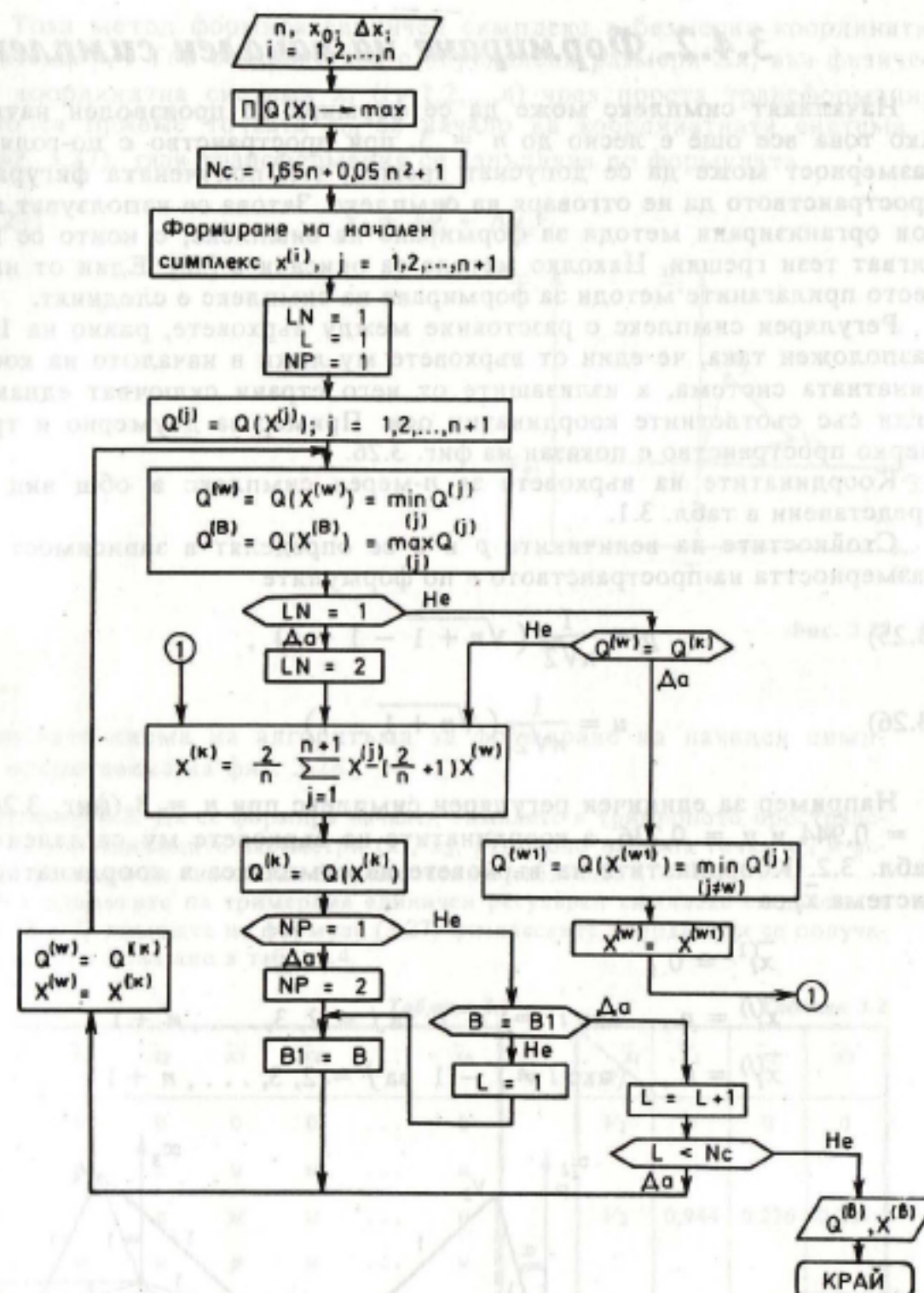
$$(3.24) \quad N_c = 1,65n + 0,05n^2 + 1,$$

където n е броят на управляващите параметри.

11. След зацикляне на симплекса, ако точността не е задоволителна, около върха с най-добър резултат се формира нов симплекс с намалени размери Δx_i и търсенето продължава отново от т. 4.

Окупненият блок алгоритъм на симплексния метод е показан на фиг. 3.25.

За да се реализира алгоритъмът, необходимо е да се разгледа как



Фиг. 3.25

се формира начален симплекс и как се отразява върхът с най-лош резултат.

3.4.2. Формиране на начален симплекс

Началният симплекс може да се формира по произволен начин. Ако това все още е лесно до $n = 3$, при пространство с по-голяма размерност може да се допуснат грешки, т.е. получената фигура в пространството да не отговаря на симплекс. Затова се използват някои организирани методи за формиране на симплекс, с които се избягват тези грешки. Няколко метода са описани в [58]. Един от най-често прилаганите методи за формиране на симплекс е следният.

Регулярен симплекс с разстояние между върховете, равно на 1, е разположен така, че един от върховете му лежи в началото на координатната система, а излизащите от него страни сключват еднакви ъгли със съответните координатни оси. Пример за двумерно и тримерно пространство е показан на фиг. 3.26.

Координатите на върховете за n -мерен симплекс в общ вид са представени в табл. 3.1.

Стойностите на величините p и u се определят в зависимост от размерността на пространството n по формулите

$$(3.25) \quad p = \frac{1}{n\sqrt{2}} (\sqrt{n+1} - 1 + n),$$

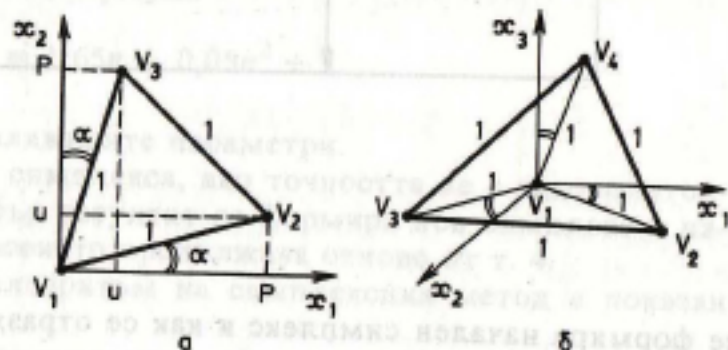
$$(3.26) \quad u = \frac{1}{n\sqrt{2}} (\sqrt{n+1} - 1).$$

Например за единичен регулярен симплекс при $n = 3$ (фиг. 3.26б) $p = 0,944$ и $u = 0,236$, а координатите на върховете му са дадени в табл. 3.2. Координатите на върховете на симплекса в координатната система $\bar{x}_i$ са

$$\bar{x}_i^{(1)} = 0,$$

$$\bar{x}_i^{(j)} = p, \quad \text{ако } i = j - 1 \text{ за } j = 2, 3, \dots, n+1,$$

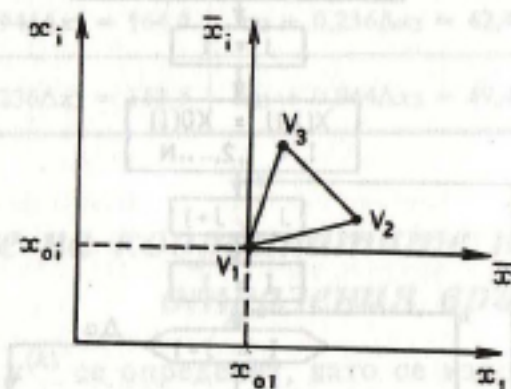
$$\bar{x}_i^{(j)} = u, \quad \text{ако } i \neq j - 1 \text{ за } j = 2, 3, \dots, n+1.$$



Фиг. 3.26

Този метод формира единичен симплекс в безмерна координатна система $\bar{x}_i$. Той се представя с определени размери Δx_i във физическа координатна система x_i ($i = 1, 2, \dots, n$) чрез проста трансформация. Ако се приеме точката x_{0i} за начало на координатната система $\bar{x}_i$ (фиг. 3.27), тази трансформация се изпълнява по формулата

$$(3.27) \quad x_i = x_{0i} + \Delta x_i \bar{x}_i.$$



Фиг. 3.27

Блоковата схема на алгоритъма за формиране на начален симплекс е представена на фиг. 3.28.

Пример 3.2. Да се формира начален симплекс в тримерното пространство на управляващите параметри (x_1, x_2, x_3) около начална точка x_{0i} и условни размери на симплекса Δx_i , посочени в табл. 3.3.

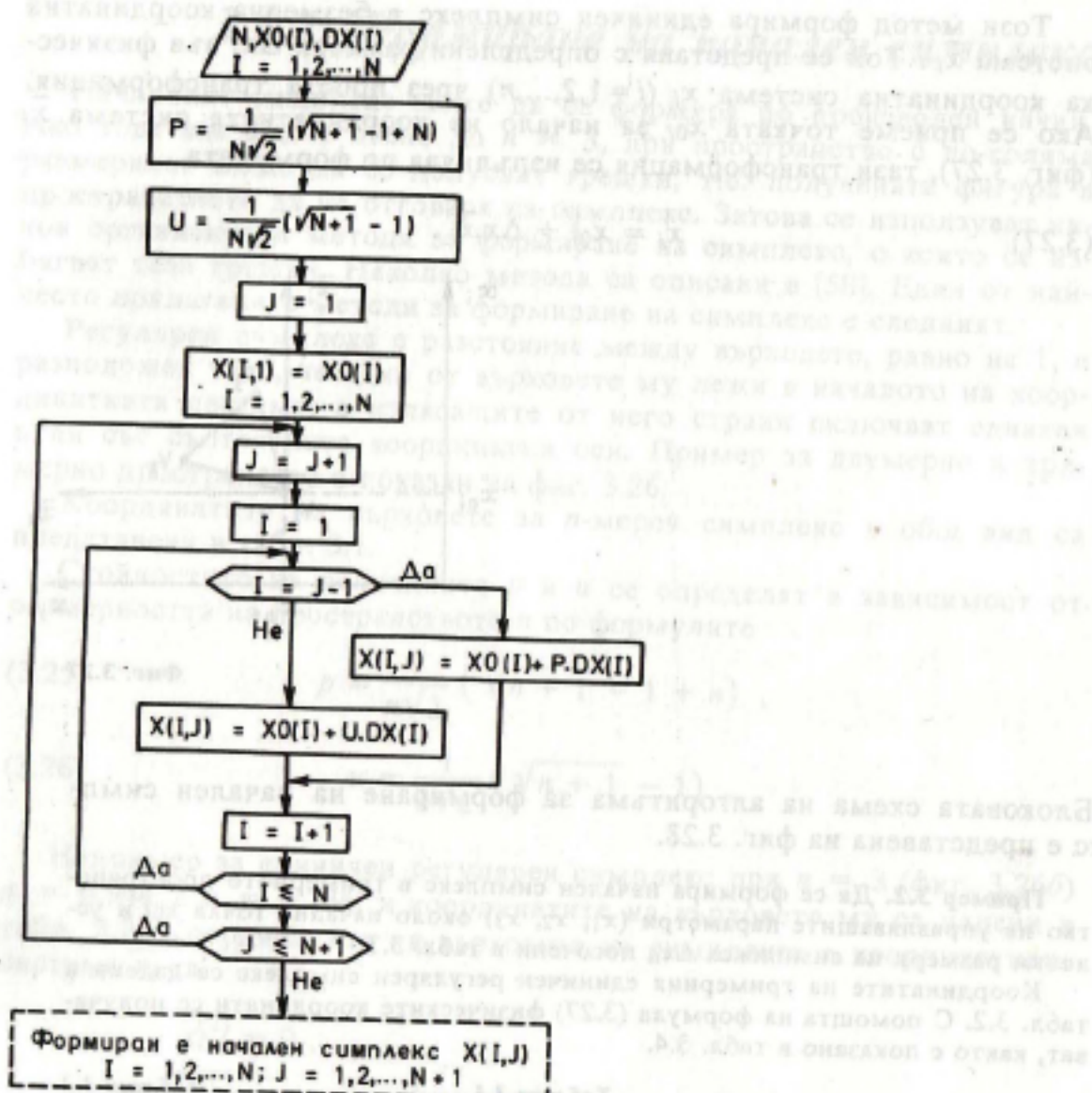
Координатите на тримерния единичен регулярен симплекс са дадени в табл. 3.2. С помощта на формула (3.27) физическите координати се получават, както е показано в табл. 3.4.

Таблица 3.1

$\bar{x}_i \backslash V_j$	$\bar{x}_1$	$\bar{x}_2$	$\bar{x}_3$	$\bar{x}_4$	...	$\bar{x}_n$
V_1	0	0	0	0	...	0
V_2	p	u	u	u	...	u
V_3	u	p	u	u	...	u
V_4	u	u	p	u	...	u
V_5	u	u	u	p	...	u
...	...	...	...	...	...	...
V_{n+1}	u	u	u	u	...	p

Таблица 3.2

$\bar{x}_i \backslash V_j$	$\bar{x}_1$	$\bar{x}_2$	$\bar{x}_3$
V_1	0	0	0
V_2	0,944	0,236	0,236
V_3	0,236	0,944	0,236
V_4	0,236	0,236	0,944



Фиг. 3.28

Таблица 3.3

	x_i	x_1	x_2	x_3
		%	°C	min
x_{0i}		10	150	40
Δx_i		2	15	10

Таблица 3.4

Връх	$x_1, \%$	$x_2, ^\circ\text{C}$	x_3, min
V_1	$x_{01} + 0 = 10,0$	$x_{02} + 0 = 150,0$	$x_{03} + 0 = 40,0$
V_2	$x_{01} + 0,944\Delta x_1 = 11,90$	$x_{02} + 0,236\Delta x_2 = 153,5$	$x_{03} + 0,236\Delta x_3 = 42,4$
V_3	$x_{01} + 0,236\Delta x_1 = 10,47$	$x_{02} + 0,944\Delta x_2 = 164,0$	$x_{03} + 0,236\Delta x_3 = 42,4$
V_4	$x_{01} + 0,236\Delta x_1 = 10,47$	$x_{02} + 0,236\Delta x_2 = 153,5$	$x_{03} + 0,944\Delta x_3 = 49,4$

3.4.3. Определяне на координатите на отразения връх

Координатите на отразения връх $x^{(k)}$ се определят, като се използват свойствата на отразяването. Новият връх е разположен симетрично на най-лошия $x^{(w)}$ относно срещуположната стена на симплекса и лежи на права, която преминава през центъра на тежестта $\bar{x}$ (фиг.3.29). Координатите на центъра на тази стена се определят от вектора $x^{(c)}$:

$$(3.28) \quad x^{(c)} = \frac{1}{n} \left(\sum_{j=1}^{n+1} x^{(j)} - x^{(w)} \right).$$

За да се намерят координатите на новия връх, се използва векторното равенство

$$(3.29) \quad x^{(k)} = x^{(w)} + 2(x^{(c)} - x^{(w)}).$$

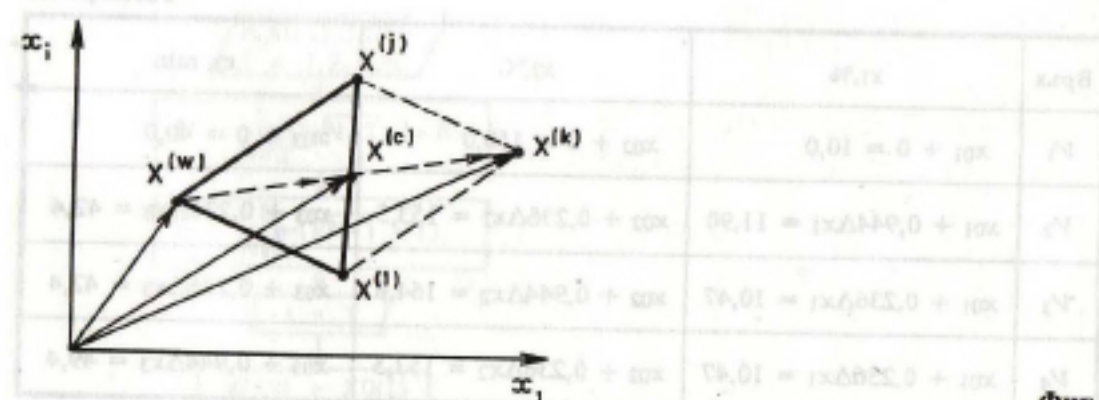
Като се замести $x^{(c)}$ от (3.28) в (3.29), се получава

$$(3.30) \quad x^{(k)} = \frac{2}{n} \sum_{j=1}^{n+1} x^{(j)} - \left(\frac{2}{n} + 1 \right) x^{(w)},$$

т.е. координатите за всеки управляващ параметър са

$$(3.30a) \quad x_i^{(k)} = \frac{2}{n} \sum_{j=1}^{n+1} x_i^{(j)} - \left(\frac{2}{n} + 1 \right) x_i^{(w)}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

На фиг. 3.29 е илюстрирано определянето на $x^{(k)}$ за двумерен симплекс.



Фиг. 3.29

Пример 3.3. Нека за формирания тримерен симплекс с координати, посочени в табл. 3.4, връх V_2 е с най-лош резултат за целевата функция. Координатите на отразения връх, изчислени по (3.30a), са:

$$x_1^{(2)} = \frac{2}{3}(10 + 11,9 + 10,47 + 10,47) - \left(\frac{2}{3} + 1\right) 11,9 = 8,73\%,$$

$$x_2^{(2)} = \frac{2}{3}(150 + 153,5 + 164 + 153,5) - \left(\frac{2}{3} + 1\right) 153,5 = 158,2^\circ\text{C},$$

$$x_3^{(2)} = \frac{2}{3}(40 + 42,4 + 42,4 + 49,4) - \left(\frac{2}{3} + 1\right) 42,4 = 45,5 \text{ min}.$$

Блоквата схема на алгоритъма за определяне на връх с най-лош $x^{(w)}$ и с най-добър $x^{(b)}$ резултат за $Q(x)$, както и за изчисляване на координатите на нов връх $x^{(k)}$, който заменя $x^{(w)}$, е показана на фиг. 3.30.

Блоквата схема на алгоритъма за определяне на връх $x^{(w)}$ с резултат, следващ след най-лошия, е представена на фиг. 3.31.

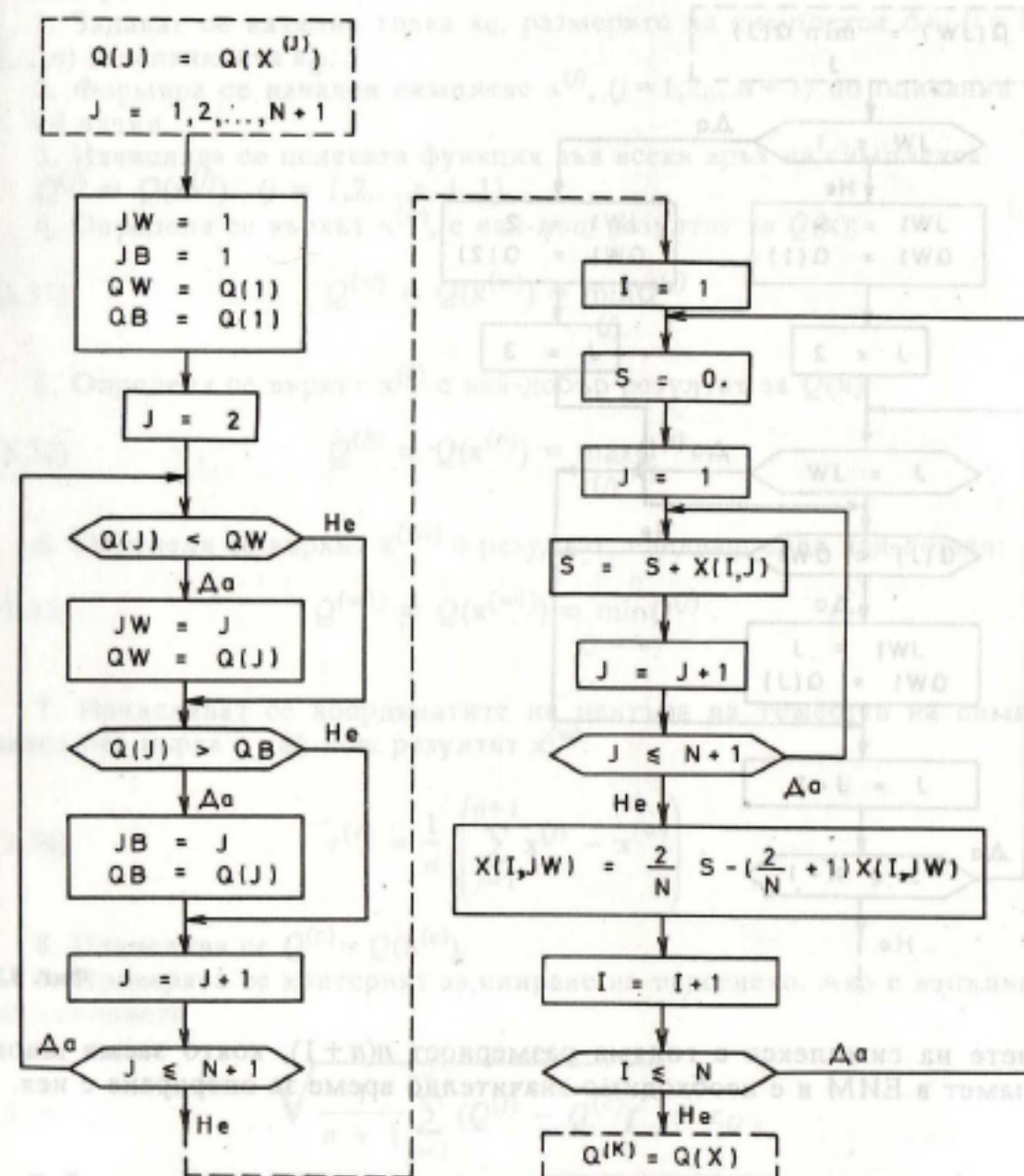
Предимства на симплексния метод

1. Методът е много ефективен при голям брой управляващи параметри $2 \leq n \leq 30 \div 50$, тъй като за изучаване на целевата повърхнинна и движение по нея се прави само една стъпка независимо от броя на управляващите параметри.

2. Методът е приложим и за числена, и за експериментална оптимизация.

3. Размерите на симплекса могат да се изменят в зависимост от получаваните резултати при отразяване на върховете. Тази модификация е известна като метод на деформируемия симплекс или метод на Нелдер – Мид [147], разгледан в т. 3.5.

4. Симплексният метод е приложим при неограничена област на



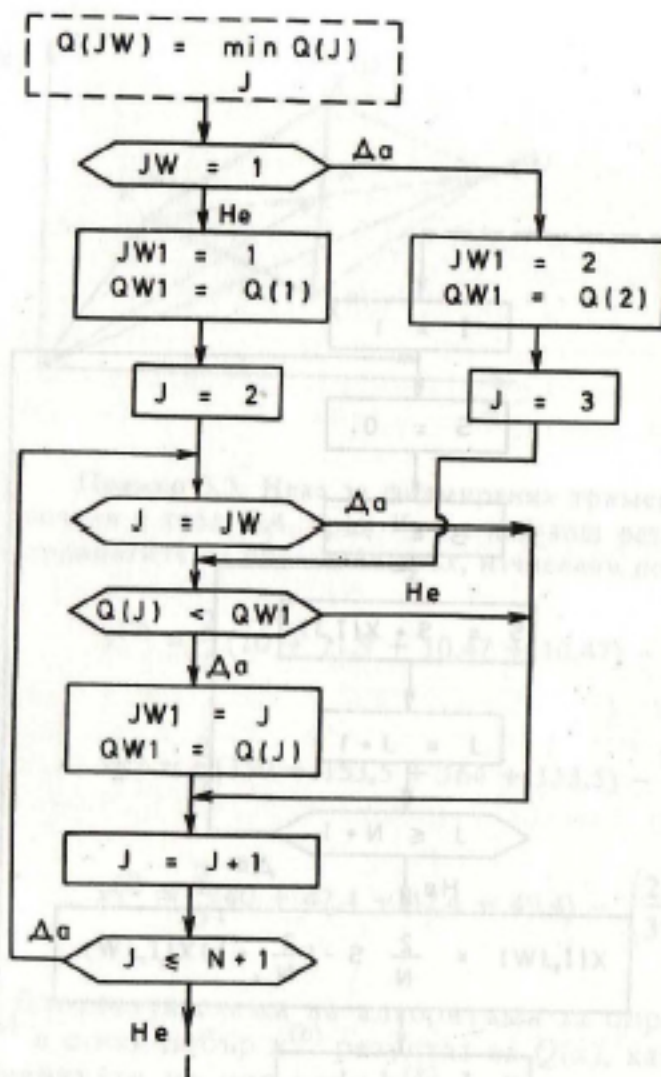
Фиг. 3.30

пространството за x . С известно преработване на алгоритъма той се прилага успешно и при $x \in \Gamma_x$.

Недостатъци на симплексния метод

1. Пътят към екстремума и скоростта на сходимост зависят от началната ориентация на симплекса.

2. При много голям брой управляващи параметри ($n > 50$) при числена оптимизация се получава матрица от координатите на върхо-



Фиг. 3.31

вете на симплекса с голяма размерност $n(n+1)$, която заема много памет в ЕИМ и е необходимо значително време за опериране с нея.

3.5. Метод на Нелдер – Мид

Скоростта на сходимост на симплексния метод съществено зависи от размера на симплекса. Ако симплексът е формиран далеч от екстремума и е с малки размери, той се придвижва до максимума много бавно. Ако размерите на симплекса са големи, екстремумът се локализира неточно.

Нелдер и Мид [147] са предложили метод на деформируемия симплекс, при който размерите на симплекса се изменят в зависимост от резултатите за целевата функция в процеса на търсенето. Симплексът може да се разтегля, свива и редуцира.

Алгоритъмът на метода е следният:

1. Задават се начална точка x_0 , размерите на симплекса Δx_i ($i=1, 2, \dots, n$) и величината ϵ_Q .
2. Формира се начален симплекс $x^{(j)}$, ($j=1, 2, \dots, n+1$) по описания в т. 3.4 начин.
3. Изчислява се целевата функция във всеки връх на симплекса: $Q^{(j)} = Q(x^{(j)})$, ($j=1, 2, \dots, n+1$).
4. Определя се върхът $x^{(w)}$, с най-лош резултат за $Q(x)$:

$$(3.31) \quad Q^{(w)} = Q(x^{(w)}) = \min_{(j)} Q^{(j)}.$$

5. Определя се върхът $x^{(b)}$ с най-добър резултат за $Q(x)$:

$$(3.32) \quad Q^{(b)} = Q(x^{(b)}) = \max_{(j)} Q^{(j)}.$$

6. Определя се върхът $x^{(w1)}$ с резултат, следващ след най-лошият:

$$(3.33) \quad Q^{(w1)} = Q(x^{(w1)}) = \min_{(j \neq w)} Q^{(j)}.$$

7. Изчисляват се координатите на центъра на тежестта на симплекса без върха с най-лош резултат $x^{(w)}$:

$$(3.34) \quad x^{(c)} = \frac{1}{n} \left(\sum_{j=1}^{n+1} x^{(j)} - x^{(w)} \right).$$

8. Изчислява се $Q^{(c)} = Q(x^{(c)})$.

9. Проверява се критерият за спиране на търсенето. Ако е изпълнено условието

$$(3.35) \quad \sqrt{\frac{1}{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} (Q^{(j)} - Q^{(c)})^2} \leq \epsilon_Q,$$

търсенето се прекратява и се отпечатват $x^{(b)}$ и $Q^{(b)}$. Иначе алгоритъмът продължава с т. 10.

10. Отразява се върхът с най-лош резултат и се изчисляват координатите на нов връх

$$(3.36) \quad x^{(N)} = x^{(c)} + \delta(x^{(c)} - x^{(w)}); \quad \delta > 0.$$

11. Изчислява се $Q^{(N)} = Q(x^{(N)})$.

12. Ако $Q^{(N)} \geq Q^{(b)}$, симплексът се разтегля и се изчислява нов връх