МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН
ЮЖНО-КАЗАХСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ им. М.О. АУЕЗОВА

Инков А.М., Тапалов Т.Т., Ахметова К.Т.

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ

Методические указания к выполнению лабораторных работ студентами специальности 36.01.40 «Автоматизация и информатизация в системах управления» и 36.02.40 «Автоматизация технологических процессов и производств

Шымкент 2003г

Инков А.М., Тапалов Т.Т., Ахметова К.Т. Методы оптимизации. Методические указания к выполнению лабораторных работ студентами специальности 36.01.40 «Автоматизация и информатизация в системах управления» и 36.02.40 «Автоматизация технологических процессов и производств». Южно-Казахстанский Государственный Университет им. М.О. Ауэзова (ЮКГУ). 2003 г. - 76 стр., таб., ил.

В методических указаниях содержится полное описание четырех лабораторных работ по дисциплине «Методы оптимизации», рассматриваются теоретические основы и алгоритмы поиска оптимума целевых функций. Исследуются как градиентные, так и безградиентные методы оптимизации. К каждой из лабораторных работ приведен подробный контрольный пример, задания, контрольные вопросы.

Рецензенты: д.т.н., профессор ЮКГУ Ескендиров Ш.З.
к.т.н., начальник департамента Информатики Университета «Мирас» к.т.н., Апсеметов А.Т.

Рассмотрены и рекомендованы к печати научно - методическим советом ЮКГУ, протокол №___от 04 июля 2003 г.

© Южно-Казахстанский Государственный Университет (ЮКГУ), 2003 г.

СОДЕРЖАНИЕ

Стр.

Введение. 4
1.Постановка задачи оптимизации. 6
2.Методика выполнения работ, требования к отчетам. 8
3.Лабораторная работа №2: «Методы одномерной оптимизации». 9
3.1.Метод прямого поиска по дискретам. 9
3.2.Метод трехточечного поиска. 14
3.3.Метод дихотомии. 15
3.4.Метод Больцано. 17
3.5.Метод Фибоначчи. 18
3.6.Метод золотого сечения. 20
3.7.Метод поиска с обратным половинным шагом. 22
3.8.Метод Пауэла. 23
3.9.Метод Девиса – Свена - Кемпи. 25
3.10.Метод поиска с использованием кубической аппроксимации. 26
4.Лабораторная работа №2: «Градиентные методы многомерной безусловной оптимизации» 29
4.1.Метод релаксаций. 29
4.2.Метод градиента. 35
4.3.Метод наискорейшего спуска. 38
5.Лабораторная работа №3: «Безградиентные методы многомерной безусловной оптимизации. Метод сканирования» 43
6.Лабораторная работа №4: «Безградиентные методы многомерной безусловной оптимизации. Метод Нелдера-Мида (деформированного многогранника)» 48
7.Варианты заданий. 53
8. Список рекомендуемой литературы. 55
9.Контрольные вопросы 56

ВВЕДЕНИЕ.

Большое число задач в науке и техники формулируются как экстремальные: оптимальное управление, оптимальное распределение ресурсов, оптимальное конструирование алгоритмов, принятие оптимальных решений, определение оптимальных условий ведения процесса, оптимального состава композиций и т.д. В качестве критерия оптимальности (целевой функции) могут быть использованы как экономические, так и технологические показатели: прибыль, себестоимость, производительность, качество продукта и т.п. Большинство практических задач имеет несколько (а некоторые, возможно, даже бесконечное число) решений. Корректная постановка задачи оптимизации требует единственности критерия оптимальности и наличия ресурсов оптимизации, т.е. параметров оптимизации, варьируемых в определенном диапазоне[1-9].

Для решения задач оптимизации применимы два принципиально различных подхода:

1).Определение оптимальных условий непосредственно на объекте путем экспериментирования (экспериментальная оптимизация). Такой подход находит применение в том случае, если отсутствует математическая модель объекта, но есть возможность поставить ряд экспериментов на объекте. Процесс экспериментального исследования при этом разбивается на отдельные стадии локального изучения целевой функции. Информация, полученная на каждом этапе, определяет стратегию продолжения эксперимента. Область оптимального значения целевой функции достигается, таким образом, с помощью последовательной многократной процедуры локального изучения целевой функции.

2).Определение оптимальных условий функционирования объекта с использованием его математической модели. В отличие от первого такой подход позволяет решать не только задачу оптимизации, но также и задачу оптимального проектирования. Кроме того этот подход предполагает широкое использование средств вычислительной техники и, как следствие, приводит к существенной экономии материальных затрат и времени исследования.

Целью оптимизации является нахождение наилучшего технически реализуемого решения среди многих потенциально возможных в соответствии с некоторым критерием эффективности (качества) с учетом реальных ограничений. В любой практической оптимизационной задаче существует много совпадающих этапов. Наиболее важным этапом является моделирование рассматриваемой функции, которую необходимо минимизировать, а также определения ограничений, для осуществления минимизации. Эта процедура должна быть реализована на практике с использованием средств вычислительной техники для выполнения большого объема вычислений. И, наконец, математический результат должен быть интерпретирован опять же в терминах физического содержания задач.

На практике встречаются задачи, в которых целевая функция может быть дифференцируемой, недифференцируемой, либо вообще заданной неявно. В настоящем пособии содержится описания методов и алгоритмов одномерной и многомерной

оптимизации разных типов, наиболее широко применяемых в методах нелинейного программирования. Настоящее пособие содержит общую постановку задачи оптимизации, а также описание методов одномерной и многомерной оптимизации и методические указания к выполнению четырех лабораторных работ.

1.ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ.

Общая постановка задач оптимизации предполагает:

1). Выбор критерия оптимальности (целевой функции) вида:

F = F(X), где X-вектор параметров оптимизации.

Причем вид этой зависимости, в случае экспериментальной оптимизации, может быть не определен аналитически, но имеется возможность наблюдать значения целевой функции при любой допустимой комбинации значений параметров оптимизации, путем экспериментирования непосредственно на объекте.

2). Выбор параметров (ресурсов оптимизации) оптимизации (факторов) из множества переменных, оказывающих влияние на целевую функцию, как наиболее существенных, причем допускающих варьирование в некотором диапазоне.

3). Определение стратегии оптимизации, доставляющей экстремум целевой функции F(X), определенной в m-мерном пространстве параметров (фазовом пространстве).

В простейшем случае при ограничениях на параметры оптимизации вида:

$X_j^{MIN} \le X_j \le X_j^{MAX}$ (j =1, 2, 3,…m)

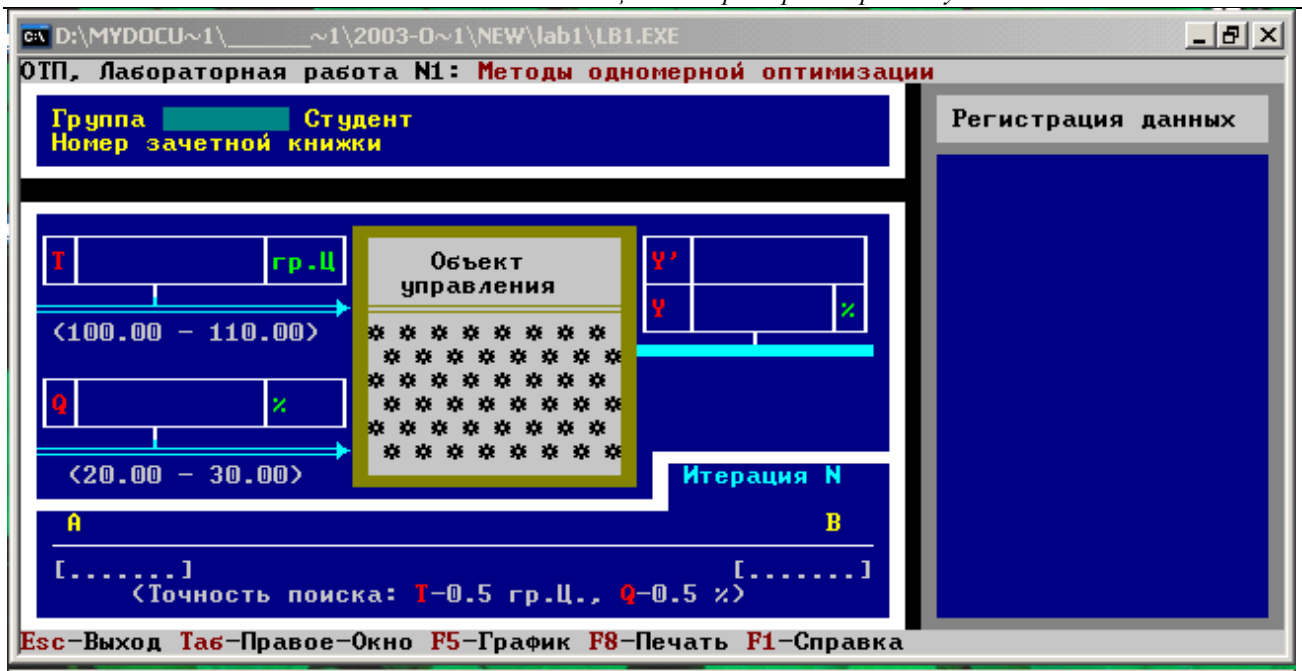
Фазовое пространство представляет собой гиперкуб. В общем случае, если ограничения функционально связаны с параметрами оптимизации, фазовое пространство имеет более сложный вид, при этом усложняется также и решение задач оптимизации.

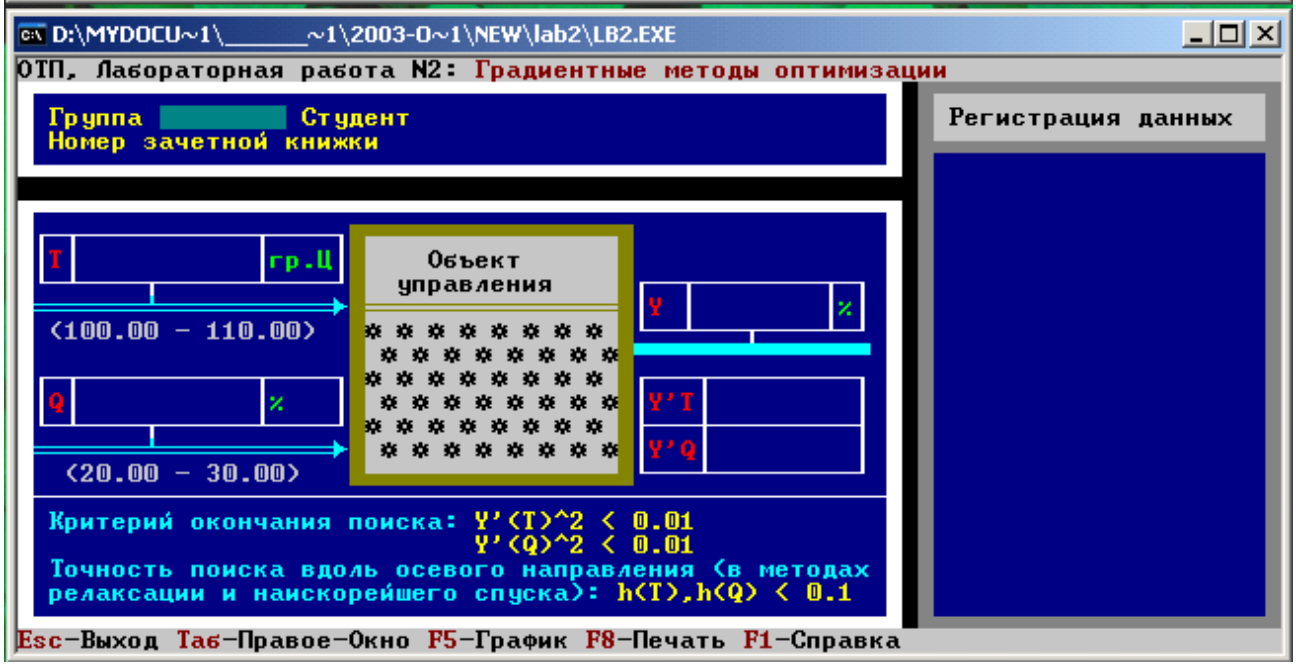
В лабораторных работах предлагается решить задачу оптимизации объектов, условия, функционирования которых определяются:

- в лабораторной работе №1 одним из наиболее существенных факторов (T или Q);
- в лабораторных работах№2-4 (температура T или концентрация Q) двумя наиболее существенными факторами (T, Q);при ограничениях:

$T^{MIN} \le T \le T^{MAX}$, $Q^{MIN} \le Q \le Q^{MAX}$.

Необходимо определить оптимальные значения факторов, доставляющие минимум целевой функции F(T) или F(Q) в работе №1, либо F(T,Q) в работах №№2-4. Ниже приведены копии экранов лабораторных работ №1 и №2:


D:\MYDOCU~1_____~1\2003-O~1\NEW\lab1\LB1.EXE
ОТП, Лабораторная работа N1: Методы одномерной оптимизации
Группа Студент
Номер зачетной книжки
Регистрация данных
T
гр.Ц
(100.00 - 110.00)
Q
%
(20.00 - 30.00)
Объект управления
Y'
Y
%
Итерация N
A
B
[.......]
[.......]
(Точность поиска: T-0.5 гр.Ц., Q-0.5 %)
Esc-Выход Таб-Правое-Окно F5-График F8-Печать F1-Справка


D:\MYDOCU~1_____~1\2003-O~1\NEW\lab2\LB2.EXE
ОТП, Лабораторная работа N2: Градиентные методы оптимизации
Группа Студент
Номер зачетной книжки
Регистрация данных
T
гр.Ц
(100.00 - 110.00)
Q
%
(20.00 - 30.00)
Объект управления
Y
%
Y'T
Y'Q
Критерий окончания поиска: Y'(T)^2 < 0.01
Y'(Q)^2 < 0.01
Точность поиска вдоль осевого направления (в методах релаксации и наискорейшего спуска): h(T),h(Q) < 0.1
Esc-Выход Таб-Правое-Окно F5-График F8-Печать F1-Справка

2.МЕТОДИКА ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТ, ТРЕБОВАНИЯ К ОТЧЕТАМ.

Порядок выполнения лабораторных работ следующий.

1).Ознакомиться с постановкой задачи оптимизации и алгоритмами изучаемых методов оптимизации.

2).Согласно варианту (в основном это номер студента в списке группы) получить вид целевой функции и границы поиска.

3).Провести расчеты поиска оптимизации для заданной целевой функции в соответствии с алгоритмом изучаемого метода оптимизации.

4).Составить блок-схему изучаемого метода оптимизации.

5).Написать программу, реализующую исследуемый метод.

6).Провести на ЭВМ проверку правильности расчетов.

7).Запустить на выполнение одну из программ:

- Lab1 - «Лабораторная работа №1» (при изучении методов одномерной оптимизации).
- Lab2 - «Лабораторная работа №2» (при изучении градиентных методов многомерной оптимизации).
- Lab3 - «Лабораторная работа №3» (при изучении метода сканирования).
- Lab4 - «Лабораторная работа №4» (при изучении метода деформированного многогранника).

8).Провести исследование на анализ изучаемых методов оптимизации:

- Построить график исследуемой функции в заданных диапазонах.
- Нанести на график результат поиска экстремума.
- Провести анализ эффективности изучаемого метода (вывод).

9).Составить отчет о результатах работ, содержащий:

- Описание постановки задачи.
- Описание теоретических основ изучаемых методов.
- Результаты расчетов поиска оптимизации для заданной целевой функции (исследований).
- Блок-схему изучаемого метода оптимизации.
- Программу на ЭВМ, реализующую исследуемый метод.
- Результаты расчетов (исследований) на ЭВМ.
- Графики, иллюстрирующие результаты исследований изучаемых алгоритмов.
- Анализ результатов и выводы.

10).Защитить отчет.

3.ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №2: «МЕТОДЫ ОДНОМЕРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ».

3.1.Метод прямого поиска по дискретам.

В этом методе первоначально задаются **к** значениями независимой переменной **X** равномерно распределенной с шагом **h** на интервале неопределенности [**A, B**]. Просмотрев все значения функции **F(X)**, определяют точку, в которой значение функции минимально, и сужают исходный интервал неопределенности до величины 2***h** с центром в этой точке, после чего поиск повторяют, пока не достигается заданная точность **ε**. При достаточно большом числе **к** данный метод позволяет найти минимум унимодальной (монотонно возрастающей или убывающей при отклонении от оптимума в любую сторону) функции.

Исходными данными являются:

- A, B - границы интервала неопределенности;
- к - количество дискрет;
- ε- точность поиска.

Алгоритм поиска состоит из следующих шагов:

1) Вычисляется шаг поиска: h=(B-A)/k.
2) Интервал неопределенности [A, B] делится на подинтервалы сеткой (т.е. набором значений X) из точек: X_i=A+(i-1)*h, для i=1,2....k+1.
3) Вычисляются и запоминаются значения функции в каждой из (k+1) точек сетки : $F_i=F(X_i)$.
4) Находится точка, в которой функция имеет наименьшее значение: $F_{MIN}=MIN[F_1,...,F_i,..,F_{K+1}]$, X_{MIN}=точка X_i, которая соответствует F_{MIN}.
5) Выбирается новый интервал, включающий два подинтервала с наименьшим вычисленным значением функции F_{MIN} и на их общей границе: A=X_{MIN}-h, B=X_{MIN}+h.
6) Проверяется окончание поиска: если длина интервала [A,B] больше заданной точности, т.е. |B-A|>ε, то перейти к пункту 1.
7) Вычисляются оптимальные значения: $X_{ОПТ}$=(B-A)/2, $F_{ОПТ}=F(X_{ОПТ})$, интервал неопределенности: [A, B].
8) Конец алгоритма.

Контрольный пример.

Исследуются метода поиска оптимума целевой функции вида:

$Y = 12197.65046 - 133.30951*T + 0.36491*T^2$

в границах варьирования параметра оптимизации: $175 \le T \le 193$ при к = 5.

Расчет поиска оптимума для целевой функции интервал изменения температуры T = 175 ÷ 186.

1.Итерация.

$$h = \frac{(175-186)}{5} = 2{,}2$$

1) $X_1 = 175$ $X_2 = 175+2,2 = 177,2$ $X_3 = 175+4,4 = 179,4$ $X_4 = 175+6,6 = 181,6$ $X_5 = 175+8,8 = 183,8$ $X_6 = 175+11 = 186$
2) $F_1=12197,65046-133,30951*175+0,36491*175^2=43,855$
   $F_2=12197,65046-133,30951*177,2+0,36491*177,2^2=33,321$
   $F_3=12197,65046-133,30951*179,4+0,36491*179,4^2=26,319$
   $F_4=12197,65046-133,30951*181,6+0,36491*181,6^2=22,85$
   $F_5=12197,65046-133,30951*183,8+0,36491*183,8^2=22,913$
   $F_6=12197,65046-133,30951*186+0,36491*186^2=26,508$
3) $F_1 = \min \Rightarrow X_{min} = X_4 = 181,6$
4) $A = 181,6-2,2 = 179,4$ $B = 181,6+2,2 = 183,8$
5) $[183,8-179,4] = 4,4 > \varepsilon$

2. Итерация.

$$h = \frac{(4,4)}{5} = 0,88$$

1) $X_1 = 179,4$ $X_2 = 180,28$ $X_3 = 181,16$ $X_4 = 182,04$ $X_5 = 182,92$ $X_6 = 183,8$
2) $F_1=12197,65046-133,30951*179,4+0,36491*179,4^2=26,319$
   $F_2=12197,65046-133,30951*180,28+0,36491*180,28^2=24,508$
   $F_3=12197,65046-133,30951*181,16+0,36491*181,16^2=23,261$
   $F_4=12197,65046-133,30951*182,04+0,36491*182,04^2=22,58$
   $F_5=12197,65046-133,30951*182,92+0,36491*182,92^2=22,464$
   $F_6=12197,65046-133,30951*183,8+0,36491*183,8^2=22,913$
3) $F_5 = \min \Rightarrow X_{min} = X_5 = 182,92$
4) $A = 182,92-0,88 = 182,04$ $B = 182,92+0,88 = 183,8$
5) $[183,8-182,04] = 1,76 > \varepsilon$

3. Итерация

$$h = \frac{(1,74)}{5} = 0,352$$

1) $X_1 =182,04$ $X_2 = 182,392$ $X_3 = 182,744$ $X_4 = 183,096$ $X_5 = 183,448$ $X_6 = 183,8$
2) $F_1=12197,65046-133,30951*182,04+0,36491*182,04^2=22,58$
   $F_2=12197,65046-133,30951*182,392+0,36491*182,392^2=22,466$
   $F_3=12197,65046-133,30951*182,744+0,36491*182,744^2=22,442$
   $F_4=12197,65046-133,30951*183,096+0,36491*183,096^2=22,508$
   $F_5=12197,65046-133,30951*183,448+0,36491*183,448^2=22,665$
   $F_6=12197,65046-133,30951*183,8+0,36491*183,8^2=22,913$
3) $F_3 = \min \Rightarrow X_{min} = X_3 = 182,744$
4) $A = 182,392$ $B = 183,096$
5) $[182,392-183,096] = 0,704 > \varepsilon$

4. Итерация.

$$h = \frac{(0,704)}{5} = 0,1408$$

1) $X_1 =182,392$ $X_2 = 182,533$ $X_3 = 182,674$ $X_4 = 182,814$ $X_5 = 182,955$ $X_6 = 183,096$

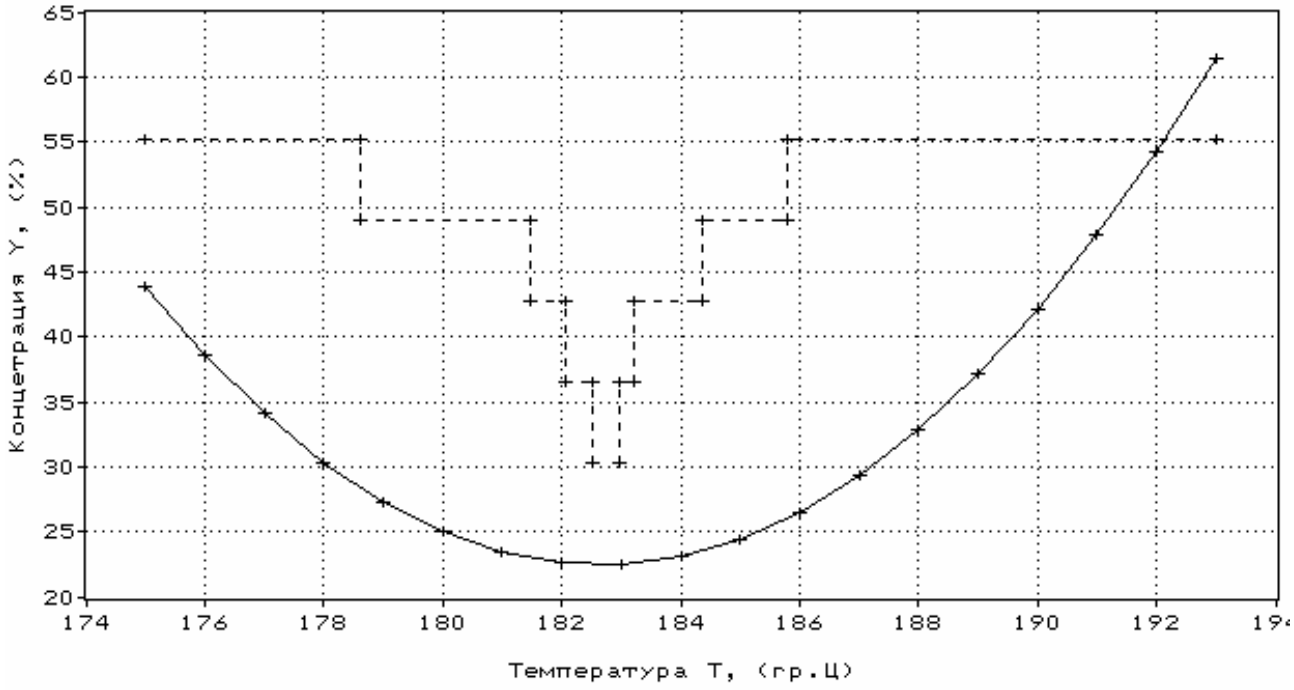
2) F_1=12197,65046-133,30951*182,392+0,36491*182,392^2=22,466
   F_2=12197,65046-133,30951*182,533+0,36491*182,533^2=22,445
   F_3=12197,65046-133,30951*182,674+0,36491*182,674^2=22,439
   F_4=12197,65046-133,30951*182,814+0,36491*182,814^2=22,448
   F_5=12197,65046-133,30951*182,955+0,36491*182,955^2=22,471
   F_6=12197,65046-133,30951*183,096+0,36491*183,096^2=22,508
3) $F_3 = \min \Rightarrow X_{min} = X_3 = 182,674$
4) A = 182,533 B = 182,814
5) [182,533-182,814] = 0,282 < ε

$$X_{опт} = \frac{182,533 + 182,814}{2} = 182,6735$$

$$F_{опт} = 12197,65046 - 133,30951*182,6735 + 0,36491*182,6735^2 = 22,439$$

Описанная выше процедура может быть проиллюстрирована графиком, показанном на рисунке 1.1

Рис.1.1.: Иллюстрация метода прямого поиска

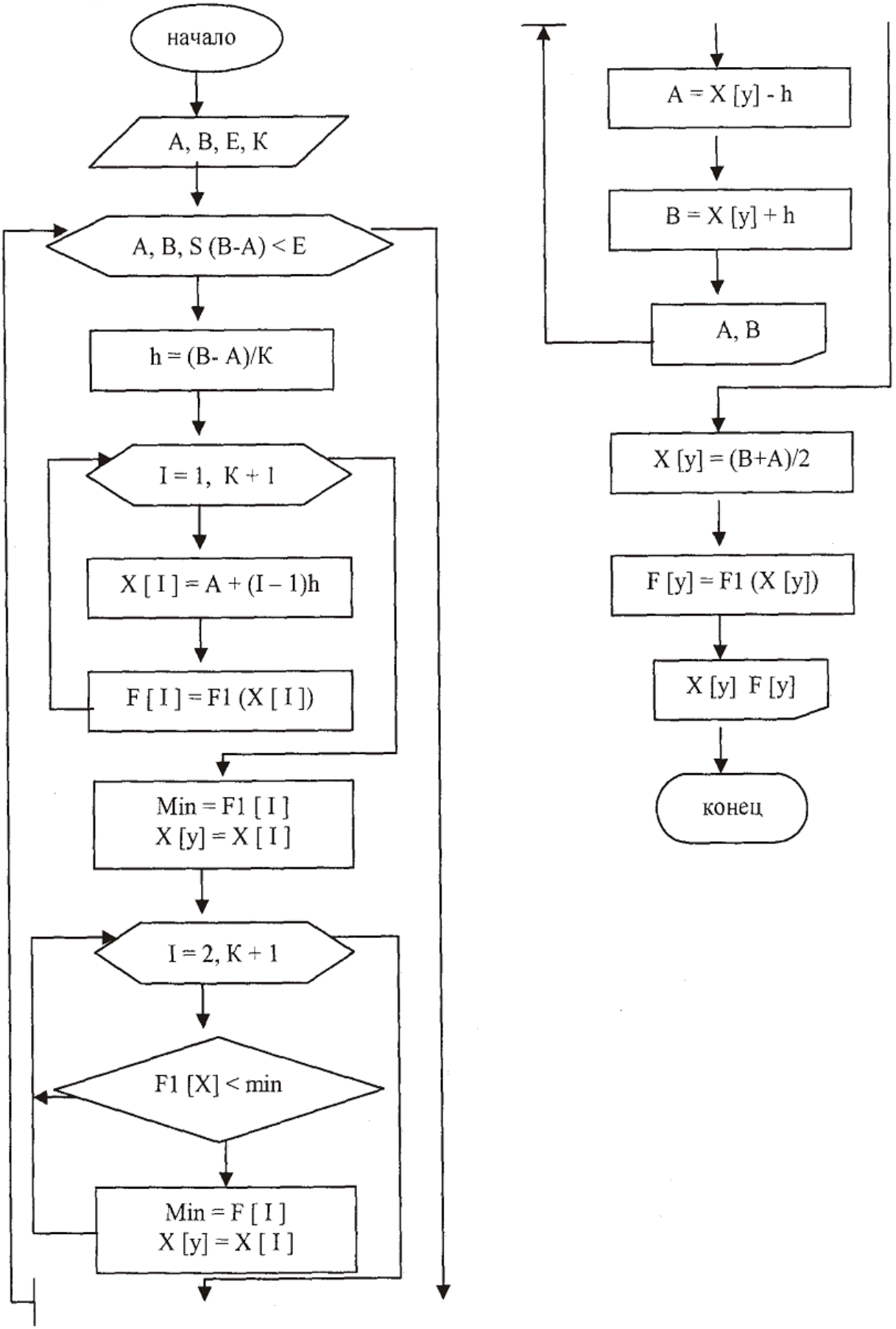


Текст программы, реализующей описанный метод

```
Program pryamogo;
Var a,b,h,e: real;I,k: integer;
f, x: array [1…6] : real;
Function f1 (t :real) : real;
Begin f1 : =12197.65046-133.30951*t+0.36491*t*t end;
Begin
Real (a, b, k, e);
h: = (b-a)/k;
```

```
For i: = 1 to k+1 do begin
x[ i ] : = a+(i-1) *h:
f[ i ] : = f1(x[ i ])
End;
For f[ i ] : = f[ i ]; x[1]; x[ i ] end;
a: = x[1] –h; b: = x[1] +h;
Writeln (‘A= ‘, a, ‘B= ‘, b);
Until abs (b-a) < e;
x[1] : = (a+b)/2;
f[1] : =f1(x[1]);
Writeln (‘X= ‘, x[1], ‘F= ‘, f[1])
End.
```

Блок схема метода прямого поиска.



3.2.Метод трехточечного поиска.

Рассматриваемый метод позволяет сузить исходный интервал неопределенности на каждой итерации точно в два раза. Этот метод называется трехточечным, поскольку его реализация основана на выборе трех пробных точек, равномерно распределенных в интервале неопределенности, середина найденного нового интервала всегда совпадает с одной из пробных точек. Этот метод подобен методу прямого поиска, при **к=3**.

Исходными данными являются:

- A, B - границы интервала неопределенности;
- ε - точность поиска.

Алгоритм поиска состоит из следующих шагов:

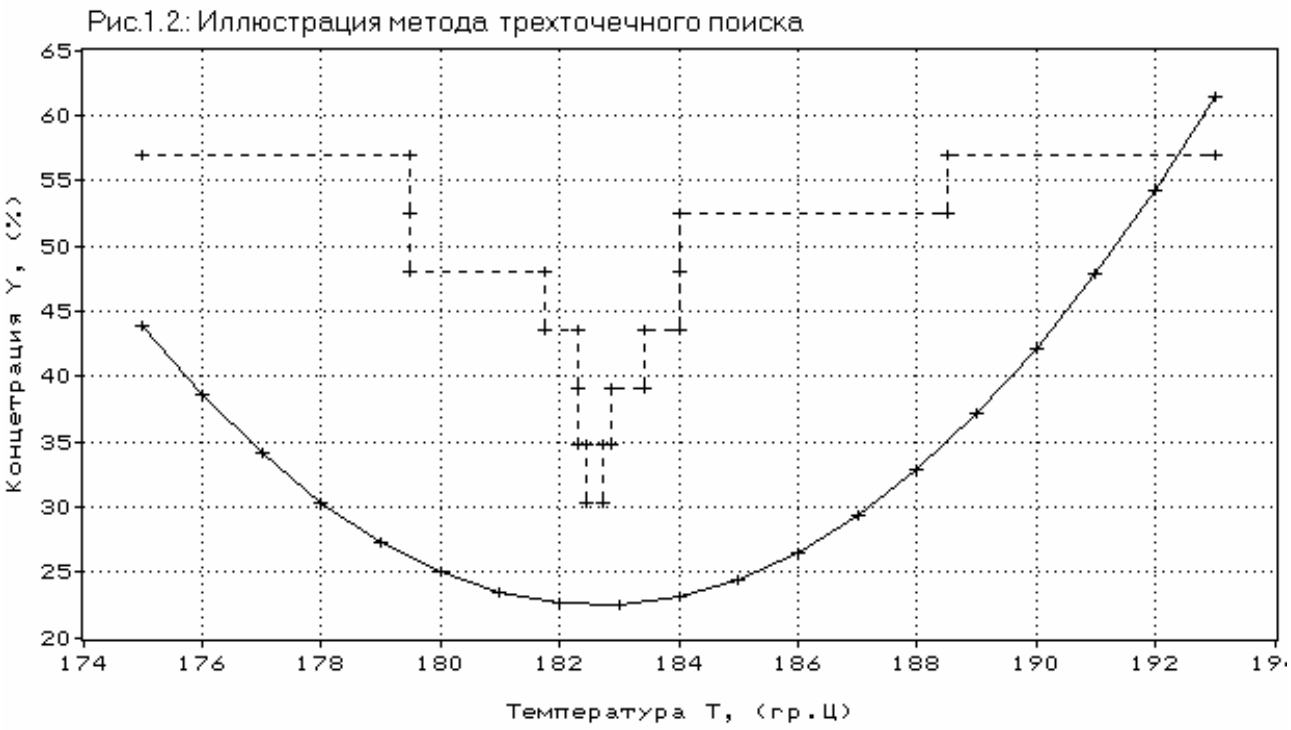
1) Находится середина интервала [A,B]: $X_0=(A+B)/2$.
2) Вычисляется и запоминается значение исследуемой функции в точке X_0: $F_0=F(X_0)$.
3) Находятся положение двух точек внутри интервала [A,B]: $X_1=A+Z$, $X_2=B-Z$, где: $Z=(B-A)/4$.
4) Вычисляются и запоминаются значения исследуемой функции в этих точках: $F_1=F(X_1)$, $F_2=F(X_2)$.
5) Сравниваются значения функции F_0, F_1, F_2:
   - если $F_0<F_1$ и $F_0<F_2$, то $A=X_1$, $X_0=X_0$, $B=X2$.
   - если $F_1<F_0$ и $F_1<F_2$, то. $A=A$, $X_0=X_1$, $B=X_0$.
   - если $F_2<F_0$ и $F_2<F_1$, то $A=X_0$, $X_0=X_2$, $B=B$.
6) Проверяется окончание поиска: если длина интервала [A, B] больше заданной точности, т.е. $|B-A| > \varepsilon$, то перейти к пункту 2.
7) Вычисляются оптимальные значения: $X_{ОПТ}=(B+A)/2$, $F_{ОПТ}=F(X_{ОПТ})$, интервал неопределенности: [A, B].
8) Конец алгоритма.

Результат решения контрольного промера приведен в следующей таблице:

n	A	T1 F(T1)	T2 F(T2)	T3 F(T3)	B	B - A
1	175.000	179.500 26.073	184.000 23.081	188.500 34.868	193.000	18.000
2	179.500	181.750 22.730	184.000 23.081	186.250 27.127	188.500	9.000
3	179.500	180.625 23.939	181.750 22.730	182.875 22.443	184.000	4.500
4	181.750	182.313 22.471	182.875 22.443	183.438 22.647	184.000	2.250
5	182.313	182.594 22.428	182.875 22.443	183.156 22.516	183.438	1.125

6	182.313	182.453 22.442	182.594 22.428	182.734 22.429	182.875	0.563
7	182.453				182.734	0.281

Оптимальное значение функции F(T):22.428
при значении аргумента T:182.594
найдено за 19 расчетов значений целевой функции.



3.3.Метод дихотомии.

Этот метод является одним из самых простых методов одномерной оптимизации, исходный интервал неопределенности [**A,B**] в этом методе уменьшается на каждой итерации почти в два раза. Реализация метода основана на выборе двух пробных точек, расположенных симметрично на расстоянии t от центра интервала неопределенности. В зависимости от значения функции в этих точках определяется новый интервал неопределенности, затем процесс поиска повторяется.

Исходными данными являются:

- A, B - границы интервала неопределенности;
- ε - точность поиска.

Алгоритм поиска состоит из следующих шагов :

1) Вычисляется шаг поиска: h=ε/2.
2) Находится середина интервала [A,B]: X=(B+A)/2.
3) Находятся положение двух точек внутри интервала [A,B]: X_1=X-h, X_2=X+h.
4) Вычисляются и запоминаются значения исследуемой функции в этих точках: $F_1=F(X_1)$, $F_2=F(X_2)$.
5) Сравниваются значения F_1 и F_2.
   - Если F1<F2, то новый интервал будет иметь границы: A=A, B=X2.

- Если F1>F2, то новый интервал будет иметь границы: A=X1, B=B.
- Если F1=F2, то новый интервал будет иметь границы: A=X1, B=X2.

6) Проверяется окончание поиска : если длина интервала [A,B] больше e+e/100, то перейти к пункту 2.

Вычисляются оптимальные значения: $X_{ОПТ}=(B-A)/2$, $F_{ОПТ}=F(X_{ОПТ})$, интервал неопределенности :[A,B].

Конец алгоритма.

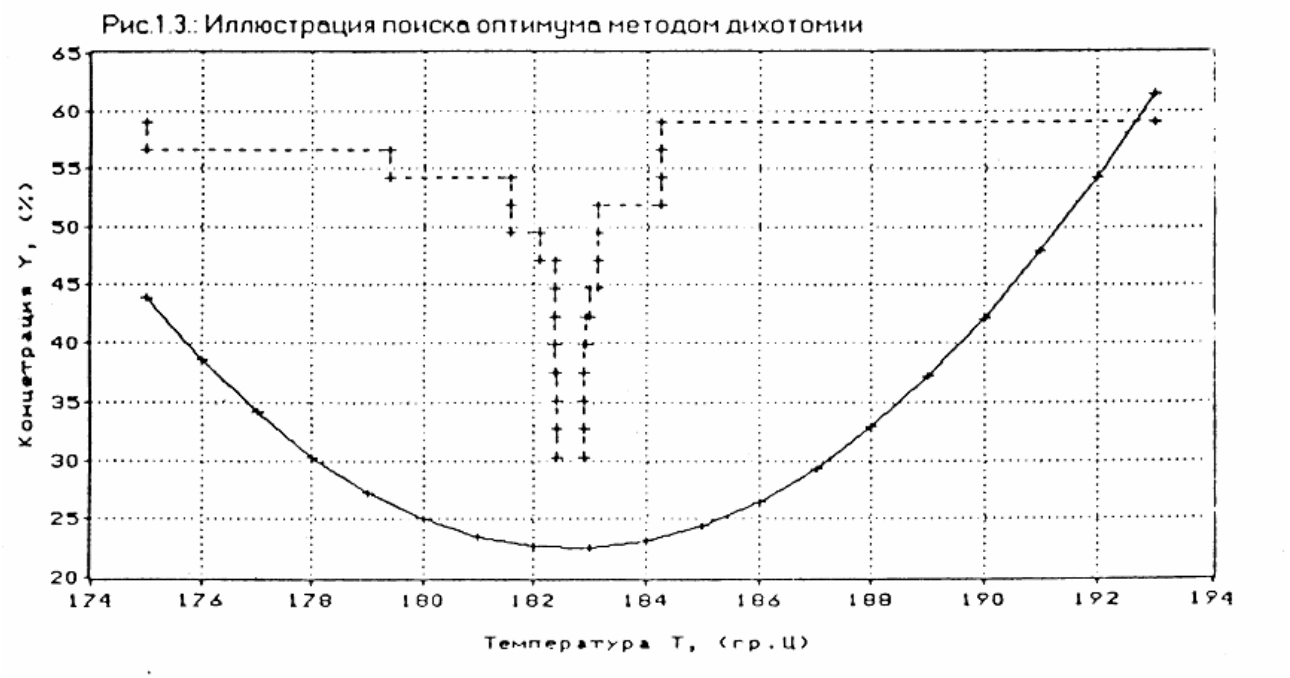
Результат решения контрольного промера приведен в следующей таблице:

n	A	T1 F(T1)	T2 F(T2)	B	B - A
1	175.000	183.750 22.859	184.250 23.348	193.000	18.000
2	175.000	179.375 26.367	179.875 25.259	184.250	9.250
3	179.375	181.563 22.867	182.063 22.557	184.250	4.875
4	181.563	182.656 22.427	183.156 22.516	184.250	2.688
5	181.563	182.109 22.538	182.609 22.428	183.156	1.594
6	182.109	182.383 22.455	182.883 22.445	183.156	1.047
7	182.383	182.520 22.434	183.020 22.474	183.156	0.773
8	182.383	182.451 22.443	182.951 22.457	183.020	0.637
9	182.383	182.417 22.448	182.917 22.451	182.951	0.568
10	182.383	182.400 22.452	182.900 22.447	182.917	0.534
11	182.400	182.408 22.450	182.908 22.449	182.917	0.517
12	182.408	182.413 22.449	182.913 22.450	182.917	0.509
13	182.408			182.913	0.504

Оптимальное значение функции F(T):22.427,

при T: 182.661

найдено за 25 расчетов значений целевой функции.



3.4.Метод Больцано.

В рассматриваемом методе на каждой итерации поиска вычисляется производная **D** в середине интервала неопределенности. Если при этом значение **D** в этой точке равно нулю, то процесс поиска заканчивается и данная точка является оптимальной, если **D>0**, то известно, что минимум находится слева, если же **D<0**, то минимум находится справа. Затем сужается исходный интервал неопределенности в два раза. Отбрасывается та часть интервала неопределенности, где не содержится точка оптимума. Используемое в этом методе значение производной **D** вычисляется аналитически или числено по разностной формуле:

D=[F(X+h)-F(X-h)]/2*h.

Исходными данными являются:

- A, B - границы интервала неопределенности;
- ε - точность поиска;
- h - шаг, используемый для поиска производной.

Алгоритм поиска состоит из следующих шагов:

1) Находится середина интервала [A,B], X=(B+A)/2.
2) Вычисляется производная исследуемой функции в точке X: D=(F(X+h)-F(X-h))/2*h.
3) Проверяется знак производной D.
   - если D=0, то перейти к пункту 5.
   - если D>0, то новый интервал [A,B] будет иметь границы: A=A, B=X.
   - если D<0, то новый интервал [A,B] будет иметь границы: A=X, B=B.
4) Проверяется окончание поиска, если длина интервала [A,B] больше заданной точности, т.е. |B-A|>ε , то перейти к пункту 1.
5) Вычисляются оптимальные значения: $X_{ОПТ}$=(B-A)/2, $F_{ОПТ}$=F($X_{ОПТ}$), интервал неопределенности :[A,B].

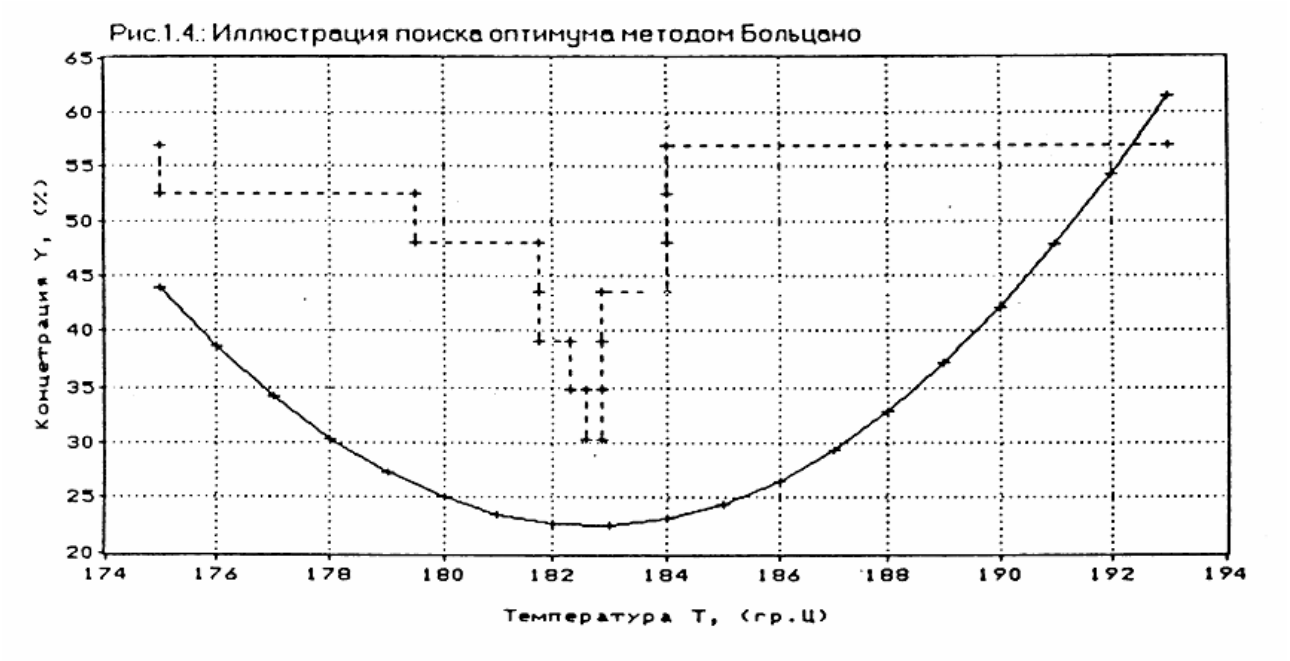
6) Конец алгоритма.

Результат решения контрольного промера приведен в следующей таблице:

n	A	T1 F*(T1)	B	B - A
1	175.000	184.000 0.977	193.000	18.000
2	175.000	179.500 -2.307	184.000	9.000
3	179.500	181.750 -0.665	184.000	4.500
4	181.750	182.875 0.156	184.000	2.250
5	181.750	182.313 -0.254	182.875	1.125
6	182.313	182.594 -0.049	182.875	0.563
7	182.594		182.875	0.281

Оптимальное значение функции F(T):22.429,

при T: 82.734 найдено за 12 расчетов целевой функции или 6-ее производной.



3.5.Метод Фибоначчи.

Процедура поиска минимума в этом методе основана на использовании последовательности чисел Фибоначчи, которая определяется следующим образом*:*

$W_K=W_{K-1}+W_{K-2}$, $W_1=W_2=1$

Последовательность чисел Фибоначчи имеет следующий вид:

1,2,3,5,8,13,21,34,55,89,144,233...

Эта, очень быстро возрастающая, последовательность используется для определения величины шага в процессе поиска оптимума. Количество расчетов функции необходимых для локализации экстремума функции **F(X)** в методе Фибоначчи определяется до начала процесса поиска оптимума.

Исходными данными являются:

- A, B - границы интервала неопределенности;
- ε - точность поиска;

Алгоритм поиска состоит из следующих шагов :

Вычисляется вспомогательное число $Z=(B-A)/\varepsilon$.

1) Рассчитываются числа Фибоначчи $W_K=W_{K-1}+W_{K-2}$, до тех пор, пока не выполнится неравенство:

$W_{K-1}<Z<W_K$, где К=1,2,3,...

2) Определяется минимальный шаг поиска: $h=(B-A)/W_K$.
3) Вычисляется и запоминается значение функции в начале исходного интервала [A,B]: $F_1=F(X_1)$, где $X_1=A$, J=1, J-номер исследуемой точки.
4) Находится положение следующей точки поиска внутри интервала (A,B): $X_2=X_1+h*W_{K-1}$.
5) Вычисляется и запоминается значение функции в новой точке: $F_2=F(X_2)$.
6) Подсчитывается номер исследуемой точки: J=J+1.
7) Сравнивается значение функции F_1 и F_2.
   - если $F_2<=F_1$, то $X_1=X_2$, $F_1=F_2$, $X_2=X_1 + h*W_{(K-J)}$
   - если $F_2>F_1$, то $X_1=X_2$, $F_1=F_2$, $X_2=X_1 - h*W_{(K-J)}$
8) Проверяется окончание поиска; если номер исследуемой точки J меньше k, то перейти к пункту 6.
9) Вычисление оптимального значения: $X_{ОПТ}=X_2$, $F_{ОПТ}=F(X_2)$
10) Конец алгоритма.

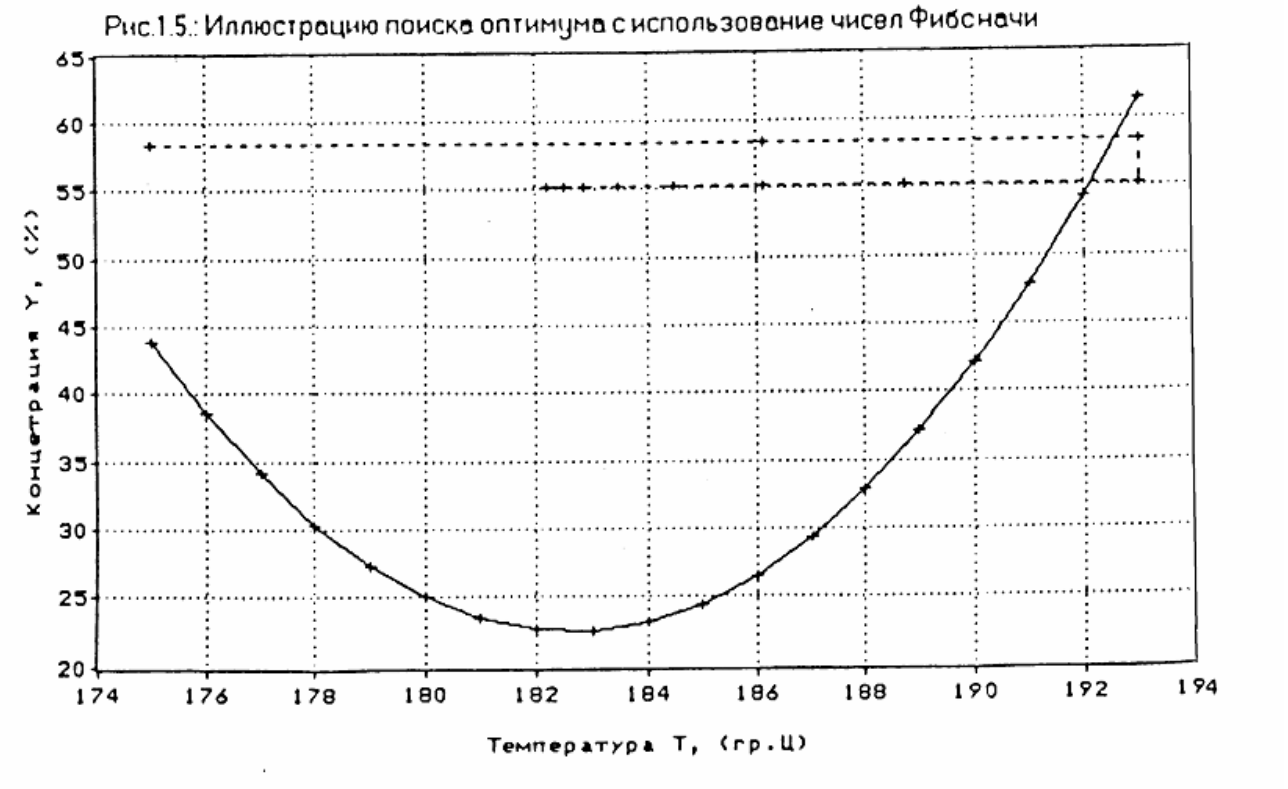
Результат решения контрольного промера приведен в следующей таблице:

n	T	F(T)	h	W
1	175.000	43.844	0.327	55
2	186.127	26.811	0.327	34
3	193.000	61.434	0.327	21
4	188.745	35.936	-0.327	13
5	186.127	26.811	-0.327	8
6	184.491	23.649	-0.327	5
7	183.509	22.689	-0.327	3
8	182.855	22.440	-0.327	2
9	182.527	22.433	-0.327	1
10	182.200	22.504	-0.327	1

Оптимальное значение функции F(T):22.504

при значении аргумента T:182.200

найдено за 10 расчетов значений целевой функции.



3.6.Метод золотого сечения.

Если какой-либо интервал поделить на две неравные части так, чтобы отношение длины большей части к длине всего интервала была равна отношению длины меньшей части к длине большей части, то эта пропорция называется золотым сечением. Численно это отношение будет равно $Z=(\sqrt{5}-1)/2=0.6180339887...$ В этом методе внутри исходного интервала неопределенности [A,B] выбирают две точки отстоящие от концов исходного интервала на расстоянии (1-Z) от его длины. В этих точках определяется значение функции F(X) и исходный интервал неопределенности сужается в Z раз.

Исходными данными являются:

- A, B - границы интервала неопределенности;
- ε - точность поиска;

Алгоритм поиска состоит из следующих шагов:

1) Вычисляются и запоминаются значения исследуемой функции на конце исходного интервала [A,B]:
   $F_1=F(X_1)$, где: $X_1=A$
   $F_4=F(X_4)$, где: $X_4=B$
2) Находится положение двух точек внутри исходного интервала [A,B]:
   $X_2=X_1+(3-\sqrt{5})/2*(X_4-X_1)$
   $X_3=X_4-(3-\sqrt{5})/2*(X_4-X_1)$
3) Вычисляется и запоминается значение функции в этих точках: $F_2=F(X_2)$, $F_3=F(X_3)$
4) Сравниваются значения функции F_2 и F_3:

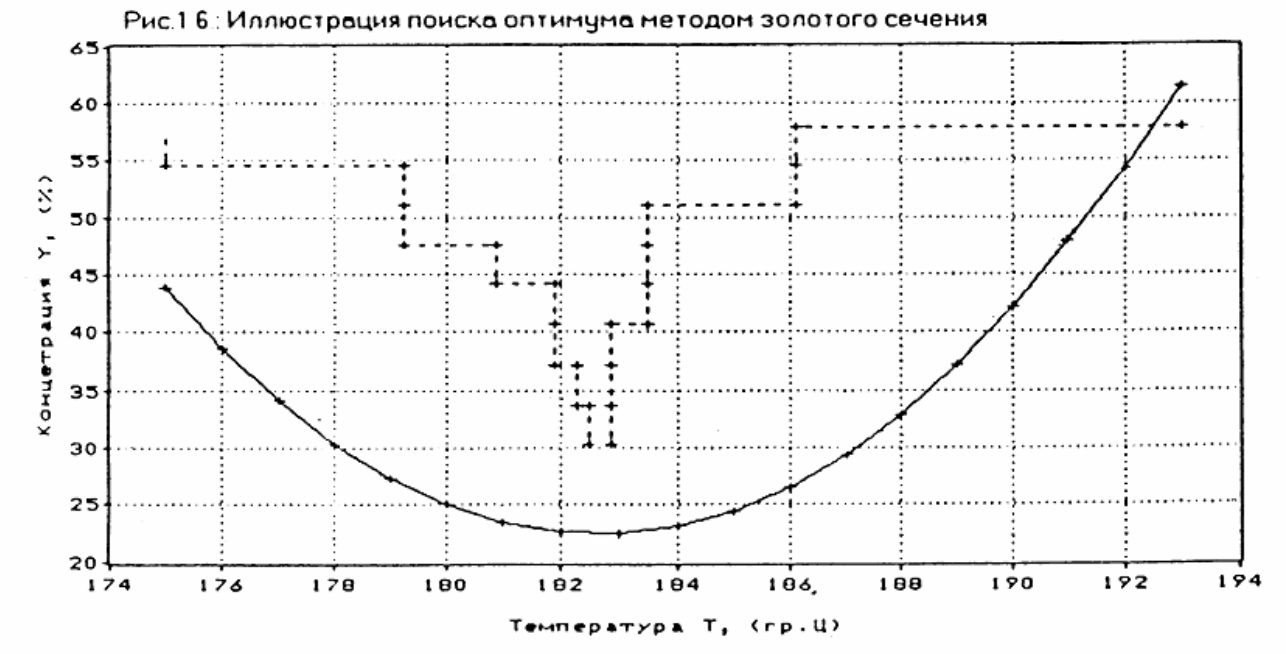
- если $F_2<F_3$,то $X_1=X_1, X_4=X_3, X_3=X_2, X_2=X_1+(3-\sqrt{5})/2*(X_4-X_1)$, $F_1=F_1$, $F_4=F_3$, $F_3=F_2$. Вычисляется и запоминается значение функции: $F_2=F(X_2)$.
- если $F_2>=F_3$,то $X_1=X_2, X_4=X_4, X_2=X_3, X3=X4-(3-\sqrt{5})/2*(X4-X1)$, $F_1=F_2$, $F_2=F_3$, $F_4=F_4$. Вычисляется и запоминается значение функции: $F_2=F(X_2)$.

5) Проверяется окончание поиска, если длина интервала $[X_1, X_4]$ больше заданной точности , т.е. $|X_4-X_1|>e$, то перейти к пункту 4.
6) Вычисляются оптимальные значения:
   $X_{ОПТ}=(X_4+X_1)/2$, $F_{ОПТ}=F(X_{ОПТ})$,
   интервал неопределенности $[X_1, X_4]$.
7) Конец алгоритма.

Результат решения контрольного промера приведен в следующей таблице:

n	A	T1 F(T1)	T2 F(T2)	B	B - A
1	175.000	181.875 22.652	186.125 26.804	193.000	18.000
2	175.000	179.249 26.674	181.875 22.652	186.125	11.125
3	179.249	181.875 22.652	183.498 22.683	186.125	6.875
4	179.249	180.872 23.594	181.875 22.652	183.498	4.249
5	180.872	181.875 22.652	182.495 22.437	183.498	2.626
6	181.875	182.495 22.437	182.878 22.444	183.498	1.623
7	181.875	182.259 22.486	182.495 22.437	182.878	1.003
8	182.259	182.495 22.437	182.642 22.427	182.878	0.620
9	182.495			182.878	0.383

Оптимальное значение функции F(T):22.427
при значении аргумента T:182.687
найдено за 17 расчетов значений целевой функции.



3.7.Метод поиска с обратным половинным шагом.

Начиная от **X=A**, для последовательных значений независимой переменной **X**, увеличивающейся на каждом шаге на величину **h**, вычисляется значение функции **F(X)**, до тех пор, пока функция **F(X)** продолжает убывать. Если определенное значение **F(X)** начинает возрастать, то из этой точки процедура поиска повторяется с шагом (**-h/2**) до тех пор, пока величина шага **h** не будет меньше заданной точности ε.

Исходными данными являются:

- A, B - границы интервала неопределенности;
- ε - точность поиска;
- h - шаг поиска.

Алгоритм поиска состоит из следующих шагов :

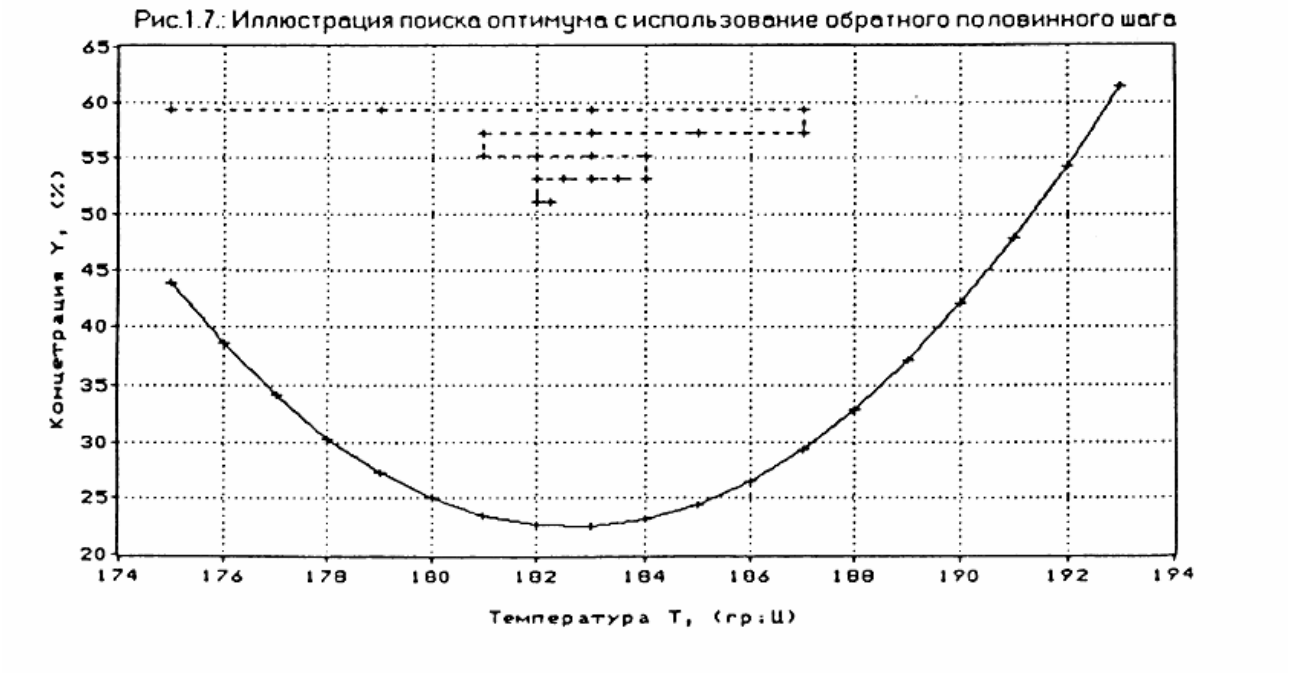
1) Вычисляются и запоминаются значения исследуемой функции в начале исходного интервала [A,B]: $F_1=F(X_1)$, где $X_1=A$.
2) Находится новое положение исследуемой точки внутри интервала [A,B]: $X_2=X_1+h$.
3) Вычисляются и запоминаются значения исследуемой функции в новой точке: $F_2=F(X_2)$
4) Сравниваются значения функции F_2 и F_1.
   - если $F_2<F_1$, то $F_1=F_2$ и перейти к пункту 2.
5) Вычисляется новое положение шага поиска: h = -h/2.
6) Проверяется окончание поиска:
   - если величина шага $|h|>\varepsilon$, то перейти к пункту 2.
7) Вычисляются оптимальные значения, $X_{ОПТ}=X_2$, $F_{ОПТ}=F(X_2)$, интервал неопределенности $[X_2-h, X_2+h]$.

8) Конец алгоритма.

Результат решения контрольного промера приведен в следующей таблице:

n	T	F(T)	h
1	175.000	43.844	4.000
2	179.000	27.318	4.000
3	183.000	22.469	4.000
4	187.000	29.297	4.000
5	185.000	24.423	-2.000
6	183.000	22.469	-2.000
7	181.000	23.433	-2.000
8	182.000	22.586	1.000
9	183.000	22.469	1.000
10	184.000	23.081	1.000
11	183.500	22.684	-0.500
12	183.000	22.469	-0.500
13	182.500	22.436	-0.500
14	182.000	22.586	-0.500
15	182.250	22.488	0.250

Оптимальное значение функции F(T):22.488
при значении аргумента T:182.250
найдено за 15 расчетов значений целевой функции.



3.8.Метод Пауэла.

В этом методе используется прием, когда на ограниченном интервале неизвестная функция аппроксимируется квадратичным полиномом, а затем по построенному

аппроксимирующему выражению оцениваются координаты точки истинного минимума функции.

Исходными данными являются:

- A, B - границы интервала неопределенности;
- ε - точность поиска;
- h - шаг поиска.

Алгоритм поиска состоит из следующих шагов :

1) Вычисляются, и запоминается значение функции в начале исходного интервала [A,B]: $F_1=F(X_1)$, где $X_1=A$.
2) Находится вторая точка внутри интервала [A,B]: $X_2=X_1+h$.
3) Вычисляется и запоминается значение функции: $F_2=F(X_2)$.
4) Находится третья точка X внутри интервала [A,B]:
   - если $F_1>F_2$, то $X_3=X_1+2*h$
   - если $F_1>=F_2$, то $X_3=X_1-h$
5) Вычисляется и запоминается значение функции в этой точке: $F_3=F(X_3)$.
6) Находится точка, в которой функция имеет наименьшее значение: $F_{MIN}=MIN(F_1,F_2,F_3)$, X_{MIN}-точка, которая соответствует F_{MIN}.
7) Находится стационарная точка X* аппроксимирующего квадратного полинома по следующей формуле:

   $X^*=(X_2+X_1)/2-(A_1/2*A_2)$,

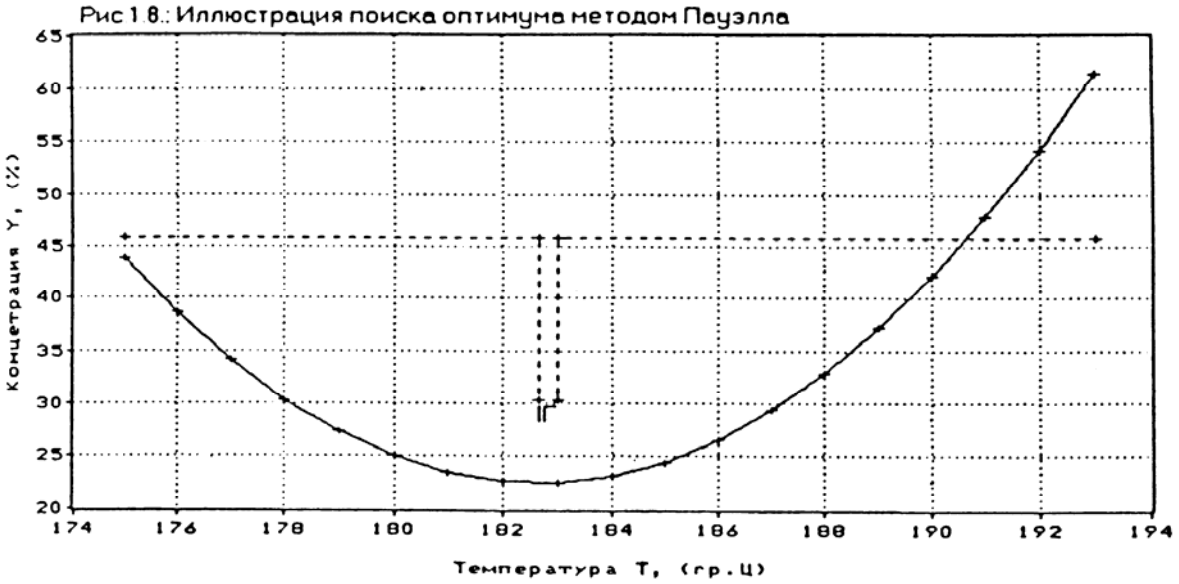
   где: $A_1=(F_2-F_1)/(X_2-X_1)$,

   $A_2=1/(X_3-X_2)*((F_3-F_1)/(X_3-X_1)-(F_2-F_1)/(X_2-X_1))$
8) Проверяется окончание поиска:
   - если величина интервала $|X_{MIN}-X^*|<=\varepsilon$, то перейти к пункту
9) Выбирается “наилучшая” точка X_{MIN} или X* (точка, значение функции в которой наименьшее) и две точки по обе стороны от нее. Эти точки обозначаются в естественном порядке (X_1,X_2,X_3) и переходят к пункту 6.
10) Вычисляются оптимальные значения , $X_{ОПТ}=X^*$, $F_{ОПТ}=F(X^*)$.
11) Конец алгоритма.

Результат решения контрольного промера приведен в следующей таблице:

n	T1 F(T1)	T2 F(T2)	T3 F(T3)	T* F(T*)	|T* - Tmin|
1	175.000 43.844	179.000 27.318	183.000 22.469	182.661 22.427	0.339

Оптимальное значение функции F(T):22.427
при значении аргумента T:182.661
найдено за 4 расчета значений целевой функции.



3.9.Метод Девиса – Свена - Кемпи.

Метод подобен предыдущему, но квадратичная аппроксимация функции **F(X)** осуществляется в окрестности оптимума, который достигается за счет пробных шагов из начальной точки **X=A**, до тех пор, пока функция **F(X)** не перестанет убывать.

Исходными данными являются:

- A, B - границы интервала неопределенности;
- ε - точность поиска;
- h - шаг поиска.

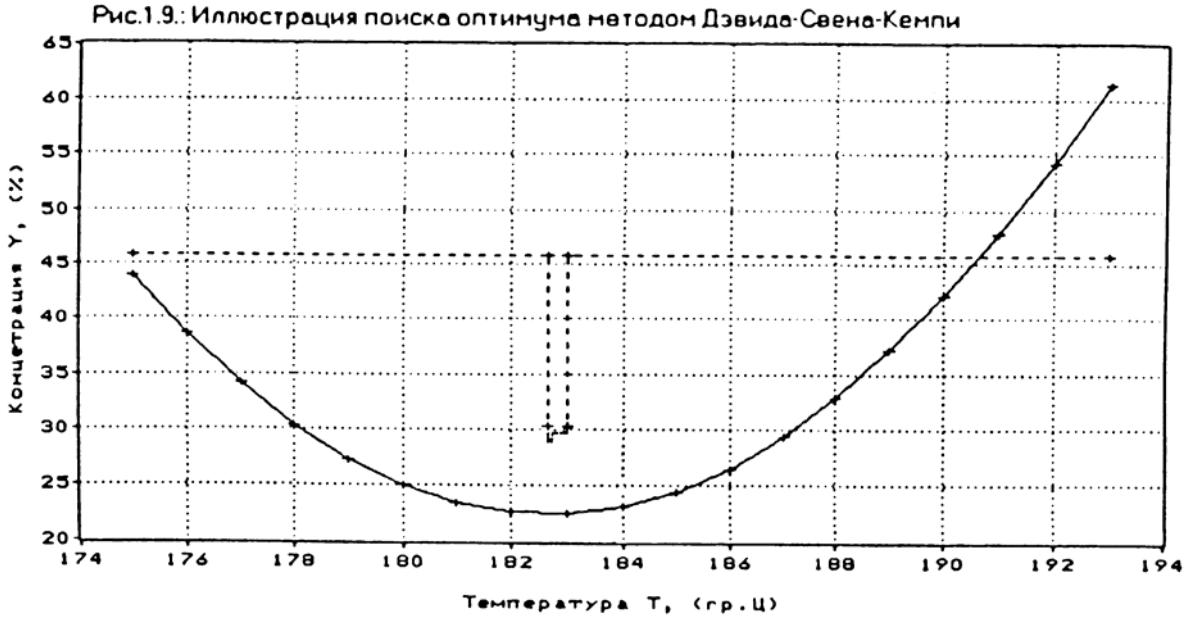
Алгоритм поиска состоит из следующих шагов :

1) Вычисляются, и запоминается значение функции в начале исходного интервала [A,B]: $F_1=F(X_1)$, где $X_1=A$.
2) Находится вторая точка внутри интервала [A,B]: $X_2=X_1+H$.
3) Вычисляется и запоминается значение функции: $F_2=F(X_2)$.
4) Находится третья точка X внутри интервала [A,B]:
   - если $F_1>F_2$, то $X_3=X_1+2*h$
   - если $F_1<=F_2$, то $X_3=X_1-h$, перейти к пункту 8
5) Вычисляется и запоминается значение функции в этой точке: $F_3=F(X_3)$.
6) Находится следующая точка X внутри интервала [A,B]: $X_4=X_3+3*h$, $X_1=X_2$, $X_2=X_3$, $X_3=X_4$.
7) Вычисляется и запоминается значение функции: $F_4=F(X_4)$.
   - если $F_4<F_3$, то перейти к пункту 6.
   - если $F_4>F_3$, то перейти к пункту 8.
8) Дальше решаем по методу Пауэлла.

Результат решения контрольного промера приведен в следующей таблице:

n	T1 F(T1)	T2 F(T2)	T3 F(T3)	T* F(T*)	|T* - Tmin|
	175.000 43.844				
1	179.000 27.318	183.000 22.469	187.000 29.297	182.661 22.427	0.339

Оптимальное значение функции F(T):22.427
при значении аргумента T:182.661
найдено за 5 расчетов значений целевой функции.



3.10.Метод поиска с использованием кубической аппроксимации.

В этом методе минимизируемая функция **F(X)** аппроксимируется полиномом третьего порядка. Логическая схема метода аналогична схеме метода с использованием квадратичной аппроксимации, но в данном методе построение аппроксимирующего полинома производится на основе меньшего числа точек, поскольку в каждой точке можно вычислять значения, как функции, так и ее производной. Исходными данными являются:

- A, B - границы интервала неопределенности;
- ε - точность поиска;
- h - шаг поиска.

Алгоритм поиска состоит из следующих шагов:

1) Вычисляется и запоминается значение функции в начале исследуемого интервала [A,B], $D_1=F'(X_1)$, где $X_1=A$, K=1, (К-номер исследуемой точки).
2) Проверяется знак производной D_1:

- если $D_1<0$, то находится точка внутри интервала [A,B]: $X_2=X_1+2^{(K-1)*h}$, К=К+1.
- если $D_1>0$, то находится точка внутри интервала [A,B]: $X_2=X_1-2**(K-1)*H$, К=К+1.
- если $D_1=0$, то $X^*=X_1$ и прейти к пункту 11.

3) Вычисляется и запоминается значение производной исследуемой функции в новой точке: $D_2=F'(X_2)$.
4) Проверяется значение производных D_1 и D_2:
   - если $D_1*D_2>0$, то $X_1=X_2$ и перейти к пункту 2.
5) Вычисляются значения функции в двух точках:
   - $F_1=F(X_1)$, $F_2=F(X_2)$.
6) Находится стационарная точка X* аппроксимирующего кубичного полинома:
   - $X^*=X_2$, если $M<0$;
   - $X^*=X_2-M*(X_2-X_1)$, если $0=M=1$;
   - $X^*=X_1$, если $M>1$;

   где:

   $M = (D_2+W-Z)/(D_2-D_1+2*W)$

   $Z = (3*(F_1-F_2)/(X_2-X_1))+D_1+D_2$

   $W = -(Z^2-D_1*D_2)^{0.5}$, если $X_1>=X_2$

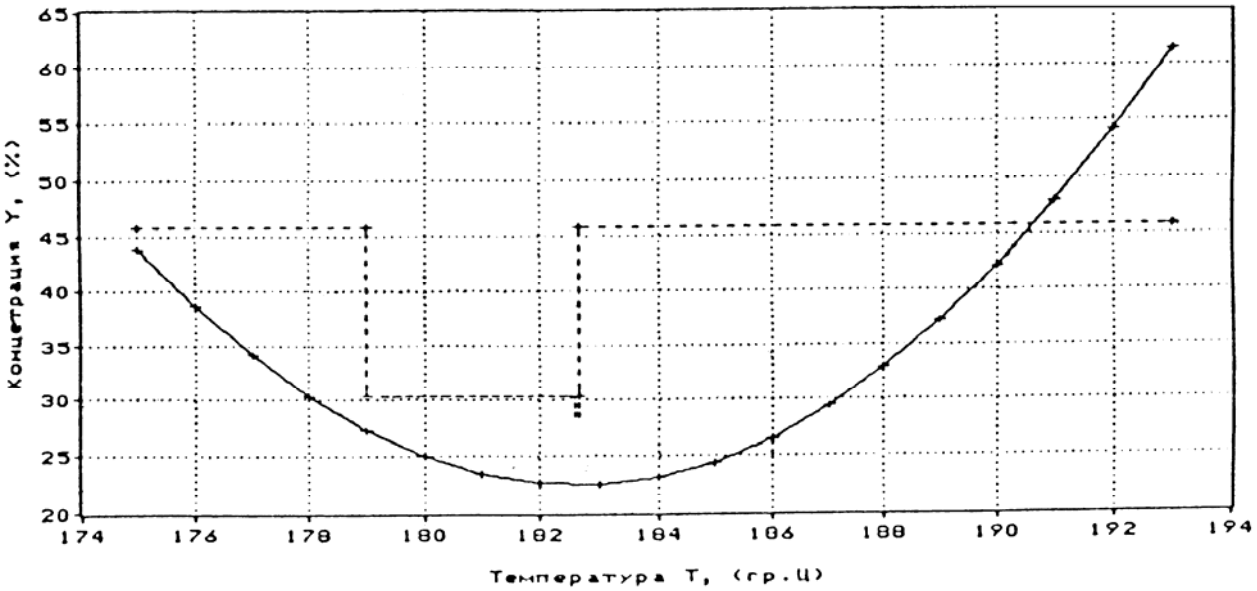
   $W = (Z^2-D_1*D_2)^{0.5}$, если $X_1<X_2$
7) Если $F(X^*)<F(X_1)$, перейти к шагу 8, в противном случае вычисляется X* по формуле $X^*=X^*+0.5*(X^*-X_1)$ до тех пор, пока не выполняется неравенство: $F(X^*)<=F(X_1)$
8) Проверка на окончание поиска:
   - если величина интервала $|X_1-X^*| <= \varepsilon$, то перейти к 11.
9) Вычисляется производная исследуемой функции в новой точке: $D^*=D(X^*)$.
10) Находятся новые точки для аппроксимации:
   - если $(D^*)*(D_1)<0$, то $X_2=X_1$, $X_1=X^*$.
   - если $(D^*)*(D_1)>0$, то $X_1=X^*$, $X_2=X_2$. и перейти к пункту 6.
11) Вычисляются оптимальные значения: $X_{ОПТ}=X^*$, $F_{ОПТ}=F(X^*)$.
12) Конец алгоритма.

Результат решения контрольного промера приведен в следующей таблице:

n	T1 F(T1)	D1	T2 F(T2)	D2	T*	D(T*)	T*-Tmin
1	175.000 43.844	-5.591	179.000 27.318	-2.672			
2	179.000 27.318	-2.672	187.000 29.297	3.167	182.661 22.427	0.000	3.66

Оптимальное значение функции F(T):22.427
при значении аргумента T:182.661
найдено за 15 расчетов значений целевой функции.

Рис.1.10.: Поиск оптимума с использованием кубичной аппроксимации



4.ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №2: «ГРАДИЕНТНЫЕ МЕТОДЫ МНОГОМЕРНОЙ БЕЗУСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ»

В основу градиентных методов поиска оптимума положены вычисления и анализ производных целевой функции **F(X),** дающих возможность быстрого попадания в окрестность экстремума.

4.1.Метод релаксаций.

Алгоритм метода заключается в отыскании осевого направления, вдоль которого функция цели уменьшается наиболее сильно. Для этого в начальной точке поиска определяются производные оптимизируемой функции по всем независимым переменным. Осевому направлению с наибыстрейшим убыванием целевой функции, очевидно, соответствует наибольшая по модулю производная. Если знак производной отрицательный, то целевая функция убывает в направлении оси, если положительный, то в обратном направлении. По направлению убывания целевой функции производятся шаги до тех пор, пока не будет получено минимальное значение по выбранному осевому направлению. Тогда вновь определяются производные по всем переменным за исключением той, по которой осуществляется спуск, и снова находится осевое направление наибыстрейшего убывания функции в цели, по которому производятся дальнейшие шаги, и т.д.

Критерием окончания поиска оптимума является достижение такой точки, при движении из которой по любому осевому направлению дальнейшего убывания функции цели не происходит. На практике в качестве признака оптимума часто применяется условие:

$$\sum_{j=1}^{n}\left(\frac{dF}{dx_j}\right)^2 < \varepsilon \qquad (1)$$

которое при ε->0 превращается в точное условие равенства нулю производных в точке оптимума.

Алгоритм спуска для выбранного осевого направления может быть записан в виде следующей формулы:

$X_j^{(k+1)}=X_j^{(k)}-h^{(k)}\mathrm{sgn}(dF(X^{(p)}/dX_j)$ (2)

Графическое изображение движения от исходного состояния к оптимуму показано на **рис.2**:

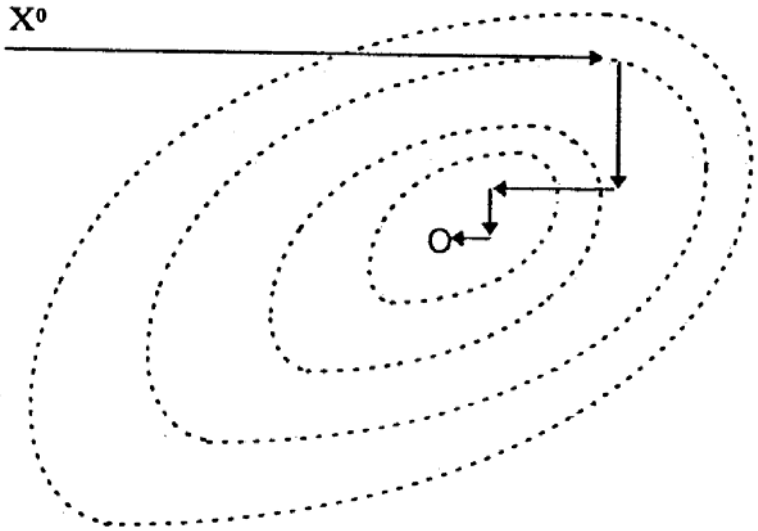


Рис.2.: Характер движения к оптимуму в методе релаксации.

Очевидно, что скорость движения к минимуму зависит от того, насколько удачно выбран шаг $\mathbf{h^{(k)}}$ изменения независимых переменных. При слишком малой величине шага число шагов, которое необходимо сделать, чтобы достичь оптимума, будет большим, и следовательно, потребуется много раз вычислять значения целевой функции на пути движения к оптимуму.

Если, напротив, величина шага с самого начала спуска выбрана слишком большой, то вблизи оптимума может возникнуть “рыскание”, так как при большой величине шага мала вероятность попадания в окрестность оптимума, в которой выполняется условие окончания поиска (1). Поэтому представляют интерес специальные приемы изменения величины шага в процессе поиска.

Простейший алгоритм изменения шага состоит в следующем. В начале спуска по одному из осевых направлений задается некоторый шаг $\mathbf{h^{(0)}}$ равный, например, 0.1, что соответствует изменению значения физической переменной $\mathbf{Y_j}$ на 10% от принятого диапазона $\mathbf{d_j}$. С этим шагом производится спуск по выбранному осевому направлению до тех пор, пока для двух последующих вычислений значений целевой функции выполняется условие:

$$F(X^{(k+1)})<F(X^{(k)}) \quad (3)$$

При нарушении условия на каком-либо L-м шаге направление спуска по оси изменяется на обратное и спуск продолжается из последней рассчитанной точки с уменьшенной вдвое величенной шага.

Формульная запись этого алгоритма имеет вид:

$$h^{(K+1)} = \begin{Bmatrix} h^{(K)}, & F(X^{(K)}) \le F(X^{(K-1)}) \\ \dfrac{-h^{(K)}}{2}, & F(X^{(K)}) > F(X^{(K-1)}) \end{Bmatrix} \quad (4)$$

В результате использования такой стратегии шаг спуска по осевому направлению будет уменьшаться в районе минимума целевой функции по этому направлению и поиск минимума можно прекратить, когда величина шага $\mathbf{h^{(k)}}$ станет меньше заданной точности определения минимума ε_{xi} в осевом направлении. Затем отыскивается новое осевое направление, в котором функция изменяется наиболее сильно. Начальный шаг в новом направлении уже можно выбрать не как заданную долю диапазона изменения независимой переменной, а как заданную долю расстояния, пройденного вдоль предыдущего осевого направления. Это позволяет автоматически уменьшать начальный шаг по каждому следующему осевому направлению при приближении к оптимуму целевой функции, в районе которого спуск по каждой оси происходит на небольшое расстояние.

Существенной особенностью метода релаксации является зависимость времени поиска от ориентации системы координат. На **рис.3** показаны линии постоянного уровня одной и той же целевой функции в системах координат, отличающихся между собой поворотом осей. Если в случае, изображенном на **рис.3.а** для достижения минимума целевой функции необходимо только два цикла движения вдоль осевых направлений, то для случая, приведенного на **рис.3.б.** число таких циклов возрастает весьма существенно.

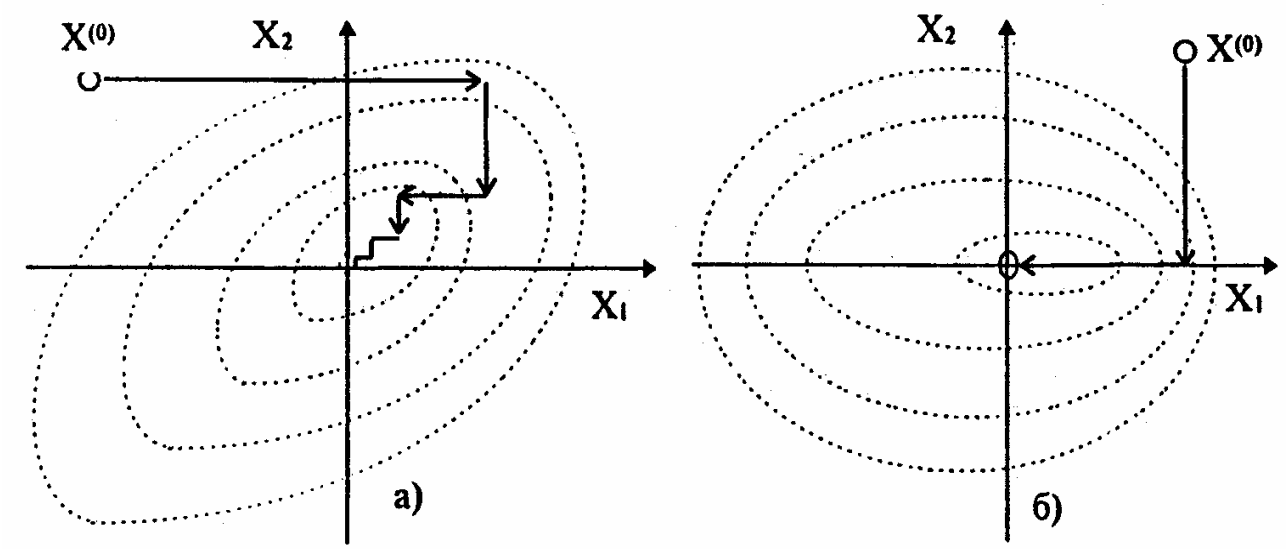


Рис.3: Зависимость времени поиска оптимума от ориентации системы координат.

Алгоритм поиска оптимума целевой функции методом релаксации при выполнении лабораторной работы следующий:

1) Задаются координаты начальной точки: X_1^0, X_2^0, k =0
2) Определяются частные производные в начальной точке:
3) $dX_1^K = F'_{X1}(X_1^K, X_2^K)$, $dX_2^K = F'_{X2}(X_1^K, X_2^K)$
4) Определяется осевое направление (по абсолютному значению производной) вдоль которого будут осуществляться шаги:
   - если $|dX_1^K| > |dX_2^K|$, то движение вдоль X_1.

- если $|dX_2^K|>|dX_1^K|$, то движение вдоль X_2.

5) Вдоль выбранного осевого направления определяется (по методу (2),(3))оптимальная точка **методом обратного половинного шага**. Первоначальную величину шага принять равной $h_i = 1$, а точность поиска вдоль осевого направления принять равной $w_i = 0.1$.
6) Найденная точка фиксируется и, аналогичным образом, находится оптимальная точка вдоль другого осевого направления.

Проверяется условие окончания поиска по (1). Величину ε принять равной 0.005. Если это условие выполняется для каждой частной производной в найденной точке, то поиск прекращается, если нет, то вычисления продолжаются с пункта 2.

Контрольный пример.

Исследуется оптимум целевой функции: Y = F(T,Q) аналитическое выражение, которой имеет вид:

Y=1296.6279-17.82162***T**+0.07213***T**^{2}-13.36467***Q**+0.277715***Q**^{2} T = 110..130, Q = 18..30.,

причем график функции ориентирован относительно оси координат поворотом на 70°. Критерием окончания поиска считать условие: $(Y'_T)^2 < 0.005$, $(Y'_Q)^2 < 0.005$, При поиске вдоль осевого направления принять точность поиска: $w_i = 0.1$.

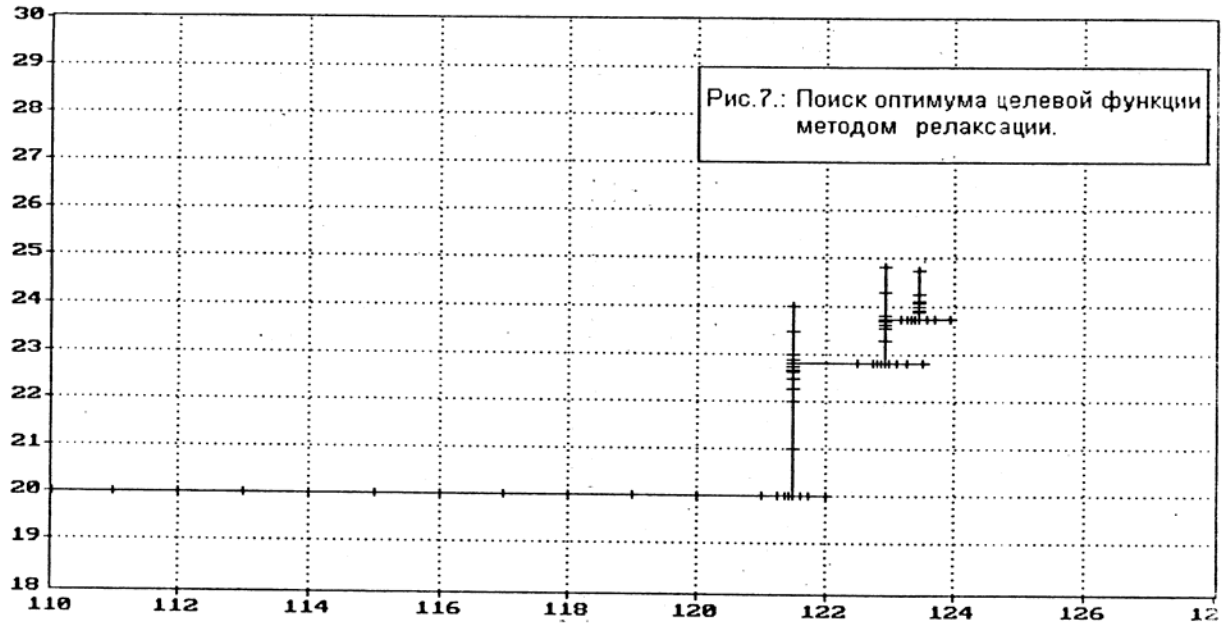
Оптимум ищется согласно алгоритму (4).

Результаты оптимизации сведены в таблицу:

T	Q	Y	**Y'$_T$**	**Y'$_Q$**
110.000	20.00	62.307	-4.475	1.471
111.000	20.00	58.028	-4.084	1.269
112.000	20.00	54.139	-3.693	1.068
113.000	20.00	50.642	-3.302	0.867
114.000	20.000	47.536	-2.910	0.665
115.000	20.000	44.821	-2.519	0.464
116.000	20.000	42.498	-2.128	0.262
117.000	20.000	40.565	-1.737	0.061
118.000	20.000	39.024	-1.346	-0.140
119.000	20.000	37.873	-0.955	-0.342
120.000	20.000	37.114	-0.564	-0.543
121.000	20.000	36.746	-0.172	-0.745
122.000	20.000	36.769	0.219	-0.946
121.500	20.000	36.709	0.023	-0.845
121.000	20.000	36.746	-0.172	-0.745
121.250	20.000	36.715	-0.075	-0.795
121.500	20.000	36.709	0.023	-0.845
121.750	20.000	36.727	0.121	-0.896
121.625	20.000	36.715	0.072	-0.870
121.500	20.000	36.709	0.023	-0.845

121.375	20.000	36.709	-0.026	-0.820
121.438	20.000	36.708	-0.001	-0.833
121.500	20.000	36.709	0.023	-0.845
121.500	21.000	36.018	-0.178	-0.537
121.500	22.000	35.635	-0.380	-0.228
121.500	23.000	35.561	-0.581	0.080
121.500	24.000	35.796	-0.782	0.389
121.500	23.500	35.640	-0.682	0.235
121.500	23.000	35.561	-0.581	0.080
121.500	22.500	35.560	-0.480	-0.074
121.500	22.000	35.635	-0.380	-0.228
121.500	22.250	35.588	-0.430	-0.151
121.500	22.500	35.560	-0.480	-0.074
121.500	22.750	35.551	-0.531	0.003
121.500	23.000	35.561	-0.581	0.080
121.500	22.875	35.554	-0.556	0.042
121.500	22.750	35.551	-0.531	0.003
121.500	22.625	35.553	-0.505	-0.035
121.500	22.688	35.551	-0.518	-0.016
121.500	22.750	35.551	-0.531	0.003
121.500	22.813	35.552	-0.543	0.022
122.500	22.813	35.204	-0.152	-0.179
123.500	22.813	35.248	0.239	-0.380
123.000	22.813	35.177	0.044	-0.280
122.500	22.813	35.204	-0.152	-
122.750	22.813	35.178	-0.054	-0.229
123.000	22.813	35.177	0.044	-0.280
123.250	22.813	35.200	0.141	-0.330
123.125	22.813	35.186	0.092	-0.305
123.000	22.813	35.177	0.044	-0.280
122.875	22.813	35.175	-0.005	-0.254
122.750	22.813	35.178	-0.054	-0.229
122.813	22.813	35.176	-0.030	-0.242
122.875	22.813	35.175	-0.005	-0.254
122.938	22.813	35.175	0.019	-0.267
122.938	23.813	35.062	-0.182	0.041
122.938	24.813	35.258	-0.384	0.350
122.938	24.313	35.122	-0.283	0.196
122.938	23.813	35.062	-0.182	0.041
122.938	23.313	35.080	-0.082	-0.113
122.938	23.563	35.062	-0.132	-0.036

122.938	23.813	35.062	-0.182	0.041
122.938	23.688	35.059	-0.157	0.003
122.938	23.563	35.062	-0.132	-0.036
122.938	23.625	35.060	-0.145	-0.016
122.938	23.688	35.059	-0.157	0.003
122.938	23.750	35.060	-0.170	0.022
123.938	23.750	35.086	0.222	-0.179
123.438	23.750	35.024	0.026	-0.078
122.938	23.750	35.060	-0.170	0.022
123.188	23.750	35.030	-0.072	-0.028
123.438	23.750	35.024	0.026	-0.078
123.688	23.750	35.043	0.124	-0.129
123.563	23.750	35.031	0.075	-0.103
123.438	23.750	35.024	0.026	-0.078
123.313	23.750	35.024	-0.023	-0.053
123.188	23.750	35.030	-0.072	-0.028
123.250	23.750	35.026	-0.048	-0.041
123.313	23.750	35.024	-0.023	-0.053
123.375	23.750	35.023	0.001	-0.066
123.438	23.750	35.024	0.026	-0.078
123.438	24.750	35.100	-0.176	0.230
123.438	24.250	35.024	-0.075	0.076
123.438	23.750	35.024	0.026	-0.078
123.438	24.000	35.014	-0.025	-0.001
123.438	24.250	35.024	-0.075	0.076
123.438	24.125	35.017	-0.050	0.037
123.438	24.000	35.014	-0.025	-0.001
123.438	23.875	35.017	0.001	-0.040
123.438	23.938	35.015	-0.012	-0.021
123.438	24.000	35.014	-0.025	-0.001
123.438	24.063	35.015	-0.037	0.018



4.2.Метод градиента.

Как уже говорит само название метода, в нем используется градиент целевой функции. В отличии от рассмотренного выше метода релаксации в методе градиента в методе градиента шаги совершаются в направлении наибыстрейшего уменьшения целевой функции, что, естественно, ускоряет процесс поиска оптимума.

Поиск оптимума при использовании метода градиента также производится в два этапа. На первом находятся значения частных производных по всем независимым переменным, которые определяют направление градиента в рассматриваемой точке. На втором этапе осуществляется шаг в направлении, обратном направлению градиента, т.е. в направлении наибыстрейшего убывания целевой функции.

При выполнении шага одновременно изменяются значения всех независимых переменных. Каждая из них получает приращение, пропорциональное соответствующей составляющей градиента по данной оси.

По существу в методе градиента применяется та же информация о целевой функции, что и в методе релаксации при выборе осевого направления, однако спуск производится оптимально.

Алгоритм градиентного метода может быть записан следующим образом:

$$X_J^{(K+1)} = X_J^{(K)} - h^{(K)} * \frac{\frac{\partial F(X^{(K)})}{\partial X_J}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial F(X^{(K)})}{\partial X_i}\right)^2}} \quad (5)$$

В алгоритме (5) для градиентного поиска применяется нормализованный вектор градиента, указывающий лишь направление наискорейшего изменения целевой функции, но не указывает скорости ее изменения по этому направлению. При использовании нормализованного вектора-градиента шаг спуска определяется величи-

ной $\mathbf{h^{(k)}}$, стратегию изменения которой можно строить независимо от абсолютной величины градиента.

Иногда применяется алгоритм градиентного поиска в виде:

$$X_J^{(K+1)} = X_J^{(K)} - h^{(0)} * \frac{\partial F(X^{(K)})}{\partial X_J} \quad (6)$$

В этом случае величина шага $\Delta \mathbf{X_j^{(k)}}$ при постоянном значении параметра $\mathbf{h^{(0)}}$ изменяется автоматически в соответствии с изменением абсолютной величины градиента. Длина шага определяется выражением:

$$\Delta X_J^{(K)} = -h^{(0)} * \frac{\partial F(X^{(K)})}{\partial X_J} \quad (7)$$

Алгоритм (6) обладает тем достоинством, что при приближении к оптимуму длина шага $\Delta \mathbf{X_j^{(k)}}$ автоматически уменьшается.

Вообще задача выбора стратегии изменения величины шага в градиентном поиске более важна, чем в методе релаксации. Это объясняется тем, что после каждого шага здесь находятся производные целевой функции, расчет которых связан с вычислением n значений целевой функции. Если, с одной стороны, размер шага слишком мал, то движение к оптимуму будет долгим из-за необходимости расчета целевой функции в очень многих точках. С другой стороны, если, например, в алгоритме (6) шаг $\mathbf{h^{(0)}}$ выбран слишком большим, в районе оптимума может возникнуть “рыскание”, которое либо не затухает, либо затухает слишком медленно.

Характер поиска оптимума при малой и большой величинах шага показан на **рис.4**.

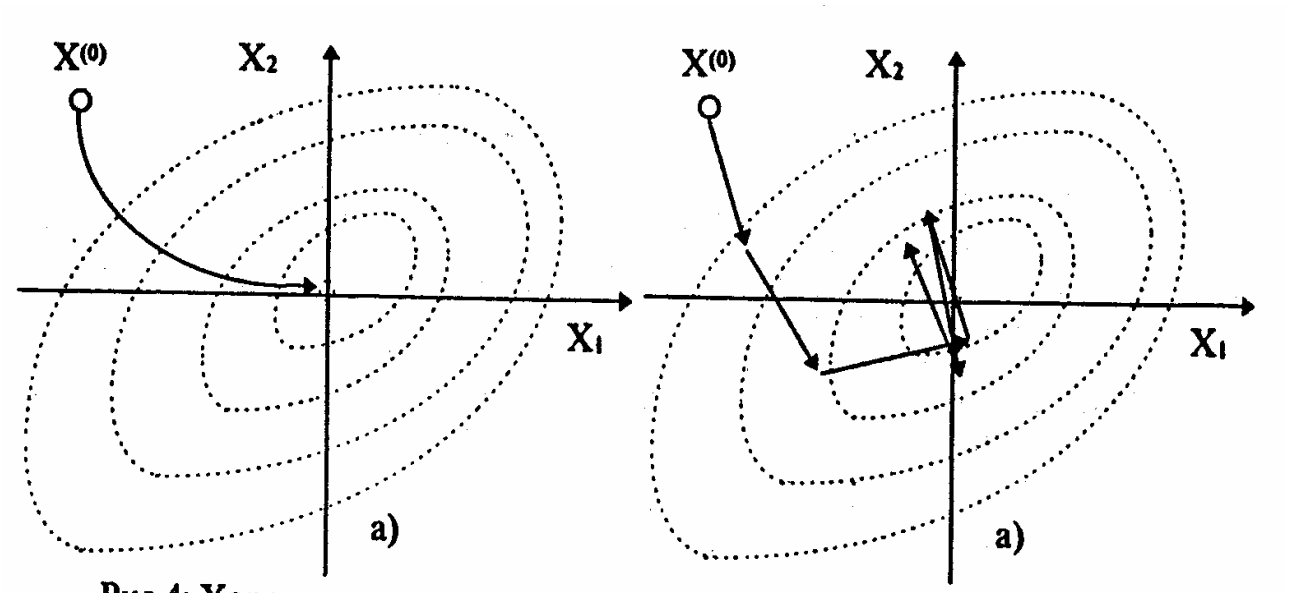


Рис.4: Характер движения к оптимуму с малой (а) и большой (б) величиной шага.

Момент окончания поиска определяется по выполнению некоторых предварительно заданных условий. Один из вариантов окончания поиска заключается в проверке на каждом шаге соотношения (1).

Недостатком метода является то, что при его использовании можно обнаружить только локальный оптимум. Для того чтобы найти у функции другие локальные оптимумы, необходимо произвести поиск из других начальных точек.

Алгоритм поиска оптимума целевой функции методом градиента при выполнении лабораторной работы следующий:

1) Задаются координаты начальной точки: X_1^0, X_2^0.
2) Определяются частные производные в начальной точке:

   $dX_1^0 = F'_{X1}(X_1^0, X_2^0)$, $dX_2^0 = F'_{X2}(X_1^0, X_2^0)$
3) Определяется направление градиента, и находятся координаты следующей точки X_1^1, X_2^1 по (6-7). Величину шага принять равной h = 1.
4) Определяются частные производные в следующей точке:

   $dX_1^1 = F'_{X1}(X_1^1, X_2^1)$, $dX_2^2 = F'_{X2}(X_1^1, X_2^1)$
5) Проверяется условие окончания поиска по (1). Величину ε принять равной 0.005. Если это условие выполняется для каждой частной производной в найденной точке, то поиск прекращается, если нет, то вычисления продолжаются с пункта 3.

Контрольный пример.

Исследуется оптимум целевой функции: Y = F(T,Q)

аналитическое выражение, которой имеет вид:

$$\mathbf{Y}=1296.6279-17.82162*\mathbf{T}+0.07213*\mathbf{T}^2-13.36467*\mathbf{Q}+0.277715*\mathbf{Q}^2$$

T = 110..130, Q = 18..30.,

причем график функции ориентирован относительно оси координат поворотом на 70°. Критерием окончания поиска считать условие: $(Y'_T)^2 < 0.005$, $(Y'_Q)^2 < 0.005$.

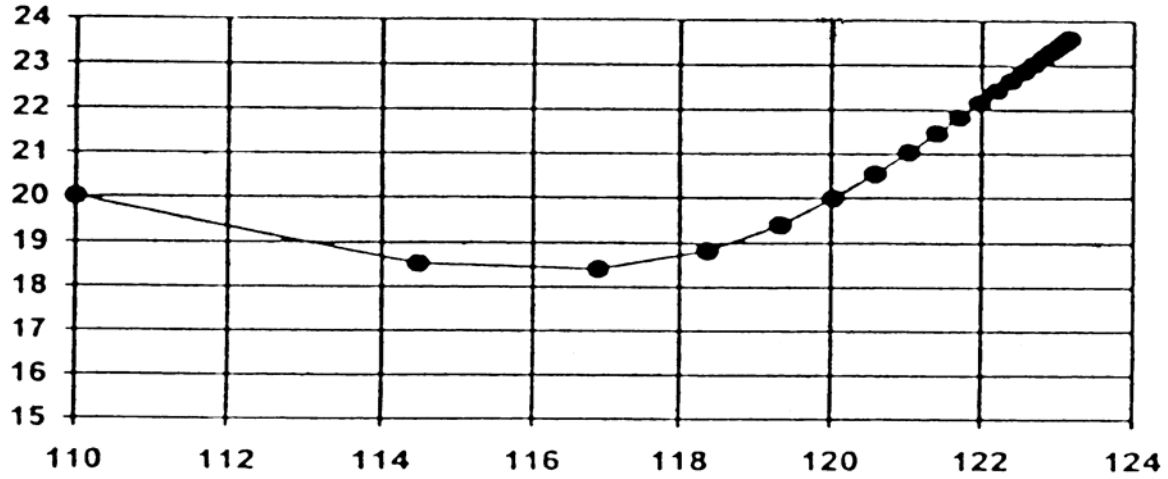
Оптимум ищется согласно алгоритму (6), с шагом $h^{(0)}=1$.

Результаты оптимизации сведены в таблицу:

T	Q	Y	$\mathbf{Y'_T}$	$\mathbf{Y'_Q}$
110.000	20.000	62.307	-4.475	1.471
114.475	18.529	45.694	-2.428	0.116
116.903	18.413	40.996	-1.455	-0.409
118.358	18.822	39.031	-0.968	-0.576
119.327	19.398	37.884	-0.706	-0.593
120.032	19.991	37.101	-0.549	-0.552
120.581	20.543	36.539	-0.445	-0.492
121.027	21.036	36.130	-0.370	-0.430
121.397	21.466	35.831	-0.312	-0.372
121.709	21.838	35.612	-0.265	-0.320
121.974	22.158	35.452	-0.226	-0.275
122.200	22.433	35.335	-0.193	-0.235
122.393	22.668	35.249	-0.165	-0.202
122.558	22.870	35.186	-0.141	-0.173

122.699	23.043	35.139	-0.121	-0.148
122.819	23.190	35.106	-0.103	-0.126
122.922	23.317	35.081	-0.088	-0.108
123.011	23.425	35.063	-0.076	-0.093
123.086	23.518	35.049	-0.065	-0.079
123.151	23.597	35.040	-0.055	-0.068

Рис.8: Поиск оптимума методом градиента



4.3.Метод наискорейшего спуска.

Сочетание основных идей метода релаксации и градиента дает метод наискорейшего спуска, который заключается в следующем.

После того как в начальной точке найден градиент оптимизируемой функции и тем самым определено направление ее наибыстрейшего убывания в указанной точке, в данном направлении делается шаг спуска. Если значение функции в результате этого шага уменьшилось, то производится очередной шаг в том же направлении, и так до тех пор, пока в этом направлении не будет найден минимум, после чего вычисляется градиент и определяется новое направление наибыстрейшего убывания целевой функции.

В сопоставлении с методом градиента метод наискорейшего спуска оказывается более выгодным из-за сокращения объема вычислений. По существу метод наискорейшего спуска по вычислительным затратам эквивалентен методу релаксации, однако выгодно отличается от него тем, что по крайней мере первые шаги после определения производятся в оптимальном направлении. Очевидно, что чем менее резко изменяется направление градиента целевой функции, тем выгоднее использовать метод наискорейшего спуска по сравнению с методом градиента, т.е. вдали от оптимума. Вблизи оптимума направление градиента меняется резко, поэтому указанный метод автоматически переходит в метод градиента, так как минимум по каждому направлению находится за небольшое число шагов.

На **рис.5**. показаны возможная траектория движения к оптимуму при применении метода наискорейшего спуска и траектория движения к оптимуму при использовании метода градиента.

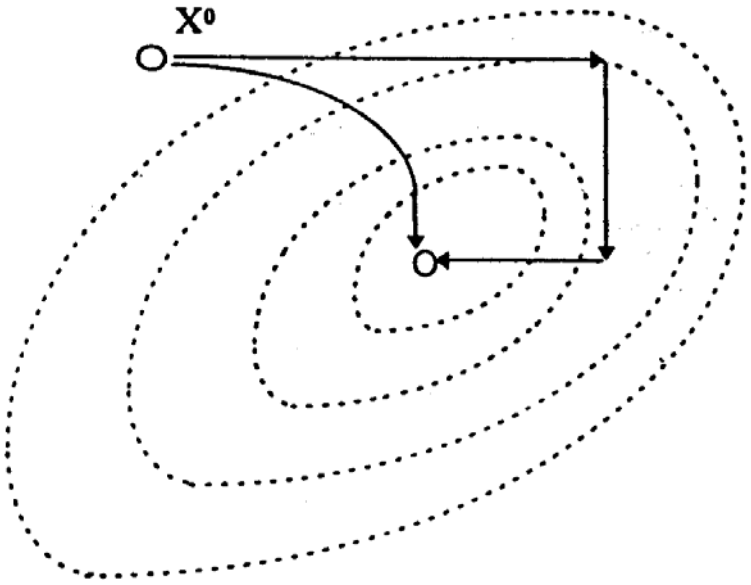


Рис.5.: Характер движения к оптимуму в методе наискорейшего спуска и методе градиента.

Важной особенностью метода наискорейшего спуска является то, что при его применении каждое новое направление движения к оптимуму ортогонально предшествующему. Это объясняется тем, что движение в одном направлении производится до тех пор, пока направление движения не окажется касательным к какой-либо линии постоянного уровня. Тем самым, метод наискорейшего спуска имеет сходство с методом релаксации, для которого новое направление также ортогонально предшествующему, однако в отличии от метода релаксации скорость сходимости к оптимуму не зависит от ориентации системы координат.

В качестве критерия окончания поиска могут использоваться те же условия, что и в рассмотренных выше методах. Кроме того, можно также применять условие окончания поиска по форме соотношения:

$$\sqrt{\sum_{j=1}^{n}\left(X_J^{(A)} - X_J^{(B)}\right)^2} < \varepsilon \quad (8),$$

где $X_J^{(A)}, X_J^{(B)}$-координаты начальной и конечной точек последнего отрезка спуска (рис.6.)

Относительно выбора стратегии изменения шага остаются справедливыми все рекомендации, приведенные для метода релаксации. При выполнении лабораторной работы оптимум вдоль выбранного направления градиента следует искать методом Пауэла (см. методы одномерной оптимизации).

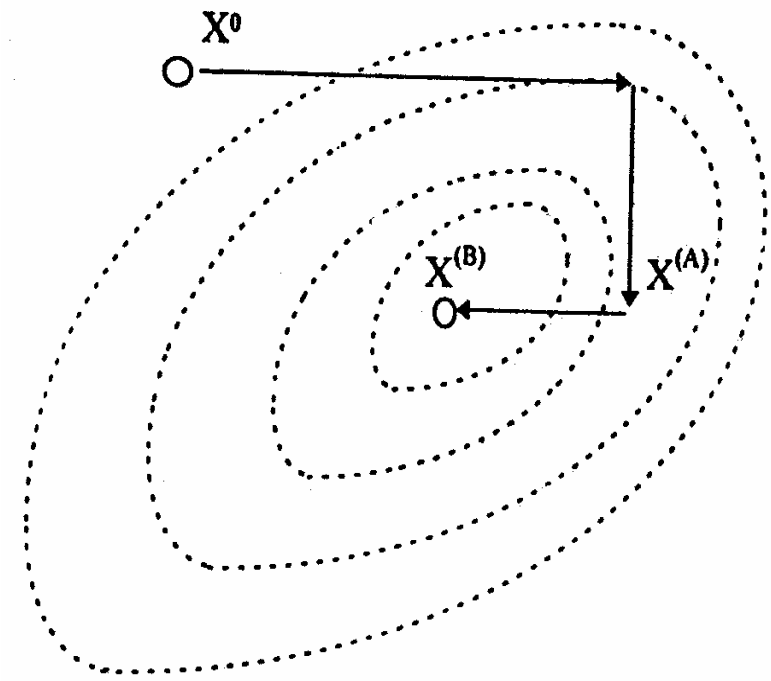


Рис.6.: К определению окончания поиска в методе наискорейшего спуска.

Алгоритм поиска оптимума целевой функции методом наискорейшего спуска при выполнении лабораторной работы следующий:

1) Задаются координаты начальной точки: X_1^0, X_2^0, k =0
2) Определяются частные производные в точке k:
   $dX_1^K = F'_{X1}(X_1^K, X_2^K)$, $dX_2^K = F'_{X2}(X_1^K, X_2^K)$
3) Определяется направление градиента, вдоль которого будут осуществляться шаги.
4) Вдоль выбранного направления градиента определяется оптимальная точка **методом Пауэла**. Первоначальную величину шага принять равной $h_i = 0.1$, а точность поиска вдоль текущего направления градиента принять равной $\varepsilon_i = 0.1$.
5) Проверяется условие окончания поиска по (1). Величину ε принять равной 0.005. Если это условие выполняется для каждой частной производной в найденной точке, то поиск прекращается, если нет, то вычисления продолжаются с пункта 2.

Контрольный пример.

Исследуется оптимум целевой функции: Y = F(T,Q)

аналитическое выражение, которой имеет вид:

$$\mathbf{Y}=1296.6279-17.82162*\mathbf{T}+0.07213*\mathbf{T}^2-13.36467*\mathbf{Q}+0.277715*\mathbf{Q}^2$$

T = 110..130, Q = 18..30.,

причем график функции ориентирован относительно оси координат поворотом на 70°. Критерием окончания поиска считать условие: $(Y'_T)^2 < 0.005$, $(Y'_Q)^2 < 0.005$, При поиске вдоль направления градиента принять точность поиска: $\varepsilon_i = 0.1$.

Оптимум ищется согласно алгоритму (6), с шагом $h^{(0)}=0.5$.

Оптимум вдоль заданного на (к)-м шаге направлении градиента ищется методом Пауэла (см. методы одномерной оптимизации).

Результаты оптимизации сведены в таблицу:

T	Q	Y	$\mathbf{Y'_T}$	$\mathbf{Y'_Q}$
110.000	20.000	62.307	-4.475	1.471
112.238	19.265	52.607	-3.452	0.793
114.475	18.529	45.694	-2.428	0.116
118.904	17.074	40.231	-0.403	-1.225
118.904	17.074	40.231	-0.403	-1.225
118.904	17.074	40.231	-0.403	-1.225
119.106	17.686	39.440	-0.447	-1.077
119.307	18.299	38.731	-0.492	-0.928
120.947	23.290	36.011	-0.856	0.281
120.947	23.290	36.011	-0.856	0.281
120.947	23.290	36.011	-0.856	0.281
121.375	23.150	35.656	-0.660	0.152
121.803	23.009	35.403	-0.464	0.022
122.650	22.731	35.204	-0.077	-0.234
122.650	22.731	35.204	-0.077	-0.234
122.650	22.731	35.204	-0.077	-0.234
122.688	22.848	35.175	-0.086	-0.206
122.727	22.965	35.149	-0.094	-0.178
123.041	23.920	35.050	-0.164	0.054
123.041	23.920	35.050	-0.164	0.054
123.041	23.920	35.050	-0.164	0.054
123.122	23.893	35.037	-0.126	0.029
123.204	23.866	35.027	-0.089	0.004
123.366	23.813	35.020	-0.015	-0.045
123.366	23.813	35.020	-0.015	-0.045

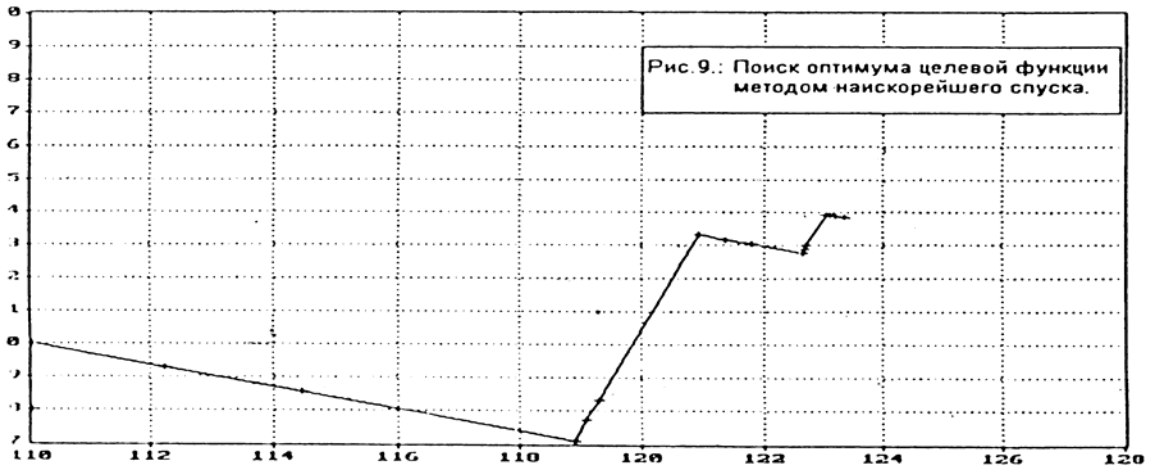


Рис.9.: Поиск оптимума целевой функции методом наискорейшего спуска.

5.ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №3: «БЕЗГРАДИЕНТНЫЕ МЕТОДЫ МНОГОМЕРНОЙ БЕЗУСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ. МЕТОД СКАНИРОВАНИЯ»

Метод сканирования заключается в последовательном просмотре значений критерия оптимальности в ряде точек, принадлежащих области изменения независимых переменных, и нахождения среди этих точек такой, в которой критерий оптимальности имеет минимальное (максимальной) значение. Точность метода, естественно, определяется тем, насколько “густо” располагаются выбранные точки в допустимой области изменения независимых переменных.

Основным достоинством метода сканирования является то, что при его использовании с достаточно “густым” расположением исследуемых точек всегда гарантируется отыскание глобального оптимума, так как анализируется вся область изменения независимых переменных. Другое достоинство - независимость поиска от вида оптимизируемой функции.

К недостаткам метода относится, в первую очередь, необходимость вычисления значений целевой функции для большого числа точек. Это должно гарантировать, что оптимум не будет пропущен при применении данного метода поиска.

Общий недостаток градиентных методов оптимизации состоит в том, что все они “застревают” в ближайшем локальном оптимуме, в область “притяжения” которого попадает выбранная начальная точка спуска. В отличии от этих методов метод сканирования никак не связан с наличием локальных оптимумов целевой функции. Поэтому его можно использовать иногда для предварительного грубого установления границ областей “притяжения” указанных оптимумов, после чего могут уже применяться градиентные методы спуска для измерения точной “глубины” каждого локального оптимума.

Наиболее простой алгоритм поиска оптимума методом сканирования, называемый еще иногда поиском на сетке переменных, заключается в том, что по каждой из независимых переменных даются приращения в соответствующем порядке, обеспечивающем заполнение всей области изменения этих переменных равномерной и достаточно густой сеткой. В простейшем случае двух переменных $\mathbf{X_1}$ и $\mathbf{X_2}$ сканирование сводится к просмотру значений критерия оптимальности при заданном значении одной переменной $\mathbf{X_2}$ для ряда значений другой $\mathbf{X_1}$, которые определяются как отстоящей друг от друга на величину шага $\mathbf{\Delta X1}$ по переменной $\mathbf{X_1}$. После того как весь диапазон изменения переменных **X1** при заданном значении **X2** исследован и для него найдено минимальной значение критерия оптимальности, изменяется значение переменной **X2** также на величину некоторого шага $\mathbf{\Delta X2}$ по этой переменной и т.д.

Для произвольного числа независимых переменных шаг по каждой следующей переменной производится после того, как полностью завершен цикл по предыдущей.

Дополнительные ограничения на независимые переменные по существу не усложняют процедуру использования метода сканирования, так как в этом случае точки, которые не удовлетворяют заданным условиям, просто исключаются из рас-

смотрения и значения критерия оптимальности в них не вычисляются. Наличие дополнительных ограничений на независимые переменные даже ускоряет решение задачи, если, конечно , эти ограничения не заданы в виде трудно вычислимых соотношений, поскольку возможный диапазон изменения переменных при этом сужается и значения критерия оптимальности рассчитываются в меньшем числе точек.

Особенно просто обстоит дело, если ограничения заданы в виде, когда приемлемость точки решается простой проверкой этих условий. Однако метод сканирования можно применить также и в случае, если ограничения имеют вид равенства. Наиболее простой путь при этом состоит в замене ограничения типа:

$\sum(X_1,X_2,....X_п)=0$ (8)

ограничением:

$\sum (X_1,X_2,....X_п)\leq\delta$ (9)

определим некоторую δ-окрестность гиперповерхности, описываемой уравнением (8), где и используется метод сканирования.

Нетрудно получить оценку вычислительных затрат при применении метода сканирования. Так, в случае поиска оптимума целевой функции при условии, что точность определения положения этого оптимума равна Δ, т.е. искомые значения нормализованных переменных не должны отличаться от истинного положения оптимума на величину, большую, чем Δ, число рассчитываемых значений целевой функции составит:

$S=(1/\Delta)^n$ (10)

где n-число независимых переменных решаемой задачи(размерность задачи).

Для отыскания оптимума функции двух переменных $F(X_1,X_2)$ с точностью $\Delta=10^{-3}$ по формуле (10) находим $S=(10^3)^2=10^6$.

Для отыскания оптимума функции трех переменных $F(X_1,X_2,X_3)$ с той же точностью получим: $S=(10^3)^3=10^9$.

Таким образом, число вычислений критерия оптимальности при определении положения оптимума методом сканирования возрастает в показательной зависимости от размерности решаемой задачи. Поэтому эффективное применение данного метода в основном ограничивается задачами невысокой размерности n =2-3, если используется простейший алгоритм поиска, рассмотренный выше, для отыскания оптимума с невысокой точностью.

Существуют различные модификации метода сканирования, применяемые в основном для сокращения объема вычислений. Одна из таких модификаций заключается в том, что использование алгоритма с переменным шагом сканирования. Вначале величина шага выбирается достаточно большой, по возможности значительно превышающей требуемую точность определения положения оптимума, и выполняется грубый поиск, который локализует область нахождения глобального оптимума. После того как эта область определена, производится поиск с меньшим шагом только в пределах указанной области. Практически можно организовать целый ряд таких процедур последовательного уточнения положения оптимума. Необ-

ходимый объем вычислений значений целевой функции при этом существенно сокращается и может быть подсчитан по формуле:

$S=k^{-rn}(1/\Delta)^n+r(2k)^n$ (11)

где n-размерность задачи; Δ-точность отыскания оптимума; r-число этапов уточнения поиска, на которых шаг поиска уменьшается в k раз.

Начальный шаг сетки переменных в данном случае определяется формулой:

$\Delta_0=k^r\Delta$

Например, при поиске оптимума функции двух переменных (n=2) с точностью $\Delta=10^{-3}$, используя два этапа уточнения величины шага (r=2) в k=10 раз, т.е. с начальным шагом $\Delta_0=0.1$ необходимый объем вычислений составит

$S=10^{-4}(10^3)^2+2(20)^2=900$

что более чем в 1000 раз сокращает объем вычислений при сканировании с постоянным шагом.

Для функции трех переменных R(X1,X2,X3) соответственно можно найти:

$S=10^{-6}(10^3)^3+2(20)^3=17000$

т.е. выигрыш по сравнению с применением постоянного шага еще более значителен.

На рис.10. показан поиск с переменным шагом для функции двух переменных. Кружком обозначено истинное положение оптимума, а крестом приближение, найденное в результате грубого поиска.

Важнейшим моментом при использовании метода сканирования с переменным шагом является выбор грубого начального шага поиска. если начальная величина шага Δ_0 выбрана слишком большой, то может возникнуть опасность пропуска глобального оптимума. Если же начальный шаг выбран слишком малым, то может быть велик необходимый для поиска объем вычислений. При выборе величины шага существенную помощь может оказать информацию о поведении целевой функции, наличии локальных экстремумов и т.д.

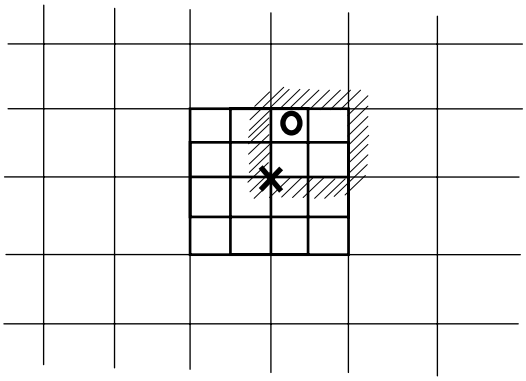


Рис.10.: Поиск оптимума методом сканирования с переменным шагом.

Алгоритм поиска оптимума целевой функции методом сканирования при выполнении лабораторной работы следующий:

1) На основе пределов варьирования параметров X_1,X_2 ($X_i^{нач}$,$X_i^{конеч}$) определяется шаг варьирования по каждой из переменных:

2) $h_{X1}=(X_1^{конеч}-X_1^{нач})/K_{X1}$, $h_{X2}=(X_2^{конеч}-X_2^{нач})/K_{X2}$
3) где K_{Xi}-количество дискрет в i-м осевом направлении.
4) Определяются значение функции в каждой узловой точке сканируемой области, и находится наилучшая точка.
5) Найденная точка локализуется двумя соседними (по каждой из независимых переменных) и тем самым определяется новая область поиска.
6) Проверяется условие окончания поиска: Если длина нового интервала по каждой из переменных $E_{Xi} < 0.5$, то поиск прекращается, если нет, то вычисления продолжаются с пункта 1.

Контрольный пример.

Исследуется оптимум целевой функции: Y = F(T,Q)

аналитическое выражение, которой имеет вид:

$$\mathbf{Y}=1296.6279-17.82162*\mathbf{T}+0.07213*\mathbf{T}^2-13.36467*\mathbf{Q}+0.277715*\mathbf{Q}^2$$

T = 110..130, Q = 18..30.,

причем график функции ориентирован относительно оси координат поворотом на 70°. Критерием окончания поиска считать условие: $h^{(k)}_T < 0.5$, $h^{(k)}_Q < 0.5$.

Результат решения контрольного промера приведен в следующей таблице:

Итер.-1	**20.000**	**21.667**	**23.333**	**25.000**	**26.667**	**28.333**	**30.000**
110.000	62.307	65.187	68.924	73.517	78.968	85.276	92.441
113.333	49.563	51.324	53.942	57.417	61.749	66.938	72.984
116.667	41.166	41.808	43.307	45.663	48.876	52.946	57.873
120.000	37.114	36.637	37.018	38.255	40.349	43.300	47.109
123.333	37.409	35.813	35.074	35.193	36.168	38.001	40.690
126.667	42.046	39.335	37.480	36.474	36.332	37.048	38.624
130.000	51.041	47.213	44.239	42.094	40.832	40.429	40.885
Итер.-2	**21.667**	**22.222**	**22.778**	**23.333**	**23.889**	**24.444**	**25.000**
120.000	36.637	36.669	36.796	37.018	37.335	37.747	38.255
121.111	35.880	35.787	35.789	35.887	36.080	36.368	36.751
122.222	35.605	35.388	35.266	35.239	35.308	35.472	35.731
123.333	35.813	35.472	35.225	35.074	35.019	35.058	35.193
124.444	36.502	36.037	35.668	35.393	35.213	35.127	35.138
125.556	37.677	37.088	36.594	36.195	35.891	35.679	35.565
126.667	39.335	38.622	38.004	37.480	37.052	36.712	36.474
Итер.-3	**23.333**	**23.519**	**23.704**	**23.889**	**24.074**	**24.259**	**24.444**
122.222	35.239	35.252	35.274	35.308	35.352	35.406	35.472
122.593	35.131	35.129	35.138	35.158	35.188	35.229	35.280
122.963	35.076	35.060	35.056	35.061	35.078	35.105	35.142
123.333	35.074	35.045	35.027	35.019	35.021	35.034	35.058
123.704	35.127	35.084	35.051	35.030	35.018	35.018	35.028
124.074	35.233	35.176	35.130	35.094	35.069	35.055	35.051

124.444	35.393	35.322	35.262	35.213	35.173	35.145	35.127
Итер.-4	**24.074**	**24.136**	**24.198**	**24.259**	**24.321**	**24.383**	**24.444**
123.333	35.021	35.025	35.029	35.034	35.041	35.049	35.058
123.457	35.014	35.016	35.019	35.023	35.028	35.035	35.042
123.580	35.013	35.014	35.015	35.017	35.021	35.026	35.032
123.704	35.018	35.017	35.017	35.018	35.020	35.023	35.028
123.827	35.029	35.026	35.025	35.024	35.025	35.027	35.029
123.951	35.046	35.042	35.039	35.036	35.035	35.036	35.037
124.074	35.069	35.063	35.058	35.055	35.052	35.051	35.051

6.ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №4: «БЕЗГРАДИЕНТНЫЕ МЕТОДЫ МНОГОМЕРНОЙ БЕЗУСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ. МЕТОД НЕЛДЕРА-МИДА (ДЕФОРМИРОВАННОГО МНОГОГРАННИКА)».

Попыткой избежать необходимости вычисления производных для определения направления наискорейшего продвижения к оптимуму и в то же время сохранить возможность достаточно быстрого движения к нему является алгоритм Нелдера-Мида (являющийся модификацией симплексного метода).

Основная идея этого метода заключается в том, что по известным значениям целевой функции в вершинах выпуклого многогранника, называемого симплексом, находится направление, в котором требуется сделать следующий шаг, чтобы получить наибольшее уменьшение (увеличение) критерия оптимальности. При этом под симплексом в n-мерном пространстве понимается многогранник, имеющий ровно n+1 вершин, каждая из которых определяется пересечением n гиперплоскостей данного пространства. Примером симплекса в двухмерном пространстве, т.е. на плоскости, является треугольник (рис.11.а). В трехмерном пространстве симплексом будет любая четырехугольная пирамида, имеющая четыре вершины, каждая из которых образована пересечением трех плоскостей-граней пирамиды (рис.11.б).

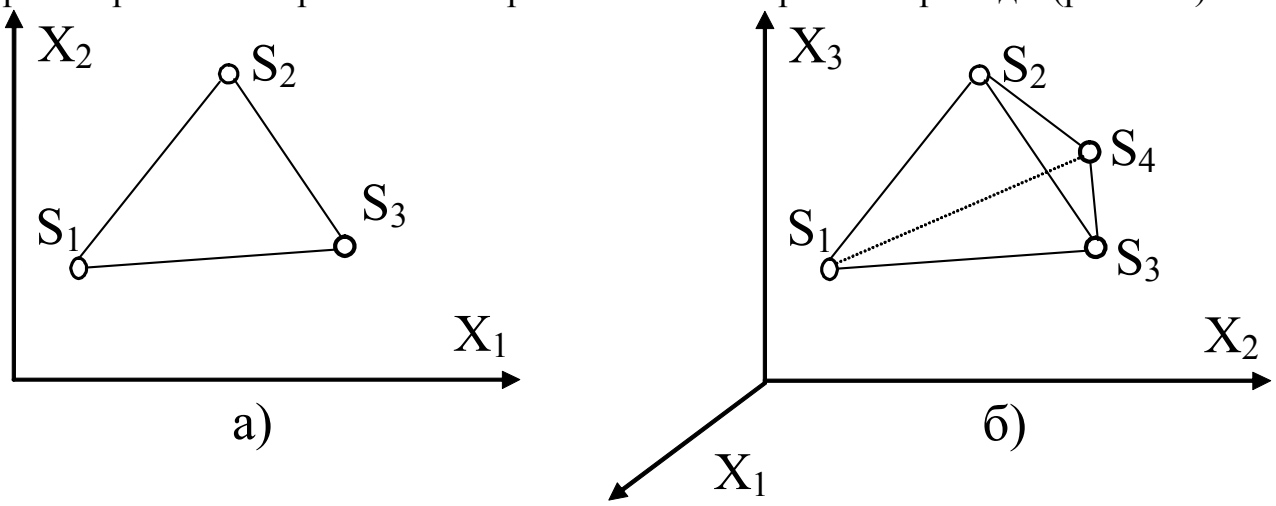


Рис.11.: Примеры симплексов на плоскости а) и в пространстве б).

Отметим одно свойство симплекса: против любой из вершин симплекса $\mathbf{S_j}$ расположена только одна грань, на которой можно построить симплекс, отличающийся от прежнего расположением вершины $\mathbf{S_j}$, тогда как остальные вершины совпадают. Вершина $\mathbf{S_j}$ нового симплекса, вообще говоря, может находиться и по другую сторону грани от вершины S_j. Именно это свойство симплекса и обусловило возможность его применения при решении оптимальных задач, в которых требуется отыскать экстремальные точки целевой функции.

Алгоритм поиска оптимума при выполнении лабораторной работы методом Нелдера-Мида следующий:

1) Задаются вершины начального симплекса: S_1^0, S_2^0, и S_3^0.
2) Определяется значение целевой функции в каждой из трех вершин симплекса F_1, F_2, F_3.

3) Из значений целевой функции выбирается:
   - Наихудшее - $F_X = MAX(F_1, F_2, F_3)$, $F_X = f(X_X)$
   - Наилучшее - $F_Л = MIN(F_1, F_2, F_3)$, $F_Л = f(X_Л)$
4) Определяется центр грани противолежащий худшей вершине:

$$X_O = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1, i \neq X}^{n} X_i$$ где: n-количество вершин симплекса (n=3).

5) Худшая вершина отражается относительно центра X_O и определяется пробная точка (точка отражения):

$X_П = X_O + \varepsilon (X_O - X_X)$, где: $\varepsilon = 1$ (коэффициент отражения)

находится значение функции в пробной точке: $F_П = f(X_П)$.

6) Если значение $F_П < F_Л$ осуществляется попытка растяжения симплекса:

$X_P = X_O + \varepsilon (X_П - X_O)$, где: $\varepsilon = 2$ (коэффициент растяжения)

находится значение функции: $F_P = f(X_P)$.
   - Если $F_P < F_П$ то худшая вершина заменяется на точку растяжения с координатами X_P. Новый симплекс будет иметь вершины (S_2, S_3, S_P).
   - Если $F_P > F_П$ то худшая вершина заменяется на точку отражения с координатами $X_П$. Новый симплекс будет иметь вершины $(S_2, S_3, S_П)$.

7) Если: $F_Л < F_П < F_X$ то худшая вершина заменяется на точку отражения с координатами $X_П$. Новый симплекс будет иметь вершины $(S_2, S_3, S_П)$.
   - Если значение $F_П > F_X$ осуществляется попытка сжатия симплекса:

$X_C = X_O - \varepsilon (X_O - X_X)$, где: $\varepsilon = 0.5$ (коэффициент сжатия)находится значение функции: $F_C = f(X_C)$.
   - Если $F_C < F_X$ то худшая вершина заменяется на точку сжатия с координатами X_C. Новый симплекс будет иметь вершины (S_2, S_3, S_C).
   - Если $F_C > F_X$ то осуществляется уменьшение размеров симплекса относительно лучшей грани:

$$X_i = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1, i \neq o}^{n} (X_i - X_o)$$

Новый симплекс будет иметь вершины (S_2, S_A, S_O).

8) Проверяется условие окончания поиска: Если длина каждого ребра симплекса станет меньше $\varepsilon = 0.5$, то поиск прекращается, если нет, то вычисления продолжаются с пункта 2.

На рис.12. приведена иллюстрация изложенного выше алгоритма на примере поиска оптимума функции от двух переменных.

Доказано, что направление движения в симплексном методе совпадает с направлением градиента, если, естественно, симплекс достаточно мал. Вместе с тем, реализация данного метода не требует существенного увеличения вычислительных затрат с повышением размерности решаемой задачи, поскольку на каждом шаге рассчитывается только одно значение целевой функции независимо о числа перемен-

ных. В то же время при использовании градиентных методов поиска с возрастанием числа независимых переменных соответственно увеличивается число вычисляемых значений целевой функции при расчете производных по всем переменным.

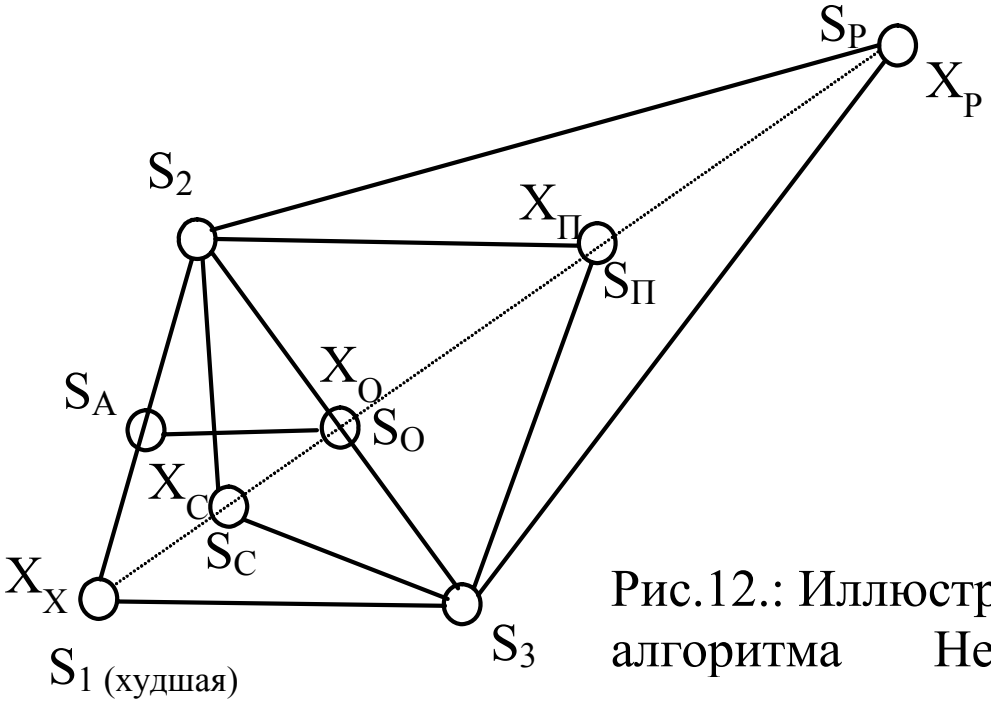


Рис.12.: Иллюстрация алгоритма Нелдера-Мида.

Контрольный пример.

Исследуется оптимум целевой функции: Y = F(T,Q)

аналитическое выражение, которой имеет вид:

$$\mathbf{Y}=1296.6279-17.82162*\mathbf{T}+0.07213*\mathbf{T}^2-13.36467*\mathbf{Q}+0.277715*\mathbf{Q}^2$$

T = 110..130, Q = 18..30.,

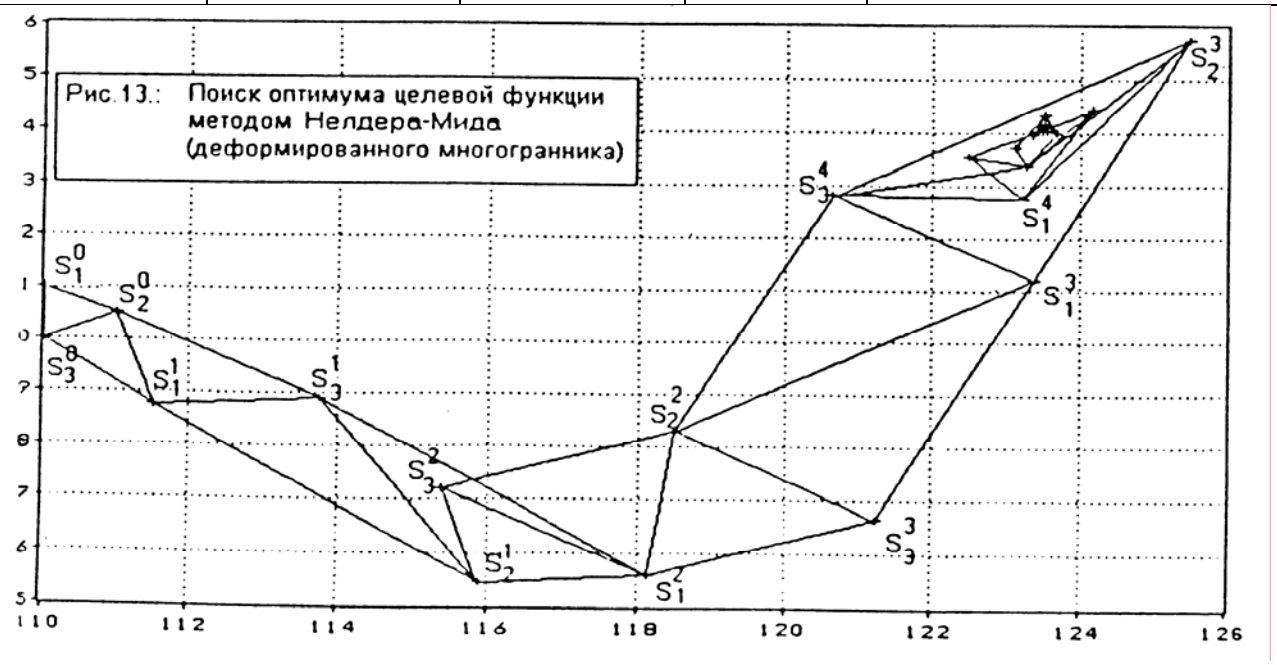
причем график функции ориентирован относительно оси координат поворотом на 70°. Критерием окончания поиска считать условие, когда все грани симплекса станут меньше ε = 0.5.

Результат решения контрольного промера приведен в следующей таблице:

Итерация	T	Q	Y	Симплекс получен:
	110.000	20.000	62.307	
1	110.000	21.000	63.932	
	111.000	20.500	58.701	
	110.000	20.000	62.307	растяжением
2	111.500	18.750	54.815	
	111.000	20.500	58.701	
	113.750	18.875	47.666	растяжением
3	111.500	18.750	54.815	
	111.000	20.500	58.701	
	113.750	18.875	47.666	растяжением
4	111.500	18.750	54.815	

	115.875	15.438	44.666	
	113.750	18.875	47.666	отражением
5	118.125	15.563	42.631	
	115.875	15.438	44.666	
	115.375	17.188	44.032	сжатием
6	118.125	15.563	42.631	
	115.875	15.438	44.666	
	115.375	17.188	44.032	растяжением
7	118.125	15.563	42.631	
	118.500	18.250	39.294	
	121.250	16.625	41.156	отражением
8	118.125	15.563	42.631	
	118.500	18.250	39.294	
	121.250	16.625	41.156	растяжением
9	123.375	21.188	36.205	
	118.500	18.250	39.294	
	120.625	22.813	36.177	отражением
10	123.375	21.188	36.205	
	118.500	18.250	39.294	
	120.625	22.813	36.177	отражением
11	123.375	21.188	36.205	
	125.500	25.750	35.538	
	120.625	22.813	36.177	сжатием
12	123.219	22.734	35.222	
	125.500	25.750	35.538	
	122.492	23.527	35.157	сжатием
13	123.219	22.734	35.222	
	125.500	25.750	35.538	
	122.492	23.527	35.157	сжатием
14	123.219	22.734	35.222	
	124.178	24.440	35.067	
	122.492	23.527	35.157	сжатием
15	123.277	23.359	35.067	
	124.178	24.440	35.067	
	123.110	23.714	35.038	сжатием
16	123.277	23.359	35.067	
	124.178	24.440	35.067	
	123.110	23.714	35.038	сжатием
17	123.277	23.359	35.067	
	123.686	23.988	35.021	
	123.110	23.714	35.038	отражением

18	123.518	24.343	35.026	
	123.686	23.988	35.021	
	123.356	23.940	35.017	сжатием
19	123.518	24.343	35.026	
	123.686	23.988	35.021	
	123.356	23.940	35.017	сжатием
20	123.520	24.153	35.015	
	123.686	23.988	35.021	
	123.356	23.940	35.017	сжатием
21	123.520	24.153	35.015	
	123.562	24.017	35.014	
	123.448	24.013	35.014	сжатием
22	123.520	24.153	35.015	
	123.562	24.017	35.014	
	123.448	24.013	35.014	сжатием
23	123.512	24.084	35.013	
	123.562	24.017	35.014	
	123.493	24.032	35.013	сжатием
24	123.512	24.084	35.013	
	123.562	24.017	35.014	



7.ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ.

1. $1475.034 – 101.512x + 0.522x^2$
   x=97.23 A=90 B=105
2. $5678.112 – 567001x + 0.902x^2$
   x=314.31 A=310 B=3
3. $8013.098 – 203.203x + 0.324x^2$
   x=313.58 A=305 B=320
4. $7230.122 – 925.124x + 0.96x^2$
   x=478 A=470 B=485
5. $5623.233 – 854.248x + 0.425x^2$
   x=1004.9 A=100 B=1015
6. $8542.531 – 331.305x + 0.102x^2$
   x=1624 A=1615 B=1630
7. $9998.991 – 321.501x + 0.213x^2$
   x=754.7 A=750 B=765
8. $5651.348 – 402.113x + 0.442x^2$
   x=454.87 A=445 B=460
9. $7901.567 – 501.115x + 0.183x^2$
   x=1369.2 A=1365 B=1380
10. $1122.922 – 962.529x + 0.814x^2$
    x=591.23 A=585 B=600
11. $8789.328 – 887.348x + 0.624x^2$
    x=711 A=705 B=720
12. $5677.548 – 551.918x + 0.945x^2$
    x=292 A=285 B=300
13. $6543.310 – 777.026x + 0.264x^2$
    x=1471.6 A=1465 B=1480
14. $14345.134 – 230.578x + 0.215x^2$
    x=536.22 A=525 B=540
15. $8056.340 – 77.87x + 1.14\ x^2$
    x=23.74 A=15 B=30
16. $3567.020 – 22.141x + 0.35\ x^2$
    x=31.62 A=25 B=40
17. $12842.273 – 284.752x + 0.202\ x^2$
    x=704.83 A=700 B=715
18. $36897.883 – 545.382x + 2.033\ x^2$
    x=134.13 A=125 B=140
19. $25635.731 – 483.325x + 4.002\ x^2$
    x=60.39 A=50 B=65
20. $3983.836 – 27.815x + 3.532\ x^2$
    x=7.8 A=5 B=20
21. $27814.441 – 13.454x + 0.302\ x^2$

x=44.5 A=40 B=55

22. $64385.352 – 27.386x + 0.042 x^2$

x=326.02 A=315 B=330

23. $37453.891 – 333.691x + 1.131 x^2$

x=147.52 A=145 B=160

24. $213963269 – 224.871x + 2.535 x^2$

x=44.35 A=40 B=55

8. СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.

1. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии. – М.: Химия , 1976, -576с.
2. Химельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. –М.: Мир, 1975г., 354с.
3. Базара М., Шетти К. Нелинейное програмирование, теория и алгоритмы. –М.: Мир, 1982г. 583с.
4. Реклеитес Г., Реивиндром А., Рэгсдел К. Оптимизация в технике в 2-х кн. –М.: Мир, 1986.
5. Шуп, Терри Е. Решение инженерных задач на ЭВМ., –М.: Мир, 1982г. 235с.
6. Банди Б. Методы оптимизации, вводный курс, –М.: Радио и связь, 1980г. , 128с.
7. Дьяконов В.П. Справочник по алгоритмам и программам на языке Бейсик для персональных ЭВМ , справочник. –М.: Наука, гл. физ.-мат. лит., 1987-240с.
8. Инков А.М., Михелев В.М., Дмитриев О.Л. Оптимизация технологических процессов и производств. Методические указания к выполнению лабораторных работ по специальности 36.03. Шымкент, Южно-Казахстанский технический университет, 1998 г.
9. Инков А.М., Михелев В.М. Методические указания для проведения самостоятельной работы по изучению на ЭВМ методов одномерной оптимизации студентами специальности 21.03 "Автоматизация технологических процессов и производств" Казахский химико - технологический институт, Чимкент, 1989.

9.КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ.

1) Что такое оптимизация?
2) Приведите примеры объектов оптимизации?
3) Что такое критерий оптимизации?
4) Объясните смысл ограничения и связей при решении задач оптимизации.
5) Приведите примеры задач оптимизации с ограничениями и без ограничений.
6) Сформулируйте задачу оптимизации.
7) Что такое глобальный и локальный оптимум? Приведите примеры.
8) Что понимается под условной и безусловной оптимизацией?
9) Приведите примеры одномерной оптимизации.
10) Какая функция называется унимодальной?
11) Как можно судить о положении оптимума унимодальной функции по знаку производной, в какой либо точке этой функции?
12) Какие можно использовать критерии окончания поиска оптимума функции?
13) В чем состоит алгоритм сужения интервала неопределенности при использовании методов: прямого поиска по дискретам, трехточечного поиска, дихотомии, Больцано, золотого сечения?
14) В чем отличие особенностей методов: Фибоначчи, с обратным половинным шагом, Пауэла, ДСК, кубической аппроксимации?
15) Что дает использование методов аппроксимации в задачах оптимизации?
16) Какие методы оптимизации называются градиентными?
17) В чем сущность метода релаксации
18) Как может зависеть время поиска оптимума в методе релаксации от ориентации системы координат
19) Какова может быть стратегия поиска оптимальной точки, в методе релаксации, при движении вдоль одного из осевых направлений
20) В чем сущность метода градиента
21) В чем сущность метода наискорейшего спуска
22) Что может служить критерием окончания поиска оптимума в градиентных методах
23) В чем сущность метода сканирования
24) Достоинства и недостатки метода сканирования
25) Что может служить критерием окончания поиска оптимума в методе сканирования
26) Что такое симплекс
27) В чем сущность метода Нелдера-Мида
28) Что может служить критерием окончания поиска оптимума в методе Нелдера-Мида