Лекция 4. Методы решения оптимизационных задач

В данном подразделе кратко рассматриваются некоторые методы нахождения экстремальных значений целевой функции. В части практического поиска экстремумов важно помнить, что эффективность этой процедуры высока для случая унимодальной (то есть с одним экстремумом) функции. Это означает, что при оптимизации целесообразно сужать поле поиска вблизи предполагаемого максимума.

Математически задача нахождения экстремума заданной функции может быть решена либо с помощью методик классического математического анализа, основанных на исследовании производных функции, либо с помощью численных методов, основанных на действиях с конечными числами. В случае компьютерного моделирования, особенно при использовании физико-химических моделей, удобно применять численные методы, на базе которых создаются расчетные модули пакетов моделирующих программ (ПМП). Фактически при использовании таких пакетов исследователь мало причастен к выбору методов расчета, однако знание особенностей возможных математических методов позволяет более эффективно использовать существующие ПМП.

В целом наиболее универсальной математической задачей оптимизации является нахождение безусловного экстремума функции численными методами поиска. Общий алгоритм этого поиска включает этапы:

– экспертный выбор начальной точки, который существенно влияет на продолжительность решения задачи;

– обоснованный выбор направления движения к точке экстремума;

– пошаговое движение от начальной точки к экстремуму в выбранном направлении.

Существующие многообразные численные методы нахождения экстремума отличаются способом выбора направления и движения от начальной точки к экстремуму. По способу выбора направления движения методы безусловной оптимизации разделяются на градиентные или безградиентные методы поиска.

С точки зрения математических особенностей численные методы безусловной оптимизации можно разделить на поиск экстремума для функции:

1) одной переменной (метод сканирования, метод локализации экстремума, метод золотого сечения, метод поиска с использованием чисел Фибоначчи и др.);

2) многих переменных без использования производных (метод сканирования, метод Гаусса – Зейделя, поиск по деформируемому многограннику, или симплекспланирование, и др.);

3) многих переменных с использованием производных (методы градиента, наискорейшего спуска, крутого восхождения, релаксаций, Ньютона и др.).

Наиболее простым примером оптимизации функции одной переменной $y = f(x)$ является метод сканирования (рис. 2.3). В этом случае выбранный диапазон значений оптимизирующего фактора от x_{min} до x_{max} разбивается на равные участки величиной Δx, которая называется шагом поиска или сканирования. Затем в каждой точке шага x_i рассчитываются и сравниваются между собой значения функции y_i. Соответственно при поиске минимума запоминается наименьшее значение y_i^{min}. Далее можно продолжить сканирование в окрестности точки y_i^{min} с меньшим шагом сканирования, величина которого определяет точность нахождения экстремума целевой функции. Разновидностью метода сканирования является метод локализации экстремума, в котором производится деление первоначальных интервалов на подынтервалы с учетом значений функции, рассчитанных на границах интервалов. Такой подход позволяет существенно сократить объем вычислений за счет использования для подынтервалов значений функции, рассчитанных для интервалов.

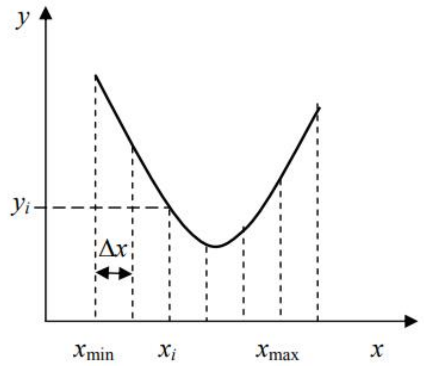

Рис. 2.3. Графическая иллюстрация
метода сканирования для оптимизации
функции одной переменной

В методе золотого сечения для выбора точек расчета целевой функции внутри заданного поля значений оптимизирующего фактора используется геометрическое правило золотого сечения в виде:

$$\frac{a}{b} = \frac{b}{c} \text{ или } ac = b^2,$$

где a – длина отрезка; b, c – длина большей и меньшей частей отрезка соответственно.

Математические соотношения, вытекающие из правила золотого сечения, используются при оптимизации для выбора исходных точек интервала, а также его деления на подынтервалы разной величины при движении к экстремуму.

Более важное практическое значение, в том числе при моделировании ХТП, имеет решение многомерной задачи оптимизации, то есть оптимизации целевой функции многих оптимизирующих факторов. Для таких случаев среди методов расчета без использования производных можно выделить поиск по деформируемому многограннику (метод Нелдера и Мида), который основан на симплекс-планировании. Проведение экспериментов по симплекс-плану позволяет проводить оптимизацию объекта без расчетов по математической модели и определять направление движения к экстремуму целевой функции на основании данных минимального количества опытов, что особенно важно при большом количестве оптимизирующих факторов.

Симплексом называют простейшую выпуклую геометрическую фигуру, имеющую в k-мерном пространстве k + 1 вершину. Например, в двумерном пространстве, то есть для целевой функции $y = f(x_1, x_2)$, симплексом является треугольник. Алгоритм симплексной оптимизации при поиске, например, максимума функции, включает следующие основные этапы:

– составление плана эксперимента из k + 1 опытов, в котором координаты вершин исходного симплекса являются условиями опытов, то есть значениями оптимизирующих факторов (например, для двумерной оптимизации исходным симплексом $C_{исх}$ является треугольник (рис. 2.4) с определенными значениями факторов x_1, x_2, x_3);

– проведение опытов по симплекс-плану (экспериментальное определение значений целевой функции y_1, y_2, y_3 в вершинах);

– исключение из плана вершины с наименьшим полученным значением y_i^{min} (вершина x_1, y_1 на рис. 2.4);

– построение нового симплекса с включением в него новой вершины (вершина x* на рис. 2.4), являющейся зеркальным отражением отброшенной точки относительно противоположной грани исходного симплекса, то есть построение нового деформированного симплекса $C_{деф}$;

– проведение эксперимента в новой точке x* деформированного симплекса с определением значения целевой функции y*;

– деформационное перемещение симплекса по аналогичной схеме в направлении увеличения целевой функции.

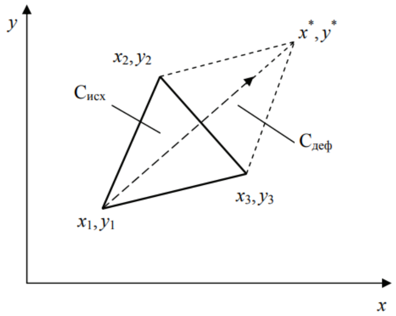

Рис. 2.4. Графическая иллюстрация метода поиска экстремума по деформируемому многограннику (симплекс-планирование) для оптимизации функции многих (двух) переменных без использования производных

Градиентные методы оптимизации используют приближенные математические зависимости, описывающие целевую функцию. Они основаны на анализе производных этой функции, с учетом того, что производная функции по нормали к поверхности фиксированного уровня значений этой функции алгебраически равна градиенту этой функции. В случае многомерной оптимизации движение по градиенту представляет кратчайший путь поиска экстремума. Существенные трудности градиентных методов связаны с выбором шага, который ограничен кривизной целевой функции и точностью вычислений значений этой функции.

Достаточно широко из градиентных методов оптимизации используется метод крутого восхождения. В этом методе предполагается предварительное локальное описание поверхностей фиксированного уровня значений целевой функции S_i с помощью полнофакторного или дробнофакторного эксперимента. Таким образом, при оптимизации целевой функции S_i данным градиентным методом основными этапами являются:

– выбор исходной точки поиска и построение плана полнофакторного или дробнофакторного эксперимента для получения данных, отражающих поверхности уровней целевой функции S_i;

– получение регрессионных уравнений (или статистических моделей), позволяющих описать поверхности, или кривых фиксированного уровня значений целевой функции (рис. 2.5, кривые y_1, y_2, y_3);

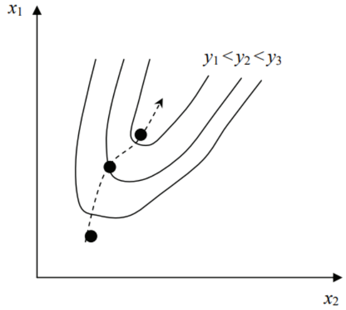

Рис. 2.5. Графическая иллюстрация градиентного метода крутого восхождения для оптимизации функции многих (двух) переменных с использованием производных

– вычисление градиента целевой функции в выбранной точке;

– крутое восхождение в направлении градиента в пределах шага, вычисленного по каждой координате пространства;

– поиск экстремума целевой функции (минимальное значение y_{min} в примере на рис. 2.5) при движении в направлении градиента.