ПРИМЕНЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО СИМПЛЕКСНОГО МЕТОДА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПОИСКА МИНИМУМА

Филатов Сергей Юрьевич
Н.с., Российский Федеральный Ядерный Центр — Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Технической Физики им. академика Е. И. Забабахина, г. Снежинск
phil_1979@inbox.ru

Аннотация. Предложена оригинальная версия симплексного метода для поиска минимума функции, заданной аналитически. Алгоритм прошел верификацию. Использовались различные начальные приближения и ограничения. Оригинальная версия симплексного метода обеспечивает решение уравнения с двумя неизвестными с удовлетворительной точностью. Разработанный алгоритм можно распространить на решение уравнений с большим числом неизвестных.

Ключевые слова: нелинейный симплексный метод, поиск минимума, аналитическая функция, верификация.

THE NONLINEAR SIMLEX–METHOD APPLICATION FOR MINIMUM SEARCH TASK SOLUTIONS

S. Filatov

Summary. The original simplex-method version is offered for minimum search of analytical function. Algorithm was verified. Various initial approximations and constraints were used. The original simplex-method version showed good agreement for equation with two variables. Algorithm may be used for solution of equations with more variables.

Keywords: nonlinear simplex-method, minimum search, analytical function, verification.

Введение

Согласно [1] и [2] в симплексном методе отсутствует необходимость вычисления производных для определения направления наискорейшего продвижения к оптимуму и одновременно сохраняя возможность достаточно быстрого продвижения к нему. Основания идея этого метода состоит в том, что по известным значения целевой функции в вершинах выпуклого многогранника, называемого симплексом, находится направление, в котором требуется сделать 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 двумерном пространстве, т.е. на плоскости является треугольник. В трехмерном пространстве симплексом будет любая четырехгранная пирамида, имеющая четыре вершины, каждая из которых образована пересечением трех плоскостей — граней пирамиды.

В [1] отмечено, что симплекс обладает одним свойством: против любой из вершин симплекса S_j расположена только одна грань, на которой можно построить новый симплекс, отличающийся от прежнего расположением новой вершины $\tilde{S}_j$, тогда как остальные вершины обоих симплексов совпадают. Вершина $\tilde{S}_j$ нового симплекса может находиться 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 целевых функций. На рисунке 1 схематично показан алгоритм симплексного метода на примере задачи поиска наименьшего значения целевой функции двух независимых переменных с линиями постоянного уровня.

В [1] доказано, что при применении правильных симплексов 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 от числа переменных. 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.

1. Решение системы уравнений симплексным методом

Далее описан алгоритм авторской программы RESURS, которая уточняет точки, «подозрительные» на экстремум функции n — переменных

$$F\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right),$$

при помощи симплекс-метода. За основу был взят симплексный метод, описанный в работе [1] и модифи-

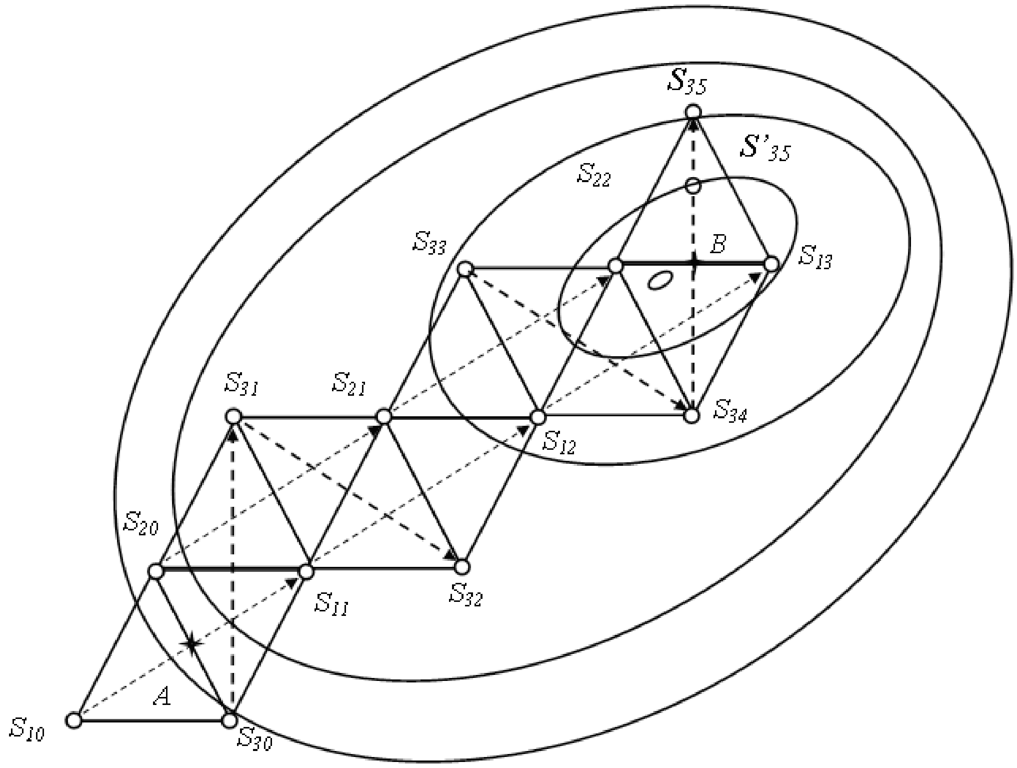

Рис. 1. Схематичное представление поиска минимума симплексным методом

Таблица 1. Приятые обозначения

x_i	–	Варьируемые параметры $i = 1, \dots, n$
x_i^0	–	Начальные значения варьируемых параметров $i = 1, \dots, n$
$min\ x_i,\ max\ x_i$	–	Границы области изменения x_i, $min\ x_i \le x_i \le max\ x_i$
$min\ x_i^0,\ max\ x_i^0$	–	Начальные границы области изменения x_i
y_i	–	Безразмерные параметры $0 \le y_i \le 1$
y_{ic}	–	Безразмерные координаты начальной точки.
$y_{iЛ}$, $y_{iП}$	–	Расстояние до границы области изменения.
R_c	–	Радиус симплекса.
Y_{ij}	–	Координаты j-ой вершины симплекса $j = 1, \dots, n+1$
ВС	–	Обозначение вершины симплекса (ВС=1 — да, ВС=0 — нет).
СПВ	–	Самая плохая вершина симплекса (имеются две самых плохих вершины — СПВ1 и СПВ2).
F	–	Функция цели. Рассчитывается в каждой точке с координатами x_i
ЧФЦ	–	Число обращений к функции цели.
ЧФЦЭ	–	Число обращений к функции цели на этапе.
F_n	–	Новая функция цели.
y_{i*}	–	Координаты центра грани, противоположной СПВ1.
СКФЦ	–	Счетчик корректировок функций цели.
СКФЦЭ	–	Счетчик корректировок функции цели на этапе.
НЭ	–	Номер этапа.

цированный автором. Метод настроен на поиск минимума целевой функции ($\min F$). Принятые обозначения переменных, используемых в методе приведены в таблице 1.

Алгоритм RESURS состоит из девяти модулей, описание каждого из модулей приводится ниже.

1. Подготовка исходных данных

По всем варьируемым размерным параметрам x_i задаются: начальные значения варьируемых параметров x_{ic}; начальные ограничения $min\ x_i^0 \leq x_i \leq max\ x_i^0$. Поскольку в процессе движения симплекса, ограничения могут меняться, то они же и принимаются за текущие $x_{ic} = x_{ic}^0$, $min\ x_i = min\ x_i^0$, $max\ x_i = max\ x_i^0$.

НЭ=0, ЧФЦ=0, ЧФЦЭ=0, СКФЦЭ=0, СКФЦ=0.

2. Переход к безразмерным переменным

Безразмерные переменные y_i рассчитываются по формулам

$$y_i = \frac{x_i - \min x_i}{\max x_i - \min x_i}.$$

Безразмерные координаты y_{ic} начальной точки определяются уравнениями

$$y_{ic} = \frac{x_{ic} - \min x_i}{\max x_i - \min x_i}.$$

Таким образом, все y_i изменяются в промежутке $0 \leq y_i \leq 1$.

3. Определение радиуса симплекса. Начало работы симплекса

Определяются расстояния от центра будущего симплекса y_{ic} до границ $min\ y_i = 0$ и $max\ y_i = 0$.

$h_{iЛ} = y_{ic}$, $h_{iП} = 1 - y_{ic}$.

$i = 1, \ldots, n$, где n — число варьируемых параметров (переменных). $h_{iЛ}$ — расстояние от центра до левой границы, $h_{iП}$ — расстояние от центра до правой границы. Из всех значений выбирается наименьшее.

$h_{min} = min\{h_{iЛ},\ h_{iП}\}$.

Радиус симплекса определяется как часть h_{min}

$$R_c = \frac{h_{\min}}{5НЭ}.$$

4. Построение симплекса (правильного многогранника)

Каждая вершина симплекса с номером j ($o = 1, \ldots, n+1$) имеет n координат y_{ij} ($i = 1, \ldots, n$), которые вычисляются по формулам

$$Y_{ij} = \begin{cases} y_{ic} + R_c\sqrt{\dfrac{n+1}{in(i+1)}}, & при \quad i > j-1, \\ y_{ic} - R_c\sqrt{\dfrac{n+1}{in(i+1)}}, & при \quad i = j-1, \\ y_{ic}, & при \quad i < j-1, \end{cases}.$$

После определения всех безразмерных координат Y_{ij} j-ой вершины определяются по модулю № 5 в этой вершине функция цели. При этом в модуль 5 подается информация, что считается вершина симплекса (ВС)

ВС=1.

После завершения построения симплекса проводится его анализ по модулю № 6 и определяются вершины СПВ1 и СПВ2 (самые плохие вершины).

5. Функция цели

Функция цели F рассчитывается в точке с координатами x_i ($i = 1, \ldots, n$). Эта точка может быть вершиной симплекса (ВС=1), либо это не вершина симплекса (ВС=0). Для расчета функции цели в точке с безразмерными координатами y_i ($i = 1, \ldots, n$) необходимо перейти к размерным переменным x_i по формулам

$$x_i = \min x_i + y_i\left(\max x_i - \min x_i\right).$$

После этого рассчитывается целевая функция $F(x_i)$. При каждом обращении к расчету F увеличиваются на единицу число обращений к функции цели и число обращений к функции цели этапа.

ЧФЦ=ЧФЦ+1, ЧФЦЭ=ЧФЦЭ+1.

5.1 Если ВС=1, то полученное значение функции цели $F(x_i, x_n)$ присваивается j-ой вершине $F_j = F$.

5. 2 Если ВС=0, то точка с координатами x_i и целевой функцией $F(x_1, x_n)$ называется новой $F_n = F$.

Тем не менее, новая точка не является вершиной симплекса.

6. Анализ симплекса

В результате анализа определяются «хорошие» и «плохие» вершины, а также разница между ними. Вычисляется «самая плохая вершина» (СПВ), удовлетворяющая условию

$$F_k = \max\left\{F_j\right\},$$

где j — номер вершины симплекса ($j = 1, \ldots, n+1$). Эта вершина обозначается СПВ1 и имеет индекс k. Из оставшихся вершин определяется снова «самая плохая вершина»

$$F_l = \max\left\{F_j\right\},\ j \neq k.$$

Эта вершина обозначается СПВ2 и имеет индекс l.

7. Движение симплекса

Рассчитываются безразмерные координаты центра грани, противоположной СПВ1

$$y_{i*} = \frac{1}{n}\sum_{\substack{j=1,\\ j\neq k}}^{n} Y_{ij}.$$

Затем, совершается отражение СПВ1 через рассчитанный центр противоположной грани по формуле

$$y_{iн} = 2y_{i*} - Y_{ik}.$$

В новой точке, которая пока еще не является вершиной симплекса (ВС=0), определяется функция цели F по правилам модуля № 5. Функция цели в этой точке обозначается F_H. При этом увеличиваются на единицу счетчики ЧФЦ и ЧФЦЭ:

ЧФЦ=ЧФЦ+1, ЧФЦЭ=ЧФЦЭ+1.

Если выполнены условия

$$\left.\begin{matrix} 0 < y_{iн} < 1, \quad i = 1, \ldots, \mathrm{n} \\ F_н < F_{СПВ2} \end{matrix}\right\} \quad (*),$$

то функция цели F_H не корректируется. Если же хотя бы одно из условий (*) не выполнено, то функция цели F_H корректируется по формуле

$$F_н = F_{СПВ2}\left(1-\varepsilon\right),$$

где ε_1 — малое число, например 10^{-5}. При этом, счетчики корректировки функции цели этапа увеличиваются на единицу

СКФЦ=СКФЦ+1, СКФЦЭ=СКФЦЭ+1.

Затем, проверяются условия движения симплекса к цели

$$\begin{cases} 7.1\ \ СКФЦЭ < \varepsilon_4 \cdot ЧФЦЭ, \quad где\ \ \varepsilon_4 = 0.2 \\ 7.2\ \ \max\left\{F_j\right\} - \min\left\{F_j\right\} > \varepsilon_2 \left|\max\left\{F_j\right\}\right|\ ,\ где\ \varepsilon_2 = 0.1 \\ 7.3\ \ R_c > \varepsilon_3,\ где\ \ \varepsilon_3 = 10^{-5} \end{cases}$$

Условие 7.2 необходимо, чтобы симплекс не «топтался» на месте, а 7.3 — для предотвращения стягивания в точку.

Если эти условия выполнены, то этап продолжается. Для этого, вершина СПВ1 отбрасывается, а вместо нее точка «н» становится новой вершиной ($F_j = F_H$, $Y_{ij} = y_{iH}$). Затем, повторяются все операции, начиная с модуля № 6. Если хотя бы одно из условий 7.1–7.3 не выполнено, то этап завершается по правилам модуля № 8.

8. Завершение этапа

В данном модуле принимается решение — закончить оптимизацию или сформировать новый этап. Из всех вершин симплекса и новой точки выбирается вершина с наилучшим значением целевой функции

$$F_{хор} = \min\left\{F_j, F_н\right\},\ где\ (\ j = 1, \ldots, n+1\ ).$$

Выполняется проверка на условия

$$\begin{cases} 8.1\ \ R_c \geq \varepsilon_3, \quad где\ \ \varepsilon_3 = 10^{-5} \\ 8.2\ \ \left|F_{хор} - F_{СПВ1}\right| > \varepsilon_3 \cdot F_{СПВ1}\ \ ,\ где\ \varepsilon_2 = 0.1 \\ 8.3\ \ 0 < y_{iхор} < 1,\ \ для\ i = 1, \ldots, \mathrm{n} \end{cases}$$

Если безразмерные координаты этой точки удовлетворяют условиям (8.1) — (8.3), то начинается новый этап, а значения НЭ, ЧФЦЭ, СКФЦЭ заносятся в память программы.

После чего, счетчики изменяют свои значения следующим образом

НЭ=НЭ+1, СКФЦЭ=0, ЧФЦЭ=0.

Далее, рассчитываются размерные координаты хорошей точки, принимаемые за центр нового симплекса

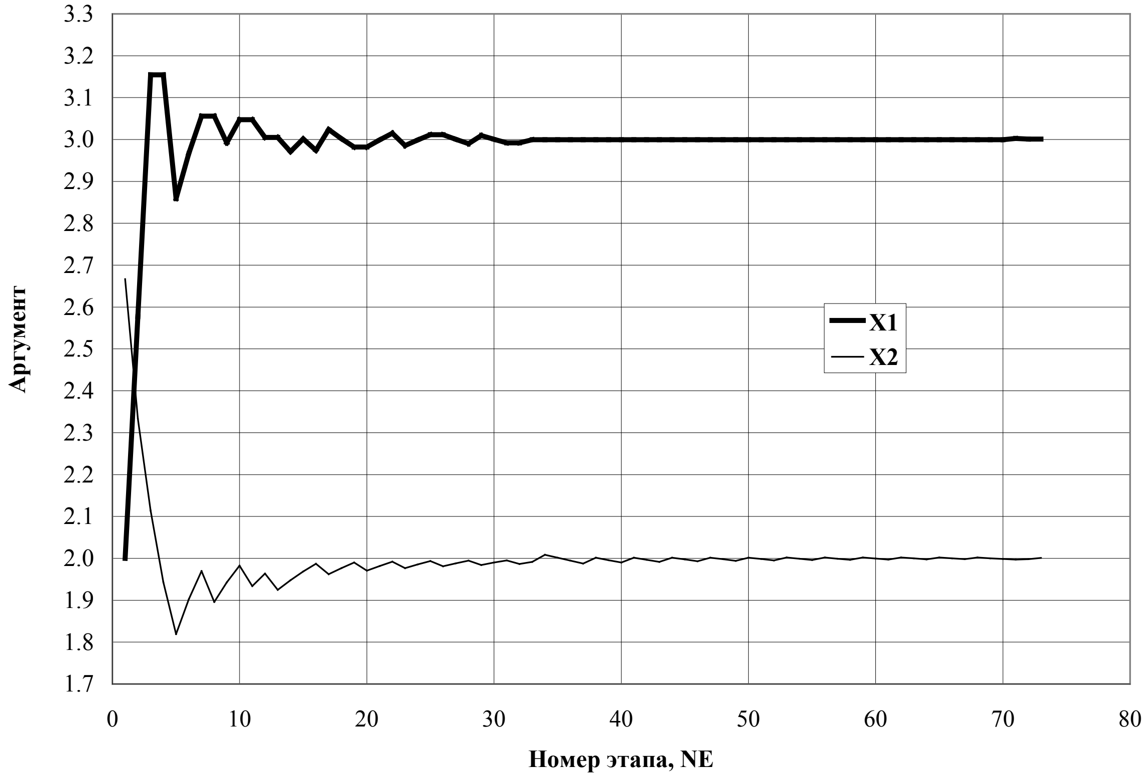

Рис. 2. Зависимость значений «хорошей» и двух «плохих» вершин от номера этапа

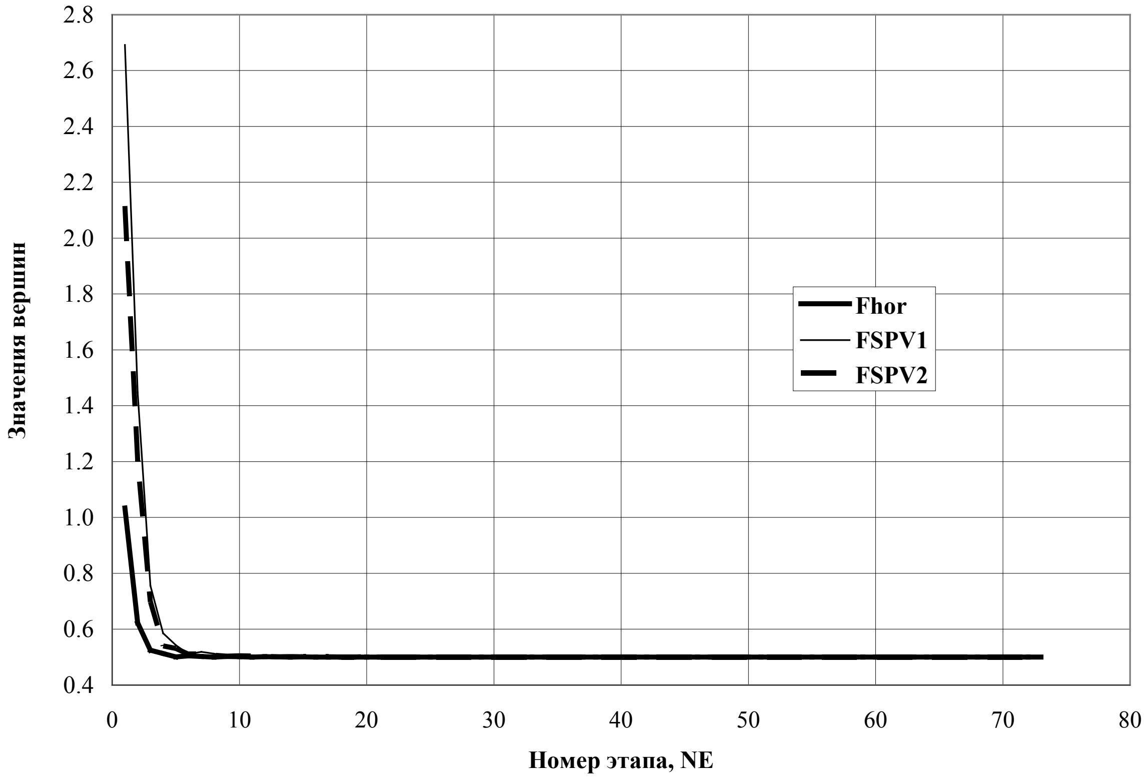

Рис. 3. Зависимость значений переменных «хорошей» вершины x_1 и x_2 от номера этапа

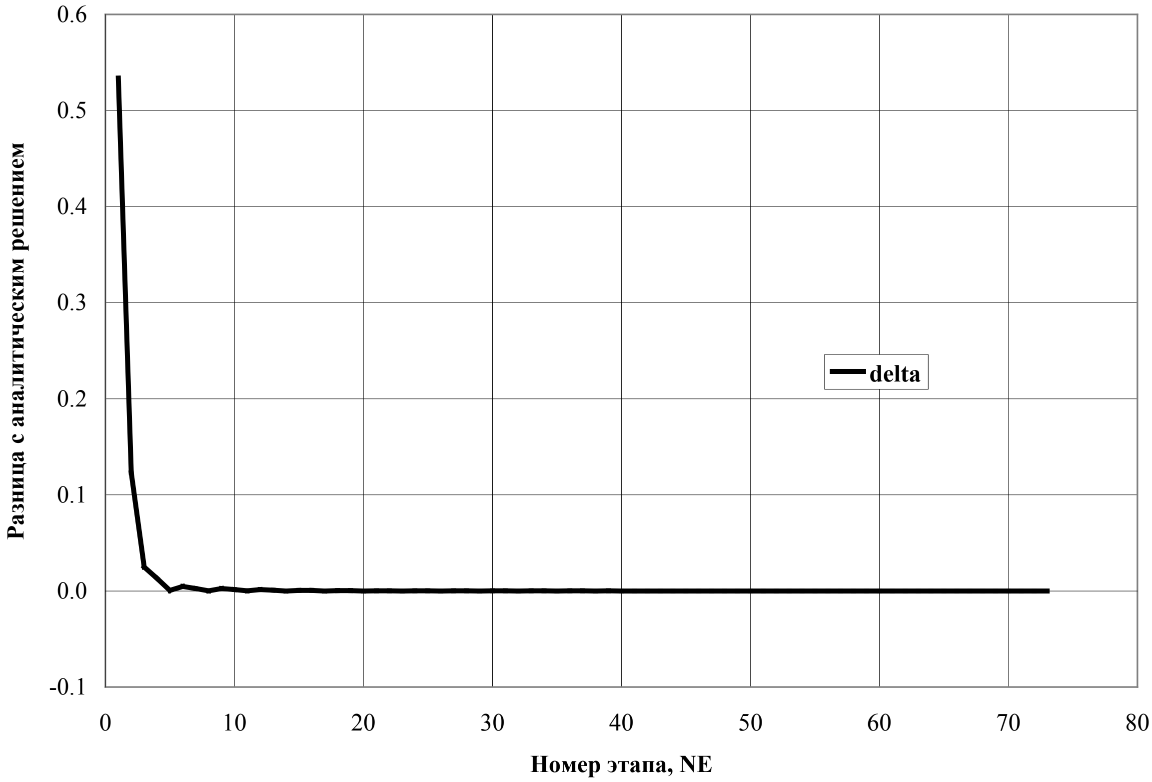

Рис. 4. Разница численного решения и аналитического

$$x_{ic} = \min x_i + y_{ixop}\left(\max x_i - \min x_i\right).$$

Затем, находятся новые границы области оптимизации

$$h_{iЛ} = x_{ic} - \min x_i,\ h_{iП} = \max x_i - x_{ic},$$

$$H_i = \min\left\{h_{iЛ}, h_{iП}\right\}.$$

Вычисляются новые ограничения для области оптимизации

$$\min x_i = x_{ic} - H,\ \max x_i = x_{ic} + H.$$

После чего, начинается новый этап оптимизации, начиная с модуля № 2 до модуля № 8. Если хотя бы одно из условий (8.1) — (8.3) не выполнено, то оптимизация прекращается и происходит переход на модуль № 9.

9. Конец оптимизации

Безразмерные координаты y_{ixop} «хорошей» точки F_{xop} переводятся по уравнениям, аналогичным в модуле № 5

$$x_{ixop} = \min x_i + y_{ixop}\left(\max x_i - \min x_i\right).$$

Результаты выдаются на печать, в файл или в другой модуль.

2. Верификация симплексного метода

Для проверки алгоритма использовалось нахождение корней в уравнении параболоида — поиск минимума функции. Функция была задана в следующем виде

$$Z = ax_1^2 + bx_2^2 - cx_1 - dx_2 + f, \qquad (1)$$

где коэффициенты, входящие в уравнение имеют следующие значения: $a = 0.5,\ b = 1,\ c = 3,\ d = 4,\ f = 9$. Данная функция имеет аналитическое решение в точке $x_{1M} = 3$, $x_{2M} = 2$, равное $z_M = 0.5$. Использовались следующие начальные приближения: $x_{1c} = 2$, $x_{2c} = 3$. Поиск минимума функции был задан в области, ограниченной следующими значениями: $0 \le x_{1M} \le 5$, $0 \le x_{2M} \le 5$.

В результате численного решения найдено значение функции равное $z_M = 0.500000983862495$. Отличие численного решения от аналитического, составляет 10–4%. Значения аргументов функции составляют $x_{1M} = 3.00118920738385$ и $x_{2M} = 1.99947392453677$. Как видно, из результатов расчета, отличие минимальное.

С целью иллюстрации удовлетворительной работы симплексного метода на рисунках 2–3 показаны интересующие значения в зависимости от номера этапа. На рисунке 2 показаны изменения значений «хорошей» вершины и двух «плохих». Изменения значений аргументов (переменные x_1 и x_2, входящие в уравнение (1)), приведены на рисунке 3. На рисунке 4 показано разница между численным решением и аналитическим. Как видно из рисунков, решение достигается, когда номер этапа равен 73.

Дополнительно, для верификации алгоритма оригинальной версии симплексного метода был проведен ряд расчетов (поиск минимума) с различными значениями коэффициентов a, b, c, d, f, входящими в уравнение (1), а также различными начальными приближениями и ограничениями. На примере десяти вариантов расчета обеспечивается решение выражения (1) симплексным методом. Максимальное значение абсолютной погрешности не превышает 5%.

Выводы

На основе имеющихся в литературе данных разработан алгоритм, в котором реализована оригинальная версия симплексного метода.

Алгоритм верифицирован на примере поиска минимума функции параболоида. Использовались различные начальные приближениями и ограничения. На примере десяти вариантов расчета обеспечивается удовлетворительное решение симплексным методом. Максимальное значение абсолютной погрешности не превышает 5%.

Получено, что оригинальная версия симплексного метода обеспечивает решение уравнения с двумя неизвестными с удовлетворительной точностью. Разработанный алгоритм можно распространить на решение уравнений с большим числом неизвестных, чем два.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бояринов А.И., Кафаров В. В. Методы оптимизации в химической технологии. М.: Химия, 575 с.
2. Spendley D.N., Hext G. R., Himsworth F. R., Technjmetrics, 1962, N4.

Журнал «Современная наука: актуальные проблемы теории и практики»

Российский Федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики