ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Лекция №3

Основные методы оптимизации. Часть 2

Дисциплина: Методы оптимизации и организации энерго- и ресурсосберегающих химико-технологических систем

Лектор: Киргина Мария Владимировна
к.т.н., доцент отделение Химической инженерии
Инженерной школы природных ресурсов

март
2018

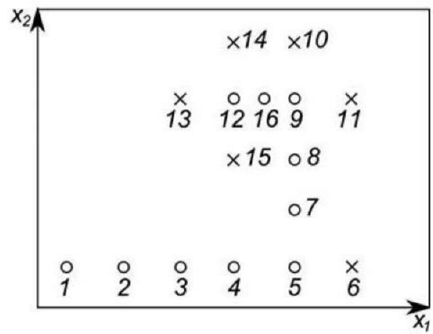
План лекции

- Метод покоординатного спуска
- Метод градиента
- Экспериментальный поиск оптимума
- Метод Бокса - Уилсона
- Метод крутого восхождения

Метод покоординатного спуска

- Два фактора.
- Поиск максимума.

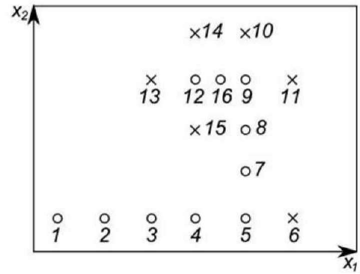
1. Выбираем координаты начальной точки поиска $\boldsymbol{x_{1H}}$ и $\boldsymbol{x_{2H}}$, (т.е. те значения $\boldsymbol{x_1}$ и $\boldsymbol{x_2}$, от которых будет искаться оптимум); единичные приращения обоих факторов (**шаги**) $\boldsymbol{H_1}$ и $\boldsymbol{H_2}$, а также малые приращения факторов $\boldsymbol{e_1}$ и $\boldsymbol{e_2}$.



Выбор величин определяется физическим смыслом задачи и той информацией о ней, которой мы располагаем заранее.

Метод покоординатного спуска

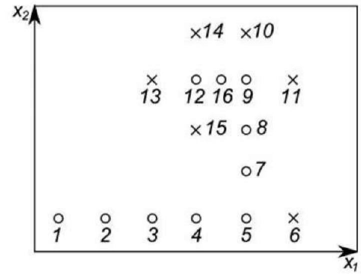
2. Рассчитываем значение $F(x_{1Н}, x_{2Н})$ в точке ***1***.
3. Не меняя величины x_2, двигаемся вдоль оси x_1, давая на каждом шаге фактору приращение H_1 (или $-H_1$, в зависимости от того, при движении в какую сторону будет наблюдаться рост ***F***).



4. На каждом шаге – в точках **2**, **3**, **4** и т.д. – проводится расчет ***F***.
5. Шаги продолжаются до тех пор, пока продолжается рост ***F***. Неудачными будем считать те шаги, на которых получено значение ***F*** меньшее, чем на предыдущих шагах.

Метод покоординатного спуска

6. После первого неудачного шага (точка **6**) возвращаемся в предыдущую точку (точка **5**).
7. Фиксируем величину $\boldsymbol{x_1}$ и начинаем изменять $\boldsymbol{x_2}$, давая ему приращения H_2 или $-H_2$ (точки **7**, **8**, **9**, **10**).



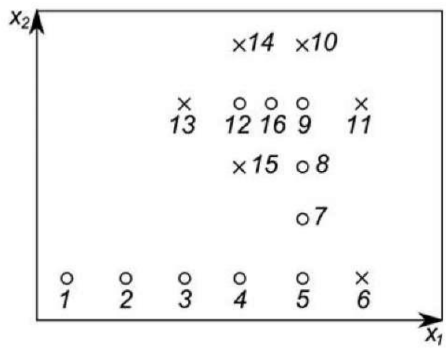
8. Затем снова движемся вдоль оси $\boldsymbol{x_1}$ (точки **11**, **12**, **13**), снова меняем направление (точки **14**, **15**) и т.д.
9. Из точки **12** двигаться некуда: во всех окружающих точках (**9**, **13**, **14**, **15**) значение $\boldsymbol{F}$ меньше, чем в данной. Мы приблизились к максимуму и прежние крупные шаги из точки **12** переносят нас через него.

Метод покоординатного спуска

10. Уменьшаем шаги (например, вдвое – точка **16**) и продолжаем поиск уменьшенными шагами. Уменьшение шага может производиться неоднократно.

11. Когда шаги оказываются меньше, чем соответственно $\boldsymbol{e}_1$ и $\boldsymbol{e}_2$, логично считать, что **максимум зафиксирован** достаточно точно и можно закончить расчет, приняв лучшую точку за оптимум.

Если факторов больше двух, то после движения вдоль осей x_1 и x_2 производится движение вдоль осей x_3, x_4 и т.д. и лишь затем снова начинается движение вдоль x_1.



Метод градиента

- ✓ Два фактора.
- ✓ Поиск максимума.

Градиент – вектор, своим направлением указывающий направление наибольшего возрастания некоторой величины, значение которой меняется от одной точки пространства к другой, а по величине (модулю) равный скорости роста этой величины в этом направлении.

1. Выбираем координаты начальной точки $\boldsymbol{x}_{1H}$ и $\boldsymbol{x}_{2H}$, шаги $\boldsymbol{H_1}$ и $\boldsymbol{H_2}$ и малые приращения $\boldsymbol{e}_1$ и $\boldsymbol{e}_2$.
2. Движение к оптимуму начинаем не вдоль оси координат, а в направлении градиента ***(если ищется минимум, то в противоположном градиенту направлении***).

Метод градиента

3. Поскольку $\boldsymbol{H_1}$ и $\boldsymbol{H_2}$ приняты за единичные приращения координат, формула градиента имеет вид:

$$\mathrm{grad}F = \frac{\partial F}{\partial x_1} H_1 + \frac{\partial F}{\partial x_2} H_2$$

4. Для расчета направления градиента необходимо знать частные производные целевой функции по факторам. Для расчета производных проводится вспомогательная серия расчетов.

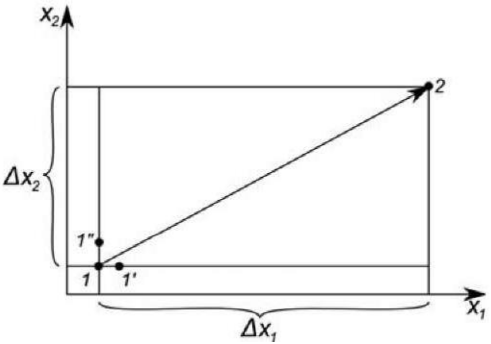
Метод градиента

5. Около начальной точки **1** ставятся две вспомогательные точки: **1'** на расстоянии $\boldsymbol{e_1}$ вдоль оси $\boldsymbol{x_1}$ и **1"** на расстоянии $\boldsymbol{e_1}$ вдоль оси $\boldsymbol{x_2}$, в них рассчитывается функция $\boldsymbol{F}$.

6. Производные находим по формулам:

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = \frac{F(x_1 + e_1, x_2) - F(x_1, x_2)}{e_1}$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_2} = \frac{F(x_1, x_2 + e_2) - F(x_1, x_2)}{e_2}$$

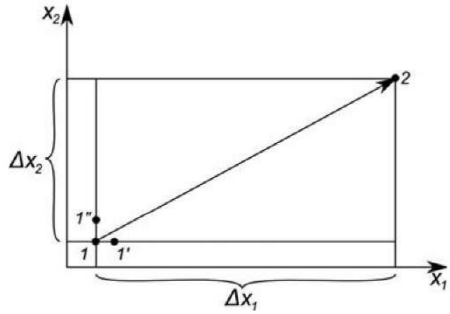


Метод градиента

7. После этого делаем шаг в точку **2** для следующего расчета ***F***. Ее координаты рассчитываются как:

$$x_{i+1,\mathrm{j}} = x_{ij} + \Delta x_j$$

$$\Delta x_j = \frac{\partial F}{\partial x_j} H_j$$



Здесь ***i*** – номер точки; ***j*** – номер фактора.

Метод градиента

8. Если шаг оказался удачным, можно определить производные в новой точке ***i*+1**, найти новое направление градиента, сделать шаг и т.д.

9. Можно действовать иначе: если шаг оказался удачным, т.е. если $F_{i+1} > F$ (при поиске максимума), то делают следующий шаг в том же направлении, подставляя в формулу ранее найденные значения производных:

$$\Delta x_j = \frac{\partial F}{\partial x_j} H_j$$

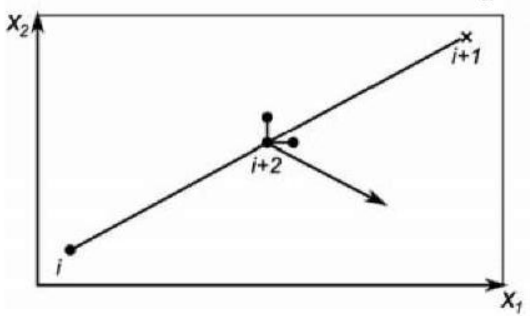
Это будет уже не направление градиента, но есть вероятность, что еще один шаг в прежнем направлении снова даст приращение ***F*** нужного знака, хотя и не максимально возможное *(так как от градиента отклонились).*

10. Если шаг удачен, делаем еще один шаг и т.д.

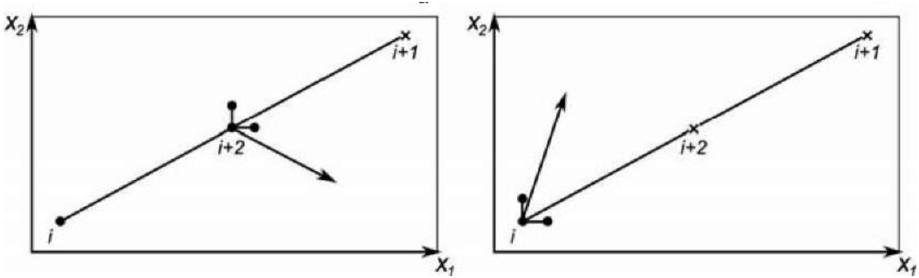
Метод градиента

11. Если шаг неудачен, т.е. $F_{i+1} < F$ (при поиске максимума) – ***это означает, что поверхность искривлена, данное направление перестало вести нас вверх, мы «перескочили» через ту окрестность предыдущей точки, в которой функция возрастала.***

12. Уменьшают шаг (например вдвое). Если уменьшенный шаг в том же направлении будет удачен, нет смысла делать еще шаг, поскольку он приведет в «плохую» точку.



Метод градиента



13. Около точки ***i*+2** поставляются вспомогательные точки для расчета производных, находим новое направление градиента и двигаемся по нему.

14. Если же и уменьшенный шаг не приведет в «хорошую» точку, то возвращаемся в точку ***i*** и ищем в ней направление градиента.

Метод градиента

15. Движение продолжается до тех пор, пока шаги не станут очень маленькими. Для **останова** вычислений используется момент, когда оба приращения Δx_{ij} окажутся меньше, чем соответствующие малые величины e_j.

Уменьшение шагов объясняется:

- ✓ неоднократным уменьшением в тех случаях, когда большой шаг оказывался неудачным;
- ✓ вблизи оптимума производные близки к нулю и формула дает уже очень малые приращения.

Экспериментальный поиск оптимума

Наиболее сложен для оптимизации случай, когда вида целевой функции неизвестен.

Единственная возможность находить оптимум – экспериментально.

Необходимо учитывать ряд обстоятельств:

- ✓ вследствие наличия случайных ошибок опытные точки нельзя располагать слишком близко друг к другу. ***Значения критерия оптимальности, полученные в соседних точках, окажутся неразличимыми, различия в величине критерия будут значительно меньше уровня ошибки.***

Экспериментальный поиск оптимума

Необходимо учитывать ряд обстоятельств:

- ✓ в эксперименте гораздо острее, чем в расчете, стоит проблема эффективности поиска.
- ✓ при экспериментальной оптимизации характер зависимости ***F*** от факторов, как правило, бывает проще, чем при расчетной.

Ошибки опытов «сглаживают рельеф» целевой функции.

В эксперименте обычно можно работать с простейшими математическими моделями – многочленами 1-го или 2-го порядков.

Экспериментальный поиск оптимума

В планировании эксперимента метод покоординатного спуска называют **методом Гаусса - Зайделя**.

От опыта к опыту изменяется только один фактор и влияние этого фактора получается в ясной форме однофакторной зависимости.

Главное преимущество метода – простота.
Главный недостаток – малая эффективность.

Метод Бокса - Уилсона

** разработан в начале 1950-х годов.*

Ставится одна или несколько серий опытов, цель которых – приблизиться к оптимуму по градиенту функции, а затем вблизи экстремума ставится план 2-го порядка и отыскивают оптимум.

В планировании эксперимента градиентный метод движения к оптимуму называют **крутым восхождением**.

Отличия от метода градиента, обусловлены ошибками опытов. Для расчета частных производных, приращения ***е*** *должны быть малы; при малых расстояниях между точками сильно скажутся ошибки опытов и оценка направления градиента будет неточна.*

Метод крутого восхождения

1. Вокруг исходной точки как центра строится факторный эксперимент **2^p** или дробный факторный эксперимент.
2. Зависимость отклика от факторов описывается многочленом 1-й степени:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \ldots + b_p x_p$$

3. Тогда частные производные равны соответствующим коэффициентам регрессии:

$$\frac{\partial y}{\partial x_j} = b_j \quad j = 1, 2, \ldots, p$$

Метод крутого восхождения

4. Принимая за единичный шаг в направлении каждой оси u_j интервал варьирования $\boldsymbol{\delta_j}$ формула:

$$\Delta x_j = \frac{\partial F}{\partial x_j} H_j$$

примет вид:

$$\Delta u_j = b_j \delta_j m \quad j = 1, 2, ..., p$$

m – множитель, регулирующий длину шага.

$$m - \frac{1}{\left|b_j\right|_{\text{макс}}} \quad j \neq 0$$

Выражение в знаменателе – наибольшая из абсолютных величин коэффициентов регрессии, за исключением свободного члена.

Метод крутого восхождения

5. Движение по направлению крутого восхождения продолжается до тех пор, пока ***y*** возрастает (либо убывает, если мы ищем минимум).
6. После этого либо ставят новый факторный эксперимент и находят новое направление градиента, либо переходят к плану 2-го порядка.

Классическая классификация

Классификация методов решения задач оптимизации:

1. **Методы исследования функций классического анализа.**
2. **Метод множителей Лагранжа.**
   вместо решения системы конечных уравнении для отыскания оптимума необходимо интегрировать систему дифференциальных уравнений.
3. **Методы вариационного исчисления.**
   применяются для решения задач, в которых критерии оптимальности представляются в виде функционалов.
4. **Динамическое программирование.**
   применяются для решения задач оптимизации дискретных многостадийных процессов, для которых общий критерий оптимальности описывается аддитивной функцией критериев оптимальности отдельных стадий.

Классическая классификация

Классификация методов решения задач оптимизации:

5. **Принцип максимума.**
   применяются для решения задач оптимизации процессов, описываемых системами дифференциальных уравнений.
6. **Линейное программирование.**
   применяются для решения задач оптимизации с линейными выражениями для критерия оптимальности и линейными ограничениями на область изменения переменных.
7. **Методы нелинейного программирования.**