в) метод Нелдера-Мида (деформируемого многогранника)

В 1964 году Нелдер и Мид предложили модификацию, в которой симплекс может изменять свою форму (растягиваясь и сжимаясь) в зависимости от свойств поверхности целевой функции. Так как в этом случае симплекс не будет уже регулярным, метод назвали поиском по деформируемому многограннику.

Модифицируем рассмотренный в п.б алгоритм минимизации целевой функции по регулярному симплексу, добавив к процедуре отражения при построении нового симплекса процедуры сжатия и растяжения. Геометрическая иллюстрация этих процедур для случая представлена на рис. 3.20, где введены следующие обозначения:

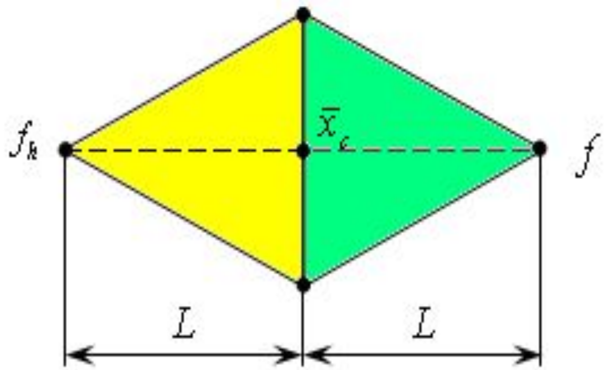
f_h - наибольшее значение целевой функции;

f_s - следующее по величине за наибольшим значение целевой функции;

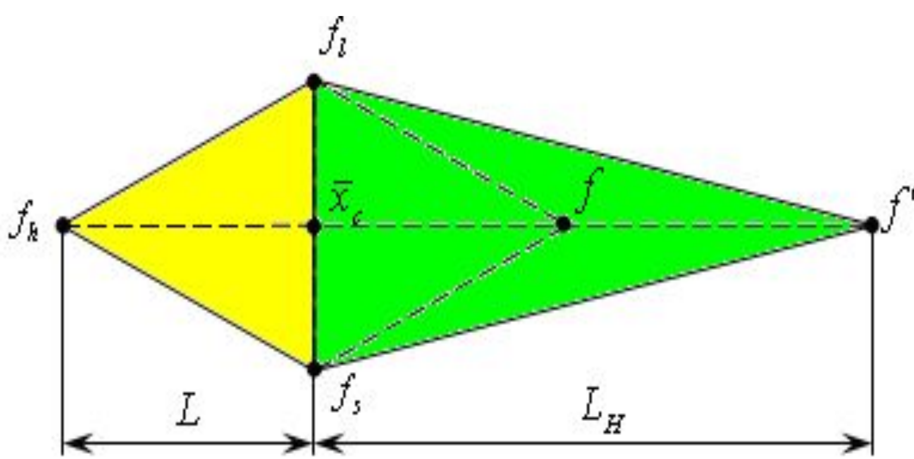
f_l - наименьшее значение целевой функции;

$f, f^{/}$- текущие значения целевой функции.

а) операция отражения



б) если $f < f_l$, то выполняется операция растяжения $L_H = \beta L$,
где β - параметр растяжения



в) если $f_s < f < f_h$, то выполняется операция сжатия $L_H = \gamma L$,
где γ - параметр сжатия

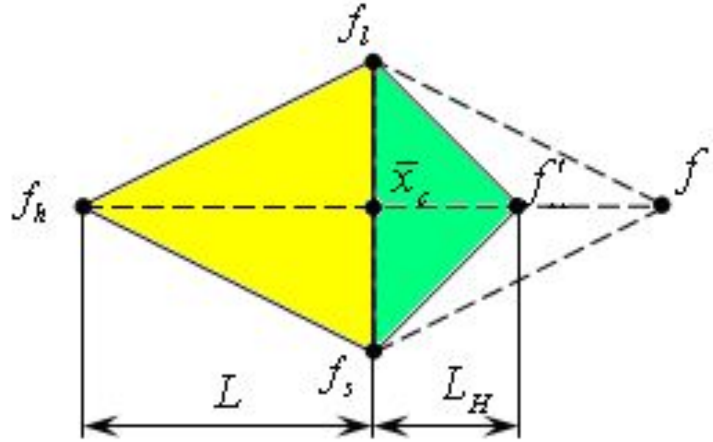


Рис. 3.20. Правила деформации симплекса

При решении практически задач минимизации параметры растяжения β и сжатия γ Нелдер и Мид рекомендует брать $\beta = 2$, $\gamma = 0{,}5$, Павиани – выбирать эти параметры из интервалов

$$2{,}8 \le \beta \le 3{,}0\,;$$

$$0{,}4 \le \gamma \le 0{,}6\,.$$

Алгоритм поиска методом Нелдера-Мида

1. Задать размерность задачи оптимизации n, координаты начальной точки многогранника $\overline{x^{(0)}} = \left(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)}\right)$, длину ребра многогранника m, параметр растяжения β, параметр сжатия γ, точность поиска ε.
2. Построить начальный многогранник в виде регулярного симплекса, вычисляя координаты остальных n вершин $\overline{x^{(1)}}, \overline{x^{(2)}}, \ldots, \overline{x^{(n)}}$ по формулам (3.22).

3. Определить номер вершины k с наибольшим значением целевой функции $f_h = f(\overline{x^{(k)}})$, номер вершины k_1 с наименьшим значением целевой функции $f_l = f(\overline{x^{(k_1)}})$ и номер вершины k_2 - со следующим по величине за наибольшим значением целевой функции $f_s = f(\overline{x^{(k_2)}})$.
4. Определить центр тяжести всех вершин многогранника за исключением вершины $\overline{x^{(k)}}$:

$$\overline{x_c} = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} \overline{x^{(i)}}.$$

5. Отразить вершину $\overline{x^{(k)}}$ относительно центра тяжести $\overline{x} = 2\overline{x}_c - \overline{x^{(k)}}$. Вычислить значение целевой функции $f(\overline{x})$ в отраженной точке и перейти к пункту 6.

6. Проверить условие. Если $f(\overline{x}) < f(\overline{x^{(k)}})$, то операция отражения закончилась успешно. Положить $\overline{x^{(k)}} = \overline{x}$, $f(\overline{x^{(k)}}) = f(\overline{x})$ и перейти к пункту 7. В противном случае перейти к пункту 9 и выполнить операцию сжатия.

7. Проверить условие. Если $f(\overline{x^{(k)}}) < f_l$, то выполнить операцию растяжения

$$\overline{x} = \overline{x_c} + \beta \cdot (\overline{x^{(k)}} - \overline{x_c}),$$

вычислить значение целевой функции $f(\overline{x})$ и перейти к пункту 8, иначе – к пункту 9.

8. Проверить условие. Если $f(\overline{x}) < f(\overline{x^{(k)}})$, то операция растяжения закончилась успешно. Положить $\overline{x^{(k)}} = \overline{x}$, $f(\overline{x^{(k)}}) = f(\overline{x})$ и перейти к пункту 12, иначе – к пункту 9.

9. Проверить условие. Если $f_s < f(\bar{x}) < f_h$, то выполнить операцию сжатия

$$\bar{x} = \bar{x}_c + \gamma(\overline{x^{(k)}} - \bar{x}_c)$$

вычислить значение целевой функции $f(\bar{x})$ и перейти к пункту 10, иначе к пункту 11.

10. Проверить условие. Если $f(\bar{x}) < f(\overline{x^{(k)}})$, то операция сжатия закончилась успешно. Положить $\overline{x^{(k)}} = \bar{x}$, $f(\overline{x^{(k)}}) = f(\bar{x})$ и перейти к пункту 12, иначе к пункту 11.

11. Выполнить операцию редукции. Для этого определить номер вершины r с минимальным значением целевой функции $f_{\min} = f(\overline{x^{(r)}})$. Используя соотношение

$$\overline{x^{(i)}} = \overline{x^{(r)}} + 0{,}5 \cdot (\overline{x^{(i)}} - \overline{x^{(r)}}), \quad i = \overline{0, n}, \; i \neq r$$

сформировать новый многогранник с уменьшенными вдвое сторонами. Перейти к шагу 12.

12. Проверить критерий окончания процесса поиска, предложенный Нелдером и Мидом

$$\sigma = \left\{ \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^{n} \left[f(\overline{x^{(i)}}) - f(\overline{x_c}) \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} < \varepsilon \ ,$$

где $\overline{x_c} = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^{n} \overline{x^{(i)}}$ - центр тяжести многогранника на данном шаге.

13. Если условие выполнено $\sigma < \varepsilon$, то процесс вычислений завершен. В качестве приближенного решения принять вершину многогранника с минимальным значением целевой функции. В противном случае перейти к шагу 3 и продолжить процесс итераций.

Пример 3.9. Найти минимум целевой функции

$$f(\overline{x}) = x_1^2 - x_1 x_2 + 3x_2^2 - x_1$$

методом Нелдера-Мида с точностью $\varepsilon = 0,1$.

Решение. Зададим начальную точку симплекса $\overline{x^{(0)}} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)})^T = (0,0)^T$, длину ребра симплекса $m = 1$, параметр растяжения $\beta = 2,8$, параметр сжатия $\gamma = 0,4$.

Вычислим приращения

$$\delta_1 = \left(\frac{\sqrt{n+1} - 1}{n\sqrt{2}} \right) \cdot m = \left(\frac{\sqrt{3} - 1}{2\sqrt{2}} \right) \cdot 1 = 0,259;$$

$$\delta_2 = \left(\frac{\sqrt{n+1} + n - 1}{n\sqrt{2}} \right) \cdot m = \left(\frac{\sqrt{3} + 2 - 1}{2\sqrt{2}} \right) \cdot 1 = 0,966.$$

Используя δ_1 и δ_2 вычислим координаты двух остальных вершин симплекса

$$\overline{x^{(1)}} = (x_1^{(0)} + \delta_1; x_2^{(0)} + \delta_2)^T =$$

$$= (0 + 0{,}259; 0 + 0{,}966)^T = (0{,}259; 0{,}966)^T \ ;$$

$$\overline{x^{(2)}} = (x_1^{(0)} + \delta_2; x_2^{(0)} + \delta_1)^T =$$

$$(0 + 0{,}966; 0 + 0{,}259)^T = (0{,}966; 0{,}259)^T .$$

Итерация 0. Вычислим значения целевой функции $f(\overline{x})$ в вершинах $\overline{x^{(0)}}$, $\overline{x^{(1)}}$, $\overline{x^{(2)}}$ и обозначим наибольшее значение функции f_h, следующее за наибольшим значением f_s, наименьшее значение функции f_l.

$$f_s = f(\overline{x^{(0)}}) = 0, \quad f_h = f(\overline{x^{(1)}}) = 2{,}357, \quad f_l = f(\overline{x^{(2)}}) = -0{,}082.$$

Наибольшее значение целевой функции соответствует вершине $\overline{x^{(1)}}$ отразим ее относительно центра тяжести вершин $\overline{x^{(0)}}$ и $\overline{x^{(2)}}$.

$$\overline{x}_{c1} = \frac{1}{2}(x_1^{(0)} + x_1^{(2)};\ x_2^{(0)} + x_2^{(2)})^T = (0{,}483;\ 0{,}129)^T.$$

Используя свойство регулярности, найдем координаты отраженной вершины

$$\overline{x^{(3)}} = 2\overline{x_{c1}} - \overline{x^{(1)}} =$$

$$= 2(0{,}483;\ 0{,}129)^T - (0{,}259; 0{,}966)^T =$$

$$= (0{,}707; -0{,}707)^T. \quad f(\overline{x^{(3)}}) = 1{,}793.$$

Так как $f(\overline{x^{(3)}}) < f(\overline{x^{(1)}})$, то **отражение удачно.**

Условие растяжения $f(\overline{x^{(3)}}) < f_l$ не выполняется.

Так как выполняется условие

$$f_s = 0 < f(\overline{x^{(3)}}) = 1{,}793 < f_h = 2{,}357,$$

то выполним операцию сжатия симплекса

$$\overline{x^{(4)}} = \overline{x}_{c1} + 0{,}4(\overline{x^{(3)}} - \overline{x}_{c1}) =$$

$$= (0{,}483; 0{,}129)^T + 0{,}4[(0{,}707; -0{,}707)^T - (0{,}483; 0{,}129)^T] =$$

$$= (0{,}573; -0{,}205)^T.$$

Так как $f(\overline{x^{(3)}}) < f(\overline{x^{(4)}})$, то **операция сжатия закончилась удачно.**

Следовательно текущий симплекс образован вершинами

$$\overline{x^{(0)}}, \quad f(\overline{x^{(0)}}) = 0,$$

$$\overline{x^{(2)}}, \quad f(\overline{x^{(2)}}) = -0{,}082,$$

$$\overline{x^{(4)}}, \quad f(\overline{x^{(4)}}) = -0{,}001.$$

Проверим условие окончания поиска. Определим координаты центра тяжести симплекса

$$\overline{x_c} = \frac{1}{3}(\overline{x_1^{(0)}} + \overline{x_1^{(2)}} + \overline{x_1^{(4)}};\ \overline{x_2^{(0)}} + \overline{x_2^{(2)}} + \overline{x_2^{(4)}}) =$$

$$\frac{1}{3}(0 + 0{,}966 + 0{,}573;\ 0 + 0{,}259 - 0{,}205)^T = (0{,}513; 0{,}018)^T,$$

$$f(\overline{x_c}) = -0{,}258\,.$$

Вычислим $$\left\{\frac{1}{n+1}\cdot\sum_{i=0}^{2}\left[f(\overline{x^{(i)}}) - f(\overline{x_c})\right]^2\right\}^{\frac{1}{2}} =$$

$$= \left\{\frac{1}{3}\left[(0 + 0{,}258)^2 + (-0{,}082 + 0{,}258)^2 + (-0{,}001 + 0{,}258)^2\right]\right\}^{\frac{1}{2}} =$$

$$= 0{,}234 > \varepsilon$$

Процесс итераций продолжается.

Итерация 1. Текущий симплекс образован вершинами $\overline{x^{(0)}}$, $\overline{x^{(2)}}$, $\overline{x^{(4)}}$, которым соответствует значение целевой функции

$$f_h = f(\overline{x^{(0)}}) = 0,$$

$$f_l = f(\overline{x^{(2)}}) = -0{,}082,$$

$$f_s = f(\overline{x^{(4)}}) = -0{,}001.$$

Отразим вершину $\overline{x^{(0)}}$ относительно центра тяжести вершин $\overline{x^{(2)}}$ и $\overline{x^{(4)}}$

$$\bar{x}_{c2} = \frac{1}{2}(x_1^{(2)} + x_1^{(4)};\ x_2^{(2)} + x_2^{(4)})^T = (0{,}769;\ 0{,}027)^T.$$

Используя свойство регулярности, найдем координаты отраженной вершины

$$\overline{x^{(5)}} = 2\bar{x}_{c2} - \overline{x^{(0)}} = 2 \cdot (0{,}769;\ 0{,}027)^T - (0;0)^T = (1{,}539;0{,}054)^T,$$

$$f(\overline{x^{(5)}}) = 0{,}755.$$

Так как $f(\overline{x^{(0)}}) < f(\overline{x^{(5)}})$, то операция отражения закончилась неудачей. Учитывая, что условие сжатия $f_s < f(\overline{x^{(5)}}) < f_h$ также не выполнено, проведем операцию редукции.

Сформируем новый многогранник с уменьшенными вдвое сторонами и вершиной $\overline{x^{(2)}}$, которой соответствует наименьшее значение целевой функции $f_l = f(\overline{x^{(2)}}) = -0{,}082$

$$\overline{x^{(6)}} = \overline{x^{(2)}} + 0{,}5 \cdot (\overline{x^{(0)}} - \overline{x^{(2)}}) =$$

$$= (0{,}966\,;\,0{,}259)^T + 0{,}5 \cdot \left[(0\,;\,0)^T - (0{,}966\,;\,0{,}259)^T\right] =$$

$$= (0{,}483\,;\,0{,}129)^T, \qquad f(\overline{x^{(6)}}) = -0{,}262,$$

$$\overline{x^{(7)}} = \overline{x^{(2)}} + 0{,}5 \cdot (\overline{x^{(4)}} - \overline{x^{(2)}}) =$$

$$= (0{,}966\,;\,0{,}259)^T + 0{,}5 \cdot \left[(0{,}573\,;\,-0{,}205)^T - (0{,}966\,;\,0{,}259)^T\right] =$$

$$= (0{,}769\,;\,0{,}027)^T, \qquad f(\overline{x^{(7)}}) = -0{,}196.$$

После операции редукции текущий многогранник образован вершинами $\overline{x^{(2)}}$, $\overline{x^{(6)}}$, $\overline{x^{(7)}}$, которым соответствует значение целевой функции

$$f(\overline{x^{(2)}}) = -0{,}082\,,\quad f(\overline{x^{(6)}}) = -0{,}262\,,\quad f(\overline{x^{(7)}}) = -0{,}196\,.$$

Проверим условие окончания поиска. Определим координаты центра тяжести симплекса

$$\overline{x_c} = \frac{1}{3}(\overline{x_1^{(2)}} + \overline{x_1^{(6)}} + \overline{x_1^{(7)}};\; \overline{x_2^{(2)}} + \overline{x_2^{(6)}} + \overline{x_2^{(7)}}) =$$

$$= \frac{1}{3}(0{,}966 + 0{,}483 + 0{,}769;\; 0{,}259 + 0{,}129 + 0{,}027)^T =$$

$$= (0{,}739; 0{,}138)^T;\quad f(\overline{x_c}) = 0{,}238\,.$$

Вычислим

$$\left\{\frac{1}{n+1}\cdot\sum_{i=0}^{2}\left[f(\overline{x^{(i)}})-f(\overline{x_c})\right]^2\right\}^{\frac{1}{2}}=$$

$$=\left\{\frac{1}{3}\cdot\left[(-0{,}082+0{,}238)^2+(-0{,}262+0{,}238)^2+(-0{,}196+0{,}238)^2\right]\right\}^{\frac{1}{2}}=$$

$$=0{,}094<\varepsilon.$$

Так как условие окончания поиска выполняется, то **процесс итераций завершен.**

В качестве приближенного значения выбирается вершина с наименьшим значением целевой функции текущего симплекса, образованного вершинами $\overline{x^{(2)}}, \overline{x^{(6)}}, \overline{x^{(7)}}$:

$$\overline{x^{*}} = \overline{x^{(6)}} = (0{,}438; 0{,}129)^{T},$$

$$f(\overline{x^{*}}) = -0{,}262.$$

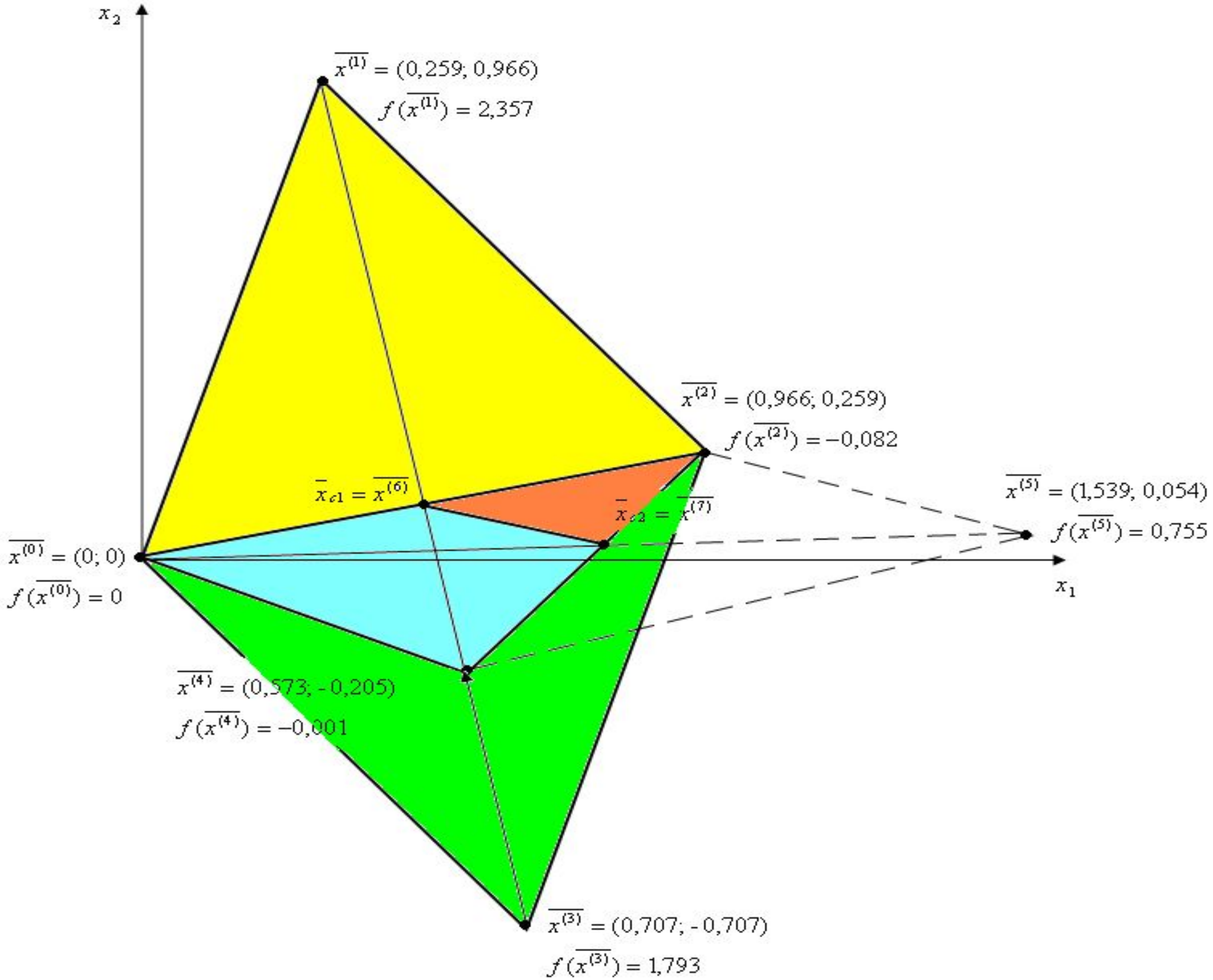


Рис. 3.21. Итерации поиска методом Нелдера - Мида в примере 3.9