

VYSOKÁ ŠKOLA STROJNÍ A TEXTILNÍ V LIBERCI

Fakulta strojní

Leoš HAVRDA

Globální optimalizace funkcí více proměnných

Diplomová práce

1994

VYSOKÁ ŠKOLA STROJNÍ A TEXTILNÍ V LIBERCI

Fakulta strojní

Obor 23-40-8

Automatické systémy řízení výrobních procesů ve strojírenství
Katedra technické kybernetiky

Globální optimalizace funkcí více proměnných

Autor: Leoš Havrda

Vedoucí práce: Ing. Václav Záda, CSc., KTK, VŠST Liberec

Rozsah diplomové práce: 49 stran

VYSOKÁ ŠKOLA STROJNÍ A TEXTILNÍ V LIBERCI

Fakulta strojní

Katedra technické kybernetiky

Školní rok: 1993/94

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

pro Leoše HAVRDU

obor 23-40-8 Automatizované systémy řízení výrobních procesů
ve strojírenství

Vedoucí katedry Vám ve smyslu zákona č. 172/1990 Sb. o vysokých školách určuje tuto diplomovou práci:

Název tématu:

Globální optimalizace funkcí více proměnných

Zásady pro vypracování:

1. Seznámit se s metodami optimalizace funkcí více proměnných
2. Důkladně prostudovat metodu globální optimalizace navrženou v práci /1/
3. Metodu z bodu 2., resp. i další metody, aplikovat na několika konkrétních příkladech, provést porovnání rychlosti konvergence z hlediska doby trvání výpočtu i z hlediska počtu potřebných kroků
4. Provéřít změny parametrů u metody dle bodu 2. na konvergenci, viz bod 3, u několika málo vybraných úloh

VYSOKÁ ŠKOLA STROJNÍ A TEXTILNÍ

Univerzitní knihovna

Voroněžská 1329, Liberec 1

PSČ 461 17

KTK/ASR-S

V/141/94S

Rozsah grafických prací:

Rozsah průvodní zprávy:

40-50 stran

Seznam odborné literatury:

- /1/ Záda, V.: Globální optimalizace se spline aproximací.
Koloquium ČSFR-BRD Zittau, listopad 1992
- /2/ Maňas, M.: Optimalizační metody. SNTL, Praha 1979
- /3/ Hamala, M.: Nelineárne programovanie. Alfa, Bratislava 1992

Vedoucí diplomové práce: Ing. Václav Záda, CSc.

Konzultant:

Zadání diplomové práce: 31.10.1993

Termín odevzdání diplomové práce: 27. 5.1994



Vedoucí katedry

Doc. Ing. Vojtěch Konopa, CSc.

Děkan

Prof. Ing. Jaroslav Exner, CSc.

V Liberci

dne 29.10. 1993

Místopřísežně prohlašuji, že jsem diplomovou práci
vypracoval samostatně a s použitím uvedené literatury.

Leoš Havrda

Leoš HAVRDA

V Huntířově nad Jizerou

dne 27. května 1994

P O D Ě K O V Á N Í

Úvodem své práce si dovoluji srdečně poděkovat vedoucímu
diplové práce

Ing. Václavu Zádovi, CSc.,

který mi poskytl odborné vedení, cenné rady a připomínky při
zpracování diplomové práce.

OBSAH DIPLOMOVÉ PRÁCE

	str.
Titulní list	1
Úvodní list	2
Zadání diplomové práce	3
Místopřisežné prohlášení	4
Poděkování	5
1.0. ÚVOD	8
2.0. POPIS JEDNOTLIVÝCH SKUPIN METOD	9
2.1. Skupina metod určení extrému bez derivování funkce	9
2.2. Skupina metod určení extrému pomocí prvních, resp. i druhých derivací funkce	9
3.0. ALGORITHMY VYBRANÝCH METOD	10
3.1. Metoda globální optimalizace se spline-aproximací	10
3.1.1. Popis parametrů metody	11
3.1.2. Formulace úlohy	12
3.1.3. Algoritmus metody	13
3.1.4. Interpolace kubickými spline funkcemi	14
3.1.5. Řešení třídiagonálního systému lineárních rovníc	17
3.1.6. Globální minimum spline funkce	18
3.2. Metoda flexibilního simplexu	20
3.2.1. Algoritmus metody flexibilního simplexu	20
3.3. Metoda gradientu (metoda největšího spádu)	22
3.3.1. Algoritmus gradientních metod	22
3.4. Metoda Gaussova	24

3.4.1.	Princip Gaussovy metody	24
4.0.	POROVNÁNÍ VYBRANÝCH METOD Z HLEDISKA DOBY TRVÁNÍ A POČTU POTŘEBNÝCH KROKŮ	25
4.1.	Celkové porovnání jednotlivých metod	31
4.2.	Doplnění metody globální optimalizace se spline-aproximací	32
5.0.	VLIV PARAMETRŮ U METODY GLOBÁLNÍ OPTIMALIZACE SE SPLINE-APROXIMACÍ NA KONVERGENCI	34
5.1.	Vliv parametru k	34
5.2.	Vliv parametru h	36
6.0.	POPIS PROGRAMU	38
6.1.	Programová realizace	39
7.0.	APLIKACE GLOBÁLNÍ OPTIMALIZACE	41
7.1.	Aplikace na návrh regulátoru podle kvadratického kritéria	41
7.1.1.	Zadání úlohy	41
7.1.2.	Řešení úlohy	41
7.2.	Aplikace na návrh regulátoru podle zobecněného kvadratického kritéria	44
7.2.1.	Zadání úlohy	44
7.2.2.	Řešení úlohy	44
8.0.	ZÁVĚR	47
	Seznam příloh	48
	Použitá literatura	49

1.0. ÚVOD

Rychlý rozvoj průmyslové výroby vyžaduje odpovídající rozvoj regulační techniky. V řízení strojírenských procesů jsou nezbytné řídicí a zabezpečovací systémy. Aby bylo možno správně nastavit tyto systémy, je v některých případech vhodné použít globální optimalizace funkcí více proměnných.

Globální optimalizací funkce více proměnných se rozumí nalezení nejvyšší nebo nejnížší hodnoty z určené definiční oblasti funkce.

Globální optimalizace se může například použít k:

- a) seřízení regulátorů pro řízení strojírenských procesů
- b) optimalizaci řezných podmínek při obrábění
- c) identifikaci dynamických systémů
- d) projektování technologických zařízení
- a další.

Na jednotlivé proměnné jsou v mnoha případech kladeny omezující podmínky vycházející z předpokladu, že parametry systému nemohou nabývat jakýchkoli hodnot. V literatuře je známa celá řada optimalizačních metod, z nichž velká většina konverguje pouze k lokálnímu extrému. Proto je nutné mít k dispozici metodu umožňující s vysokou pravděpodobností nalézt globální extrém. V této práci se zabýváme právě porovnáním algoritmu, který tuto vlastnost splňuje, s ostatními běžnými algoritmy určujícími pouze lokální extrém.

Metody optimalizace lze rozdělit na dvě skupiny. Do první skupiny patří metody nalezení extrému bez derivování funkce. Do druhé skupiny patří metody určení extrému pomocí prvních, respektive i druhých derivací funkce.

2.0. POPIS JEDNOTLIVÝCH SKUPIN METOD

2.1. Skupina metod určení extrému bez derivování funkce

Tato skupina metod používá k nalezení extrému účelové funkce pouze analytický tvar funkce. Z tohoto důvodu jsou algoritmy těchto metod obecně jednodušší, a protože vycházejí při hledání extrému pouze z jednoho údaje (tím je zadaná funkce) jsou obecně pomalejší.

Metody je vhodné použít v těchto případech:

- a) účelová funkce obsahuje nespojitosti, respektive není hladká a pod.
- b) účelová funkce je složitá a určení jejich parciálních derivací, tj. prvních, respektive i druhých, by trvalo neúměrně dlouho.

Pro účely této práce byly vybrány následující metody určení extrému bez derivování funkce:

- metoda globální optimalizace se spline-aproximací
- metoda flexibilního simplexu
- metoda Gaussova

2.2. Skupina metod určení extrému pomocí prvních, resp. i druhých derivací funkce

Tyto metody obecně rychleji naleznou extrém než metody nalezení extrému bez derivování funkce, protože využívají k výpočtu první, případně i druhé parciální derivace účelové funkce. V důsledku toho, že se tyto parciální derivace používají, bývají algoritmy těchto metod složitější.

Tyto metody se používají v případech, kdy potřebujeme nalézt extrém velmi rychle a pro funkce, u kterých lze snadno určit první resp. i druhou parciální derivaci.

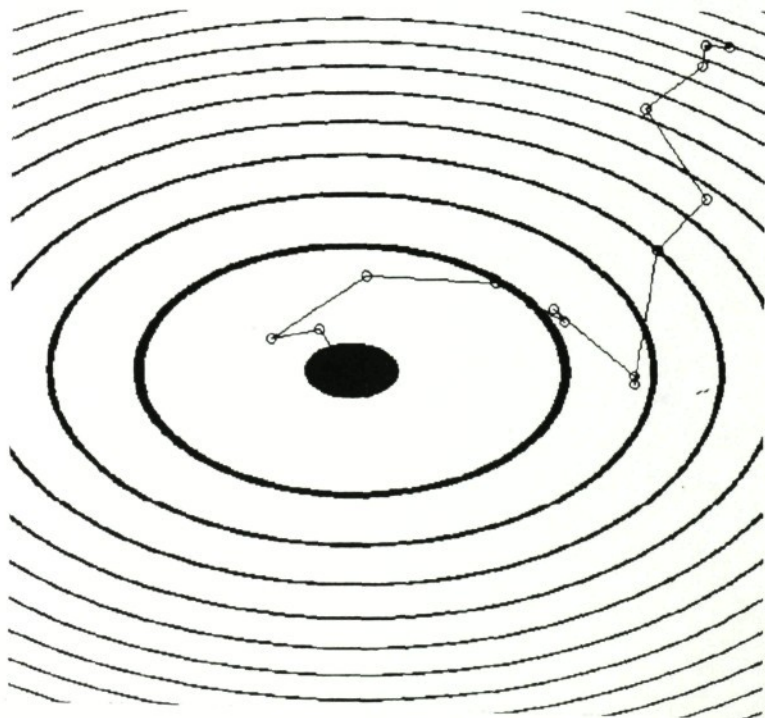
Pro účely této práce byla vybrána metoda gradientu.

3.0. ALGORITMY VYBRANÝCH METOD

3.1. Metoda globální optimalizace se spline-aproximací

Metoda globální optimalizace se spline-aproximací byla vybrána pro její vysokou pravděpodobnost nalezení globálního extrému. Tato skutečnost má však za následek delší dobu trvání výpočtu. Další její dobrou vlastností je, že ji lze použít na případy s omezením nebo bez omezení jednotlivých proměnných.

Na obrázku č. 1 je znázorněno, jak metoda globální optimalizace se spline-aproximací nalézá postupně systémem náhodných přímek (na těchto přímkách se provádí aproximace pomocí spline-funkcí) body se stále klesající funkční hodnotou. Při nalézání extrému se vychází z libovolného bodu (zde je vlevo nahoře) a postupně se nalézá minimum funkce (uprostřed obrázku).



obr. 1.

Uvedený algoritmus se zabývá hledáním globálního minima. Příklad globálního maxima lze snadno získat buď úpravou uvedeného algoritmu nebo lépe přechodem k funkci $-f$ místo f .

3.1.1. Popis parametrů metody

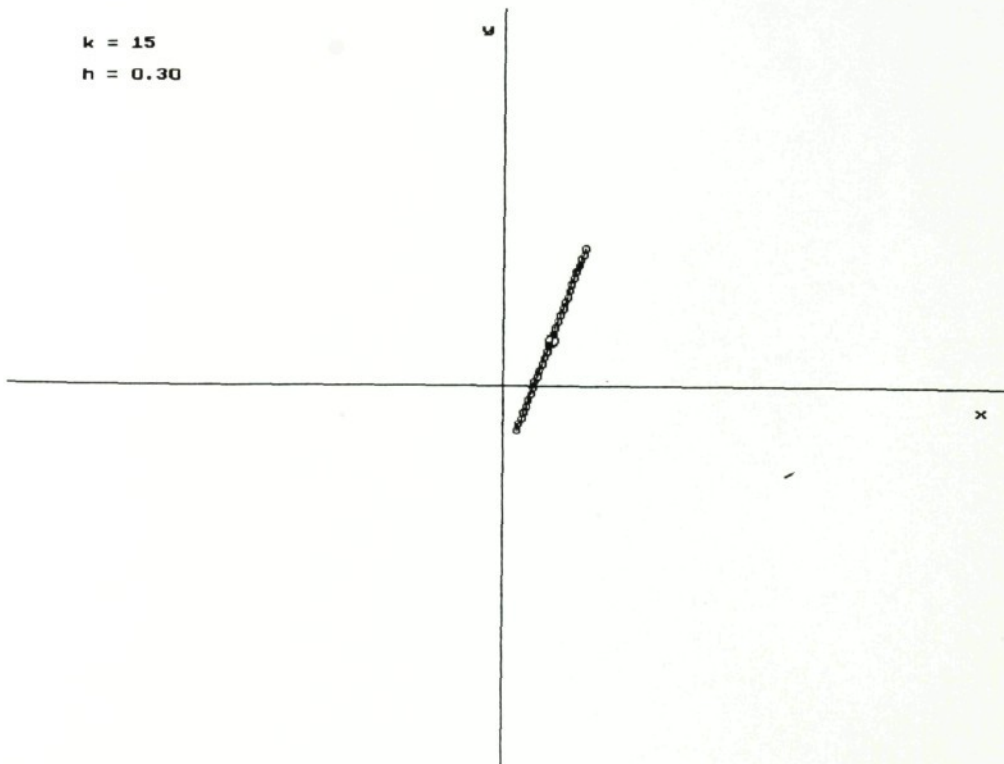
Pro nalezení globálního extrému touto metodou je nutno zadat dva parametry:

- parametr k , který vyjadřuje počet bodů po obou stranách výchozího bodu na aproximační křivce.
- parametr h , který vyjadřuje vzdálenost bodů od sebe na aproximační křivce.

Vliv obou těchto parametrů na délku aproximační křivky i na hustotu bodů na této křivce je patrný z obrázků č. 2 a č. 3.

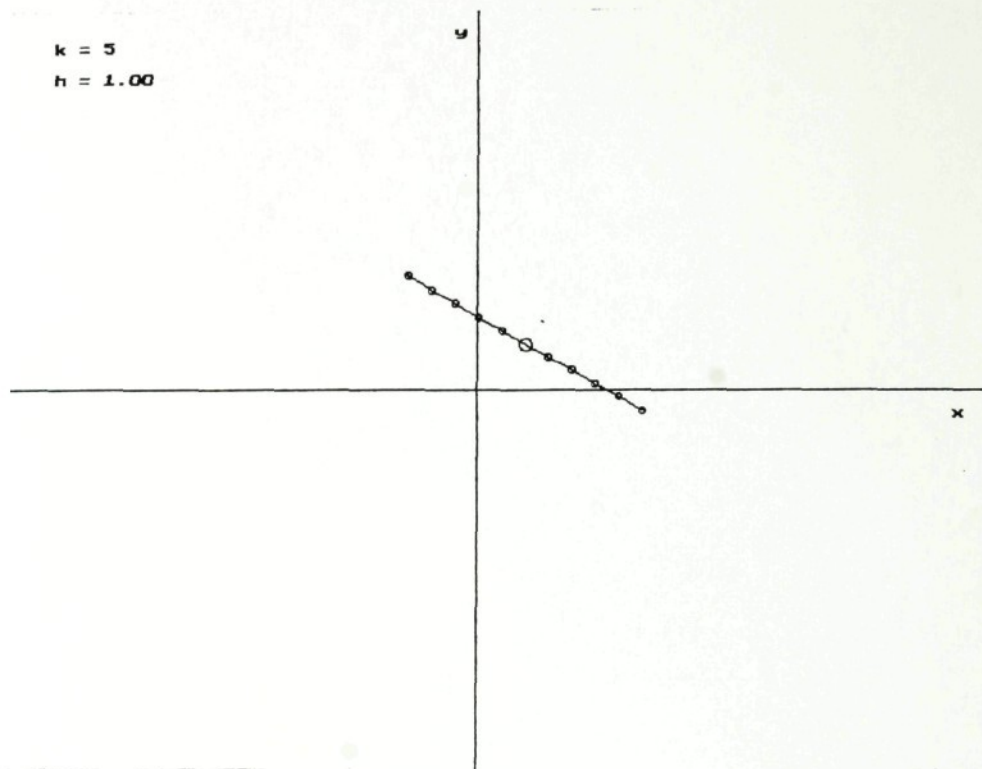
$$k = 15$$

$$h = 0.30$$



obr. 2.

$k = 5$
 $h = 1.00$



obr. 3.

Při pohledu na oba obrázky je zřejmé, že ideální pro nalezení extrému touto metodou je volit k co největší (aby aproximační přímka byla co nejdelší a obsáhla co největší oblast) a h relativně malé (pro dosažení velké hustoty bodů). Při takovéto volbě by však výpočet trval neúměrně dlouho, proto je nutné oba tyto parametry vhodně sladit.

3.1.2. Formulace úlohy

Je dána funkce f proměnných $p_1, p_2, \dots, p_m$.

Označme

$$p = [p_1, p_2, \dots, p_m]^T$$

Dále Q je přípustná množina vektorů p , která je souvislá a její vnitřek $Q^0 = \text{int } Q$ je oblast, t.j. souvislá otevřená množina. Úlohou je nalezení absolutního minima funkce f při

splnění podmínky, že $p \in Q$, t.j. formálně, hledám $p_{\min}$, pro něž platí

$$p \in Q \Rightarrow f(p_{\min}) \leq f(p)$$

3.1.3. Algoritmus metody

Celý postup metody globální optimalizace lze rozdělit do následujících kroků:

- Zvolíme malé $\epsilon > 0$ (např. $\epsilon = 10^{-4}$), přirozené číslo k , reálné číslo $h > 0$.
- Volíme odhad $p^0 \in Q^0$ a určíme $f(p^0)$.
- Generujeme m -tici náhodných čísel $c_1, c_2, \dots, c_m$ s normálním rozdělením. Pro náhodný vektor $c = [c_1, \dots, c_m]^T$ žádáme, aby střední hodnota $E(c) = 0$ a rozptyl $E(c \cdot c^T) = I$, kde I je jednotková matice.

- Určíme body $p^i \in Q$

$$p^i = p^0 + i \cdot h \cdot c, \quad i \in (-k, -k+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, k),$$

kde konstanta $h > 0$ je parametrem metody. Pokud $p^i \notin Q$ pro některé i , kontrahujeme h kvocientem q , pro který platí $0 < q < 1$ (obvykle $q = 0.5$), tak dlouho, až $p \in Q$ pro všechna i .

- Určíme $f(p^i)$ pro p^i , $f(p^0)$ už známe. Průběh funkčních hodnot na přímce $p^0 + t \cdot h \cdot c$ aproximujeme spline-funkcí $g(t)$, která je popsána v kapitole 3.1.4.

- Určíme minimum použité interpolační spline-funkce. Hodnotu t , pro kterou je $g(t)$ minimální, označíme $t_{\min}$. Je-li $g(t_{\min}) \leq f(p^0) - \epsilon$ určíme nový bod

$$p = p^0 + t_{\min} \cdot h \cdot c$$

Jestliže $p \notin Q^0$, vrátíme se na krok c), je-li $p \in Q^0$, určíme $f(p)$. Platí-li $f(p) < f(p^0)$, zaměníme $p \rightarrow p^0$ a $f(p) \rightarrow f(p^0)$, přejdeme na krok c). Je-li $f(p) \geq f(p^0)$ přejdeme na krok b) bez záměny (neúspěšná iterace).

Do algoritmu je dále třeba zabudovat test ukončení.

Ukončit výpočet můžeme např. po provedení předem stanoveného počtu kroků, nebo jestliže několik po sobě jdoucích funkčních hodnot se liší o méně než předem stanovené malé číslo resp. s dosud dosaženou minimální hodnotou jsme spokojeni a pod.

Pro náš případ jsme si vybrali případ ukončení výpočtu po předem stanoveném počtu neúspěšných kroků za sebou. Ze zkušeností jsme nastavili tuto hodnotu na 20 (20x za sebou se na aproximační přímce nevyskytuje menší hodnota než už nalezený bod). Dále se výpočet ukončuje tehdy, když při kontrakci parametru h je tato hodnota menší než 10^{-5} (středový bod na aproximační přímce je na hranici definiční oblasti funkce).

3.1.4. Interpolace kubickými spline funkcemi

Potřebujeme interpolovat $2k+1$ bodů

$f(p^{-k}), f(p^{-k+1}), \dots, f(p^0), f(p^1), \dots, f(p^k)$, které pro jednoduchost označíme $f_{-k}, f_{-k+1}, \dots, f_{-1}, f_0, f_1, \dots, f_k$.

Hledáme funkci $g(t)$ (kubická spline-funkce) s předpoklady:

a) $g \in C^2(-k, k)$;

b) $t \in \langle i-1, i \rangle \Rightarrow g(t) = g_i(t) = \sum_{n=0}^3 a_n^{(i)} (i-t)^n$,

pro $i = -k+1, -k+2, \dots, k$

c) $g(i) = f_i = f(p^i)$, $i = -k, -k+1, \dots, k$

d) $g''(-k) = 0 = g''(k)$ "speciální volba"

Poněvadž $g''(t)$ je spojitá a lineární na intervalu $\langle i-1, i \rangle$,

kde $i = -k+1, \dots, k$, lze pro $t \in \langle i-1, i \rangle$ psát

$$g''(t) = m_{i-1}(i-t) + m_i(t-i+1),$$

kde $m_i = g''(i)$.

Dvojnásobnou integrací předchozí rovnice podle t dostaneme

$$g(t) = m_{i-1} \frac{(i-t)^3}{6} + m_i \frac{(t-i+1)^3}{6} + A_1(i-t) + B_1(t-i+1)$$

Integrační konstanty A_1 , B_1 určíme z podmínek

$$g(i-1) = f_{i-1} \quad , \quad g(i) = f_i$$

Dosazením podmínek do vztahu plyne

$$\frac{m_i}{6} + B_1 = f_i \quad , \quad \frac{m_{i-1}}{6} + A_1 = f_{i-1} \quad ,$$

takže dosazením za A_1 a B_1 získáme finální vztah

$$g(t) = m_{i-1} \frac{(i-t)^3}{6} + m_i \frac{(t-i+1)^3}{6} + (f_{i-1} - \frac{m_{i-1}}{6})(i-t) + \\ + (f_i - \frac{m_i}{6})(t-i+1)$$

Derivováním tohoto vztahu dostaneme

$$g'(t) = -m_{i-1} \frac{(i-t)^2}{2} + m_i \frac{(t-i+1)^2}{2} + f_i - f_{i-1} - \frac{m_i - m_{i-1}}{6} \quad (1)$$

Z tohoto vztahu určíme limity derivace zleva a zprava v uzlových bodech

$$g'(i-) = \frac{m_{i-1}}{6} + \frac{m_i}{3} + f_i - f_{i-1}$$

$$g'(i+) = -\frac{m_i}{3} - \frac{m_{i+1}}{6} + f_{i+1} - f_i$$

Podle předpokladu a) jsou g' a g'' spojité na $\langle -k, k \rangle$, odtud a ze spojitosti g' v bodech $-k+1$, $-k+2$, ..., $k-1$ dostaneme

2k-1 rovnic

$$\frac{1}{6} m_{i-1} + \frac{2}{3} m_i + \frac{1}{6} m_{i+1} = f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}$$

S ohledem na předpoklad d) (speciální volba) je $m_{-k} = 0 = m_k$, takže pro neznámé $m_{-k+1}, m_{-k+2}, \dots, m_{k-1}$ dostáváme soustavu lineárních algebraických rovnic

$$A \times m = B \times F$$

kde A je čtvercová třídiagonální matice

$$A = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

$$m = \begin{bmatrix} m_{-k+1} \\ m_{-k+2} \\ \vdots \\ \vdots \\ m_{k-1} \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} f_{-k} \\ f_{-k+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ f_k \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

Matice A je ostře diagonálně dominantní (důkaz je proveden v práci /1/ na straně 6) a je tedy regulární. Soustava rovnic $A \cdot \mathbf{u} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{F}$ má tedy jediné řešení pro $\mathbf{u}$, a proto i spline-funkce $g(t)$ splňující dané podmínky existuje právě jedna.

Platí, že interpolace kubickými spline-funkcemi je vysoce efektivní, proto jsme tento přístup užili též v této práci.

3.1.5. Řešení třídiagonálního systému lineárních rovnic

Uvažujeme systém rovnic

$$A \mathbf{x} = \mathbf{y}, \text{ kde } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$$

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 \\ c_2 & a_2 & b_2 & 0 & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & b_3 & 0 & . & . & . & 0 \\ . & . & . & . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & . & . & c_n & a_n \end{bmatrix}$$

Řešení hledíme ve tvaru procedury

$$x_i = p_i x_{i+1} + q_i, \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

Z i -té rovnice dostaneme

$$c_i x_{i-1} + a_i x_i + b_i x_{i+1} = y_i$$

Vyloučíme neznámá x_{i-1} z obou rovnic tak, že v první rovnici zaměníme i za $i-1$, dostaneme

$$(a_i + c_i p_{i-1}) x_i + b_i x_{i+1} = y_i - c_i q_{i-1} \quad /$$

a odtud

$$x_i = - \frac{b_i}{a_i + c_i p_{i-1}} x_{i+1} + \frac{y_i - c_i q_{i-1}}{a_i + c_i p_{i-1}}$$

Srovnáním dvou rovnic pro x_i získáme rekurentní formule pro určení koeficientů p_i a q_i :

$$p_i = \frac{-b_i}{a_i + c_i p_{i-1}}, \quad q_i = \frac{y_i - c_i q_{i-1}}{a_i + c_i p_{i-1}}$$

Pro $x_n = g_n$ vypočteme ostatní neznámé z rovnice:

$$x_i = p_i x_{i+1} + q_i$$

Lze dokázat že daný algoritmus je stabilní ve smyslu nahromadění chyb zaokrouhlováním pro $|P_i| < 1$.

Poznamenejme, že systém rovnic $A \times m = B \times F$ je vhodné násobit 6, aby se zjednodušil tvar matice A.

3.1.6. Globální minimum spline funkce

V této kapitole se budeme zabývat nalezením minimální hodnoty spline-funkce $g(t)$ v celém intervalu $\langle -k, k \rangle$.

Zabývejme se nejprve otázkou lokálního extrému na intervalu $i-1 < t < i$. Pro lokální extrém na tomto intervalu musí platit $g'(t) = 0$, čili dle rovnice (1) na straně 15:

$$-m_{i-1} \frac{(i-t)^2}{2} + m_i \frac{(t-i+1)^2}{2} + f_i - f_{i-1} - \frac{(m_i - m_{i-1})}{6} = 0$$

Tuto rovnici dále upravíme na tvar

$$(t-i)^2(m_i - m_{i-1}) + 2(t-i)m_i + 2(f_i - f_{i-1}) + \frac{(2m_i - m_{i-1})}{3} = 0 \quad (2)$$

A. Necht $m_i \neq m_{i-1}$

Značí-li D_i diskriminat této rovnice, pak

$$D_i = 4m_i^2 - 4(m_i - m_{i-1}) \frac{2(f_i - f_{i-1}) + (2m_i - m_{i-1})}{3}$$

Aby extrém existoval, musí být $D_i \geq 0$ a pak z (2) plyne

$$t_{ex} - i = \frac{-m_i \pm 0.5 \sqrt{D_i}}{m_i - m_{i-1}} \quad (3)$$

Rovnici z předpokladu d) lze upravit na tvar

$$g''(t) = (m_1 - m_{1-1})(t-i) + m_1$$

z něhož po dosazení z (3) dostaneme:

$$g''(t_{ex}) = \pm \frac{\sqrt{D_1}}{2}$$

Podmínka, že hledáme minimum, dává volbu znaménka +, takže z (3) dostaneme:

$$t_{ex}^1 = i + \frac{-m_1 + 0.5 \sqrt{D_1}}{m_1 - m_{1-1}}$$

Lokální minimum navíc hledáme na intervalu $(i-1, i)$, takže musí platit:

$$i-1 < i + \frac{-m_2 + 0.5 \sqrt{D_1}}{m_1 - m_{1-1}} < i \quad \text{neboli}$$

$$-1 < \frac{-m_2 + 0.5 \sqrt{D_1}}{m_1 - m_{1-1}} < 0 \quad (4)$$

B. Pokud $m_1 = m_{1-1}$, pak (2) je lineární rovnice, a ta nabývá extrémů vždy v krajních bodech.

Výsledek úvah zní: spline-funkce $g(t)$ má na otevřeném intervalu $i-1 < t < i$ lokální minimum právě tehdy, když

a) $m_1 \neq m_{1-1}$

b) $D_1 \geq 0$

c) platí (4)

Jeho hodnota je pak $g(t_{ex}^1)$.

Nalezení globálního extrému spline-funkce je nyní již snadnou záležitostí. Je jím bod s nejmenší hodnotou z množiny všech lokálních extrémů na otevřených intervalech $(i-1, i)$ a všech funkčních hodnot ve styčných bodech těchto intervalů, tj. hodnot $f(p^{-K}), f(p^{-K+1}), \dots, f(p^K)$.

3.2. Metoda flexibilního simplexu

Metoda flexibilního simplexu patří také mezi metody určení extrému bez derivování účelové funkce. Lze ji též použít na případy bez omezení respektive s omezením jednotlivých proměnných.

3.2.1. Algoritmus metody flexibilního simplexu

Princip metody spočívá v určení směru hledání v n rozměrném prostoru z hodnot účelové funkce v $n+1$ bodech. Tyto body se volí obvykle ve vrcholech pravidelného n rozměrného polyedru. Takové uspořádání se nazývá regulárním simplexem. Souřadnice simplexu $1x$ až $n+1x$ s jedním vrcholem v počátku souřadného systému mohou být vyjádřeny maticí:

$$D = [1x, \dots, n+1x] = \begin{bmatrix} 0 & d_1 & d_2 & d_2 \\ 0 & d_2 & d_1 & d_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & d_2 & d_2 & d_1 \end{bmatrix}$$

Matice D má rozměr $D [n, n+1]$.

$$d_1 = \frac{t}{n \sqrt{2}} (\sqrt{n+1} + n - 1)$$

$$d_2 = \frac{t}{n \sqrt{2}} (\sqrt{n+1} - 1)$$

kde t je parametr metody.

Ve všech bodech polyedru se vypočítá hodnota účelové funkce $f(1x)$, pro $i = 1 \dots n+1$. Vrchol s nejvyšší hodnotou účelové funkce označíme hx , podobně vrchol s nejnižší hodnotou označíme $1x$. Určíme těžiště všech vrcholů kromě hx

a označíme ho $n+2x$:

$$n+2x = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n+1} (x_i - h x)$$

Regulární simplex se krok od kroku deformuje tak, aby se přizpůsobil průběhu účelové funkce. Výpočtový algoritmus kroku k je následující:

a) odraz: určí se bod $n+3x_k = n+2x_k + \alpha (n+2x_k - h x_k)$

b) prodloužení: jestliže $f(n+3x_k) \leq f(1x_k)$ prodlouží se vektor

$$(n+3x_k - n+2x_k) \text{ na } n+4x_k = n+2x_k + \tau (n+3x_k - n+2x_k).$$

Jestliže $f(n+4x_k) < f(1x_k)$, zamění se $n+4x_k$ za $1x_k$, jinak se zamění $n+3x_k$ za $1x_k$. Tím vznikne nový simplex. Přejde se na výpočtový krok odraz s $k = k+1$.

c) zkrácení: jestliže $f(n+3x_k) > f(1x_k)$ pro všechna $i = h$, zkrátí se vektor $(n+3x_k - h x_k)$ na

$$n+5x_k = n+2x_k + \beta (h x_k - n+2x_k).$$

Záměnou $n+5x_k$ za $h x_k$ vznikne nový simplex. Přejde se na výpočtový krok odraz s $k = k+1$.

d) zmenšení: jestliže $f(n+3x_k) > f(h x_k)$, zmenší se všechny hrany polyedru při zachování jeho orientace a vrcholu $1x_k$ v prostoru $1x_k = 1x_k + 0.5 (1x_k - 1x_k)$, pro $i = 1$ až $n+1$. Tento nový simplex nahrazuje simplex stávající. Přejde se na výpočtový krok odraz s $k = k+1$.

e) ukončení: jestliže je

$$\frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} [f(1x_k) - f(n+2x_k)]^2 \leq \delta^2$$

pak proces hledání končí.

Proměnné α , β , τ , δ jsou parametry metody. Literatura doporučuje volit tyto parametry na základě zkušeností takto:

$$\alpha = 1 \quad \tau = 2$$

$$\beta = 0.5 \quad \delta = 1$$

3.3. Metoda gradientu (metoda největšího spádu)

Gradientní metody patří mezi metody určení extrému funkce pomocí prvních, resp. i druhých parciálních derivací účelové funkce. Gradientní metody se používají v případech, kdy je možno tyto parciální derivace snadno určit. Jejich nevýhodou je také nemožnost zadat omezující podmínky proměnných, t.j. zadat definiční oblast účelové funkce.

3.3.1. Algoritmus gradientních metod

Hledáme minimum funkce $f(x)$. Záporný gradient $-f'(x)$ udává největší spád funkce $f(x)$ v bodě x . Této skutečnosti se právě využívá v gradientních metodách.

Zvolíme počáteční bod x_0 a přechod od libovolného bodu x_k k novému bodu x_{k+1} se provádí podle iteračního vzorce:

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k \nabla f(x_k) \quad , \quad \lambda_k > 0 \quad , \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Jsou-li čísla $\lambda_k > 0$ velmi malá, jedná se o gradientní metodu s krátkým krokem.

Volíme-li $\lambda_k > 0$ v každé iteraci co největší, ale takové, abychom postoupili ve směru záporného gradientu jen tehdy, vede-li to ke snížení hodnoty účelové funkce $f(x)$, pak hovoříme o gradientní metodě s dlouhým krokem. Metoda s dlouhým krokem se též nazývá optimální gradientní metoda nebo metoda největšího spádu.

Zvolíme-li λ_k malé $\Rightarrow$ je hledání extrému pomalé a je-li $\lambda_k = \text{konst.} \Rightarrow$ nastane oscilace v blízkosti extrému. Proto je vhodné volit zprvu λ_k dosti velké a postupně ho zmenšovat.

Hledáme:

$$\min_{\lambda > 0} f[x_k - \lambda \nabla f(x_k)] \quad (5)$$

Aproximujeme $f(x)$ kvadratickým výrazem:

$$f(x) \approx f(x_k) + \nabla^T f(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2} (x - x_k)^T H(x_k)(x - x_k) \quad (6)$$

kde $H(x)$ je Hessova matice druhých parciálních derivací

$$H(x) = \left[\frac{\partial^2 f(x_k)}{\partial x^i \partial x^j} \right] \quad i, j = 1, 2, \dots, n$$

Položme $s_k = -\nabla f(x_k)$ a $x - x_k = \lambda s_k$, pak podle (5), (6) lze psát pro stacionární bod:

$$\frac{d}{d\lambda} [f(x_k) - \nabla^T f(x_k) \lambda s_k + \frac{1}{2} \lambda^2 s_k^T H(x_k) s_k] = 0$$

a odtud

$$\lambda = - \frac{\nabla^T f(x_k) s_k}{s_k^T H(x_k) s_k}$$

a potom po dosazení za $s_k = -\nabla f(x_k)$ dostaneme:

$$\lambda = \frac{\nabla^T f(x_k) \nabla f(x_k)}{\nabla^T f(x_k) H(x_k) \nabla f(x_k)}$$

Rychlejší konvergenci očekáváme od metod využívajících i druhých derivací funkce. Je-li oprávněná aproximace (6), pak minimum ve stacionárním bodě je dáno:

$$\nabla f(x_k) + H(x_k)(x - x_k) = 0$$

Označíme-li bod x_{k+1} místo x_k , pak

$$x_{k+1} = x_k - H^{-1}(x_k) \nabla f(x_k)$$

Tato metoda se nazývá Newtonova metoda, zde je nutné, aby matice $H(x_k)$ byla regulární (pro určení inverzní matice $H^{-1}(x_k)$). V blízkosti extrému lze v případě, že se $H(x_k)$

příliš nemění postupovat takto:

$$x_{k+1} = x_k - H^{-1} \nabla f(x_k)$$

kde H^{-1} je zvolena pevně pro několik následujících kroků, což uspoří výpočetní čas určování inverzí Hessianových matic.

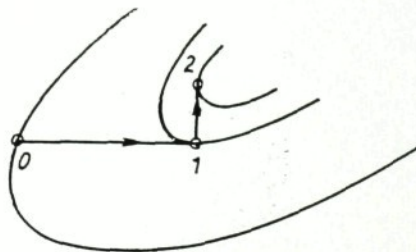
3.4. Metoda Gaussova

Metoda Gaussova patří mezi metody určení extrému bez derivování funkce. Tato metoda byla vybrána pro její jednoduchost a možnost nalezení extrému s jakoukoliv přesností.

3.4.1. Princip Gaussovy metody

Princip metody je následující: nejdříve se určí přírůstky pro jednotlivé složky vektoru x (vektor proměnných funkce $f(x)$), t.j. s jakou přesností chceme nalézt extrém. Následně se pro každý krok vždy cyklicky vybírá jedna složka vektoru x a v jejím směru se provádí přímé hledání postupného minima. Nejdříve se určí směr postupu podle dvou hodnot z okolí výchozího bodu a v tomto směru se pokračuje v hledání minima, dokud účelová funkce klesá. Po nalezení tohoto postupného minima se provádí hledání v jiné složce vektoru x . Postup se opakuje pokud není dosaženo potřebné přesnosti.

Princip Gaussovy metody je zobrazen na obrázku č.4.



obr. 4.

4.0. POROVNÁNÍ VYBRANÝCH METOD Z HLEDISKA DOBY TRVÁNÍ A POČTU POTŘEBNÝCH KROKŮ

Pro porovnání vybraných metod jsme jednotlivými metodami vypočítali následující příklady:

a) nalézt minimum funkce $f(x, y, z) = x^2 + 2xy^2 + z^2 - 2xz + 1$

bez omezujících podmínek pro proměnné.

Výsledky zjištěné analyticky:

$$\begin{aligned}x &= 0 \\y &= 0 \\z &= 1 \\ \text{funkční hodnota} &= 0\end{aligned}$$

Handwritten:
 $f = x^2 + 2y^2 + z^2 - 2xz + 1$
 $\nabla f = (2x - 2z, 4y, 2z - 2x) = (0, 0, 0)$
 $\Rightarrow x = z, y = 0$
 $f(x, 0, x) = 2x^2 - 2x^2 + 1 = 1$
 $\Rightarrow$ minimum $f = 0$ at $(0, 0, 1)$

Výsledky metodou globální optimalizace se
spline-aproximací:

$$\begin{aligned}x &= 0.0280 \\y &= -0.0714 \\z &= 0.8879 \\ \text{funkční hodnota} &= 0.0236 \\ \text{celkový počet kroků} &: 38 \\ \text{z toho úspěšných} &: 11 \\ \text{čas potřebný pro výpočet} & 0:0:4:94\end{aligned}$$

Výsledky metodou flexibilního simplexu:

$$\begin{aligned}x &= -0.008 \\y &= 0.001 \\z &= 1.004 \\ \text{funkční hodnota} &= 0.0001 \\ \text{počet kroků výpočtu} &: 69 \\ \text{čas potřebný pro výpočet} & 0:0:0:60\end{aligned}$$

Výsledky metodou Gaussovou:

$$\begin{aligned}x &= -0.000 \\y &= -0.000 \\z &= 1.000 \\ \text{funkční hodnota} &= 0.0000 \\ \text{čas potřebný pro výpočet} & 0:0:1:81\end{aligned}$$

Výsledky metodou gradientu:

$$\begin{aligned}x &= -0.000 \\y &= 0.021 \\z &= 1.000 \\ \text{funkční hodnota} &= 0.0008 \\ \text{čas potřebný pro výpočet} & 0:0:2:31\end{aligned}$$

Porovnáním jednotlivých metod jsme zjistili, že metoda globální optimalizace se spline aproximací je z hlediska času i přesnosti nevýhodná.

Z hlediska času a přesnosti je nejvýhodnější metoda flexibilního simplexu.

Metoda gradientu a metoda Gaussova jsou z hlediska času a přesnosti ještě vyhovující.

b) nalézt minimum funkce $f(x,y) = x^2xy^2 + x - 5$ s omezujícími podmínkami $-1 \leq x \leq 3$

$$-6 \leq y \leq 6$$

Výsledky zjištěné analyticky:

$x = -1$
 $y = 0$
funkční hodnota = -6

Výsledky metodou globální optimalizace se spline-aproximací:

$x = -0.9999$
 $y = -0.0721$
funkční hodnota = -5.9947
celkový počet kroků: 26
z toho úspěšných: 18
čas potřebný pro výpočet 0:0:2:25

Výsledky metodou flexibilního simplexu:

$x = -0.996$
 $y = 0.011$
funkční hodnota = -5.9960
počet kroků výpočtu: 24
čas potřebný pro výpočet 0:0:0:22

Výsledky metodou Gaussovou:

$x = -0.990$
 $y = -0.000$
funkční hodnota = -5.9900
čas potřebný pro výpočet 0:0:1:43

Metodou gradientu tento příklad nešel vypočítat, protože se tato metoda nedá použít na případy, kde se

vyskytují omezující podmínky pro proměnné.

Metoda flexibilního simplexu je z hlediska času nejvýhodnější, metoda globální optimalizace se spline aproximací nejméně výhodná.

Použité metody jsou z hlediska počtu kroků i přesnosti srovnatelné.

c) nalézt minimum funkce $f(x,y) = e^{[-x^2x-y^2y]} \times \cos(x)$

s omezujícími podmínkami pro proměnné: $-\pi/4 \leq x \leq \pi/4$

$$-\pi \leq y \leq \pi$$

Výsledky zjištěné analyticky:

$$x = \pi/4$$

$$y = \pi$$

$$\text{funkční hodnota} = 0$$

Výsledky metodou globální optimalizace se spline-aproximací:

$$x = 0.7769$$

$$y = 2.9192$$

$$\text{funkční hodnota} = 0.0001$$

$$\text{celkový počet kroků: } 40$$

$$\text{z toho úspěšných: } 8$$

$$\text{čas potřebný pro výpočet } 0:0:4:67$$

Výsledky metodou flexibilního simplexu:

$$x = 0.785$$

$$y = 3.139$$

$$\text{funkční hodnota} = 0.0000$$

$$\text{počet kroků výpočtu: } 19$$

$$\text{čas potřebný pro výpočet } 0:0:0:38$$

Výsledky metodou Gaussovou:

$$x = 0.780$$

$$y = 3.140$$

$$\text{funkční hodnota} = 0.0000$$

$$\text{čas potřebný pro výpočet } 0:0:1:37$$

Metodou gradientu tento příklad nešel vypočítat opět

z důvodů výskytu omezujících podmínek pro jednotlivé proměnné.

Všechny metody jsou srovnatelné z hlediska přesnosti a počtu kroků.

Z hlediska času je nejvýhodnější metoda flexibilního simplexu a nejméně výhodná metoda globální optimalizace se spline aproximací.

d) nalézt minimum funkce $f(x,y) = axb + 4x(a + b)$

kde $a = x^6 - 4x^5 + 2x^4 + 8x^3 - 7x^2 - 4x$

$b = y^4 + 2xy^3 - 3xy^2 - 4xy$

bez žádných omezujících podmínek pro proměnné x,y .

Výsledky zjištěné analyticky:

$x = 1$
 $y = 1$
funkční hodnota = 7

Výsledky	metodou	globální	optimalizace	se
spline-aproximací:				

$x = 1.6302$
 $y = 0.9967$
funkční hodnota = 7.0000
celkový počet kroků: 40
z toho úspěšných: 5
čas potřebný pro výpočet 0:0:6:92

Výsledky metodou flexibilního simplexu:

$x = 1.001$
 $y = 0.913$
funkční hodnota = 7.0000
počet kroků výpočtu: 13
čas potřebný pro výpočet 0:0:0:22

Výsledky metodou Gaussovou:

$x = 1.000$
 $y = 1.070$
funkční hodnota = 7.0000
čas potřebný pro výpočet 0:0:0:72

Metodou gradientu jsem tento příklad nedělal, protože nalezení parciálních derivací účelové funkce by trvalo neúměrně dlouho vzhledem k výpočtu příkladu.

Všechny metody jsou srovnatelné z hlediska přesnosti.

Z hlediska počtu kroků je výhodnější metoda globální optimalizace se spline aproximací.

Z hlediska času je nejvýhodnější metoda flexibilního simplexu a nejméně výhodná metoda globální optimalizace se spline aproximací.

1) nalézt maximum funkce $f(x) = |2 - 3||x| - 2||$

omezující podmínkou pro proměnnou: $-3 \leq x \leq 3$

Výsledky zjištěné analyticky:

$x = 0$
funkční hodnota = 4

Výsledky metodou globální optimalizace se

spline-aproximací:

$x = -0.0153$
funkční hodnota = 3.9540
celkový počet kroků: 22
z toho úspěšných: 2
čas potřebný pro výpočet 0:0:2:69

Výsledky metodou flexibilního simplexu:

$x = 0.000$
funkční hodnota = 4.0000
počet kroků výpočtu: 5
čas potřebný pro výpočet 0:0:0:5

Výsledky metodou Gaussovou:

$x = 2.000$
funkční hodnota = 2.000
čas potřebný pro výpočet 0:0:0:16

Metodou gradientu u tohoto příkladu také nešlo nalézt minimum, protože se v účelové funkci vyskytují absolutní

hodnoty a z tohoto důvodu není možné zadat parciální derivace podle jednotlivých proměnných pouze jedinou funkcí.

Metoda Gaussova našla pouze lokální extrém.

Z hlediska času a přesnosti je nejvýhodnější metoda flexibilního simplexu.

Z hlediska počtu kroků výpočtu je nejvýhodnější metoda globální optimalizace se spline-aproximací.

nalézt minimum funkce $f(x,y) = \frac{x \cos(x+y)}{1 + y^2}$

s omezující podmínkou pro proměnnou: $-30 \leq x \leq 30$

Výsledky metodou globální optimalizace se spline-aproximací:

x = 28.3414
y = -0.0453
funkční hodnota = -28.2766
celkový počet kroků: 87
z toho úspěšných: 20
čas potřebný pro výpočet 0:0:9:40

Výsledky metodou flexibilního simplexu:

x = -1.214
y = 0.527
funkční hodnota = -0.7346
počet kroků výpočtu: 23
čas potřebný pro výpočet 0:0:0:22

Výsledky metodou Gaussovou:

x = 3.560
y = -0.140
funkční hodnota = -3.3571
čas potřebný pro výpočet 0:0:1:5

Výsledky metodou gradientu:

x = 3.550
y = -0.163
funkční hodnota = -3.3545
čas potřebný pro výpočet 0:0:1:43

Z výsledků jasně vidíme přednost metody globální optimalizace se spline aproximací, která jako jediná našla globální extrém. Ostatní metody našly pouze extrém lokální.

$$g) \text{ nalézt minimum funkce } f(x,y) = \frac{a \ b \ c \ d}{|21 + x + y|}$$

$$\text{kde } a = \sin(x) \times \sin(y)$$

$$b = \arctg(x^3 + x^2 + x + 1)$$

$$c = \arctg(y^4 + y^3 + y - 5)$$

$$d = \arctg(\sqrt{|\sin(x) - 5 e^y|})$$

s omezujícími podmínkami pro proměnné: $-10 \leq x \leq 10$

$$-10 \leq y \leq 10$$

Tento " odstrašující příklad " uvádíme pro ilustraci možností metody globální optimalizace se spline-aproximací. Ostatní vybrané metody nedokáží nalézt extrém.

Výsledky metodou globální optimalizace se spline-aproximací:

```
x = 1.6430
y = 3.1292
funkční hodnota = -0.1311
celkový počet kroků: 52
z toho úspěšných: 7
čas potřebný pro výpočet 0:0:14:27
```

4.1. Celkové porovnání jednotlivých metod

Porovnání je platné pouze pro tento soubor příkladů. Pro obecné závěry by bylo nutné vypracovat obsáhlejší statistické porovnání.

Pro soubor příkladů se jako nejvýhodnější jeví metoda globální optimalizace se spline aproximací, protože byla použitelná ve všech případech a vždy našla extrém globální.

Její přesnost byla sice nejmenší ale pro technickou praxi postačující.

Jako další výhodná metoda se jeví metoda flexibilního simplexu, která ve všech případech poskytovala výsledky poměrně rychle s vysokou přesností. Tato metoda se doporučuje používat na příklady, kde existuje pouze jeden extrém, extrém globální.

Gaussova metoda se sice dá použít na všechny typy příkladů, ale ne vždy nalezne extrém globální. Metodu je vhodné použít v případě, kdy jsme schopni přibližně určit globální extrém a výchozí bod hledání zadáme poblíž tohoto extrému.

Jako nejméně výhodná se jeví gradientní metoda, protože pro tento soubor příkladů byla použitelná pouze ve dvou případech a z toho jednou našla pouze lokální extrém.

4.2. Doplnění metody globální optimalizace se spline-aproximací

Po nalezení globálního extrému metodou globální optimalizace se spline-aproximací lze pro zpřesnění řešení použít některou z metod pro hledání lokálního extrému. Při výběru doplňující metody bylo nutno zvážit tyto podmínky:

- vysoká přesnost řešení
- jednoduchost algoritmu
- krátká doba řešení

Po zvážení podmínek byla vybrána metoda Gaussova. Plně splňuje první dvě podmínky a za předpokladu, že jsme poblíž globálního extrému, splňuje i podmínku třetí.

Toto zpřesnění je možné použít jen tehdy, jsme-li opravdu blízko globálního extrému. V praxi je možné, že by

se zpřesňující metoda mohla přehoupnout do lokálního extrému. Proto je nutné sledovat jednotlivé proměnné při zpřesňujícím hledání. V případě velké odchylky od počátečního bodu zpřesňujícího hledání je nutno výpočet přerušit a spustit metodu globální optimalizace se spline aproximací znovu.

5.0. VLIV PARAMETRŮ U METODY GLOBÁLNÍ OPTIMALIZACE SE SPLINE APROXIMACÍ NA KONVERGENCI

5.1. Vliv parametru k

Vliv parametru k jsme sledovali na příkladu č.1:

nalézt minimum funkce

$$f(x, y) = 2x^2 + 6y^2 + 4x - 7y$$

bez omezení proměnných

s následujícími parametry: $h = 0.5$

počáteční bod výpočtu: $x_0 = 5$

$$y_0 = 5$$

Výsledky jsou uvedeny v tabulce č. 1.

k	funkční hodnota	počet kroků	úspěšné kroky	čas výpočtu
1	-3.9846	59	25	0:0:1:54
2	-3.9942	54	19	0:0:1:60
3	-4.0197	48	14	0:0:1:70
4	-4.0156	79	20	0:0:3:29
5	-4.0133	52	12	0:0:2:53
6	-4.0377	39	9	0:0:2:20
7	-4.0258	67	10	0:0:4:23
8	-4.0414	29	4	0:0:2:3
9	-4.0370	45	5	0:0:3:46
10	-4.0308	34	8	0:0:2:86
11	-4.0225	50	4	0:0:4:56
12	-4.0146	29	3	0:0:2:86
13	-4.0165	43	11	0:0:4:56
14	-4.0074	55	9	0:0:6:21
15	-4.0025	29	4	0:0:3:51
16	-4.0027	42	7	0:0:5:49
17	-4.0097	61	7	0:0:8:18
18	-4.0390	77	6	0:0:14:42
19	-4.0265	67	7	0:0:10:5
20	-4.0358	41	5	0:0:6:65
21	-4.0363	85	17	0:0:13:78
22	-4.0375	63	11	0:0:10:65
23	-4.0201	75	13	0:0:13:8
24	-4.0140	41	4	0:0:7:42
25	-4.0206	36	7	0:0:6:86
26	-4.0409	43	10	0:0:8:89
27	-4.0278	51	10	0:0:10:33
28	-4.0384	40	8	0:0:8:41
29	-4.0196	72	9	0:0:15:66
30	-4.0398	38	7	0:0:8:63

Vliv parametru k jsme dále sledovali na příkladu č.2:

nalézt maximum funkce

$$f(x, y) = e^{[-x^2x - y^2y]} \times \cos(x)$$

s omezujícími podmínkami pro proměnné: $-\pi/4 \leq x \leq \pi/4$
 $-\pi \leq y \leq \pi$

s následujícími parametry: $h = 0.3$

počáteční bod výpočtu: $x_0 = 0.5$

$$y_0 = 3$$

Výsledky jsou uvedeny v tabulce č. 2.

k	funkční hodnota	počet kroků	úspěšné kroky	čas výpočtu
5	0.9936	57	23	0:0:3:96
6	0.9984	57	26	0:0:4:67
7	0.9963	42	16	0:0:3:74
8	0.9992	55	15	0:0:5:27
9	0.9993	52	13	0:0:5:55
10	0.9985	36	12	0:0:4:22
11	0.9984	44	22	0:0:5:71
12	0.9985	49	20	0:0:6:82
13	0.9999	48	20	0:0:7:19
14	0.9998	53	17	0:0:8:41
15	0.9996	32	11	0:0:5:33

Prostudováním tabulky č. 1. a 2. jsme dospěli k těmto závěrům:

- a) se změnou parametru k se příliš nemění přesnost výpočtu
- b) se zvyšováním parametru k se rovnoměrně zvyšuje čas potřebný k výpočtu
- c) se zvyšováním parametru k se nejdříve počet úspěšných kroků řešení snižuje a potom postupně narůstá. Neoptimálnějším rozmezím parametru k pro minimální počet kroků řešení je $k = 8 \dots 10$.

Optimální interval parametru k vzhledem k předchozím závěrům se doporučuje $k = 6 \dots 10$.

5.2. Vliv parametru h

Vliv parametru h jsme sledovali na příkladu č.1.:

nalézt minimum funkce

$$f(x, y) = 2x^2 + 6y^2 + 4x - 7y$$

bez omezení proměnných

s následujícími parametry: k = 8

počáteční bod výpočtu: $x_0 = -4$

$y_0 = 2$

Výsledky jsou uvedeny v tabulce č. 3.

h	funkční hodnota	počet kroků	úspěšné kroky	čas výpočtu
0.010	-4.0417	81	55	0:0:5:65
0.015	-4.0416	75	48	0:0:5:21
0.020	-4.0416	70	43	0:0:5:0
0.025	-4.0416	72	30	0:0:5:10
0.030	-4.0415	47	21	0:0:3:29
0.035	-4.0415	57	22	0:0:4:1
0.040	-4.0416	49	22	0:0:3:51
0.045	-4.0416	60	18	0:0:4:28
0.050	-4.0415	56	17	0:0:4:1
0.060	-4.0410	44	14	0:0:3:13
0.070	-4.0409	53	10	0:0:3:73
0.080	-4.0396	39	14	0:0:2:80
0.090	-4.0409	59	12	0:0:4:23
0.100	-4.0413	55	13	0:0:3:95
0.150	-4.0377	34	6	0:0:2:42
0.200	-4.0382	52	7	0:0:3:73
0.250	-4.0411	71	17	0:0:5:0
0.300	-4.0388	38	7	0:0:2:69
0.350	-4.0195	34	6	0:0:2:47
0.400	-4.0366	40	11	0:0:2:81
0.450	-4.0391	55	9	0:0:3:90
0.500	-4.0109	30	2	0:0:2:9
0.550	-4.0250	29	4	0:0:2:19
0.600	-3.9997	75	12	0:0:5:72
0.650	-4.0333	53	5	0:0:4:1
0.700	-3.9096	44	10	0:0:3:46
0.750	-3.9921	64	4	0:0:5:0
0.800	-4.0356	53	4	0:0:4:29
0.850	-4.0353	29	3	0:0:2:42
0.900	-4.0342	42	2	0:0:3:85
0.950	-3.9976	51	4	0:0:4:78
1.000	-3.9408	49	10	0:0:4:67
1.100	-4.0115	77	7	0:0:7:53
1.200	-4.0302	61	4	0:0:7:14
1.300	-4.0323	68	6	0:0:8:95
1.400	-3.9616	43	9	0:0:5:55
1.500	-4.036	32	10	0:0:6:10

Vliv parametru h jsme dále sledovali na příkladu č.2:

nalézt maximum funkce

$$f(x, y) = e^{[-x^2x - y^2y]} \times \cos(x)$$

s omezujícími podmínkami pro proměnné: $-\pi/4 \leq x \leq \pi/4$
 $-\pi \leq y \leq \pi$

s následujícími parametry: $k = 8$

počáteční bod výpočtu: $x_0 = 0.5$

$y_0 = 3$

Výsledky jsou uvedeny v tabulce č. 4.

h	funkční hodnota	počet kroků	úspěšné kroky	čas výpočtu
0.05	0.9997	66	31	0:0:6:37
0.07	0.9996	48	21	0:0:4:78
0.09	1.0000	44	24	0:0:4:39
0.10	0.9995	40	18	0:0:3:89
0.15	0.9992	48	18	0:0:4:78
0.20	0.9992	43	15	0:0:4:22
0.25	0.9998	54	19	0:0:5:16
0.30	0.9995	58	13	0:0:5:55
0.35	0.9983	58	34	0:0:5:88
0.40	0.9994	37	7	0:0:3:52
0.45	0.9987	41	13	0:0:4:1
0.50	0.9982	41	13	0:0:3:95

Prostudováním tabulky č. 3. a 4. jsme dospěli k těmto závěrům:

- a) při velmi malém parametru h ($h < 0.1$) se dosahuje velmi vysoké přesnosti výpočtu. Při zvyšování h nad tuto mez přesnost výpočtu postupně klesá.
- b) při zvyšování parametru h se počet úspěšných kroků výpočtu rovnoměrně snižuje.
- c) se zvyšováním parametru h se čas výpočtu nejdříve zkracuje, a potom postupně narůstá. Neoptimálnější rozmezí parametru h pro nejkratší čas řešení je v oblasti $h = 0.08 \dots 0.55$.

Optimální interval parametru h vzhledem k předchozím závěrům se doporučuje $h = 0.1 \dots 0.5$.

6.0. POPIS PROGRAMU

V rámci této práce vznikl program s názvem Globální optimalizace funkcí více proměnných. Po spuštění souboru g_optim.exe se objeví základní menu:

GLOBALNI OPTIMALIZACE funkcí více proměnných

Metoda se spline aproximací

Metoda polyedrického hledání

Metoda Gaussova

Metoda gradientu

Konec

Základní menu nabízí tyto možné varianty volby:

- a) globální optimalizace se spline-aproximací
- b) metoda polyedrického hledání
- c) metoda Gaussova
- d) metoda gradientu

Po výběru varianty a potvrzením klávesou <enter> se na obrazovce objeví výzva k zadání rozměru funkce. Rozměr funkce zadá uživatel číslem a potvrzením klávesou <enter>. Na obrazovce se objeví výzva k zadání vlastní účelové funkce. Funkce se zadává ve tvaru: funkce:=..... a potvrdí klávesou <enter>. Dále program nabízí možnost zadání omezujících podmínek pro jednotlivé proměnné. Pokud

uživatel chce tyto podmínky zadat, stiskne "a" a <enter>. Na obrazovce se objeví výzva k zadání počtu podmínek a posléze i výzvy k zadávání jednotlivých podmínek, které uživatel postupně zadává. Jako další krok program nabídne zadání dalších parametrů podle použité metody. Posledním zadávaným údajem je počáteční bod hledání globálního extrému a označení jestli se jedná o maximum nebo minimum funkce. Po stisknutí klávesy <enter> je program spuštěn, na obrazovce se postupně objevují mezivýsledky. Po ukončení programu se objeví konečné výsledky a po stlačení jakékoliv klávesy program přechází opět do základního menu.

6.1. Programová realizace

Program Globální optimalizace funkcí více proměnných se skládá z následujících souborů:

- a) g_optim.exe - obsahuje ovládání základního menu a řídí spuštění jednotlivých optimalizačních metod
- b) spline.dat - obsahuje zdrojový text algoritmu globální optimalizace se spline-aproximací. Je psán v jazyku TurboPascal 6.0, neobsahuje zadání funkce a omezující podmínky proměnných
- c) polyedr.dat - obsahuje zdrojový text algoritmu metody polyedrického hledání. Je napsaný v jazyku Turbopascal 6.0, neobsahuje zadání funkce a omezující podmínky proměnných
- d) gauss.dat - obsahuje zdrojový text algoritmu metody Gaussovy. Je napsaný v jazyku TurboPascal 6.0, neobsahuje zadání funkce a omezující podmínky proměnných
- e) grad.dat - obsahuje zdrojový text algoritmu metody gradientu. Je napsaný v jazyku TurboPascal 6.0,

- neobsahuje zadání funkce a omezující podmínky proměnných
- f) tpc.exe - kompilátor jazyka TurboPascal 6.0. Slouží pro překlad zdrojových textů algoritmů jednotlivých metod
- g) tpc.cfg, turbo.tpl - konfigurační soubory ke kompilátoru jazyka TurboPascal 6.0.

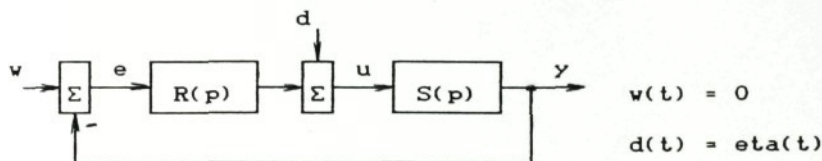
Tento způsob se volil po prostudování několika možných variant. Jedním z hlavních důvodů, které vedly k použití této varianty bylo to, že ne na každém počítači se vyskytuje jazyk TurboPascal. Také ne každý uživatel by byl schopen úpravy programu v TurboPascalu. Domníváme se, že tato varianta je jednou z nejjednodušších. Jedná se o zkopírování souboru s příponou DAT do souboru s příponou PAS s drobnými úpravami dle voleb uživatele. Po zkopírování dochází k překladu souboru s příponou PAS na soubor s příponou EXE a spuštění souboru. Po nalezení extrému dochází k vymazání pracovních souborů s příponami PAS a EXE a návratu do hlavního menu. Tímto řešením je zabezpečena minimalizace souborů v adresáři.

7.0. APLIKACE GLOBÁLNÍ OPTIMALIZACE

7.1. Aplikace na návrh regulátoru podle kvadratického kritéria

7.1.1. Zadání úlohy

Metodou minimalizace kvadratické regulační plochy je třeba navrhnout seřízení PI regulátoru $R(p)$ optimálně vyrovňavajícího vliv poruchy $d(t) = \eta(t)$, působící na vstupu do regulované soustavy $S(p)$.



$$S(p) = \frac{6}{p^3 + 6p^2 + 11p + 6} \quad R(p) = r_0 + \frac{r_1}{p}$$

ω

$$J = \int_0^\infty [e(t) - e(\omega)]^2 dt \rightarrow \min$$

0

7.1.2. Řešení úlohy

Laplaceův obraz regulační odchylky: $E(p) = f_{ed}(p) \times D(p)$

$$F_{ed}(p) = \frac{-S(p)}{1 + R(p) \times S(p)} = \frac{6 \times p}{p^3 + 6p^2 + 11p + 6p \times (1 + r_0) + 6r_1}$$

$$D(p) = \frac{1}{p}$$

$$\bar{E}(p) = E(p) - \frac{1}{p} \lim_{p \rightarrow 0} p \times E(p) = \frac{6}{p^3 + 6p^2 + 11p + 6p \times (1 + r_0) + 6r_1}$$

$$J_2 = \frac{1}{2 \times \alpha_n} \frac{H_d}{H_c}$$

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= 6r_1 & \beta_0 &= 6 \\ \alpha_1 &= 6 \times (1 + r_0) \\ \alpha_2 &= 11 \\ \alpha_3 &= 6 \\ \alpha_4 &= \alpha_n = 1 \end{aligned}$$

Hurwitzovy determinanty:

$$H_0 = \det \begin{bmatrix} 6 & 6 \times (1+r_0) & 0 & 0 \\ 1 & 11 & 6r_1 & 0 \\ 0 & 6 & 6 \times (1+r_0) & 0 \\ 0 & 1 & 11 & 6r_1 \end{bmatrix} = 6r_1 \times (396 \times (1+r_0) - 216r_1 - 36 \times (1+r_0))$$

$$H_1 = \det \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -36 \\ 1 & 11 & 6r_1 & 0 \\ 0 & 6 & 6 \times (1+r_0) & 0 \\ 0 & 1 & 11 & 6r_1 \end{bmatrix} = 36 \times (66 - 6 \times (1+r_0))$$

$$J_2 = \frac{18 \times (66 - 6 \times (1+r_0))}{6r_1 \times (396 \times (1+r_0) - 216r_1 - 36 \times (1+r_0))}$$

Vyšetření oblasti stability:

charakteristický polynom: $p^3 + 6p^2 + 11p + 6p \times (1+r_0) + 6r_1$

1. podmínka: $1+r_0 > 0$

$$r_0 > -1$$

2. podmínka: $r_1 > 0$

3. podmínka: determinanty Hurwitzovy matice H musí být větší než nula

$$H = \begin{bmatrix} 6 & 6 \times (1+r_0) & 0 & 0 \\ 1 & 11 & 6r_1 & 0 \\ 0 & 6 & 6 \times (1+r_0) & 0 \\ 0 & 1 & 11 & 6r_1 \end{bmatrix}$$

$$H_1 > 0 \quad 6 > 0 \quad \text{vždy}$$

$$H_2 > 0 \quad 66 - 6 \times (1+r_0) > 0$$

$$r_0 < 10$$

$$H_3 > 0 \quad 66 \times 6 \times (1+r_0) - 36 \times 6 \times r_1 - 36 \times (1+r_0) > 0$$

$$-r_0^2 + 9r_0 + 10 > 6r_1$$

Zadává se do programu:

vybraná metoda :globální optimalizace se

spline-aproximací

rozměr funkce: 2

funkce: $=(18 \times (66 - 6 \times (1 + p[1]))) /$

$(6 \times p[2] \times (396 \times (1 + p[1]) - 216 \times p[2] - 36 \times (1 + p[1])))$

omezující podmínky: a

počet omezujících podmínek: 4

1. podmínka: $p[1] > -1$

2. podmínka: $p[2] > 0$

3. podmínka: $p[1] < 10$

4. podmínka: $-p[1] + 9 \times p[1] + 10 > 6 \times p[2]$

počet bodů k: 10

parametr h: 0.2

minimum nebo maximum: m

Výsledky z programu:

Mělo vyjít:

$p[1] = r_0 = 6.31$

$r_0 = 6.33$

$p[2] = r_1 = 2.25$

$r_1 = 2.24$

$J_2 = 0.061$

$J_2 = 0.061$

Výsledky počítané ručně a pomocí programu Globální optimalizace funkcí více proměnných se od sebe prakticky neliší. Tento program nám velmi zjednodušil práci, protože ruční počítání vede na soustavu nelineárních rovnic, s jejímž řešením je obecně velmi mnoho práce.

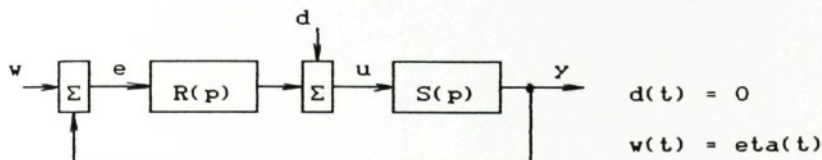
7.2. Aplikace na návrh regulátoru podle zobecněného kvadratického kritéria

7.2.1. Zadání úlohy

Podle zadaného optimalizačního funkcionálu je třeba optimálně seřadit PI regulátor na skok žádané hodnoty w :

ω

$$J = \int_0^{\infty} [[e(t) - e(\omega)]^2 - 0.5 [e'(t)]^2] dt \rightarrow \min$$



$$S(p) = \frac{1}{p + 2}$$

$$R(p) = r_0 + \frac{r_1}{p}$$

7.2.2. Řešení úlohy

Laplaceův obraz regulační odchylky: $E(p) = F_{ew}(p) \times W(p)$

$$F_{ew}(p) = \frac{1}{1 + R(p) \times S(p)} = \frac{p^2 + 2p}{p^2 + p(2 + r_0) + r_1}$$

$$W(p) = \frac{1}{p}$$

$$\bar{E}(p) = E(p) - \frac{1}{p} \lim_{p \rightarrow 0} p \times E(p) = \frac{p + 2}{p^2 + p(2 + r_0) + r_1}$$

obraz derivace regulační odchylky:

$$E'(p) = p \times E(p) - \lim_{p \rightarrow \infty} p \times E(p) = \frac{p + 2}{p^2 + p(2 + r_0) + r_1} - 1$$

$$E'(p) = \frac{-r_0 p - r_1}{p^2 + p(2 + r_0) + r_1}$$

Parcevalův integrál:

$$J_2 = J_{21} + J_{22} \quad , \quad J_{21} = \frac{1}{2 \times \alpha_{n1}} \frac{H_{d1}}{H_{c1}}$$

Hurwitzovy determinanty:

$$H_{c1} = H_{c2} = \det \begin{bmatrix} (2+r_0) & 0 \\ 1 & r_1 \end{bmatrix} = 2r_1 + r_1 r_0$$

$$H_{d1} = \det \begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 1 & r_1 \end{bmatrix} = r_1 + 4$$

$$H_{d2} = \det \begin{bmatrix} r_0^2 & -r_1^2 \\ 1 & r_1 \end{bmatrix} = r_0^2 r_1 + r_1^2$$

$$J_2 = \frac{0.25 r_0^2 r_1 + 0.25 r_1^2 + r_1 + 4}{2 \times (2r_1 + r_1 r_0)}$$

Vyšetření oblasti stability:

charakteristický polynom: $p^2 + p(2+r_0) + r_1$

1. podmínka: $2+r_0 > 0$

$$r_0 > -2$$

2. podmínka: $r_1 > 0$

u soustavy 2. řádu jsou zároveň i podmínkami postačujícími

Protože je oblast stability neohraničená je třeba zadat omezující podmínky pro maximální hodnoty r_0, r_1 z technického hlediska.

Volba: $r_0 < 50$

$r_1 < 20$

Zadání do programu:

vybraná metoda :globální optimalizace se

spline-aproximací

rozměr funkce: 2

funkce:
$$=(0.25 \times p[1] \times p[1] \times p[2] + 0.25 \times p[2] \times p[2] + p[1] + 4) /$$
$$(2 \times (2 \times p[2] + p[2] \times p[1]))$$

omezující podmínky: a

počet omezujících podmínek: 4

1. podmínka: $p[1] > -2$

2. podmínka: $p[2] > 0$

3. podmínka: $p[1] < 50$

4. podmínka: $p[2] < 20$

počet bodů k: 10

parametr h: 0.2

minimum nebo maximum: m

Výsledky z programu:

Mělo vyjít:

$p[1] = r_0 = 1.984$

$r_0 = 2$

$p[2] = r_1 = 3.997$

$r_1 = 4$

$J_2 = 0.500$

$J_2 = 0.5$

Výsledky počítané ručně a pomocí programu Globální optimalizace funkcí více proměnných se od sebe prakticky neliší. Program nám ušetřil opět mnoho práce, protože ručně tento příklad nejde vypočítat.

8.0. ZÁVĚR

Cílem této práce bylo porovnat mezi sebou metody globální optimalizace funkcí více proměnných. Zjistili jsme, že nejspolehlivější metoda nalezení globálního extrému je globální optimalizace se spline-aproximací. Tato metoda umožňuje nalézt globální extrém u všech typů příkladů, je universální.

V současné době, kdy se v praxi používají stále výkonnější a rychlejší počítače, ustupuje do pozadí i jedna z jejích nevýhod, časová náročnost výpočtu.

Porovnání algoritmů bylo prováděno na počítači PC AT 286/12. Pro srovnání uveďme, že na počítači PC 486DX/33 jsou výpočty mnohem rychlejší. V praxi to znamená, že i u složitých příkladů je extrém nalezen prakticky okamžitě.

Závěrem ještě uveďme, že na tuto práci bude v budoucnu navazovat další diplomová práce, která bude řešit použití globální optimalizace se spline-aproximací při návrhu regulátorů podle různých optimalizačních funkcionalů.

Seznam příloh

disketa se soubory: g_optim.exe

g_optim.pas

spline.dat

polyedr.dat

gauss.dat

grad.dat

tpc.exe

tpc.cfg

turbo.tpl

Použitá literatura

- /1/ Záda, V.: Globální optimalizace se spline-aproximací.
Koloquium ČSFR-BRD Zittau, listopad 1992

- /2/ Hamala, M.: Nelineárne programovanie. Alfa,
Bratislava 1972

- /3/ Hanuš, B.: Optimalizace systému řízení. Skrita VŠST,
Liberec 1978

- /4/ Jarník, J.: Integrální počet I. Academia, Praha 1984