

БЕЗГРАДИЕНТНЫЕ МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ДИНАМИКИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ

Колесникова Е.В., Колесникова Л.И., Русин Л.Ю.

Институт энергетических проблем химической физики РАН, г. Москва
rusin@chph.ras.ru

Аннотация

Рассмотрено применение безградиентных методов оптимизации к исследованию динамики элементарных процессов для определения кинематических параметров столкновения и начальных условий взаимодействия, оптимальных для образования продуктов в заданных энергетических состояниях, а также областей существования элементарных процессов. На примере элементарного процесса прямой трехтельной рекомбинации ионов проведено сравнение восьми многомерных безградиентных методов и показано, что наибольшей скоростью поиска обладают метод деформируемого многогранника с отражением двух или трех вершин, метод деформируемого многогранника с переносом вершин и метод Розенброка. Однако точность поиска с помощью этих методов ниже по сравнению с методом деформируемого многогранника с отражением одной вершины, скорость сходимости которого несколько уступает указанным методам. Остальные методы (метод Бокса, метод "спуск-подъем-перевал", имитации отжига) применительно к решаемой в данной работе задаче уступают методу деформируемого многогранника с отражением одной вершины, как по скорости поиска, так и по его точности.

GRADIENTLESS OPTIMIZATION METHODS FOR STUDIES OF ELEMENTARY PROCESSES DYNAMICS

We consider an application of gradient-free optimization methods to studies of dynamics of elementary processes. The goal is to determine the kinematic parameters of a collision and the initial conditions of the interaction that are optimal for the formation of products in the given energy states, as well as to describe the existence regions of elementary processes. By an example of the elementary process of direct three-body recombination of ions, we have compared eight multidimensional gradient-free methods and have shown that the deformed polyhedron method with the reflection of two or three vertices, the deformed polyhedron method with vertex translation, and the Rosenbrock method are characterized by the maximal search rate. However, the search accuracy ensured by these methods is worse compared with the deformed polyhedron method with the reflection of a single vertex (but the convergence rate of the latter is smaller than those of the above methods). The remaining methods (the Box, descent-ascent-saddle, and simulated annealing methods) are inferior to the deformed polyhedron method with the reflection of a single vertex in the search rate as well as in the search accuracy (as applied to the problem we solve in this work).

1 Введение. Начальные и кинематические условия в динамике элементарных процессов

Элементарный химический процесс является одним из возможных исходов столкновения частиц. Два других исхода столкновения - упругое или неупругое рассеяние - можно рассматривать как ветвление процесса рассеяния, зависящее от природы частиц, условий их столкновения и начальных внутренних энергетических состояний партнеров столкновения. Особенности структуры атомов и молекул проявляются через строение поверхности потенциальной энергии (ППЭ), которая управляет процессом столкновения и

определяет его характер. Однако, конкретный исход взаимодействия частиц в рамках известной или предполагаемой ППЭ зависит не только от конструкции ППЭ, но и от кинематических условий столкновения, т.е. относительных скоростей частиц, прицельных параметров, углов взаимной ориентации частиц и их скоростей и начальных условий, в которых находились взаимодействующие частицы.

Такое разделение основных "факторов влияния" закономерно ставит вопрос о возможных границах изменения управляющих факторов», в которых данный элементарный процесс может осуществляться. Отметим, что с одним из таких параметров – температурой - химическая кинетика имеет дело при определении энергии активации процесса. Однако, температура с точки зрения динамики элементарного процесса является очень грубым параметром по сравнению с кинематическими параметрами столкновения. Вопрос о границах кинематических параметров реализации элементарного процесса, насколько известно авторам статьи, в литературе рассматривался только в работе [1].

Рекомбинация ионов Cs^+ и Br^- при участии третьего тела является точно обратным процессу столкновительно-индуцированной диссоциации (СИД)



Для таких процессов ($\text{R}=\text{Xe}, \text{Kr}, \text{Hg}$) с хорошей точностью установлены поверхности потенциальной энергии (ППЭ) [2,3], управляющие взаимодействиями для ряда R (см. также [4]). Принцип микроскопической обратимости (см., например, [5]), основан на инвариантности обращения времени в уравнении Шредингера и классических уравнений движения. Это определяет применимость ППЭ, построенной для СИД, к исследованиям динамики рекомбинации, т.е. использовать ППЭ, управляющую прямым процессом, например, индуцированными столкновениями диссоциацией молекул с ионной связью, в том числе и молекул CsBr [4], для исследования динамики обратной реакции прямой трехтельной рекомбинации ионов



Трехтельная рекомбинация (Б) определяется в основном тремя кинематическими параметрами, рассмотренными в [1,5]: прицельным параметром b и двумя углами θ и ϕ , определяющими взаимную ориентацию векторов скоростей рекомбинирующих частиц и третьего тела. Два других параметра – энергии столкновения ионов E_{ini} и энергии третьего тела E_{rel} , могут быть заданы по сетке. Таким образом, в формализованной постановке оптимизационной задачи остаются три независимых переменных b , Θ и Φ . Для определения граничных условий осуществления рекомбинации необходимо для каждого набора энергий E_{ini} и E_{rel} необходимо найти диапазоны изменения указанных параметров, при которых внутренняя энергия E_{molec} образующейся молекулы CsBr будет минимальна. Это связано с максимальным отводом энергии от рекомбинирующей пары ионов Cs^+ и Br^- третьим телом R .

Исследование влияния кинематических параметров столкновения на механизм взаимодействия дает возможность решить две задачи исследования элементарных процессов. Первая задача состоит в определении оптимальных условий образования продуктов в заданных энергетических состояниях. Вторая задача связана с возможностью определения области исходных параметров, в которой элементарный процесс может осуществиться. По сути дела вторая задача сводится к определению многомерной области существования исследуемого элементарного процесса в рамках рассматриваемой ППЭ. Очевидно, что экспериментальная проверка роли кинематических параметров, например, прицельного параметра, практически невозможна. Исследование обеих проблем с достаточной достоверностью возможно при наличии адекватной ППЭ, которая позволяет исследовать роль этих параметров в реализации элементарного процесса, т.е. детальную динамику.

Следует отметить, что простой перебор начальных условий и кинематических параметров делает решение обеих задач практически невозможным, как по степени достоверности получаемых решений, так и по требуемым вычислительным и временным ресурсам.

Реальную перспективу решения описанных выше задач и ряд других представляют методы поисковой оптимизации [6], т.е. методы прямого поиска (или методы нулевого порядка). Эта группа методов имеет в рассматриваемой проблеме существенное преимущество перед градиентными или методами ненулевого (первого или второго порядка), выражающееся в том, что они используют только значение так называемой целевой функции, (см. ниже), а не ее аналитическое выражение, записать которое в рамках поставленных задач невозможно. Методы нулевого порядка хорошо разработаны в рамках системного анализа и представляют возможности исследования одномерных, двумерных и многомерных задач, в которых необходима оптимизация некоторой функции одного или нескольких переменных. В рассматриваемом случае такой целевой функцией может служить значение E_{molec} , которое должно быть меньше энергии диссоциации на ионы образующейся в рекомбинации молекулы CsBr. В [1,7,8,9,10] сформулированные выше задачи для R= Kr, Xe и Hg в качестве третьего тела решались методом деформируемого многогранника [1,10] и разработанный для поиска диапазонов начальных параметров существования элементарного процесса. Для всех трех R величина E_{ini} не сильно влияет на эффективность стабилизации молекулы CsBr. Зависимость от энергии третьего атома E_{rel} существенно более сложная – с ростом значений E_{rel} возрастает глубина полученного минимума внутренней энергии молекулы CsBr, т.е. усиливается эффективность стабилизации молекулы, а также уменьшается оптимальное для глубокой стабилизации молекулы значение прицельного параметра. При этом уменьшение оптимального для глубокой стабилизации молекулы значения прицельного параметра происходит с различной скоростью для различных масс третьего атома. Для R = Hg оно происходит неравномерно, с резким уменьшением при больших значениях E_{rel} , для R = Xe – практически равномерно и для R = Kr – резко и с образованием двух пиков. Эти сложные зависимости могут представлять значительный интерес с точки зрения механизма элементарного процесса. Очень сложные зависимости от кинематических параметров были получены и для областей существования рекомбинационного процесса в рамках кинематических параметров. Поэтому представляет значительный интерес сравнение использованного метода деформируемого многогранника с другими методами поисковой оптимизации, а также кратко рассмотреть другие в том числе одномерные и двухмерные методы нулевого порядка, которые могут быть полезными при решении подобных задач.

Статья построена следующим образом. В разделе 2 после настоящего введения рассматривается специфическая терминология, используемая в задачах оптимизации, и определяются основные понятия, которые при этом используются. В этом же разделе рассматриваются основные признаки, по которым классифицируются методы поисковой оптимизации и выполняется решение задач определения оптимальных условий элементарного процесса рекомбинации молекулы CsBr с участием третьего тела с точки зрения оптимизации условий. В разделе 3 выполнен краткий обзор различных безградиентных методов, включая методы одномерного, двумерного и многомерного поиска, а также характеристик безградиентных методов, наиболее известных на сегодняшний день вариаций этих методов. Рассмотрены также основные проблемы, возникающие при использовании методов нулевого порядка, и возможные пути их разрешения. Раздел 4 посвящен сравнению результатов применения восьми различных многомерных безградиентных методов оптимизации для определения значений начальных кинематических параметров, приводящих к максимальной стабилизации молекулы CsBr (результаты использования симплексного метода и его модификации к исследованию

реакции рекомбинации для решения обеих динамических задач подробно приводятся в [1]). В заключении рассматриваются некоторые перспективы применения метода к исследованию элементарных процессов и анализу зависимостей их результатов от начальных условий, а так же возможные пути усовершенствования использованного в настоящей работе метода.

2 Общая терминология и понятия задач оптимизации

С точки зрения системного анализа элементарный процесс, протекающий между атомами и молекулами, может рассматриваться как система, обладающая всеми необходимыми атрибутами, такими как, например, целостность, т.е. имеющая определенную совокупность связанных между собой и взаимодействующих друг с другом элементов [6] и другими характеристиками системы. Такое представление позволяет использовать методы *поисковой оптимизации* для определения таких значений динамических параметров элементов атомно-молекулярной системы, которые обеспечивают оптимальное с той или иной точки зрения протекание процессов в рассматриваемой системе. Это соответствует отысканию таких значений параметров системы, при которых значение некоторого критерия, называемого целевой функцией, или критерием оптимальности, будет экстремальным. Таким образом, решение ряда теоретических и практических задач сводится к отысканию экстремума (для определенности будем рассматривать задачу минимизации) скалярной функции $f(x)$ n -мерного векторного аргумента. В дальнейшем под x будем понимать вектор-столбец (точку в n -мерном пространстве) начальных параметров. Вектор x^* , соответствующий тем значениям начальных параметров, при которых значения целевой функции будут минимальными, называют оптимальным.

Задачу минимизации $f(x)$ можно заменить эквивалентной ей задачей максимизации, когда находится минимум функции $y = -f(x)$ (рис. 1).

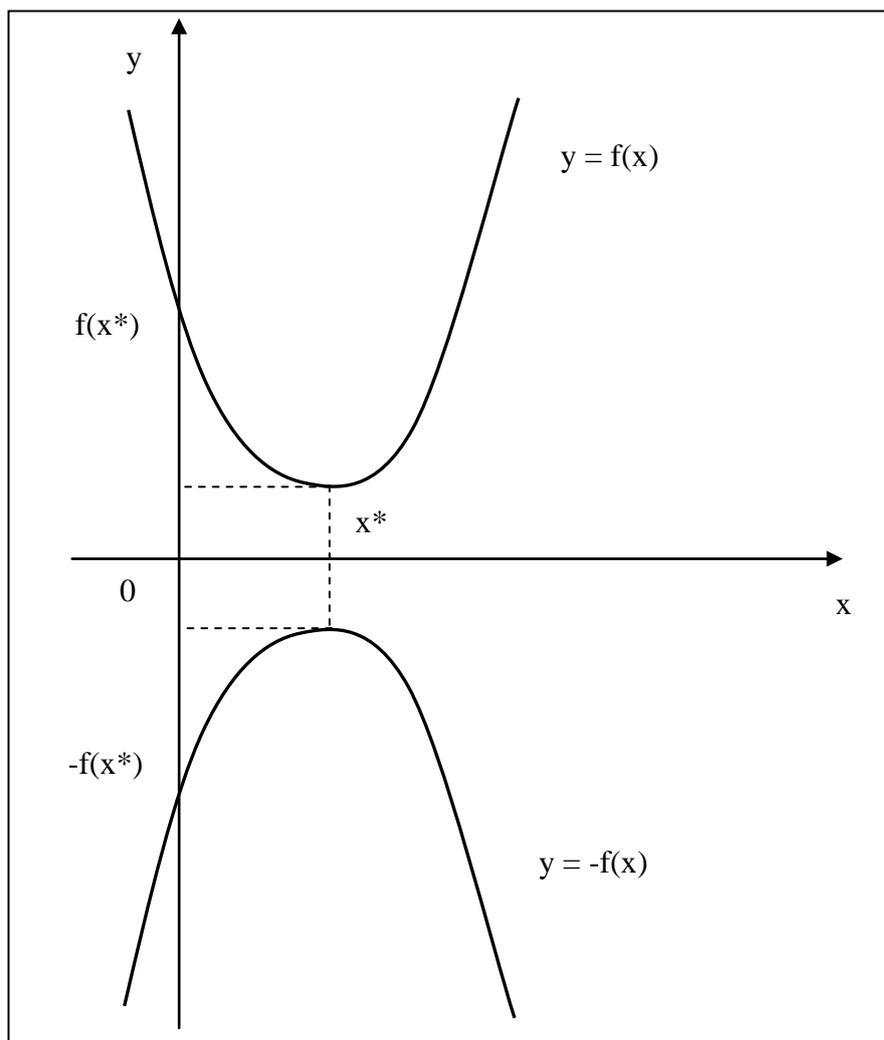


Рис.1. Графическое представление экстремума функции

К числу задач, решаемых методами оптимизации, можно отнести исследование граничных условий осуществления элементарного химического процесса. Введение целевой функции в этом случае определяется физическим содержанием процесса рекомбинации, которое рассматривается ниже.

Точка x^* определяет глобальный минимум функции одной переменной $f(x)$, заданной на числовой прямой X , если $x^* \in X$ и $f(x^*) < f(x)$ для всех $x \in X$ (рисунок 2, а). Точка x^* называется точкой строгого глобального минимума, если это неравенство выполняется как строгое. Если же в выражении $f(x^*) \leq f(x)$ равенство возможно при x , не равных x^* , то реализуется нестрогий минимум, а под решением в этом случае понимают множество $x^* = \{x^* \in X: f(x) = f(x^*)\}$ (рис. 2б).

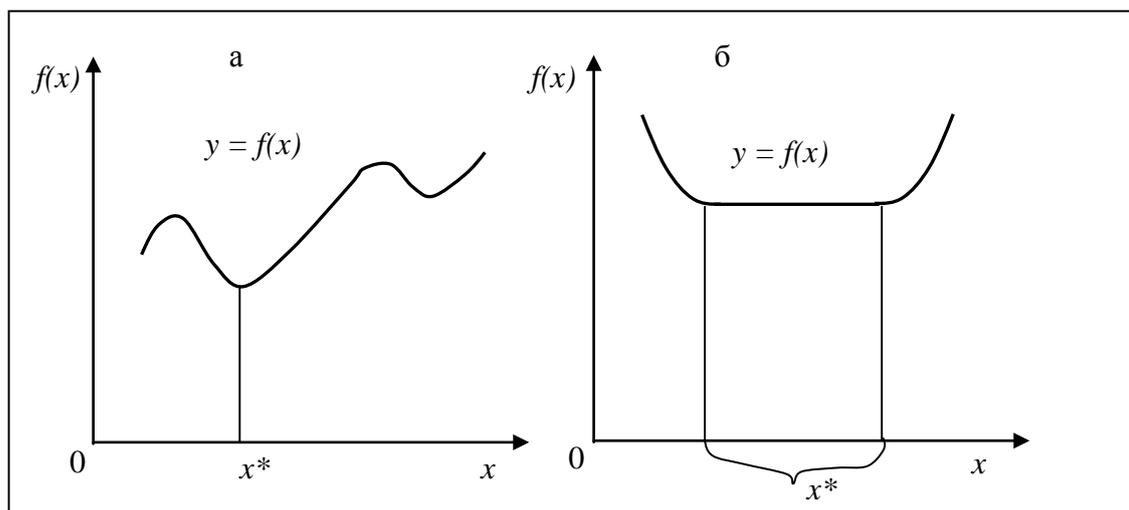


Рис. 2. Глобальный минимум: а) - строгий, б) – нестрогий

Методы решения задач отыскания минимума функции многих переменных $f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k)$ при отсутствии ограничений на диапазон изменения неизвестных условно разделяются на два класса: аналитические и поисковые.

Применение аналитических методов связано с условиями экстремума. Аналитический подход лежит в основе косвенных методов оптимизации и сводит решение задачи оптимизации к решению системы нелинейных уравнений, являющихся следствием условий экстремума функции многих переменных. Эти условия определяют, что в точке экстремума x^* все первые производные функции по независимым переменным равны нулю и образуют систему из k нелинейных уравнений, среди решений которой находятся точки минимума. Вектор $f'(x)$, составленный из первых производных функции по каждой переменной, называют градиентом скалярной функции $f(x)$. В точке минимума градиент равен нулю. Решение систем нелинейных уравнений - задача порой весьма сложная и трудоемкая, к тому же выполнимая только в том случае, когда известно аналитическое выражение целевой функции $f(x)$. Однако найти решение задачи с помощью условий экстремума явное решение задачи удается в редких случаях.

Вследствие этого на практике используют второй подход к минимизации функций, составляющий основу прямых методов [11]. Суть их состоит в построении последовательности векторов $x_0, x_1, \dots, x_j, \dots, x_n$, таких, что $f(x_0) > f(x_1) > \dots > f(x_j) > \dots > f(x_n)$. В качестве начальной точки x_0 (приближения) может быть выбрана произвольная точка, однако стремятся использовать всю имеющуюся информацию о поведении функции $f(x)$, чтобы точка x_0 располагалась как можно ближе к точке минимума. Переход (итерация) от точки x_j к точке x_{j+1} , где $n = 1, 2, \dots, n$, состоит из двух этапов:

1. Выбор направления движения из точки x_j на основе локальной информации о поведении функции в окрестностях точки (значения функции в точке и ее окрестностях, первая или вторая производная в точке) и правил метода;
2. Определение шага вдоль этого направления.

В полученной точке, если не выполнены условия останова, повторяют описанные операции.

Важной задачей при решении прикладных экстремальных задач является выбор наиболее эффективных методов оптимизации. Качественный или многокритериальный характер целевой функции также делает невозможным применение методов первого или более высокого порядка, т.к. в этом случае не ясно, что представляет собой производная,

тогда как возможно применение методов нулевого порядка для таких задач. Все эти факторы приводят к необходимости применения неградиентных, поисковых методов оптимизации, использующих только значения целевой функции. Некоторые из этих методов были рассмотрены и использованы в работах [7-10].

3 Методы прямого поиска

3.1 Общая характеристика методов нулевого порядка

В прямых методах оптимизации для определения направления спуска не требуется вычислять производные целевой функции. Направление минимизации в данном случае полностью определяется последовательными вычислениями значений функции.

Что касается рассматриваемых задач, выбор методов оптимизации нулевого порядка для поиска значений начальных кинематических параметров, приводящих к максимальной стабилизации молекулы CsBr, обусловлен тем, что аналитическое выражение зависимости целевой функции E_{molec} от независимых переменных b , θ , φ отсутствует. Существует лишь возможность получения отдельных значений целевой функции при заданных значениях входных параметров E_{ini} , E_{rel} , b , θ , φ путем расчета траекторий частиц для каждого из этих значений входных параметров. Получение выражения аналитической зависимости невозможно в связи со сложностью и нелинейностью взаимосвязей между параметрами процесса рекомбинации. В связи с отсутствием аналитического выражения целевой функции предпочтение отдается безградиентным методам оптимизации (иначе их называют методами прямого поиска). Одним из наиболее эффективных методов прямого поиска является симплексный метод, примененный в работах [1, 7-10] и использующий перемещение симплекса – многогранника, как правило, с числом вершин, на одну превышающим число независимых переменных, по поверхности независимых переменных, в локально оптимальном на каждом шаге поиске направлении. В этом разделе рассматриваются численные методы оптимизации, у которых величина и направление шага к оптимуму формируются однозначно по определенным детерминированным функциям в зависимости от свойств критерия оптимальности в окрестности текущей точки без использования производных (т.е. градиента). Все алгоритмы имеют итерационный характер и для переменной i на $j+1$ итерации выражаются формулой:

$$x_{i,j+1} = x_{i,j} + \Delta x_{i,j}. \quad (3)$$

Для рассматриваемой группы методов:

$$\Delta x_{i,j} = R(x_{1,j}, x_{2,j}, \dots, x_{n,j}). \quad (4)$$

Безградиентные (методы поисковой оптимизации или методы нулевого порядка) методы различаются способом выбора вектора направления оптимизации и его длины, определения шага и делятся на методы одномерной и многомерной оптимизации.

Основная особенность рассматриваемой группы методов — отсутствие вычисления градиента критерия оптимальности. Ряд методов прямого поиска базируется на последовательном применении одномерного поиска (поиск минимума функции на одномерном луче или отрезке) по переменным или по другим задаваемым направлениям, что облегчает их алгоритмизацию и применение. Применение методов одномерной оптимизации может быть одним из этапов многомерной оптимизации.

3.2 Одномерная оптимизация.

В ряде методов многомерной оптимизации одним из этапов является поиск минимума функции на одномерном луче или отрезке. К этим задачам, разумеется, могут быть

применены градиентные или ньютоновские методы и их модификации. Методы одномерного поиска нулевого порядка требуют только возможности вычислять значение функции в произвольной точке. Итак, мы рассматриваем задачу

$$\text{Найти } \min_{x \in [a, b]} f(x) \text{ на } [a, b] \subseteq R^1, \quad (5)$$

в которой относительно функции $f: [a, b] \rightarrow R$ предполагается то, что на этом отрезке существуют $\alpha, \beta \in [a, b]$, $\alpha \leq \beta$, такие, что:

- 1) функция $f(x)$ строго монотонно убывает на отрезке $[a, \alpha]$;
- 2) функция $f(x)$ строго монотонно возрастает на отрезке $[\beta, b]$;
- 3) $f(x^*) = \min_{x \in [a, b]} f(x)$ при $x^* \in [\alpha, \beta]$.

Это означает, что функция $f(x)$ унимодальна. Непрерывность $f(x)$ не предполагается.

Основным свойством унимодальных функций является то, что при известных значениях f в точках x_1 и x_2 отрезка $[a, b]$, $x_1 < x_2$ и можно определенно сказать, на каком из отрезков $[a, x_2]$, $[x_1, x_2]$, $[x_1, b]$ лежит минимум x^* функции f (рис. 3).

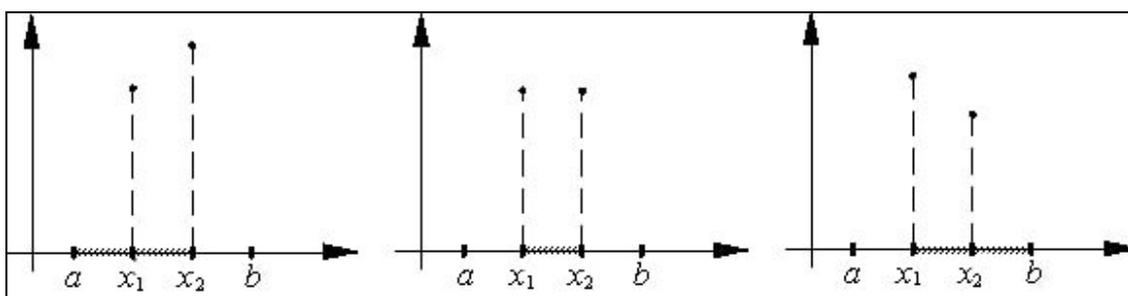


Рис. 3. Унимодальность функции

Если оказалось, что $f(x_1) < f(x_2)$, то в силу унимодальности минимум не может лежать правее точки x_2 , и от отрезка $[a, b]$ можно перейти к отрезку $[a, x_2]$, сократив интервал неопределенности, на котором располагается точка минимума. Если при тех же условиях $f(x_1) > f(x_2)$, то минимум не может лежать левее точки x_1 и можно перейти к отрезку $[x_1, b]$.

Поэтому свойство унимодальности применяется в методах оптимизации для сокращения отрезка, на котором располагается минимум функции.

В излагаемых ниже методах (деления отрезка пополам, Фибоначчи и золотого сечения – всех за исключением метода прямого сканирования) используется описанный способ сокращения интервала неопределенности. Методы различаются способами расположения точек, в которых вычисляются значения минимизируемой функции.

В реальности невозможно располагать *пробные точки*, т.е. точки, в которых вычисляются значения функции, на сколь угодно близком расстоянии друг от друга. Поэтому делается предположение, что это расстояние не меньше фиксированного числа $\varepsilon > 0$.

Все описываемые ниже методы указывают на отрезок, на котором гарантированно лежит точка x^* . Этот отрезок называют *отрезком* (или *интервалом*) *неопределенности*. Таким образом, если в качестве приближенного значения x^* взять центр этого отрезка, то погрешность метода равна половине длины отрезка неопределенности.

3.2.1 Метод прямого сканирования

Метод основан на последовательном переборе всех значений на интервале (a, b) с некоторым заранее оговоренным шагом, считающимся порогом нечувствительности, с вычислением критерия оптимальности (значений целевой функции) в каждой точке. За

величину шага принимается величина погрешности, и с этим шагом выполняется прохождение по всему интервалу (рис. 4).

Преимуществом метода является то, что даже если функция имеет много экстремумов, то все равно удастся найти глобальный экстремум. Недостатком являются требующие больших затрат времени вычисления. Для уменьшения количества таких вычислений применяется сканирование со скользящим шагом, т.е. сканирование с большим шагом ($\Delta_1 \gg \epsilon$), после которого определяется подотрезок с наиболее глубоким минимумом (x_1, x_2), где $x_2 = x_1 + \Delta_1$, дальше шаг уменьшается и отрезок сканируется, до тех пор, пока не будет достигнута величина шага, равная шагу порога нечувствительности ϵ .

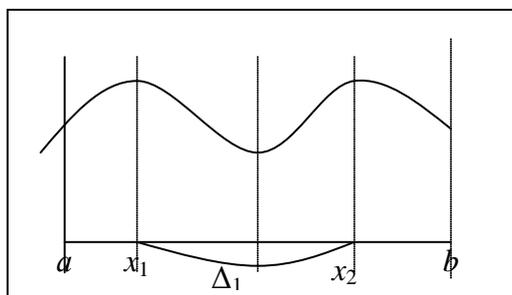


Рис. 4. Метод прямого сканирования

3.2.2 Метод дихотомии.

Пусть функция $f(x)$ унимодальна на отрезке $[a, b]$. Тогда, чтобы найти ее минимум необходимо заранее задать наименьший отрезок неопределенности ϵ , по достижении которого поиск прекращается. Величина этого отрезка определяет точность нахождения экстремума.

Переход к каждому последующему $(j + 1)$ -му отрезку сводится к размещению на j -м отрезке двух пробных точек x_{1j} и x_{2j} так, чтобы расстояние между ними было равно ϵ и они были симметричны относительно центра отрезка:

$$x_j = (a_j + b_j)/2 - \epsilon/2, \quad y_j = (a_j + b_j + \epsilon)/2 + \epsilon/2, \tag{6}$$

и выбору в качестве L_{j+1} отрезка $[a_j, x_{2j}]$, если $f(x_{1j}) \leq f(x_{2j})$ и $[x_{1j}, b_j]$ в противном случае (рис. 5).

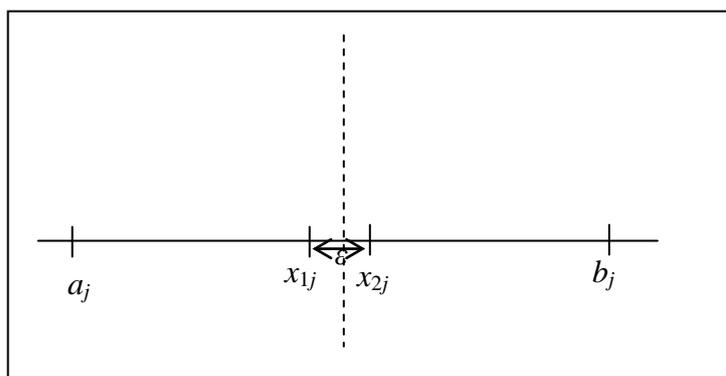


Рис.5. Метод дихотомии

Таким образом, каждый шаг требует двух вычислений функции и за j вычислений (j четно) мы получаем отрезок неопределенности длины

$$l_j = \frac{l}{2^{j/2}} + (1 - \frac{l}{2^{j/2}}) \cdot \varepsilon, \quad (7)$$

где $l = b - a$ — длина начального отрезка.

Например, если $l = 1$ и $\varepsilon \ll 1$, то для получения отрезка длины 10^{-6} нужно порядка 40 вычислений функции.

3.2.3 Метод золотого сечения

Пусть функция $f(x)$ унимодальна на отрезке $[a, b]$. Для построения конкретного метода одномерной минимизации, работающего по принципу последовательного сокращения интервала неопределенности, необходимо задать правило выбора на каждом шаге двух внутренних точек. Желательно, чтобы одна из них всегда использовалась в качестве внутренней точки и для следующего интервала. Тогда частота вычислений функции $f(x)$ сократится вдвое и одна итерация потребует расчета только одного нового значения функции. Такую стратегию используют методы золотого сечения и Фибоначчи.

Золотым сечением называется деление отрезка на две части таким образом, чтобы отношение длины всего отрезка к длине большей части равнялось отношению длины большей части к длине меньшей части отрезка.

Пусть для удобства выбран исходный отрезок $[0, 1]$, тогда из определения золотого сечения имеем

$$1/\tau = \tau/(1 - \tau), \quad 1 - \tau = \tau^2, \quad \tau = (-1 \pm \sqrt{5})/2, \quad \tau = 0,618, \quad (8)$$

где τ — точка золотого сечения.

Золотое сечение примечательно тем, что на отрезке есть две точки золотого сечения (τ и $1 - \tau$) и, если перейти от исходного отрезка к отрезку $[0, \tau]$, точка $1 - \tau$ является точкой золотого сечения этого отрезка. Если перейти к отрезку $[1 - \tau, 1]$, то точка τ будет точкой золотого сечения этого отрезка. Свойство быть точкой золотого сечения используется в методе золотого сечения используется в методе золотого сечения и повышает его эффективность. Для сокращения интервала неопределенности можно на каждом шаге (итерации) метода, кроме первого, приводить всего одно вычисление функции $f(x)$, используя точку, в которой значение функции уже вычислено.

Скорость уменьшения исходного интервала неопределенности описывается соотношениями:

$$F_3(N) = L_N/L_1 = \tau^N \approx (0,618)^{N-1}. \quad (9)$$

Для методов деления отрезка пополам и золотого сечения можем записать выражения для определения числа вычислений при сокращении исходного интервала неопределенности в $1/\varepsilon$ раз[6]:

$$F(N) = \varepsilon, \quad F_3(N) = \varepsilon_3, \quad N = 2 \ln \varepsilon / \ln 0,5, \quad N_3 = 1 + \ln \varepsilon / \ln 0,618. \quad (10)$$

В табл. 1 приведены значения N, N_3, ε :

Таблица 1

Значения числа вычислений функции N, N_3, ε .

N	7	9	14	20
N_3	6	8	11	16
ε	0,1	0,05	0,01	0,001

Методы золотого сечения и Фибоначчи основываются на одном и том же алгоритме перехода к следующей пробной точке и отличаются лишь способом выбора первой точки. В результате каждого шага (добавления одной пробной точки) мы получаем новый отрезок L с одной "старой" пробной точкой. "Новая" пробная точка симметрична «старой» точке относительно центра отрезка L . Итерации выполняются до тех пор, пока расстояние между точками a и b не перестанет превышать ε .

3.2.4 Метод Фибоначчи

Этот метод обеспечивает стратегию, максимально гарантирующую сокращение интервала неопределенности при заданном количестве вычислений функции. В силу того, что в асимптотике $\tau = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{F_{m+1}}{F_m}$, где $F_1, F_2, \dots, F_m, \dots$ - числа Фибоначчи (элементы числовой последовательности 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233, 377, 610, 987, 1597..., т.е. $F_1 = 1, F_2 = 1, F_{m+1} = F_m + F_{m-1}, m \in N$), метод золотого сечения может быть трансформирован в так называемый метод чисел Фибоначчи.

В силу свойств чисел Фибоначчи количество итераций строго ограничено. Это удобно, если сразу задано количество возможных обращений к функции.

При фиксированном количестве m обращений к процедуре вычисления значений функции $f(x)$ поиск Фибоначчи состоит в определении точек, дробящих интервалы неопределенности в отношениях, заданных числами F_{m-1}, F_{m-2} , и т.д. Если принять длину исходного интервала за F_m , то длиной k -го интервала будет F_{m-k} , а его оцениваемые внутренние точки будут отстоять от левой границы на F_{m-k-2} и на F_{m-k-1} , причем в одной из них значение функции $f(x)$ всегда известно из предыдущего шага. Таким образом, в методе Фибоначчи сначала задается число m вычислений функции, и затем первая пробная точка подбирается таким образом, чтобы последняя пара экспериментов давала отрезок неопределенности наименьшей длины. Это означает, что последние две точки должны составлять симметричную относительно центра отрезка пару, расстояние между которыми равно ε . Результатом поиска Фибоначчи с m вычислениями значений функции $f(x)$ является интервал неопределенности, составляющий $(1/F_N)$ -ю часть длины исходного интервала.

К недостаткам метода можно отнести обязательный выбор числа вычислений m значений функции до начала процесса оптимизации.

Метод Фибоначчи является лучшим в этом классе методов, в частности, по сравнению с методом золотого сечения, за одно и то же число шагов он дает отрезок неопределенности в $\tau^{2/\sqrt{5}} \approx 1.17$ раз меньший. На практике чаще используют первый из них, поскольку выигрыш в методе Фибоначчи не велик, а необходимость заранее знать число m вычислений функции зачастую обременительна.

3.2.5 Метод парабол

Идея этого метода связана с аппроксимацией минимизируемой функции $f(x)$ параболической моделью, параметры которой определяются по результатам вычислений значений функции $f(x)$ в трех точках, и с определением точки минимума модели.

Если заданы точки x_1, x_2, x_3 и значения функции в этих точках $f(x_1), f(x_2), f(x_3)$, то уравнение параболы имеет вид

$$g(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2), \quad (11)$$

где

$$f(x_1) = a_0; \quad f(x_2) = f(x_1) + a_1(x_2 - x_1), \quad (12)$$

$$f(x_3) = f(x_1) + [f(x_2) - f(x_1)] / [(x_2 - x_1)(x_3 - x_1)] + a_2(x_3 - x_1)(x_3 - x_2); \quad (13)$$

$$a_1 = [f(x_2) - f(x_1)] / (x_2 - x_1); \quad (14)$$

$$a_2 = \frac{1}{x_3 - x_2} \left[\frac{f(x_3) - f(x_1)}{x_3 - x_1} - \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \right]. \quad (15)$$

Точку минимума параболы можно определить из условия минимума $dg/dx = 0$:

$$\bar{x} = (x_1 + x_2) / 2 - a_1 / (2a_2). \quad (16)$$

Для вычисления \bar{x} необходимо по значениям $f(x_1), f(x_2), f(x_3)$ найти значения a_0, a_1, a_2 и подставить их в выражение для \bar{x} .

Данный метод ориентирован на поиск минимума функций, близких к квадратичным.

3.2.6 Метод стохастической аппроксимации

Этот метод применяют для решения задач оптимизации в условиях, когда значения минимизируемой функции вычисляются (измеряются) со случайными ошибками:

$$y(x) = f(x) + \varepsilon, \quad (17)$$

где ε - случайные ошибки.

Предполагается, что математическое ожидание ошибок равно нулю и дисперсия случайных ошибок ограничена, отсюда $My(x) = f(x)$.

Поиск минимума осуществляют с помощью рекуррентной процедуры:

$$x_{k+1} = x_k - a_k [y(x_k + c_k) - y(x_k - c_k)] / c_k, \quad k = 1, 2, \dots \quad (18)$$

Для сходимости процедуры должны выполняться следующие условия:

$$a_k > 0, \quad c_k > 0, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} a_k = \lim_{k \rightarrow \infty} c_k = 0, \quad \sum_{k=1}^{\infty} a_k = \infty, \quad \sum_{k=1}^{\infty} (a_k / c_k)^2 < \infty, \quad (19)$$

где a_k - длина шага (рабочего шага); c_k - длина пробного шага.

Данные условия выполняются, например, при

$$a_k = 1/k, \quad c_k = 1/k^{1/4}. \quad (20)$$

Движение к минимуму с помощью процедуры (18) сильно зависит от случайных ошибок при измерении значений функции. Для ослабления этой зависимости применяют следующую модифицированную процедуру:

$$x_{k+1} = x_k - a_k \operatorname{sgn}(y(x_k + c_k) - y(x_k - c_k)), \quad k = 1, 2, \dots, \quad (21)$$

где последовательности $\{a_k\}, \{c_k\}$ удовлетворяют условиям (19);

$$\operatorname{sgn} a = \begin{cases} 1 & \text{при } a > 0, \\ 0 & \text{при } a = 0, \\ -1 & \text{при } a < 0. \end{cases} \quad (22)$$

Значение a_k можно изменять лишь при изменении знака выражения $y(x_k + c_k) - y(x_k - c_k)$, сохраняя a_k постоянным в остальных случаях.

Отметим также, что описанные методы одномерной оптимизации эффективны в случаях, когда функция либо не дифференцируема, либо вычисление производных сопряжено с большими сложностями либо затратами. В противном случае чаще используют методы первого или второго порядков, например, метод Ньютона.

3.3 Методы многомерной поисковой оптимизации

3.3.1 Метод покоординатного спуска (Гаусса-Зейделя)

Пусть $l_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ - i -й единичный координатный вектор, у которого i -я координата равна единице, а остальные - равны нулю, $i = 1, \dots, n$, x_1 - начальная точка, $\alpha_1 > 0$, некоторый скаляр. Точка x_k и число α_k д.б. известны. Положим

$$p_k = l_{i_k}, \quad i_k = k - n \left\lfloor \frac{k-1}{n} \right\rfloor, \quad \text{где } \left\lfloor \frac{k-1}{n} \right\rfloor - \text{целая часть числа } \frac{k-1}{n}. \quad (23)$$

Данное условие позволяет осуществлять циклический перебор координатных векторов:

$$p_1 = l_1, \dots, p_n = l_n, p_{n+1} = l_1, \dots \quad (24)$$

Вычислим значение функции $f(x)$ в точках x_k и $x_k + \alpha_k p_k$ и проверим выполнение неравенства

$f(x_k) > f(x_k + \alpha_k p_k)$, $\alpha_{k+1} = \alpha_k$. При его невыполнении вычислим значение функции $f(x)$ в точке $x_k - \alpha_k p_k$ и проверим выполнение неравенства

$$f(x_k) > f(x_k - \alpha_k p_k). \quad (25)$$

Если неравенство выполняется, то $x_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k$, $\alpha_{k+1} = \alpha_k$.

Считаем $(k+1)$ -й шаг удачным, если выполнено одно из приведенных неравенств. Если шаг неудачен, то $x_{k+1} = x_k$,

$$\alpha_{k+1} = \begin{cases} \lambda \alpha_k & \text{при } (i_k = n+1) \cap (x_k = x_{k-n}), \\ \alpha_k & \text{при } (i_k \neq n+1) \cup (x_k \neq x_{k-n}) \cup (1 \leq k \leq n), \end{cases} \quad (26)$$

где $\lambda \in (0,1)$ - фиксированное число. Числа λ и α_1 - параметры метода.

Условия для α_{k+1} означают, что если за один цикл из n шагов реализовался хотя бы один шаг, то длина шага α_k уменьшается.

Схема метода покоординатного спуска представлена на рис. 6.

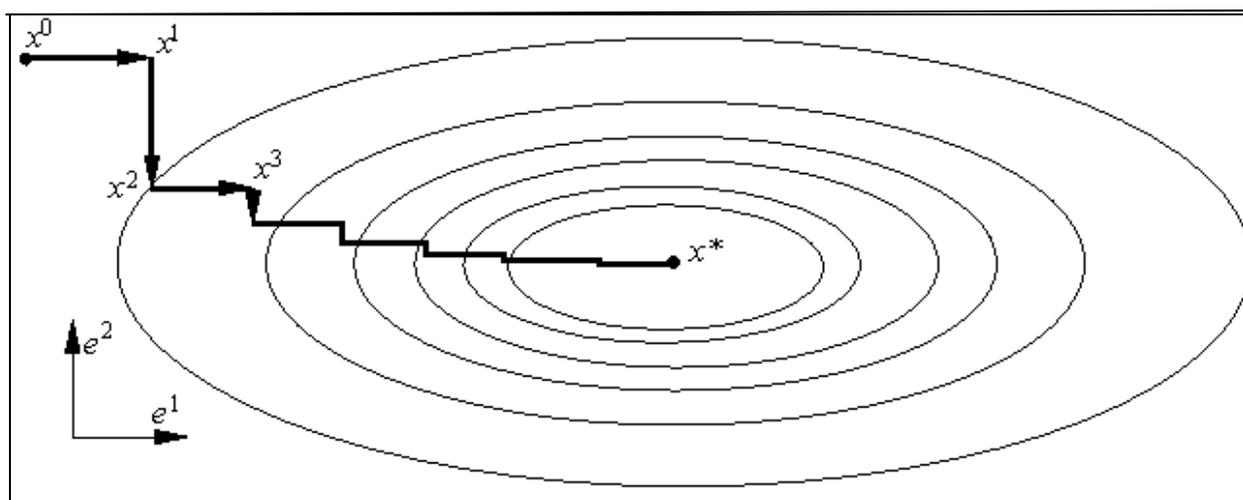


Рис. 6. Схема метода покоординатного спуска

Условие гладкости функции $f(x)$ является существенным, т.к. хотя производные в методе не используются, отсутствие гладкости может привести к отсутствию сходимости метода к решению. Поэтому для решения задачи определения оптимальных условий прямой трехтельной рекомбинации предпочтение необходимо отдать другим методам нулевого порядка.

В другом варианте метода покоординатного спуска последовательность $\{x_k\}$ строится по правилу

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \quad (27)$$

где α_k определяется из следующих условий:

$$\alpha_k \geq 0, f_k(\alpha_k) = \min_{\alpha \in (-\infty, \infty)} f_k(\alpha), f_k(\alpha) = f(x_k + \alpha p_k). \quad (28)$$

Сходимость метода относительно низкая по сравнению с методами, использующими производные, однако благодаря простоте метод получил широкое распространение.

3.3.2 Метод Хука-Дживса (сеточного поиска)

Метод является модификацией покоординатного спуска. Его идея состоит в том, что поиск периодически проводится в дополнительных направлениях, а не только в направлениях координат, что может ускорить сходимость. Метод предназначен для поиска экстремума в зонах нерегулярного поведения функции цели ("овраги", "изломы" и т.п.). Он сочетает в себе так называемый "исследующий" поиск с циклическим изменением переменных для выявления локального характера поведения целевой функции и рабочие шаги вдоль найденного направления. Поиск фактически осуществляется по узлам некоторой сетки.

Для проведения исследующего поиска необходимо задать величину шага, которая может быть различной для разных координатных направлений и изменяться в процессе поиска. Поиск начинается в некоторой исходной точке x_k . Если значение целевой функции в пробной точке не превышает значения функции в исходной точке, то шаг поиска рассматривается как успешный. В противном случае необходимо вернуться в предыдущую точку и сделать шаг противоположном направлении в последующей проверке значения

целевой функции. После перебора всех n координат исследующий поиск завершается. Полученную в результате точку x_{k+1} называют базовой.

Поиск по образцу заключается в реализации единственного шага из полученной базовой точки вдоль прямой, соединяющей эту точку с предыдущей базовой точкой. Новая точка образца определяется в соответствии с формулой

$$x'_{k+1} = x_{k+1} + (x_{k+1} - x_k). \quad (29)$$

Точка x'_{k+1} фиксируется в качестве временной базовой точки, и вновь проводится исследующий поиск. Если в результате получается точка с меньшим значением целевой функции, чем в точке x'_{k+1} , то она рассматривается как новая базовая точка x''_{k+1} . Если исследующий поиск неудачен, необходимо вернуться в точку x'_{k+1} и уменьшить величину шага путем введения некоторого множителя и возобновить исследующий поиск. Поиск завершается, когда величина шага становится достаточно малой.

Таким образом, суть этого метода состоит в обследовании окрестности начальной точки, в результате чего находят направление, в котором происходит уменьшение минимизируемой функции $f(x)$ (рис. 7). В выбранном направлении, пока значение функции уменьшается, осуществляется спуск. После того как в данном направлении не удастся найти точку с меньшим значением функции, уменьшают (как правило, вдвое) величину шага спуска. Если последовательные дробления шага не приводят к уменьшению функции, от выбранного направления спуска отказываются и осуществляют новое обследование окрестности и т. д.

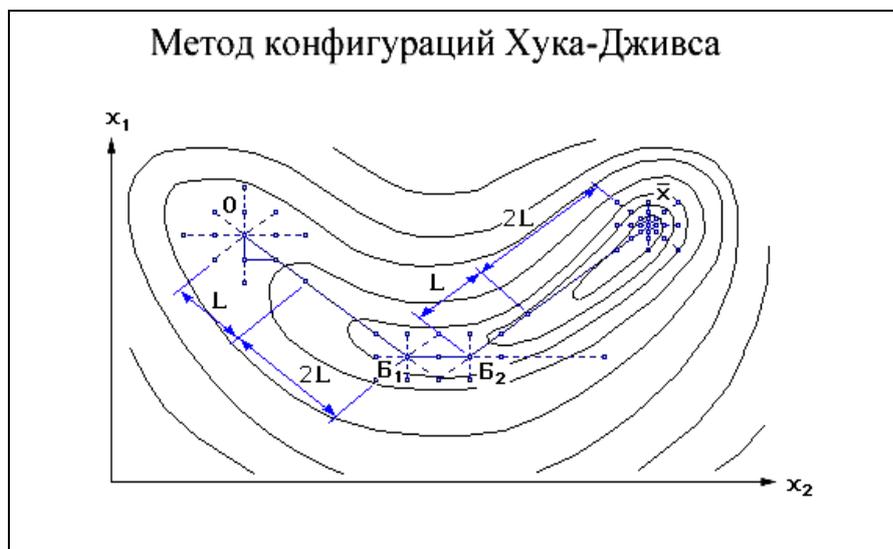


Рис. 7. Метод конфигураций Хука-Дживса

Существует ряд модификаций метода сеточного поиска путем введения системы ортогональных направлений поиска, ориентация которой изменяется на каждой итерации. Достоинством метода Хука-Дживса является простота его программирования. Он не требует знания целевой функции в явном виде, а также легко учитывает ограничения на отдельные переменные и сложные ограничения на область поиска.

Недостаток метода Хука-Дживса состоит в том, что в случае сильно вытянутых, изогнутых или обладающих острыми углами линий уровня целевой функции он может оказаться неспособным обеспечить продвижение к точке минимума. Действительно, в

случаях, изображенных на рис. 8 (а и б), каким бы малым ни брать шаг в направлении x_1 или x_2 из точки x' нельзя получить уменьшения значения целевой функции.

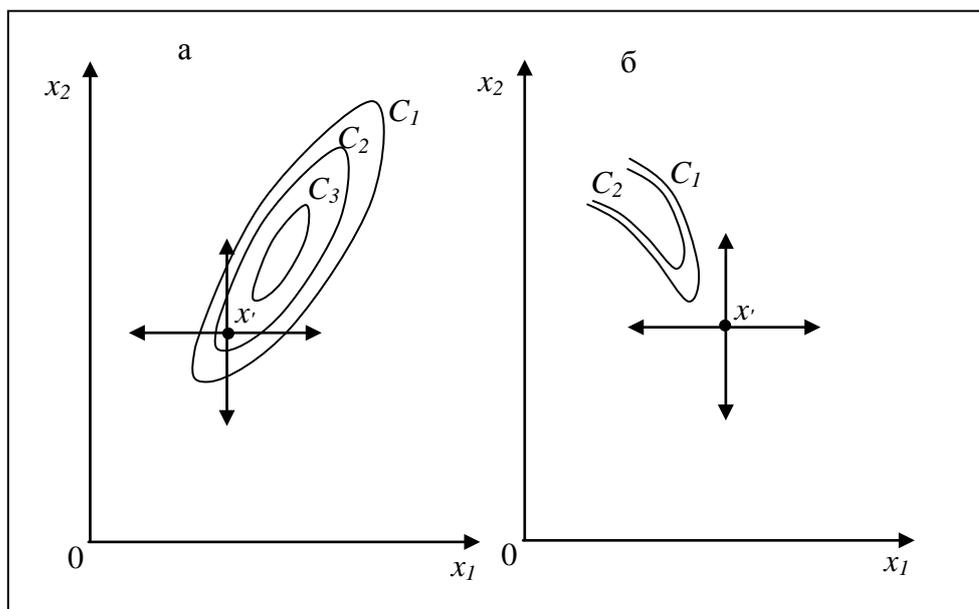


Рис. 8. Прямой поиск: невозможность продвижения к минимуму: а) $C_1 > C_2 > C_3$; б) $C_1 > C_2$

Поверхностью уровня (на плоскости - линией уровня) является поверхность, получаемая приравниванием выражения функции $f(x)$ некоторой постоянной величине C , т. е. $f(x) = C$. Во всех точках этой поверхности функция имеет одно и то же значение C . Давая величине C различные значения C_1, \dots, C_n , получают ряд поверхностей, геометрически иллюстрирующих характер функции.

Целевая функция в задаче определения оптимальных условий прямой трехтельной рекомбинации может иметь вид сложной, неровной поверхности, в том числе и с резкими перепадами значений, поэтому применение данного метода не является оптимальным.

3.3.3 Метод параллельных касательных (метод Пауэлла, метод сопряженных направлений)

Одним из эффективных по скорости сходимости методов прямого поиска считается метод сопряженных направлений. При работе этого метода информация, полученная на предыдущих итерациях, используется для построения векторов направлений поиска, а также для устранения заикливания последовательности координатных поисков. Метод ориентирован на решение задач с квадратичными целевыми функциями. В окрестности точки оптимума целевая функция зачастую может быть аппроксимирована квадратичной функцией.

Основная идея метода Пауэлла заключается в том, что в процессе движения в различных направлениях строится система взаимно сопряженных направлений. Когда построено n таких направлений и произведено n последовательных минимизаций в этих направлениях, то минимум квадратичной функции будет достигнут.

Этот метод использует свойство квадратичной функции, заключающееся в том, что любая прямая, которая проходит через точку минимума функции x^* , пересекает под равными углами касательные к поверхностям равного уровня функции в точках пересечения (Рис. 9).

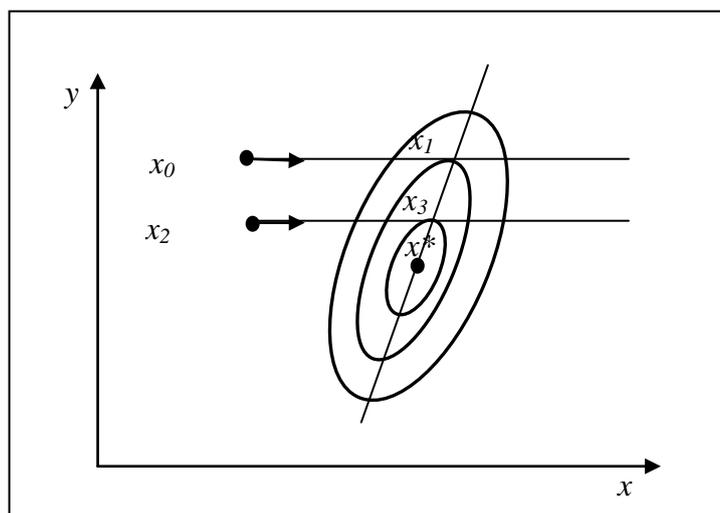


Рис. 9. Геометрическая интерпретация метода Пауэлла

Сопряженными называются направления $p_1, p_2, \dots, p_r, r \leq n$, называются A -сопряженными, если эти направления линейно независимы и для $\forall i \neq j (p_i, Ap_j) = 0$. Приведем здесь теорему [6]. Пусть $f(x) = a + (b, x) + (x, Ax)/2$ - квадратичная функция. Заданы направление (вектор) d и точки x_1, x_2 . Если y_1 минимизирует функцию $f(x_1 + \lambda d)$, а y_2 минимизирует функцию $f(x_2 + \lambda d)$, то направление $y_2 - y_1$ сопряжено с направлением d , т.е. $(y_2 - y_1, Ad) = 0$.

Действительно, из $\frac{\partial f}{\partial \lambda} = \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial \lambda} = (b^T + x^T A)d$ следует, что

$$(y_1^T A + b^T)d = 0, (y_2^T A + b^T)d = 0 \text{ и } (y_2 - y_1)^T Ad = 0. \quad (30)$$

Для случая двух переменных поиск, проводимый из точки y_1 или y_2 в направлении $y_2 - y_1$, обеспечивает получение точки минимума квадратичной функции. Таким образом, в случае двух переменных реализация трех одномерных поисков позволяет построить систему сопряженных направлений и найти точку оптимума квадратичной функции.

В приведенной теореме для того, чтобы определить сопряженное направление, требовалось задать две точки и некоторое направление. Это не очень удобно при проведении расчетов, поэтому предпочтительнее строить систему сопряженных направлений исходя из одной начальной точки, что легко осуществить с помощью координатных векторов.

Таким образом, в двумерном случае для нахождения точного минимума квадратичной функции требуется провести четыре одномерных поиска с использованием только значений функции. В случае n -мерного пространства требуется n^2 одномерных поисков для нахождения точки минимума квадратичной функции.

Суть метода состоит в следующем. Выбирается некоторая начальная точка x_0 и выполняется одномерный поиск вдоль произвольного направления, приводящий в точку x_1 . Затем выбирается точка x_2 , не лежащая на прямой $x_0 - x_1$, и осуществляется одномерный поиск вдоль прямой, параллельной $x_0 - x_1$. Полученная в результате точка x_3 вместе с точкой x_1 определяет направление $x_1 - x_3$ одномерного поиска, дающее точку минимума x^* . В случае квадратичной функции n переменных оптимальное значение находится за n итераций. Поиск минимума при этом, в конечном счете, осуществляется во взаимно сопряженных

направлениях. В случае неквадратичной целевой функции направления поиска оказываются сопряженными относительно матрицы Гессе.

Таким образом, в результате выполнения рассмотренной процедуры осуществляется поочередная замена принятых вначале направлений поиска. В итоге для квадратичной функции после n шагов они окажутся взаимно сопряженными, и метод сходится к точке локального минимума со сверхлинейной скоростью. Если же функция не является квадратичной, то требуется более чем n циклов. Поскольку целевая функция – внутренняя энергия молекулы CsBr, зависящая от энергий реагентов, прицельного параметра и углов ориентации, - не является квадратичной, то данный метод не будет работать с высокой скоростью.

3.3.4 Метод вращающихся координат (метод Розенброка)

Суть метода состоит во вращении системы координат в соответствии с изменением скорости убывания целевой функции. Новые направления координатных осей определяются таким образом, чтобы одна из них соответствовала направлению наиболее быстрого убывания целевой функции, а остальные находятся из условия ортогональности. Идея метода состоит в следующем (рис. 10):

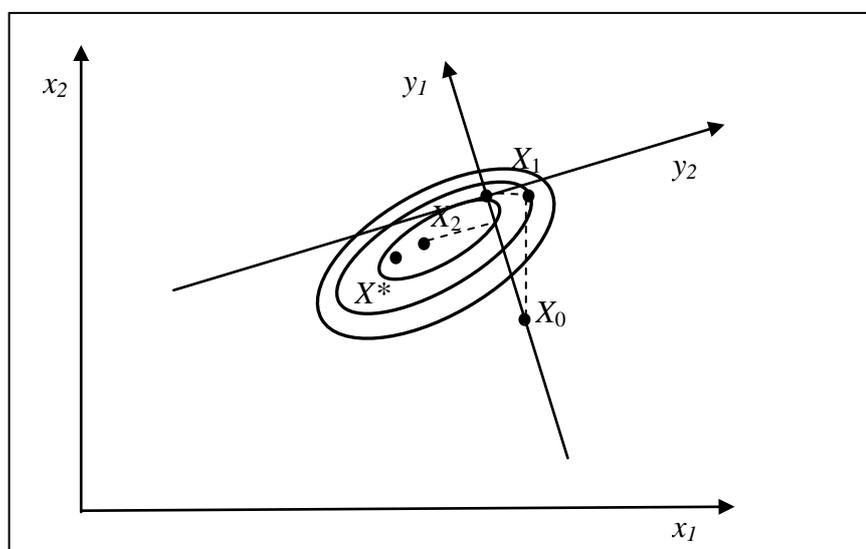


Рис.10. Геометрическая интерпретация метода Розенброка

Из начальной точки X_0 осуществляют спуск в точку X_1 по направлениям, параллельным координатным осям. На следующей итерации одна из осей должна проходить в направлении $y_1 = X_1 - X_0$, а другая - в направлении, перпендикулярном к y_1 . Спуск вдоль этих осей приводит в точку X_2 , что дает возможность построить новый вектор $X_2 - X_1$ и на его базе новую систему направлений поиска. В общем случае данный метод эффективен при минимизации овражных функций, так как результирующее направление поиска стремится расположиться вдоль оси оврага.

3.3.5 Методы случайного поиска

Методы случайного поиска отличаются от детерминированных (регулярных) методов оптимизации специальным введением в процесс поиска элементов случайности. Это означает, что в одной и той же ситуации выбор направления шага метода будет различным. Это оправданно при решении задач оптимизации при неопределенности, носящей случайный характер, например, при заметных случайных ошибках в определении значений функций,

входящих в формулировку задач оптимизации, либо при использовании нелинейных и негладких функций, характеристики которых меняются от точки до точки. В этих случаях накопление информации о поведении функции в разных точках нецелесообразно, поскольку в новой точке функция может вести себя по-иному, т.е. детерминированные стратегии могут терять смысл.

Метод случайного поиска является развитием метода проб и ошибок, когда решение ищется случайно и при удаче принимается, а при неудаче отвергается, чтобы немедленно снова обратиться к случайности. Такое поведение опирается на гипотезу о том, что случайность содержит в себе все возможности, в том числе и наилучшее поведение.

Метод проб и ошибок является универсальным методом решения задач при недостаточной априорной информации о задаче, функциях и об ограничениях. Главный недостаток методов этого типа состоит в том, что они обычно гарантируют сходимость лишь в асимптотике, т.е. за бесконечное число шагов.

Алгоритм локального случайного поиска различаются способами определения направления, в котором предпринимается попытка сделать рабочий шаг поиска. Эти способы могут реализоваться несколькими алгоритмами, такими как 1) алгоритм с парными пробами; 2) алгоритм с возвратом при неудачном шаге; 3) алгоритм с усреднением направления за несколько шагов. Эти алгоритмы описаны в [6].

3.3.6 Метод деформируемого многогранника (метод Нелдера-Мида)

Исходным алгоритмом для метода деформируемого многогранника является алгоритм с правильным симплексом, разработанный в связи со статистическим планированием эксперимента. Этот метод был впервые предложен в 1962 году Спендлеем, Хекстом и Химсвортом [12,13].

Правильным (регулярным) симплексом в пространстве E^n называется совокупность $(n + 1)$ равноудаленных друг от друга точек в n -мерном пространстве. Здесь n – число факторов (независимых переменных), влияющих на процесс. Так, например, если факторов два, то симплексом является правильный треугольник. Поскольку в рассматриваемой задаче число независимых переменных равно трем, то число вершин симплекса равно четырем, поэтому симплекс представляет собой правильный тетраэдр. Симплекс обладает тем важным для дальнейшего поиска оптимальных параметров свойством, что при удалении какой-либо его вершины можно, используя оставшиеся вершины и заменив удаленную вершину на новую, получить новый симплекс с помощью добавления новой вершины. Это свойство лежит в основе перемещения симплекса по поверхности отклика в локально оптимальном на каждом шаге направлении.

В методе Спендлея, Хекста и Химсворта минимизируется функция n независимых переменных с использованием $n + 1$ вершин деформируемого многогранника в E_n . Каждая вершина может быть идентифицирована вектором x . Вершина (точка) в E^n , в которой значение $f(x)$ максимально, проектируется через центр тяжести (центроид) оставшихся вершин. Улучшенные (в данном случае более низкие) значения целевой функции находятся последовательной заменой точки с максимальным значением $f(x)$ на более «хорошие» точки, пока не будет найден минимум $f(x)$. Использование правил уменьшения размера симплекса и предотвращения циклического движения в окрестности экстремума позволяют осуществить поиск, не использующий производные и в котором величина шага на любом этапе k фиксирована, а направление поиска можно изменять.

Принципиально описанный выше алгоритм для удобства использования может быть представлен следующим образом.

Начальный многогранник выбирается в виде регулярного (правильного) симплекса, где $k = 0$ – номер шага (этапа поиска).

Пусть

$$x_i^{(k)} = [x_{i1}^{(k)} \quad \dots \quad x_{ij}^{(k)} \quad \dots \quad x_{in}^{(k)}]^T, i = 1, \dots, n+1, \quad (31)$$

является i -ой вершиной (точкой) симплекса в E^n на k -ом этапе поиска, $k = 0, 1, \dots$, и пусть значение целевой функции в $x_i^{(k)}$ равно $f(x_i^{(k)})$. Кроме того, отметим те векторы x многогранника, которые дают максимальное значение $f(x)$.

Определим

$$f(x_h^{(k)}) = \max\{f(x_1^{(k)}), \dots, f(x_{n+1}^{(k)})\}, \quad (32)$$

где $x_h^{(k)} = x_i^{(k)}$, и соответственно найдем вершину симплекса с максимальным значением целевой функции в ней.

Поскольку многогранник в E^n состоит из $n + 1$ вершин x_1, \dots, x_{n+1} , обозначим через x_c центр тяжести всех вершин, исключая x_h .

Тогда координаты этого центра определяются формулой:

$$x_c = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1, i \neq h}^{n+1} x_i^k. \quad (33)$$

Процедура отыскания вершины в E^n , в которой $f(x)$ имеет лучшее значение, состоит из последовательности операций отражения и нового поиска вершины с максимальным значением целевой функции.

Отражение - проектирование x_h^{k+1} через центр тяжести в соответствии с соотношением:

$$x_h^{k+1} = 2x_c - x_h^k. \quad (34)$$

В каждой из четырех вершин симплекса определяются значения целевой функции, и та из вершин, в которой значение целевой функции будет наилучшим (т.е. максимальным), отражается симметрично относительно центра тяжести оставшихся трех вершин.

Вычисляется значение целевой функции $f(x_h^{k+1})$ в отраженной точке и выполняется проверка, будет ли полученное значение превышать значения целевой функции в остальных точках, оставшихся неотраженными, т.е. в точках x_i , где $i \neq h$.

Если этого не происходит, то сразу выполняется переход к следующему шагу: номер шага увеличивается на один, и снова определяется вершина симплекса с максимальным значением целевой функции.

Если проверка дала положительный результат, то из числа вершин симплекса исключается вершина x_h^{k+1} , а число вершин уменьшается на одну. Если число оставшихся вершин равно 1, то выполняется останов алгоритма. Иначе происходит переход к следующему шагу: номер шага увеличивается на один, и снова определяется вершина симплекса с максимальным значением целевой функции.

Схема перемещения точек симплекса согласно симплексному методу оптимизации наглядно представлена на рис. 11.

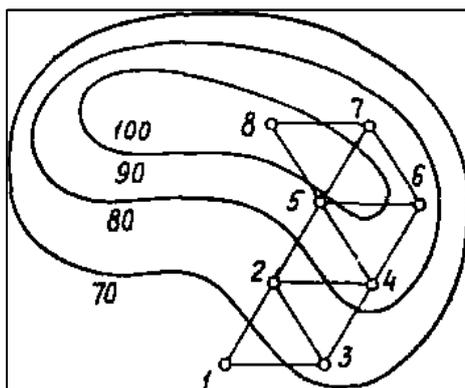


Рис.11. Оптимизация по симплексному методу

Начальная серия опытов соответствует вершинам исходного симплекса (точки 1, 2 и 3). Условия этих первых опытов берутся из области значений факторов, соответствующих наиболее благоприятным из известных режимов оптимизируемого процесса. Сравнивая между собой результаты опытов в точках 1, 2 и 3, находят среди них самый «плохой», с точки зрения выбранного критерия оптимальности. Пусть, например, самым «неудачным» оказался опыт в точке 1. Этот опыт исключают из рассмотрения, а вместо него в состав симплекса вводят опыт в точке 4, которая симметрична точке 1 относительно противоположной стороны треугольника, соединяющей точки 2 и 3.

Далее сравнивают между собой результаты опытов в вершинах нового симплекса, отбрасывают самый «неудачный» из них и переносят соответствующую вершину симплекса в точку 5. Затем рассмотренная процедура повторяется в течение всего процесса оптимизации.

Если экстремум критерия оптимальности достигнут, то дальнейшее движение симплекса прекращается. Это значит, что новый шаг возвращает исследователя в предыдущую точку факторного пространства.

При оптимизации необходимо принимать во внимание ограничения, наложенные на влияющие факторы и функции отклика.

Важно отметить, что при использовании симплексного метода нет необходимости дублировать опыты. Ошибка в отдельном опыте может только несколько замедлить оптимизацию. Если же последующие опыты выполняются безупречно, то движение к оптимуму продолжается.

Для исследования скорости сходимости симплексного метода обычно рассматривают последовательность $\{x^N\}$ - центров симплексов и изучают ее минимизирующие свойства. В этом случае процедура минимизации описывается рекуррентным уравнением

$$x^{N+1} = x^N + \alpha_N p^N, N = 1, 2, \dots, \quad (35)$$

где p^N - единичный n -мерный вектор, определяющий направление смещения центра симплекса на N -м шаге; α_N - положительная величина, равная смещению центра симплекса при переходе от x^N к x^{N+1} .

Часто эффективность симплексного метода можно повысить, используя информацию об измеренных значениях измеренной целевой функции. Таким образом можно увеличить или уменьшить размерность решаемой задачи (с формальной точки зрения, это означает соответствующее изменение размерности симплекса), отбрасывая или добавляя

соответственно несущественные или существенные переменные. Кроме того, такой подход можно применять и при решении задачи оптимизации при наличии ограничений, когда возникает необходимость движения вдоль некоторого многообразия меньшей размерности. На любом этапе оптимизации можно увеличить размерность решаемой задачи, добавив еще одну независимую переменную с помощью добавления одной вершины в n -мерный симплекс и сделав его $(n + 1)$ -мерным и тем самым использовать всю имевшуюся до этого информацию о значениях функции в вершинах симплекса.

К недостаткам описанной выше стандартной симплексной процедуры можно отнести сравнительно невысокую скорость получения новой информации и потери старой: на каждом шаге производится измерение целевой функции только в одной точке. В таких процедурах возможен достаточно большой угол между направлением смещения центра симплекса и направлением антиградиента целевой функции, зависящий от ориентации симплекса, что может приводить к появлению неэффективного шага. Как следствие этого симплекс начинает совершать колебательные движения в окрестности линии градиентного спуска, и скорость сходимости процедуры может оказаться неудовлетворительной.

Определенные практические трудности, встречающиеся при использовании регулярных симплексов, а именно – отсутствие ускорения поиска и трудности при проведении поиска на искривленных «оврагах» и «хребтах», привели к необходимости разработки улучшенных методов. Методы с деформируемым симплексом позволяют управлять размером и формой симплекса в зависимости от того, удачен или неудачным был шаг поиска. Таким образом, эти методы являются настраиваемыми в зависимости от состояния процесса. Они позволяют сделать поиск более быстрым.

Наиболее распространенным методом с деформируемыми симплексами является метод, предложенный Дж. Нелдером и Р. Мидом [14]. Скорость движения симплекса меняется в зависимости от того, удачным или неудачным был сделанный шаг. Нелдер и Мид предложили метод поиска, несколько более сложный по сравнению с прямым поиском, но оказавшийся весьма эффективным по сравнению с прямым поиском и легко осуществляемым на ЭВМ. В методе Нелдера и Мида симплекс может изменять свою форму и, таким образом, уже не будет оставаться симплексом. Именно поэтому более подходящим является название «деформируемый многогранник».

В методе Нелдера и Мида минимизируется функция n независимых переменных с использованием $n + 1$ вершин деформируемого многогранника в E^n . Каждая вершина может быть идентифицирована вектором x . Вершина (точка) в E^n , в которой значение $f(x)$ максимально, проектируется через центр тяжести (центроид) оставшихся вершин. Улучшенные (более низкие) значения целевой функции находятся последовательной заменой точки с максимальным значением $f(x)$ на более «хорошие» точки, пока не будет найден минимум $f(x)$.

Начальный многогранник обычно выбирается в виде регулярного симплекса (но это не обязательно) с точкой 1 в качестве начала координат; можно начало координат поместить в центре тяжести. Процедура отыскания вершины в E^n , в которой $f(x)$ имеет лучшее значение, состоит из следующих операций [14], которые наглядно изображены на рис. 12:

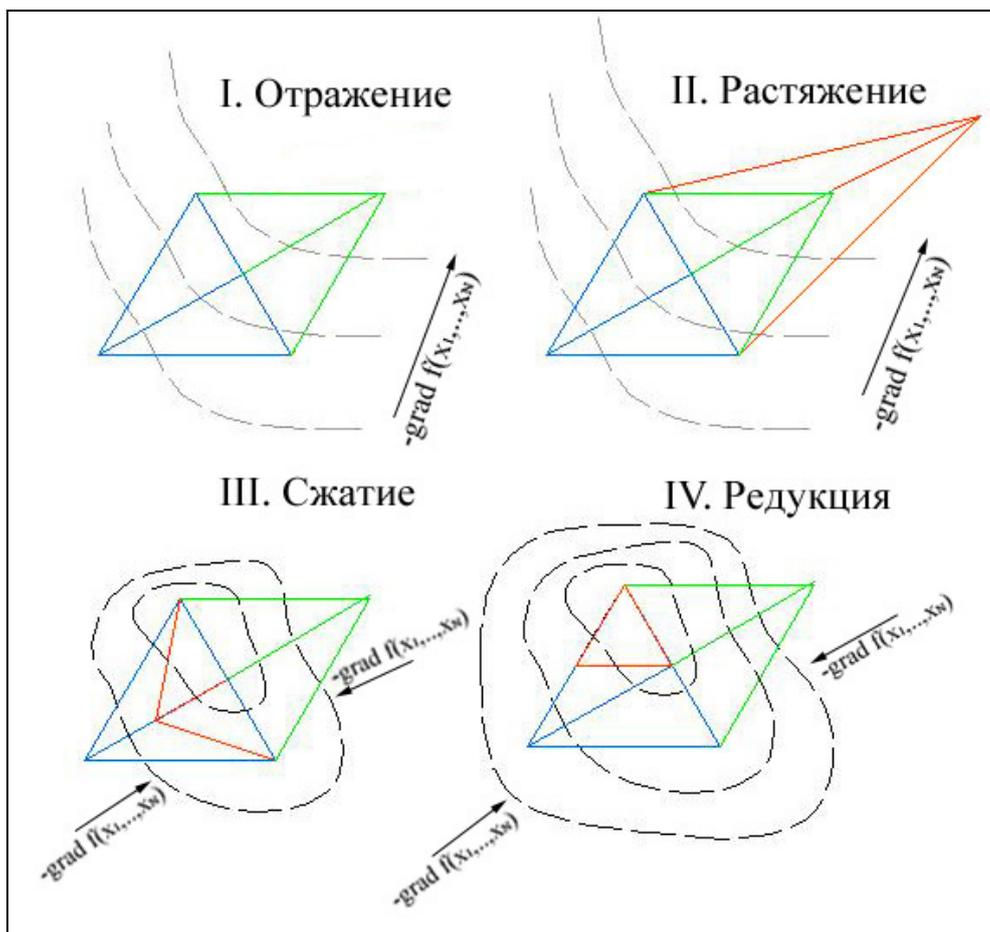


Рис. 12. Наглядное изображение основных операций метода деформируемых многогранников; пунктирными линиями изображены линии уровня целевой функции

1 Отражение - проектирование $x_h^{(k)}$ через центр тяжести в соответствии с соотношением:

$$x_{n+3}^{(k)} = x_{n+2}^{(k)} + \alpha(x_{n+2}^{(k)} - x_h^{(k)}), \tag{36}$$

где $\alpha > 0$ является коэффициентом отражения;

$x_{n+2}^{(k)}$ - центр тяжести;

$x_h^{(k)}$ - вершина, в которой функция $f(x)$ принимает наибольшее из $n + 1$ ее значений на k -ом этапе.

2 Растяжение. Эта операция заключается в следующем: если $f(x_{n+3}^{(k)}) \leq f(x_l^{(k)})$, то вектор $(x_{n+3}^{(k)} - x_{n+2}^{(k)})$ растягивается в соответствии с соотношением:

$$x_{n+4}^{(k)} = x_{n+2}^{(k)} + \sigma(x_{n+3}^{(k)} - x_{n+2}^{(k)}), \tag{37}$$

где $\sigma > 1$ представляет собой коэффициент растяжения,

$f(x_l^{(k)})$ - вершина с минимальным значением целевой функции (до операций отражения, растяжения, сжатия или редукции).

Если $f(x_{n+4}^{(k)}) < f(x_l^{(k)})$, то $x_h^{(k)}$ заменяется на $x_{n+4}^{(k)}$ и процедура продолжается снова с операции 1 при $k = k + 1$. В противном случае $x_h^{(k)}$ заменяется на $x_{n+3}^{(k)}$ и также осуществляется переход к операции 1 при $k = k + 1$.

3 Сжатие. Если $f(x_{n+3}^{(k)}) > f(x_i^{(k)})$ для всех $i \neq h$, то вектор $(x_h^{(k)} - x_{n+2}^{(k)})$ сжимается в соответствии с формулой:

$$x_{n+5}^{(k)} = x_{n+2}^{(k)} + \beta(x_h^{(k)} - x_{n+2}^{(k)}), \quad (38)$$

где $0 < \beta < 1$ представляет собой коэффициент сжатия.

Затем $x_h^{(k)}$ заменяем на $x_{n+5}^{(k)}$ и возвращаемся к операции 1 для продолжения поиска на $(k + 1)$ -м шаге.

4 Редукция. Если $f(x_{n+3}^{(k)}) > f(x_h^{(k)})$, все векторы $(x_i^{(k)} - x_l^{(k)})$, $i = 1, \dots, n + 1$, уменьшаются в $1/\gamma$ ($0 < \gamma < 1$ - коэффициент редукции) раз с отсчетом от $x_l^{(k)}$ в соответствии с формулой:

$$x_i^{(k)} = x_l^{(k)} + \gamma(x_i^{(k)} - x_l^{(k)}), \quad i = 1, \dots, n + 1. \quad (39)$$

Затем возвращаемся к операции 1 для продолжения поиска на $(k + 1)$ -м шаге.

Критерий окончания поиска, использованный в данном методе, состоит в проверке условия:

$$\left\{ \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} [f(x_i^{(k)}) - f(x_{n+2}^{(k)})]^2 \right\}^{1/2} \leq \varepsilon, \quad (40)$$

где ε - произвольное малое число, а $f(x_{n+2}^{(k)})$ - значение целевой функции в центре тяжести $x_{n+2}^{(k)}$. Этот критерий предпочтительнее критерия, связанного с вариациями независимых переменных, так как в оврагах с острым дном симплекс может сжаться до весьма малых размеров.

Кроме того, можно использовать еще два критерия останова:

$$f(x_h^{(k)}) - f(x_l^{(k)}) \leq \varepsilon; \quad (41)$$

$$\left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n+1} (f(x_i^k) - f(x_n^k))^2 \right]^{1/2} \leq \varepsilon \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n+1} (x_i^k - x_n^k)^2 \right]^{1/2}. \quad (42)$$

Выбор того или иного критерия прекращения поиска диктуется спецификой решаемой задачи.

В приложении А приведена блок-схема поиска методом деформируемого многогранника, применительно к задаче поиска минимума внутренней энергии молекулы CsBr.

На рисунке 13 представлена одна из возможных траекторий поиска методом деформируемого многогранника.

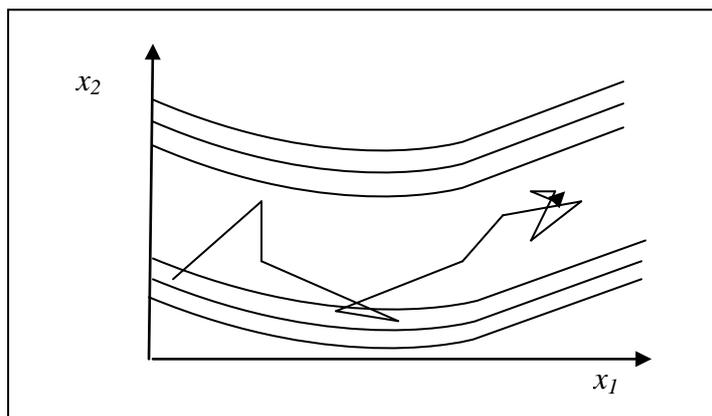


Рис. 13. Траектория метода деформируемого многогранника

Стратегия поиска определяется значениями четырех коэффициентов – α , σ , β , γ и в меньшей степени – формой исходного симплекса. Коэффициент отражения α используется для проектирования вершины с наибольшим значением $f(x)$ через центр тяжести деформируемого многогранника. Коэффициент σ вводится для растяжения вектора поиска в случае, если отражение дает вершину со значением $f(x)$, меньшим, чем наименьшее значение $f(x)$, полученное до отражения. Коэффициент сжатия β используется для уменьшения шага поиска, если операция отражения не привела к вершине со значением $f(x)$, меньшим, чем второе по величине (после наибольшего) значение $f(x)$, полученное до отражения. Коэффициент редукции γ позволяет в случае неудачных шагов (значение функции в отраженной вершине превысило ее значение в точке с максимальным значением целевой функции до отражения) вершинам симплекса приблизиться к вершине с минимальным значением $f(x)$, и дальнейший поиск осуществляется с меньшим размером симплекса (уменьшение пропорциональное), если, конечно, симплекс не расширится в процессе движения. Таким образом, с помощью операций растяжения или сжатия размеры и форма деформируемого многогранника масштабируется так, чтобы они удовлетворили топологии решаемой задачи. После того, как симплекс подходящим образом масштабирован, его размеры поддерживаются постоянными, пока изменения в топологии задачи не потребуют применения симплекса другой формы.

Естественно возникает вопрос, какие значения параметров $\alpha, \sigma, \beta, \gamma$ должны быть выбраны. После того как деформируемый многогранник подходящим образом масштабирован, его размеры должны поддерживаться неизменными, пока изменения в топологии задачи не потребуют применения многогранника другой формы. Размер симплекса можно поддерживать постоянным только при $\alpha = 1$. Кроме того, Нелдер и Мид показали, что при решении задачи с $\alpha = 1$ требуется меньшее количество вычислений функции, чем при $\alpha < 1$. С другой стороны, α не должно быть много больше единицы, поскольку:

- деформируемый многогранник легче адаптируется к топологии задачи при меньших значениях α , особенно когда необходимо изменить направление поиска, столкнувшись с изогнутой впадиной;

- в области локального минимума размеры многогранника должны уменьшаться, и большое α в этих условиях замедлит сходимость. Таким образом, значение $\alpha = 1$ выбирается как компромисс.

Чтобы выяснить, какое влияние на процедуру поиска имеет выбор β и σ , Нелдер и Мид (а также Павиани [12,13]) исследовали решение нескольких тестовых задач, используя большое число различных комбинаций значений β и σ . В качестве удовлетворительных значений этих параметров при оптимизации без ограничений Нелдер и Мид рекомендовали $\alpha = 1, \beta = 0,5$ и $\gamma = 2$. Размеры и ориентация исходного многогранника в некоторой степени влияли на время решения, а значения β и σ оказывали значительно большее влияние. Павиани отмечает, что нельзя четко решить вопрос относительно выбора β и σ , и что влияние β на эффективность поиска несколько более заметно, чем влияние σ . Павиани рекомендует следующие диапазоны значений для этих параметров:

$$\begin{cases} 0,4 \leq \beta \leq 0,6; \\ 2,8 \leq \sigma \leq 3,0. \end{cases} \quad (43)$$

При $0 < \beta < 0,4$ существует вероятность того, что из-за уплощения многогранника будет иметь место преждевременное окончание процесса. При $\beta > 0,6$ может потребоваться избыточное число шагов и больше машинного времени для достижения окончательного решения.

С помощью операции растяжения и сжатия размеры и форма деформируемого многогранника адаптируются к топографии целевой функции. В результате деформируемый многогранник в противоположность жесткому симплексу адаптируется к топографии целевой функции, вытягиваясь вдоль длинных наклонных плоскостей, изменяя направление в изогнутых впадинах и сжимаясь в окрестности минимума, что определяет эффективность рассмотренного метода.

Этот метод в силу его простоты, высокой скорости работы, приспособляемости к сложной форме поверхности целевой функции, возможности различных усовершенствований алгоритма, и был выбран для решения задачи определения условий, приводящих к максимальной стабилизации молекулы CsBr.

Следует иметь в виду, что симплексный метод, так же как и другие методы оптимизации, является локальным методом поиска экстремума. Если существует несколько экстремумов критерия оптимальности, то этот метод позволяет найти тот из них, который расположен ближе к точкам исходного симплекса. Поэтому, если есть подозрение существования нескольких экстремумов критерия оптимальности, нужно осуществить их поиск, каждый раз начиная оптимизацию из новой области факторного пространства. Затем следует сравнить между собой найденные оптимальные условия и из всех вариантов выбрать наилучший.

Одним из появившихся сравнительно недавно на основе метода деформируемого многогранника методов стал метод многонаправленного поиска Дениса и Торксон, использующий в отличие от рассмотренного метода на каждой итерации отображение n вершин относительно лучшей вершины. В остальном правила метода по изменению размера симплекса аналогичны правилам метода Нелдера-Мида. Торксон было проведено аналитическое исследование свойств предложенного метода, доказана его сходимость.

Торксон были предложены версии метода многонаправленного поиска для параллельных машин, использующие возможность проводить одновременное вычисление значений целевой функции на множестве процессоров. Этот метод уже не относится к последовательным методам.

Кроме того, Торксон объединила поисковые методы типа многонаправленного поиска и сеточного поиска Хука-Дживса в группу методов модельного поиска и провела аналитическое исследование их свойств. Все эти методы могут рассматриваться как частный случай методов деформируемых конфигураций.

Специальный симплексный метод для решения задач с ограничениями типа неравенств разработан Диксоном. Метод типа метода Нелдера-Мида дополнен специальными правилами, позволяющими симплексу двигаться воль активных ограничений. Метод относится к методам эвристического типа, эффективность его проверена на нескольких тест-функциях.

Таким образом, методы деформируемых конфигураций могут отличаться выбором правильного или деформируемого симплекса, критерием оптимальности на каждом шаге, правилами изменения размера симплекса в зависимости от состояния процесса, правилом останова. Рис. 14 показывает, что выбор количества отображаемых на каждом шаге вершин влияет на качество аппроксимации антиградиентного направления.

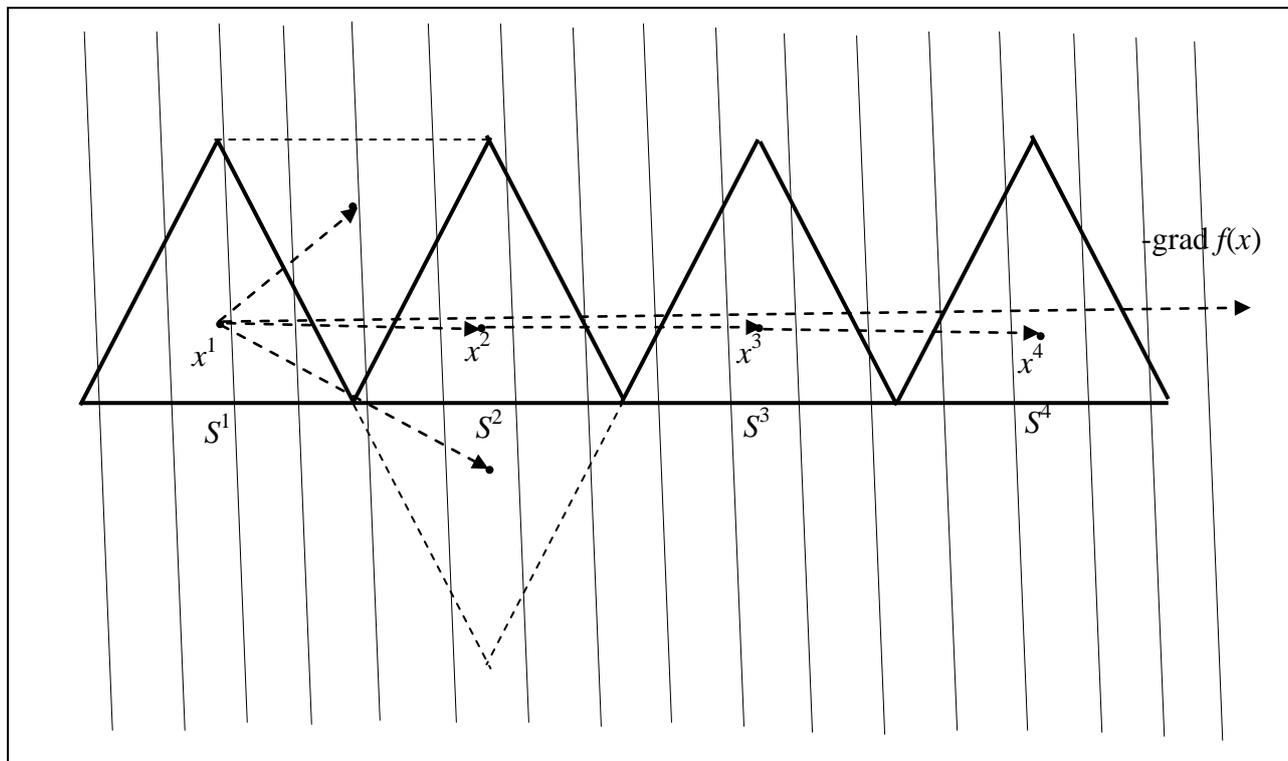


Рис. 14. Пример процедуры с отображением нескольких вершин и критерием близости к антиградиентному направлению

Критерий локальной близости к антиградиентному направлению не является единственно возможным. Таким критерием может быть также критерий максимального убывания значения функции $f(x)$ в центре симплекса при переходе от одного симплекса к другому, т.е. минимизация функции $f(x)$ в центре симплекса при отображении одной или нескольких вершин, а также критерий, по которому отображаются те вершины, в которых значение оптимизируемой функции больше, чем в центре симплекса. Указанные способы организации смещения симплекса, если их дополнить правилом останова процедуры поиска, составляют полное описание на содержательном уровне симплексных алгоритмов.

Дадим формальное описание критериев выбора локально оптимального направления смещения центра симплекса из множества возможных направлений $\Omega_N(p)$:

$$I_1^N = -(\text{grad } f(x^N), p);$$

$$I_2^N = -\Delta f_N = f^*(x^N) - f^*(x^{N+1});$$

$$I_3^N = -\Delta f_N / (m + 1);$$

$$I_4^N(m) = \sum_{i=1}^m (f(x^{N,i}) - f^*(x^N));$$

$$I_5^N(m) = I_4^N / m,$$

где $x^{N,i}$ - i -я вершина симплекса S_n ; $f^*(x^N)$ равно либо измеренному значению $f(x^N)$ в центре x^N симплекса S_n , либо среднему арифметическому значению функции $f(x)$ в вершинах симплекса S_n :

$$f^*(x^N) = \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{m+1} f(x^{N,i}). \quad (44)$$

Значение первого критерия равно величине проекции единичного вектора p на вектор антиградиент и характеризует близость направления p смещения центра симплекса к антиградиентному направлению. Значение второго критерия связано с уменьшением значения функции $f(x)$ в центре симплекса S_n , при смещении центра симплекса x^N в направлении p . Значение третьего критерия равно уменьшению $f(x)$ в центре симплекса, отнесенному к одному измерению функции $f(x)$. Четвертый критерий применим при отображении m вершин и равен сумме отклонений значений функции $f(x)$ в m вершинах от значения или от оценки значения (44) функции в центре симплекса. Для отображения выбираются те вершины, в которых значение этого отклонения положительно, т.е. вершины, лежащие выше центра симплекса. Согласно пятому критерию для отображения будет выбираться вершина с максимальным значением функцию. Если таких вершин несколько, то следует отображать любую из этих вершин.

Если функция существенно нелинейна или необходимо получить высокую точность определения экстремумов, то применение симплексных алгоритмов может оказаться неэффективным из-за постоянства размера симплекса. Точность локализации экстремума зависит от размера симплекса: чем меньше симплекс, тем точнее можно локализовать экстремум. В то же время малый симплекс приводит к большому числу шагов. Поэтому проблема построения эффективных симплексных алгоритмов может быть решена путем изменения размера симплекса в зависимости от состояния процесса. Существуют два подхода к изменению размера симплекса. Первый из них предусматривает такой выбор параметров алгоритма, при котором последовательность значений оптимизируемой функции в центрах симплексов является монотонно убывающей, причем размер симплекса сохраняется постоянным при выполнении условия монотонности и скачкообразно уменьшается при его нарушении. Такой подход эффективен при малых случайных ошибках в измеряемых значениях оптимизируемой функции. В соответствии со вторым подходом размер симплекса уменьшается на каждом шаге по заранее выбранному закону (программное изменение размера симплекса). При выборе закона изменения размера симплекса обычно учитывают требования, связанные с достижимостью симплексом любой точки пространства R^n и точной локализацией экстремального значения. Данный подход применяют при высоком уровне случайных ошибок.

Выбор того или иного правила останова вытекает из конкретной постановки задачи оптимизации. Оптимизацию можно вести до тех пор, пока симплекс не достигнет конечного заранее выбранного размера, или изменения значений целевой функции на каждом шаге не станут достаточно малы, или пока не будет выполнено определенное число шагов.

Исследования локальных свойств алгоритмов с правильным симплексом, приведенные в [6], показывают, что с ростом размерности задачи оптимизации величина оценки косинуса угла между направлением смещения центра симплекса и антиградиентным направлением убывает как $1/n$, а изменение значений минимизируемой функции в центре симплекса убывает как $1/n^2$. Сравнительная локальная эффективность алгоритмов изменяется с ростом

размерности задачи. Соотношения, полученные в [6], обосновывают целесообразность локальной оптимизации направления смещения симплекса и отображения оптимального на данном шаге количества вершин. Положительный эффект увеличивается с ростом размерности задачи n и наиболее заметен для локального убывания значений функции $f(x)$ на каждом шаге. Свойства алгоритмов улучшаются за счет лучшей аппроксимации антиградиентного направления и большей величины шага при одинаковом размере симплекса.

Для каждого алгоритма автором [6] были получены оценки скорости сходимости, которые учитывают наихудшую возможную ситуацию и являются пессимистическими. Наиболее существенной характеристикой, влияющей на оценки скорости сходимости, является оценка угла между направлением смещения центра симплекса и оценки антиградиентного направления.

Наибольшую скорость сходимости обеспечивают алгоритмы с локальными критериями оптимальности, ориентированными на наибольшее убывание значения функции – $I_2^N(m)$ и $I_2^N(m,l)$. Для всех алгоритмов с отображением нескольких вершин скорость сходимости выше скорости сходимости алгоритма с отображением одной вершины. Предварительные рекомендации по использованию алгоритмов в [6] следующие: на начальных этапах поиска вдали от экстремума в случае гладкой поверхности предпочтительнее использовать алгоритмы с критериями $I_1^N(m,l)$, $I_2^N(m,l)$, $I_3^N(m,l)$ (отображение $m + l$ вершин симплекса, где $m = 1, \dots, n$; $l = 0, \dots, n - m$, под которым понимается такой параллельный перенос его $m + l$ вершин вдоль направления от геометрического центра m отображаемых вершин симплекса к центру неотображаемых $n + 1 - m - l$ вершин симплекса, при котором симплекс, образованный $n + 1 - m - l$ неотображаемыми вершинами и $m + l$ новыми вершинами прежнего симплекса, является правильным и конгруэнтным прежнему симплексу). В районе экстремума при наличии нелинейности оптимизируемой функции более эффективны алгоритмы с критериями $I_1^N(m,l)$, $I_1^N(m)$, $I_3^N(m,l)$, $I_3^N(m)$, $I_4^N(m)$, в которых направление смещения выбирается более близким, чем в остальных алгоритмах. Наименьшей скоростью сходимости обладают алгоритмы с отображением одной вершины и с критерием $I_2^N(m)$. Алгоритмы с критериями $I_1^N(m)$, $I_3^N(m)$ и $I_4^N(m)$ занимают промежуточное положение. Однако в среднем на каждом шаге для последних требуется вдвое меньшее число измерений оптимизируемой функции, чем для алгоритмов с критериями $I_i^N(m,l)$.

Если предположить, что для алгоритмов с критериями $I_2^N(m,l)$ сохраняются те же соотношения по скорости сходимости, что и для алгоритмов с критериями $I_2^N(m)$, то наилучшей аппроксимацией антиградиентного направления обладает алгоритм с критерием $I_2^N(m,l)$. Это предположение подтверждено в [6] результатами вычислительного эксперимента.

Поскольку алгоритмы с правильным симплексом не всегда оказываются эффективными, в частности, при овражной форме целевой функции правильный симплекс не может изменить форму, чтобы вытянувшись вдоль дна оврага, успешно продолжать поиск экстремума, естественной стала идея предоставления симплексу возможности в процессе поиска менять свои размеры и форму, т.е. деформироваться. Для алгоритмов с деформируемым симплексом каждая итерация метода делится на два этапа – шаг и адаптацию. При построении методов с деформируемыми симплексами можно использовать пять основных вариантов, различающихся способами изменения размера и формы симплекса.

В первом варианте метода существуют две версии: с измерением значения функции в центре симплекса и с оценкой этого значения по измерениям в вершинах симплекса. По

первой версии сначала измеряется значение функции в центре нового симплекса и оценивается успешность шага. Если шаг успешен, то происходит вытягивание симплекса в направлении отображения я некоторым коэффициентом, вновь измеряется значение функции в центре вытянутого симплекса и для окончательного отображения выбирается симплекс с минимальным значением функции в центре. После этого измеряют значения функции в вершинах выбранного симплекса и далее переходят к следующей итерации. Если шаг был признан неудачным, то осуществляют сжатие нового симплекса в направлении отображения с некоторым коэффициентом, измеряют значение функции в центре сжатого симплекса и оценивают успешность шага. При успешном шаге проводят измерение значений функции в сжатом симплексе и переходят к следующей итерации. В случае, когда шаг со сжатым симплексом также оказывается неудачным, возвращаются к неотображенному симплексу и осуществляют его сжатие до тех пор, пока шаг не будет признан удачным.

По второй версии метода выполняют те же операции вытягивания и сжатия симплекса, только каждый раз измеряют значения функции в вершинах симплекса и оценивают успешность шага по усредненным значениям функции в вершинах симплекса. При втором варианте этап адаптации начинается с измерения значений функции в отображенных вершинах. Далее оценивается успешность отображения каждой вершины отдельно путем сравнения функции в отображенной вершине нового симплекса и в соответствующей отображаемой вершине предыдущего симплекса. Вершины считаются соответствующими, если вектор, соединяющий их, параллелен вектору, определяющему направление отображения, т.е. вектору, направленному из геометрического центра отображаемых вершин к геометрическому центру неотображаемых вершин. Для каждой отображенной вершины выполняются те же операции, что и для смещения центра симплекса в первой версии первого варианта, в зависимости от успешности отображения вершины.

В третьем варианте, как и в первом, используются две версии: с измерением значений функции в центре симплекса и с оценкой этого значения. Как при измерении значений функции в центре симплекса, так и при оценке значений выбирается наилучший центр по правилам первого варианта метода. Различие этих вариантов состоит в том, что каждая отображаемая вершина смещается в направлении вектора, соединяющего данную вершину и геометрический центр неотображаемых вершин. В этом случае при отображении нескольких вершин они как бы расходятся веером. Отображение одной вершины и отображение одной вершины с переносом второй не отличаются от первой версии метода.

В четвертом варианте метода каждая из вершин на этапе адаптации перемещается независимо от остальных. Движение вершин происходит в тех же направлениях, что и в третьем варианте метода. На этапе адаптации может произойти коррекция смещения центра симплекса в результате изменения формы симплекса.

Пятый вариант является обобщением методов, использующих правильный симплекс. В этом варианте на этапе адаптации происходит изменение размера симплекса с сохранением его формы. При изменении размера симплекса успешность шага (или изменения) определяется по измеренному значению функции в центре симплекса либо по его оценке. При отображении с переносом вершин происходит коррекция смещения центра симплекса на этапе адаптации. Чтобы избежать коррекции, можно отображать вершины только при отсутствии переноса.

Методы прямого поиска с деформируемыми симплексами, их свойства и сходимость были исследованы А.С. Рыковым [15,16,17,18,19]. По отношению к рассматриваемым алгоритмам с деформируемыми симплексами справедливы соображения относительно симплексных методов, использующих правильные симплексы. Соотношения между скоростями сходимости алгоритмов с разными критериями локальной оптимальности примерно такие же, как и для алгоритмов с правильными симплексами, использующих соответствующие локальные критерии.

На основе метода Нелдера-Мида для задач поисковой оптимизации малой и средней размерности со сложными целевыми функциями был разработан класс методов прямого поиска – методов деформируемых конфигураций, включающий в себя сотни вариантов методов (см., например, [6,20]). Одной из особенностей методов деформируемых конфигураций является блочная структура методов с относительно независимыми блоками: конструирования начальной конфигурации, критерия выбора числа отображаемых вершин, отображения вершин конфигурации, оценки успешности шага, правил адаптации размера и формы конфигурации, правила останова или перезапуска. Каждый из блоков имеет несколько вариантов и параметров, что порождает семейство алгоритмов деформируемых конфигураций.

На основе методов деформируемых конфигураций авторами [6,20] разработана диалоговая система оптимизации. Данная система позволяет пользователю конструировать любые варианты алгоритмов методов деформируемых конфигураций для безусловной оптимизации различных целевых функций. Система оптимизации включает в себя подсистему целевых тест-функций. В состав подсистемы кроме традиционных, известных тест-функций малой размерности включены овражные тест-функции с многомерным дном оврага (тест-функции Рыкова). Пользователь может конструировать овражные тест-функции с желаемыми свойствами, задавая размерность дна оврага, его изгиб, крутизну склонов.

3.3.7 Комплексный метод

Трудности, встречающиеся при попытке использовать существовавшие ранее методы поиска, подтолкнули Бокса в 1964 году к созданию несколько отличного метода [6]. По существу, он является модификацией симплексного метода Нелдера-Мида с отражением одной вершины, однако позволяет учитывать ограничения. Бокс назвал его комплексным методом. В этом методе взамен вершин симплекса используется произвольный набор вершин, принадлежащих области допустимых значений. Решаемая задача состоит в минимизации функции $f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, где x определяется явными ограничениями $l_j \leq x_j \leq u_j$ при $j = 1, 2, \dots, n$, а также неявными ограничениями $g_i(x) \leq b_i$ при $i = 1, 2, \dots, m$.

Комплексные методы являются обобщающими по отношению к симплексным. Тогда как улучшение свойств симплексных методов по отношению к методу с отображением одной вершины на каждом шаге минимизации достигалось за счет увеличения числа возможных направлений смещения центра симплекса и выбора из этих направлений локально оптимального, развитие идеи совершенствования свойств методов поиска приводит к мысли о необходимости увеличения числа возможных направлений, из которых выбирается наилучшее. Однако для симплексных алгоритмов исчерпаны возможности увеличения числа возможных направлений. В этих условиях естественной выглядит идея использовать в качестве базовой конфигурации не симплекс, а комплекс – совокупность $k \geq n + 1$ точек. Симплекс является частным случаем комплекса.

Если целевая функция $f(x)$ выпукла и функции $g_i(x)$ тоже выпуклы, то задача будет иметь единственное решение. Значения l_j и u_j являются нижней и верхней границами переменных. Если в конкретной задаче заданные переменные теоретически не имеют ограничений, то предположение о наличии у них "безопасных" границ, т.е. границ, включающих оптимум, позволит применить комплексный метод.

Данный метод является итерационным. В нем предполагается, что известны значения n и m , l_j и u_j и начальная точка x_1 , удовлетворяющая всем явным и неявным ограничениям. В первую очередь необходимо выбрать k точек, которые удовлетворяют ограничениям, а также вычислить целевую функцию во всех k точках. Множество этих точек называется комплексом. Бокс обнаружил, что k должно быть больше $(n + 1)$ - числа точек, используемых в симплексном методе Нелдера-Мида и положил $k = 2n$.

Как упоминалось выше, предполагается, что точка k_1 , удовлетворяющая всем ограничениям, задана. Остальные точки, удовлетворяющие неравенству $l_j \leq x_j \leq u_j$, могут быть выбраны следующим образом:

$$x_{ij} = l_j + r(u_j - l_j) \quad (45)$$

для $j = 1, 2, \dots, n$ и $i = 2, 3, \dots, k$, где r - псевдослучайная равномерно распределенная переменная в интервале $(0;1)$.

Точки, выбираемые в соответствии с уравнением (45) для данного j будут автоматически удовлетворять неравенству для явных ограничений. Если эти точки удовлетворяют также неравенству для неявных ограничений, то они принимаются в качестве начальных точек комплекса. Если точка, выбранная в соответствии с уравнением (45), не удовлетворяет неравенству для неявных ограничений, то она смещается на половину расстояния до центра тяжести множества уже принятых точек, т.е. формируется точка

$$x_i' = \frac{(x_i + x_c)}{2}, \quad (46)$$

где

$$x_c = \frac{1}{i-1} \sum_{e=1}^{i-1} x_e \quad (47)$$

Если точка в соотношении (46) все еще не является допустимой, то описанная соотношением (45) процедура повторяется вновь до тех пор, пока точка не станет допустимой. Если функция $g_i(x)$ выпукла, то в конце концов ограничения будут выполняться. Конечно, поскольку точка x_1 находится внутри области ограничений, то комплекс будет состоять из допустимых точек.

Удобно упорядочить точки комплекса в соответствии со значениями функции. Процедуру инициализации комплекса можно описать с помощью блок-схемы (рис. 15).

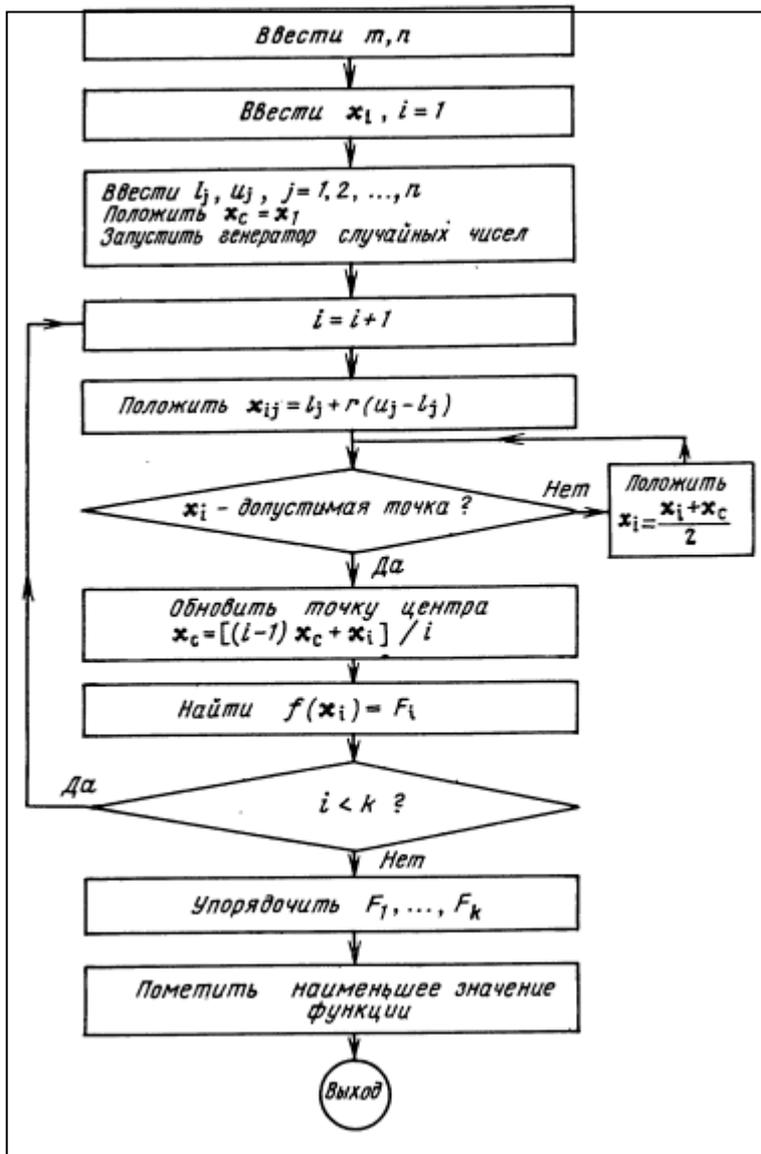


Рис. 15. Блок-схема комплексного метода

Процедура сходится, когда комплекс "стягивается" до такого размера, при котором он помещается в небольшой окрестности точки минимума. Проверка сходимости будет успешно заканчиваться на этом шаге, поскольку разница в значениях функции будет также мала.

Бокс в своем методе производил останов после того, как пять последовательных значений целевой функции $f(x)$ оказывались близкими с точностью до ε .

Как и в случае алгоритмов с деформируемыми симплексами, возможно использование отображений двух основных типов. Для отображений первого типа отображаемые вершины смещаются в направлении выбранного локально оптимального направления смещения центра комплекса. В этом случае при увеличении размера комплекс вытягивается в направлении отображения. Для отображений второго типа вершины, повергающиеся отображению, расходятся относительно центра неотображенных вершин и при увеличении размера комплекса захватывают большую область по ширине, нежели исходный симплекс. В случае совместного отображения этих вершин выбранное локально оптимальное направление смещения центра комплекса сохраняется. По-видимому [6], применение

соображений первого типа предпочтительно в случае, когда функция хорошо аппроксимируется линейной функцией и процесс поиска происходит по дну прямого оврага. Второй тип отображения целесообразно применять при резких изменениях направления движения в процессе поиска, например, при движении вдоль дна спирального или извилистого оврага. Этот тип более приспособлен к изменению формы комплекса для движения в новом направлении на следующем шаге.

При использовании комплексов можно столкнуться со следующей проблемой: при поиске в течение нескольких итераций в одном направлении, например, по дну оврага. Такое движение может приводить к тому, что комплекс вытягивается вдоль направления спуска. Предположим, что овраг делает резкий поворот. Тогда шаг, приводящий к выходу вершин на повороте на склон оврага, будет неудачным. Для изменения формы комплекса, с тем чтобы он смог успешно двигаться в новом направлении, может потребоваться несколько итераций. Процесс изменения формы комплекса можно ускорить, если при неудачном шаге исключить из комплекса одну или несколько наихудших вершин, уменьшив его размерность, и совершить следующий шаг, используя меньшее число вершин. Далее, после удачного шага, можно восстановить исходную размерность комплекса, добавив лучшие вершины из числа отображаемых вершин предыдущего комплекса. Такой подход позволяет наделять методы поиска более высокими адаптивными свойствами. Менять размерность комплекса полезно, если одна или несколько вершин в результате деформации оказались близкими. В этом случае они заменяются одной, и поиск продолжается с меньшим числом вершин. На последующих итерациях число используемых вершин можно увеличить. Также прием уменьшения размерности и поиска в подпространстве меньшей размерности, чем исходное, может оказаться эффективным в задачах с ограничениями типа равенств, когда требуется организовать поиск экстремума в подпространстве.

Использование изложенных выше соображений позволяет построить семейство алгоритмов с деформируемыми комплексами.

В алгоритмах с деформируемыми комплексами применяются те же определения отображения $(m + l)$ вершин, что и для алгоритмов с деформируемыми симплексами. Для выбора локально оптимального направления используются критерии $I_1^N - I_5^N$, введенные для алгоритмов с деформируемыми симплексами и новые критерии $I_6^N(m)$, $I_7^N(m, l)$.

По критерию $I_6^N(m)$ все вершины делятся на две группы и отображаются те вершины, в которых значения функции больше, чем среднее арифметическое значение в лучшей и худшей вершинах.

По критерию $I_7^N(m, l)$ все вершины делятся на три группы: отображаемые, переносимые и неотображаемые. Диапазон значений функции между лучшей и худшей вершинами комплекса делится на три равные части. Вершины со значениями функции, входящими в треть, прилегающую к наихудшей вершине, отображаются. Вершины со значениями функции, входящими во вторую треть, переносятся, а остальные вершины не отображаются.

Правила останова применяются те же, что и для симплексных алгоритмов.

Выбор $k = 2n$, $\alpha = 1,3$, $\beta = 0,5$ является эмпирическим правилом, предложенным Боксом [21], позволяющим обеспечить максимальную скорость сходимости. Первое значение частично предотвращает преждевременное сжатие комплекса. Коэффициент отражения $\alpha > 1$ позволяет комплексу расширяться и перемещаться в нужном направлении, пока шаги удачны. Коэффициент β позволяет комплексу сокращаться. Число вершин $k > n + 1$ делает метод более гибким, давая возможность комплексу двигаться в различных направлениях, и препятствует его вырождению, т.е. стягиванию в подпространство размерностью меньшей, чем n . Такое вырождение может происходить при движении

комплекса параллельно одному из ограничений, когда, «наткнувшись» еще на одно ограничение, комплекс оказывается неспособным к движению вдоль нового направления. В случае вырождения из такого положения существуют следующие пути выхода. Если вырождение неполное и вершины не лежат в одном подпространстве размерностью меньшей, чем n , то с помощью $\alpha > 1$ комплекс расширится и начнет движение в нужном направлении. То же произойдет, если комплекс сжался до малых размеров в овраге. В области пересечения ограничений, достигнутой комплексом, следует сформировать новый комплекс с малыми размерами. Поэтому комплекс может перемещаться внутри допустимой области вдоль границ и огибать углы в местах пересечения ограничений.

Развивая идею совершенствования свойств методов поиска, можно попытаться, не увеличивая число вершин, улучшить возможности выбора направления смещения центра конфигурации (симплекса или комплекса) за счет введения обобщающего отображения, которое позволит выбирать наилучшее направление смещения центра конфигурации из множества, содержащего большее число направлений. Идея обобщающего отображения состоит в использовании при формировании направлений смещения отображаемых вершин не геометрических центров отображаемых и неотображаемых вершин, а взвешенных центров этих вершин. При введении взвешивания получим возможность выбирать направление отображения не только за счет числа и состава отображаемых и неотображаемых вершин, но и за счет смещения их взвешенного центра.

3.3.8 Методы деформируемых конфигураций в условиях помех

Рассматриваемые методы деформируемых конфигураций ориентированы в основном на решение задач экспериментальной оптимизации. Информация о поведении оптимизируемой функции при оптимизации реальных объектов поступает в виде значений функции, полученных в результате измерений. Эти измерения сопровождаются случайными ошибками и погрешностями. Помехи носят случайный характер, и часто имеется информация об уровне и статической природе помех. Даже в таком случае, когда оптимизируемая функция задана в виде формул, возникают ошибки из-за погрешностей вычисления, определяемых конечной точностью компьютера и ошибками округлений. Другой источник ошибок в рассматриваемом случае связан с неточностью формул, по которым вычисляются значения функции. В этом случае помехи имеют детерминированный характер.

Все помехи можно разбить на четыре класса. Пусть в некоторой точке x^N измеряется значение функции $f(x)$ с ошибкой η_N , т.е. в результате измерения мы имеем

$$y(x^N) = f(x^N) + \eta_N. \quad (48)$$

1. Абсолютные детерминированные помехи. Такие помехи удовлетворяют условию

$$|\eta_N| \leq \eta, \quad (49)$$

где η - положительная константа, определяющая максимальный уровень помех.

Другие предположения о свойствах помех данного класса не выдвигаются. Эти помехи характерны при систематических ошибках измерений и при погрешностях вычислений.

2. Относительные детерминированные помехи. Для этих помех выполняется условие

$$|\eta_N| \leq \tau(f(x^N) - f_{\min}), \quad (50)$$

где τ - положительная константа.

Значения функции определяются с относительной ошибкой, убывающей по мере приближения к экстремуму. Помехи данного класса возникают при использовании формул с относительными погрешностями.

3. Абсолютные случайные помехи. Эти помехи случайны, независимы, центрированы, и их дисперсия ограничена:

$$M\eta_N = 0, M\eta_N^2 \leq \sigma^2, \quad (51)$$

где σ^2 - максимальная дисперсия.

Такие помехи характерны для измерений на реальном объекте.

4. Относительные случайные помехи. Помехи этого класса удовлетворяют условиям случайности, независимости, центрированности, и их дисперсия убывает при приближении к экстремуму:

$$M\eta_N = 0, M\eta_N^2 \leq \tau(f(x^N) - f_{\min}). \quad (52)$$

Наиболее сложными и распространенными являются помехи первого и третьего классов. В случае помех второго и четвертого классов значениями ошибок иногда можно пренебречь. Поэтому основное внимание при изучении влияния помех на свойства процесса поиска уделим случаям 1 и 3.

В рассматриваемой задаче присутствуют помехи рода 1, связанные с погрешностями вычислений, и 3, связанные с определением значений целевой функции в зависимости от входных данных на основе траекторного моделирования реального объекта – единичного взаимодействия частиц.

При абсолютных детерминированных помехах ошибки при измерениях значений функции могут повлиять на работоспособность методов. Если размер симплекса мал и значения оптимизируемой функции в вершинах симплекса различаются несущественно, то абсолютные детерминированные помехи могут привести к таким соотношениям измеренных значений функций, что шаг будет производиться не в направлении уменьшения значений функции. В [6] установлено, что симплексные методы при наличии помех перестают сходиться в точке минимума. Точность оценки вектора-градиента зависит от величины R_N – размера симплекса. Например, если должно выполняться условие останова

$$\|\overline{\text{grad}f(x^N)} - \text{grad}f(x^N)\| \leq C_1, \quad (53)$$

то выбор $R_N \geq 2n^2\eta/[C_1(n+1)]$, обоснованный в [6], гарантирует выполнение этого условия.

Сходимость гарантируется лишь в окрестность минимума, размеры которой пропорциональны уровню помех. Так же размеры окрестности зависят от вида алгоритма: чем меньше угол φ_N , гарантируемый алгоритмом, тем меньше размеры окрестности и выше точность решения задачи. Наибольшую точность обеспечивают симплексно-градиентные алгоритмы ($\varphi_N = 0$), затем следуют локально оптимальные алгоритмы. Данные выводы о точности решения задачи справедливы не только для алгоритмов с правильными симплексами, но и для алгоритмов с деформируемыми симплексами и комплексами, т.к. их свойства зависят от тех же параметров, что и для алгоритмов с правильными симплексами.

Для относительных детерминированных помех сходимость методов сохраняется, поскольку уровень помех уменьшается при приближении к экстремуму.

Было установлено в [6], что при абсолютных случайных помехах применение для оценки градиента правильного симплекса снижает зашумленность в $(n+1)^{3/2}/n$ раз в сравнении с алгоритмом с центральной пробой (несимметричный аналог метода Кифера-Вольфовица). Данный результат может служить обоснованием для применения алгоритмов с

правильными симплексами для минимизации в условиях, когда ошибки в измерениях значительны. Симплексно-градиентный алгоритм не сходится к точке минимума при наличии аддитивных случайных ошибок, а приводит лишь в окрестность точки минимума, размеры которой зависят от дисперсии помех, что справедливо и для симплексных алгоритмов, если рассматривать их направления как ухудшенную аппроксимацию оцененного антиградиентного направления.

Дисперсию оценки градиента можно снизить за счет проведения параллельных измерений в вершинах симплекса и увеличения числа таких измерений с уменьшением R_N , оставляя величину σ^2 / R_N^2 постоянной. Однако такой подход не может гарантировать сходимость к точке минимума, поскольку для симплексных процедур величины рабочего и пробного шагов связаны между собой и в этом случае трудно удовлетворить условиям более быстрого уменьшения рабочего шага по отношению к пробному.

Способом решения оптимизационных задач, которые невозможно решить с удовлетворительной точностью по причине помех, могут быть методы, ориентированные на работу в условиях значительных помех – методы стохастической аппроксимации.

В процедурах стохастической аппроксимации существенную роль играет то обстоятельство, что, хотя сдвиг на каждой итерации происходит в случайном направлении, тем не менее в нужном направлении, движение происходит с большей вероятностью, чем в нежелательном. В среднем за каждую итерацию происходит сдвиг в нужном направлении. За большее число итераций согласно закону больших чисел сдвиг в нужном направлении будет почти наверняка. Чтобы достигнуть при этом точки минимума, начиная движение из любых начальных условий, необходимо потребовать расходящуюся длину шага, члены которой представляют длину шага на каждой итерации. Чтобы, оказавшись после некоторого числа итераций в окрестности точки минимума, не выйти из нее случайно за небольшое число итераций, нужно требовать стремления к нулю длины шага. Эти соображения лежат в основе методов стохастической аппроксимации.

Предлагаемый в [6] симплексно-градиентный метод стохастической аппроксимации является симплексным аналогом метода Кифера-Вольфовица. Опишем идею этого метода, а затем укажем его отличия от метода Кифера-Вольфовица.

На каждом N -м шаге строится правильный симплекс S_N с центром x^N и радиусом описанной сферы R_N . В вершинах симплекса S_N измеряют значения минимизируемой функции $f(x)$, производя ν_N параллельных измерений в каждой вершине, затем оценивают вектор-градиент по полученным измерениям и производят шаг, пропорциональный коэффициенту ω_N , в оцененном антиградиентном направлении. Вновь полученную точку принимают за центр симплекса и повторяют описанные операции.

Движение центров x^N симплексов S_N записывается согласно правилам алгоритма в виде

$$x^{N+1} = x^N - \omega_N \overline{\text{grad} f(x^N)} = x^N - \frac{n\omega_N}{(n+1)R_N} \sum_{j=1}^{n+1} (\overline{y(x^{N,j})} - \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} \overline{y(x^{N,i})}) r^{N,j}, \quad (54)$$

где $\overline{y(x^{N,j})}$ - среднее значение ν_N параллельных измерений функции $f(x)$ в вершине $x^{N,j}$.

Условия и законы изменения параметров алгоритма R_N , ω_N , ν_N приведены в [6] при анализе сходимости алгоритма.

Отметим следующий момент. На каждом шаге оптимизации можно использовать одну и ту же матрицу симплекса, например, матрицу A , соответствующую симплексу единичного

радиуса с центром в нуле. Чтобы матрица A соответствовала матрице симплекса S_N , достаточно умножить A на R_N и к каждой строке полученной матрицы прибавить x^N . Таким способом получаем матрицу симплекса S_N с центром x^N и радиусом описанной гиперсферы R_N .

Рассмотрим отличия данного алгоритма от алгоритма Кифера-Вольфовица. Существуют два основных варианта метода Кифера-Вольфовица, характеризующихся различными способами пробных измерений значений функции $f(x)$ для оценки вектора-градиента. В первом варианте (с парными покоординатными пробами) значения частных производных оцениваются по двум измерениям $f(x)$ и общее число измерений равно $2n$. Парные пробы располагаются симметрично относительно центральной точки x^N и частные производные оцениваются по двум измерениям: в точках x^N и $x^N + C_N l_j$ ($j = 1, \dots, n$), где C_N - коэффициент, характеризующий величину варьирования переменных; l_j - единичный орт. Данная система $n + 1$ точек образует симплекс, не являющийся правильным. Наличие асимметрии в пробных точках приводит к дополнительным погрешностям в оценке вектора-градиента, и сходимость метода замедляется.

В [6] было показано, что оценка градиента по измерениям в вершинах правильного симплекса более эффективна. Это следует из того, что каждая компонента вектора-градиента оценивается по всем $n + 1$ измерениям, а не по двум из них, как в методе Кифера-Вольфовица. Кроме того, в этом случае отсутствуют дополнительные погрешности, связанные с асимметрией.

В рассматриваемом алгоритме используется идея накопления измерений. При малых размерах симплекса влияние случайных ошибок на точность оценки градиента усиливается, поэтому для снижения погрешности оценки градиента предлагается вводить параллельные измерения в вершинах симплекса. В этом случае градиент оценивается по средним значениям, измеренным в вершинах симплекса, и влияние случайных ошибок на оценку градиента уменьшается.

Кроме того, на практике встречаются ситуации, когда проведение измерений в вершинах симплекса затруднительно вследствие случайных ошибок, поступающих на вход объекта. В этом случае реализуется деформированный симплекс или комплекс. Для решения задач такого типа в [6] предлагается следующий подход.

Выбирается базовая точка x^N . На вход объекта подается соответствующее воздействие, и далее проводятся измерения входных воздействий с учетом случайных ошибок $x^{N,j} = x^N + \varepsilon_{N,j}$ ($j = 1, \dots, k$) и соответствующих им значений функции $f(x)$. После k ($k > n + 1$) измерений имеется информация о значениях функции $f(x^{N,j})$ в k точках, образующих комплекс. По результатам этих измерений оценивается значение вектора-градиента и производится шаг длиной ω_N в оцененном антиградиентом направлении. Полученная точка x^{N+1} принимается за новый базовый режим, и далее повторяется описанная процедура. Дадим краткое описание вычисления вектора-градиента по значениям функции в вершинах комплекса.

Пусть функция $f(x)$ линейна в окрестности x^N :

$$f(x) = (a, x) + b, \quad a, x \in R^n, \quad b \in R^1, \quad (55)$$

и ее значения измерены со случайными ошибками в точках $x^{N,j}$ ($j = 1, \dots, k$):

$$y(x^{N,j}) = (a, x^{N,j}) + b + \eta_{N,j}, \quad (56)$$

где $\eta_{N,j}$ - случайные независимые помехи, причем

$$M\eta_{N,j} = 0, M\eta_{N,j}^2 = \sigma^2. \quad (57)$$

Рассмотрим $(n + 1)$ -мерные векторы $z^{N,j} = (1, x^{N,j})$, $c = (b, a)$. Тогда измерения можно представить в виде

$$y(x^{N,j}) = (c, z^{N,j}) + \eta_{N,j}. \quad (58)$$

Компоненты вектора c , составляющие вектор a , являются компонентами вектора-градиента. Найдем оценку c^k вектора c методом наименьших квадратов:

$$c^k = \left(\sum_{i=1}^k z^{N,i} (z^{N,i})^T \right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^k z^{N,i} y(x^{N,i}) \right) = \Gamma_k \sum_{i=1}^k z^{N,i} y(x^{N,i}). \quad (59)$$

Далее реализуется шаг по формуле

$$x^{N+1} = x^N \omega_N \alpha^k, \text{ где } \alpha^k - \text{компоненты вектора } c^k = (b_k, a^k). \text{ Величина } \omega_N \text{ выбирается}$$

так же, как и в симплексном методе.

Сходимость алгоритма обеспечивает правильный выбор значений параметров R_N , v_N , ω_N в зависимости от дисперсии σ_N^2 . В [6] установлены параметры алгоритма, обеспечивающие сходимость.

3.4 Проблема оврагов при использовании безградиентных методов оптимизации

3.4.1 Сущность проблемы оврагов и ее преодоление с помощью овражного метода Гельфанда

Рассмотренные выше методы спуска хорошо работают не при любой форме поверхности целевой функции. Например, на рис. 16 показаны линии уровня некоторой функции. На нем линии уровня сильно вытянуты в одном направлении и сплюснены в другом. Они напоминают рельеф местности с оврагом. Этот случай крайне неудобен для описанных выше методов. Если целевая функция имеет "овраги", то рассмотренные методы поиска экстремума этой функции малоэффективны, так как будет найдено дно "оврага", и далее применяемые методы застрянут на этом дне.

Действительно, пытаясь найти наименьшее значение такой функции с помощью методов спуска, при перемещении все время в направлении антиградиента, быстро осуществится спуск на дно "оврага" и, поскольку движение идет хотя и маленькими, но конечными шагами, «овраг» будет «проскакиваться». Оказавшись на противоположной стороне "оврага", движение сделает поворот почти на 180° и происходит один или несколько шагов в обратном направлении. При этом снова происходит «проскакивание» дна "оврага" и возвращение на его первоначальную сторону. Продолжая этот процесс, мы вместо того, чтобы двигаться по дну "оврага" в сторону его понижения, будем совершать зигзагообразные скачки поперек "оврага", почти не приближаясь к цели. Таким образом, в случае "оврага" (этот нематематический термин прочно закрепился в литературе) описанные выше методы спуска часто оказываются неэффективными.

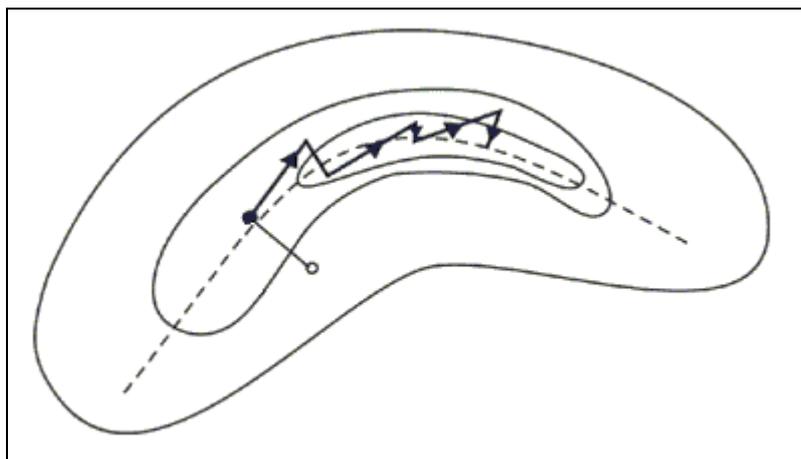


Рис. 16. Схема линий уровня овражной функции и борьба с овражностью с помощью метода Гельфанда

Для борьбы с "оврагами" был предложен ряд специальных приемов. Один из них — так называемый овражный метод Гельфанда [22] — основан на следующей идее: если функция имеет структуру оврага, то надо спуститься на дно оврага, а затем идти вдоль дна оврага, что отражено на рис. 16 и — несколько подробнее — на рис. 17. Алгоритм его заключается в следующем. Существуют два типа таких шагов: шаги спуска и овражные шаги. Шаги спуска начинаются из двух произвольных достаточно близких точек x_0 и x_1 . Каким-нибудь методом, чаще всего методом наискорейшего спуска, но применяются и другие методы, в том числе методы нулевого порядка, делается один шаг на дно оврага, и получают точки X_0 и X_1 . Задается $k = 1$ — номер шага. Производят овражный шаг α , в результате которого получается точка:

$$x_{k+1} = X_k - \frac{X_k - X_{k-1}}{\|X_k - X_{k-1}\|} \alpha \operatorname{sgn}(f(X_k) - f(X_{k-1})). \quad (60)$$

Из точки x_{k+1} совершают один шаг методом наискорейшего спуска или другим, получают точку X_{k+1} . Проверяется условие останова, и при его выполнении запоминается наилучшая точка и прекращается поиск; в противном случае $k = k + 1$ и переход к новому овражному шагу.

Разные варианты овражного метода различаются законами изменения овражного шага α . Идея метода заключается в нахождении двух точек x_k, x_{k-1} в районе дна оврага и аппроксимацией дна оврага отрезками длиной h . При изгибах оврага овражный шаг приводит на склон оврага, с которого осуществляется спуск в район дна оврага. Овражный метод не является локальным, в нем используется информация о поведении функции в двух точках сразу.

В результате, двигаясь достаточно быстро вдоль "оврага", приближаемся к искомому наименьшему значению целевой функции. Такой метод достаточно эффективен для функций двух переменных, однако при большем числе переменных могут возникнуть трудности.

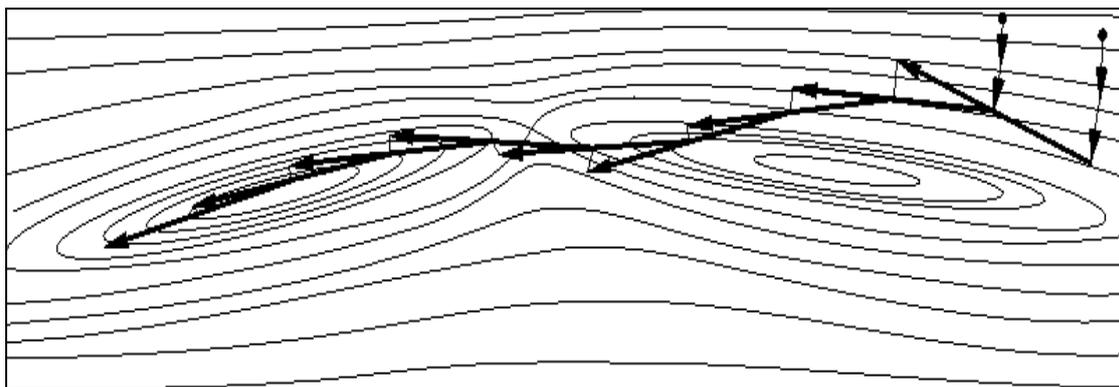


Рис. 17. Пример работы метода Гельфанда

Метод оврагов позволяет "просмотреть" окрестности дна оврага. Полученные точки можно затем уточнить с помощью локальных методов высокого порядка. Разумеется, применение овражного метода порождает массу вопросов. Например, одним из важных моментов является выбор длины овражного шага. Если шаг велик, то метод "проскакивает" локальные минимумы, если же шаг мал, то регулярного движения вдоль дна оврага не получается, особенно, если дно оврага имеет "уплощения".

3.4.2 Преодоление проблемы оврагов при большом числе независимых переменных

Существует модификация овражного метода Гельфанда [23] для числа независимых переменных, превышающего два, алгоритм которой заключается в следующем:

1 Все независимые переменные разбиваются на две группы: первая группа включает в себя переменные, изменение которых существенно влияет на значение целевой функции, вторая группа содержит переменные, при изменении которых значение целевой функции изменяется не столь значительно.

2 Выбирается начальная точка u_0 , из которой производится поиск минимума любым методом локального поиска. Этот поиск закончится на дне "оврага", в результате чего будет найдена некоторая критическая точка u_1 .

3 Из выбранной начальной точки u_0 делается шаг в направлении наибольшего изменения переменных, несущественно влияющих на значение целевой функции. При этом получается некоторое состояние u_0^1 (рис. 18).

4 Из состояния u_0^1 производится поиск минимума, в результате которого определяется еще одна критическая точка u_2 , расположенная на дне "оврага" (рис. 18).

5 Две найденные критические точки u_1 и u_2 соединяются прямой и выполняется "шаг по оврагу" в направлении убывания целевой функции. Это дает новое исходное состояние u_1^1 .

6 Из состояния u_1^1 производится спуск на "дно оврага" и находится критическая точка u_3 . Далее определяется состояние u_2^1 и т.д. (рис. 18).

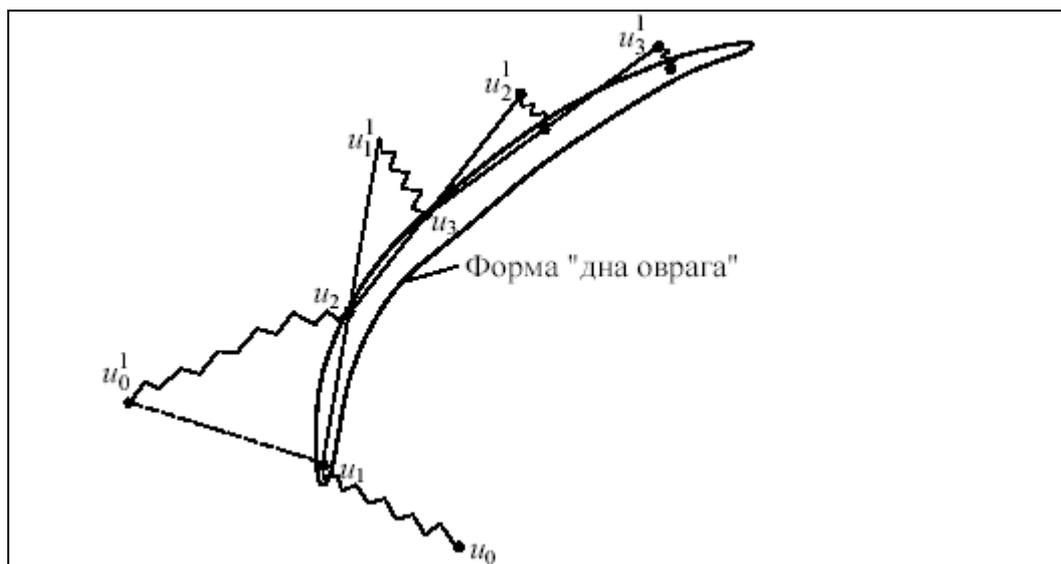


Рис. 18. Метод "оврагов" – модификация метода Гельфанда

Процесс поиска продолжается до тех пор, пока значение целевой функции во вновь найденной критической точке $u_{k+1}^1 Q(u_{k+1})$ не окажется больше, чем в предыдущей точке $u_{k-1}^1 Q(u_{k-1})$. Минимум в этом случае находится между точками u_{k-1}^1 и u_{k+1}^1 . Далее процесс поиска можно повторить, но уже с меньшими "шагами по оврагу", пока не будет достигнута требуемая точность.

В результате поиска могут возникнуть различные ситуации. Например, когда все переменные примерно одинаково влияют на значение оптимизируемой функции, но, тем не менее, "овраг" существует. В этом случае для поиска состояния u_0^1 можно сделать любой шаг из начального состояния u_0 , далее поиск продолжается по описанному выше алгоритму.

3.5 Проблема нелокальности

3.5.1 Наиболее простые способы борьбы с многоэкстремальностью

Все рассмотренные выше методы не различают локального и глобального минимумов. В случае выпуклых функций никаких проблем не возникает — любой локальный минимум является глобальным.

В случае невыпуклых функций это обстоятельство превращается в серьезнейшую проблему. Приведем сразу же примеры функций (рис. 19), для которых, на первый взгляд, невозможно предложить ничего другого, кроме перебора значений на достаточно мелкой сетке с последующим уточнением решения, например, методом Ньютона.

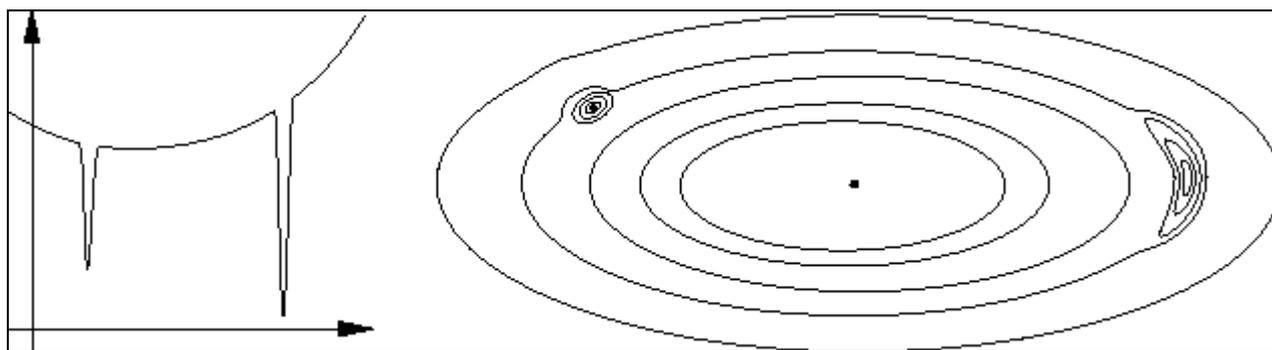


Рис. 19. Примеры функций, имеющих много локальных экстремумов

Поэтому здесь мы приведем лишь некоторые рецепты, позволяющие до известной степени решить эту проблему.

Универсального ответа на вопрос, как бороться с многоэкстремальностью, не существует. Самый простой прием состоит в том, что проводят поиск несколько раз, начиная его с разных точек. Если при этом получаются разные ответы, то сравнивают в них значения целевой функции и выбирают наименьшее. Расчеты останавливают после того, как несколько новых поисков не меняют полученного ранее результата. Выбор начальных точек поиска, обоснованность прекращения расчетов в значительной степени зависят от опыта и интуиции специалистов, решающих задачу.

Наиболее простым и очевидным способом преодоления проблемы многоэкстремальности является "разбросать" по исследуемой области (в которой гарантировано находится минимум функции) некоторое множество начальных точек и из каждой из них спускаться, например, с помощью любого метода спуска, в "ближайший" локальный минимум, сравнивая значение функции с уже найденными минимумами.

3.5.2 Метод «спуск-подъем-перевал»

Другим методом поиска глобального минимума является метод спуск – подъем – перевал. Этот метод состоит из трех циклически повторяющихся этапов. Этап спуска — это обычный спуск из некоторой начальной точки x_0 в ближайший локальный минимум, чаще всего методом сопряженных градиентов, однако может быть использован и любой другой метод, в том числе и безградиентный. Критерием попадания в малую окрестность точки локального минимума является "сходимость" итераций. В результате первого этапа мы получаем точку $x_N = y_0$, которая служит начальным приближением следующего этапа — этапа подъема. На этом этапе шаг совершается в направлении "наимедленнейшего" возрастания функции — направлении собственного вектора оператора $f''(y_n)$, отвечающего наименьшему собственному значению. Это направление находят с помощью специальной процедуры. Таким образом, строят последовательность y_n , "поднимающуюся по ложбине" до ближайшего "перевала" — седловой точки функции f . О выходе на "перевал" судят по смене знака некоторой квадратичной формы. После этого описанный трехэтапный цикл повторяется, начиная с последней ("перешедшей перевал") точки y_M этапа подъема.

3.5.3 Алгоритм имитации отжига

Алгоритм имитации отжига (*Simulated annealing*) — общий алгоритмический метод решения задачи глобальной оптимизации, особенно дискретной и комбинаторной оптимизации. Один из примеров методов Монте-Карло.

Алгоритм основывается на имитации физического процесса, который происходит при кристаллизации вещества из жидкого состояния в твёрдое, в том числе при отжиге металлов. Предполагается, что атомы уже выстроились в кристаллическую решётку, но ещё допустимы переходы отдельных атомов из одной ячейки в другую. Предполагается, что процесс протекает при постепенно понижающейся температуре. Переход атома из одной ячейки в другую происходит с некоторой вероятностью, причём вероятность уменьшается с понижением температуры. Устойчивая кристаллическая решётка соответствует минимуму энергии атомов, поэтому атом либо переходит в состояние с меньшим уровнем энергии, либо остаётся на месте. Этот алгоритм также называется алгоритмом Н. Метрополиса [24], по имени его автора.

При помощи моделирования такого процесса ищется такая точка или множество точек, на котором достигается минимум некоторой числовой функции $F(\bar{x})$, где $\bar{x} = (x_1, \dots, x_m) \in X$. Вводится последовательность точек $\bar{x}_0, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n$ пространства X . Алгоритм последовательно находит следующую точку по предыдущей, начиная с точки \bar{x}_0 , которая является начальным приближением. Алгоритм останавливается по достижении точки \bar{x}_n .

Точка \bar{x}_{i+1} по алгоритму получается на основе текущей точки \bar{x}_i следующим образом. К точке \bar{x}_i применяется оператор A , который случайным образом модифицирует соответствующую точку, в результате чего получается новая точка \bar{x}^* , находящаяся в окрестности \bar{x}_i . Точка \bar{x}^* становится точкой \bar{x}_{i+1} с вероятностью $P(\bar{x}^*, \bar{x}_{i+1})$, которая вычисляется в соответствии с распределением Гиббса:

$$P(\bar{x}^* \rightarrow \bar{x}_{i+1} | \bar{x}_i) = \left\{ \begin{array}{l} 1, F(\bar{x}^*) - F(\bar{x}_i) < 0 \\ \exp\left(-\frac{F(\bar{x}^*) - F(\bar{x}_i)}{Q_i}\right), F(\bar{x}^*) - F(\bar{x}_i) \geq 0 \end{array} \right\}. \quad (61)$$

Здесь $Q_i > 0$ — элементы произвольной убывающей, сходящейся к нулю положительной последовательности, которая задаёт аналог падающей температуры в кристалле. Скорость убывания и закон убывания могут быть заданы по желанию создателя алгоритма.

Рассчитывается изменение значения целевой функции, если оно уменьшилось, то точка \bar{x}^* становится точкой \bar{x}_{i+1} ; в противном случае принимается, что $\bar{x}^* = \bar{x}_{i+1}$ с вероятностью $\exp\left(-\frac{F(\bar{x}^*) - F(\bar{x}_i)}{Q_i}\right)$ путем генерации случайного числа R из интервала $(0,1)$ с последующим сравнением его со значением $\exp\left(-\frac{F(\bar{x}^*) - F(\bar{x}_i)}{Q_i}\right)$. Если $\exp\left(-\frac{F(\bar{x}^*) - F(\bar{x}_i)}{Q_i}\right) > R$, принять новое решение $\bar{x}^* = \bar{x}_{i+1}$; в противном случае проигнорировать его.

Уменьшается значение целевой функции с использованием коэффициента r , выбираемого из интервала $(0,1)$, и снова повторяется цикл.

После снижения температуры Q_i до нуля используется любой из детерминированных методов локальной оптимизации вплоть до достижения минимума целевой функции.

Алгоритм имитации отжига похож на градиентный спуск, но за счёт случайности выбора промежуточной точки должен будет попадать в локальные минимумы реже, чем градиентный спуск. Алгоритм имитации отжига не гарантирует нахождения минимума

функции, однако при правильной политике генерации случайной точки в пространстве X , как правило, происходит улучшение начального приближения.

Алгоритм чаще всего применяется в задачах обучения нейронных сетей или для решения полимодальных комбинаторных проблем с очень большим количеством возможных решений, например задачи о расстановке ферзей. Метод имитации отжига оказывается особенно удачным, например, для машины Больцмана, в которой каждое состояние системы считается допустимым.

4 Сравнение безградиентных методов определения условий максимальной стабилизации продуктов рекомбинации

4.1 Сравнение безградиентных методов оптимизации и выбор сравниваемых методов

Для обоснованного выбора метода решения оптимизационной задачи с целью определения значений начальных кинематических параметров (b , Θ , Φ), при которых минимизируется внутренняя энергия E_{molec} образующейся молекулы CsBr, были выполнены:

- разработки программных комплексов, реализующего каждый из рассматриваемых методов в виде модулей, и выполнении с их помощью расчетов при выбранных E_{ini} и E_{rel} ;
- сравнение полученных для различных методов результатов поиска точек с минимальной внутренней энергией молекулы CsBr. Методы сравнивались по точности поиска минимума внутренней энергии E_{molec} образующейся молекулы CsBr, что отражено в виде сравнения глубины получаемых минимумов, а также на предмет скорости поиска, которая зависит от количества итераций каждого метода.

Сравнивались следующие методы:

1. Метод деформируемого многогранника с отражением одной вершины.
2. Метод Розенброка.
3. Метод Бокса.
4. Метод деформируемого многогранника с отражением двух вершин.
5. Метод деформируемого многогранника с отражением трех вершин.
6. Метод деформируемого многогранника с переносом вершин.
7. Метод «спуск-подъем-перевал».
8. Метод имитации отжига.

Не рассматривались такие методы как

а) покоординатный спуск – по причине низкой скорости сходимости и существенности выполнения условие гладкости целевой функции для успешной работы метода;

б) метод Хука-Дживса, недостаток которого состоит в том, что в случае сильно вытянутых, изогнутых или обладающих острыми углами линий уровня целевой функции он может оказаться неспособным обеспечить продвижение к точке минимума;

в) метод Пауэлла, в котором существенным условием является квадратичность целевой функции;

г) методы случайного поиска – в силу того, что они обычно гарантируют сходимость лишь в асимптотике, т.е. за бесконечное число шагов;

д) симплексный метод с правильным симплексом по причине его слабой адаптивности к сложной форме поверхности целевой функции;

е) метод оврагов Гельфанда, применение которого было сочтено нецелесообразным для решения данной задачи, т.к. поверхности целевых функций, рассчитанных при различных энергиях E_{ini} и E_{rel} не только не имеют в своей структуре оврага, но обладают выпуклой формой.

4.2 Результаты сравнения безградиентных методов оптимизации для задачи определения условия, приводящих к максимальной стабилизации молекулы CsBr

Сравнение выбранных методов оптимизации было проведено для R = Hg, Xe, Kr при $E_{ini} = 1$ эВ, $E_{rel} = 1$ эВ; $E_{ini} = 1$ эВ, $E_{rel} = 5$ эВ; $E_{ini} = 5$ эВ, $E_{rel} = 1$ эВ; $E_{ini} = 5$ эВ, $E_{rel} = 5$ эВ. Начальная точка поиска была выбрана случайным образом, и далее спуск с использованием каждого из проверяемых методов продолжался из одной и той же начальной точки. Для каждого проводилось пять таких расчетов. Из полученных минимумов выбирался самый глубокий. Число рассчитываемых траекторий суммировалось для каждого метода. Полученные результаты сравнения методов представлены в табл. 2, где номер метода соответствует приведенному выше списку.

Таблица 2

Результаты сравнения безградиентных методов оптимизации по количеству рассчитываемых траекторий и глубине полученных с помощью методов минимумов:

R = Hg		$E_{ini} = 1$ эВ				$E_{rel} = 1$ эВ		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	6230	3890	16245	220	575	555	20945	10535
b_{min}	2,766	2,596	2,606	2,738	2,717	2,97	2,987	2,812
tet_{min}	70,770	67,522	59,918	69,720	70,080	57,150	70,035	60,717
$f_{i_{min}}$	95,700	104,208	119,835	98,130	97,830	127,860	95,611	105,683
$emolec_{min}$	0,66893	0,680951	0,696578	0,669654	0,670296	0,813753	0,785826	0,714392
R = Hg		$E_{ini} = 1$ эВ				$E_{rel} = 5$ эВ		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	5300	1510	15720	870	240	1710	38780	10540
b_{min}	2,431	2,442	0,892	2,363	2,662	2,446	2,439	2,34
tet_{min}	73,745	63,561	89,418	71,700	48,330	75,120	63,589	64,54
$f_{i_{min}}$	92,204	98,294	141,418	97,320	117,960	91,020	98,294	98,238
$emolec_{min}$	0,001017	0,04977	0,16845	0,017492	0,493606	0,002276	0,049511	0,048422
R = Hg		$E_{ini} = 5$ эВ				$E_{rel} = 1$ эВ		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	2990	600	29095	450	3265	6335	16375	10550
b_{min}	2,609	2,661	2,591	2,319	2,604	2,626	2,558	2,714
tet_{min}	24,120	42,641	21,711	31,140	18,990	72,870	42,893	45,744
$f_{i_{min}}$	146,040	101,756	176,664	101,880	164,640	92,700	103,476	94,917
$emolec_{min}$	0,672693	0,692935	0,669997	0,978621	0,691492	1,162201	0,705587	0,703613
R = Hg		$E_{ini} = 5$ эВ				$E_{rel} = 5$ эВ		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	8255	2805	25260	1095	1245	445	45395	10545
b_{min}	2,301	2,584	2,073	2,57	1,603	1,472	2,334	2,031
tet_{min}	70,170	65,191	59,632	67,560	57,150	72,720	71,075	48,108

$f_{i_{min}}$	95,100	93,848	119,265	88,530	87,000	151,350	96,198	61,437
$emolec_{min}$	0,075034	0,183577	0,255111	0,170264	0,84029	0,283449	0,083292	1,55931
R = Xe			$E_{ini} = 1 \text{ эВ}$			$E_{rel} = 1 \text{ эВ}$		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	5680	3890	16245	220	575	555	12885	10535
b_{min}	2,766	2,596	2,606	2,738	2,717	2,97	2,725	2,812
tet_{min}	70,770	67,522	59,918	69,720	70,080	57,150	71,601	60,717
$f_{i_{min}}$	95,700	104,208	119,835	98,130	97,830	127,860	94,590	105,683
$emolec_{min}$	0,66893	0,680951	0,696578	0,669654	0,670296	0,813753	0,671022	0,714392
R = Xe			$E_{ini} = 1 \text{ эВ}$			$E_{rel} = 5 \text{ эВ}$		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	5340	2385	24720	430	5015	590	54260	10535
b_{min}	1,366	1,056	0,923	0,738	2,568	0,522	1,367	1,895
tet_{min}	70,080	65,409	63,694	89,730	68,670	62,940	70,406	60,774
$f_{i_{min}}$	102,810	116,861	127,388	112,650	87,210	113,010	101,523	122,504
$emolec_{min}$	0,012476	0,030954	0,047167	0,040521	0,645996	0,071351	0,012782	0,289051
R = Xe			$E_{ini} = 5 \text{ эВ}$			$E_{rel} = 1 \text{ эВ}$		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	6090	320	15485	530	610	435	18210	10840
b_{min}	2,232	2,626	2,275	2,36	2,415	2,432	2,251	2,477
tet_{min}	48,630	52,434	53,814	58,920	59,160	65,970	50,841	53,35
$f_{i_{min}}$	120,330	101,779	107,629	93,000	97,710	83,580	114,689	164,669
$emolec_{min}$	0,59324	0,736651	0,59421	0,60632	0,608255	0,619191	0,593387	1,006407
R = Xe			$E_{ini} = 5 \text{ эВ}$			$E_{rel} = 5 \text{ эВ}$		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	9320	1965	16605	865	560	2175	13795	10590
b_{min}	1,35	1,695	0,765	0,812	0,988	1,55	1,389	0,997
tet_{min}	73,140	73,379	81,924	78,840	82,200	85,950	71,873	54,673
$f_{i_{min}}$	254,820	93,184	179,986	196,980	233,970	283,080	261,355	262,937
$emolec_{min}$	0,000001	0,054307	0,000628	0,008307	0,015735	0,243078	0,004823	0,430099
R = Kr			$E_{ini} = 1 \text{ эВ}$			$E_{rel} = 1 \text{ эВ}$		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	6835	3610	23075	340	900	700	46070	10535
b_{min}	1,965	2,005	1,965	2,243	3,355	2,195	2,069	1,83
tet_{min}	66,810	68,742	66,808	79,860	129,630	84,810	69,404	62,282
$f_{i_{min}}$	273,330	82,975	86,659	296,010	316,770	84,390	279,542	98,905
$emolec_{min}$	0,301978	0,302602	0,301978	0,335446	2,437704	0,711901	0,304660	0,305977

R = Kr		E _{ini} = 1 эВ				E _{rel} = 5 эВ		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	8490	950	17060	305	600	490	44855	10635
b _{min}	-0,028	-0,036	0,113	-0,308	0,337	-0,13	0,283	1,311
tet _{min}	58,890	83,354	58,12	58,950	61,350	60,750	64,396	61,073
f _{i,min}	278,970	82,194	179,683	275,130	37,770	313,620	277,766	256,376
emolec _{min}	0,46947	0,823529	0,464023	0,48859	0,539738	0,483918	0,556701	0,902784
R = Kr		E _{ini} = 5 эВ				E _{rel} = 1 эВ		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	6955	8195	17580	450	775	685	8540	10935
b _{min}	1,507	1,616	1,726	1,731	1,477	2,258	1,505	2,193
tet _{min}	38,760	50,726	56,929	55,710	41,820	71,430	38,752	15,262
f _{i,min}	226,050	94,038	279,126	81,510	239,220	39,720	227,595	168,774
emolec _{min}	0,282769	0,283436	0,282241	0,283537	0,288042	0,485363	0,282898	1,508921
R = Kr		E _{ini} = 5 эВ				E _{rel} = 5 эВ		
Параметр/метод	1	2	3	4	5	6	7	8
Число траекторий	7950	1370	13910	6330	4435	10640	22395	10695
b _{min}	0,203	0,404	0	0,493	0,206	0,184	0,230	1,377
tet _{min}	59,670	53,863	59,008	61,110	59,220	60,930	59,858	78,3
f _{i,min}	352,050	286,838	212,821	6,660	92,610	160,740	334,085	49,956
emolec _{min}	0,207682	0,396614	0,23244	0,228036	0,246468	0,300574	0,210156	1,243366

Приведенные в табл. 2 результаты показывают, что в подавляющем большинстве случаев (91,67%) наибольшую точность поиска точек с минимальными значениями внутренней энергии молекулы CsBr обеспечивает метод деформируемого многогранника с отражением одной вершины. Этот метод позволяет получать наиболее глубокие минимумы. По скорости сходимости лучшими являются метод деформируемого многогранника с отражением двух или трех вершин, метод деформируемого многогранника с переносом вершин и метод Розенброка. Однако точность поиска с помощью этих методов ниже по сравнению с методом деформируемого многогранника с отражением одной вершины, скорость сходимости которого следует сразу после указанных методов. Остальные методы (метод Бокса, метод «спуск-подъем-перевал», имитации отжига) применительно к решаемой в данной работе задаче уступают методу деформируемого многогранника с отражением одной вершины, как по скорости поиска, так и по его точности. Выбор симплексного метода с деформируемым многогранником и отражением одной вершины связан с тем, что для решения поставленных в работе задач максимально возможная точность поиска, которую позволяет получить данный метод, является более приоритетной по сравнению с критерием максимально возможной скорости выполнения поиска. С учетом этого метод обеспечивает хотя и не самую большую, но приемлемую скорость расчетов.

5 Заключение

В настоящей работе описаны алгоритмы и характеристики безградиентных методов оптимизации, а также рассмотрены условия задач, в которых их применение будет

оптимальным, а также ограничения применимости этих методов. Проведено количественное сравнение эффективности применения 8 различных безградиентных методов оптимизации для решения задачи определения начальных условий, приводящих к образованию наиболее стабильной молекулы CsBr. Эффективность сравнивалась по точности и скорости поиска. Был обоснован выбор метода деформируемых многогранников с отражением одной вершины, как наиболее точного и при этом относительно быстрого, для решения данной задачи. С помощью выбранного метода деформируемых многогранников, дополненного некоторыми изменениями по сравнению со стандартным алгоритмом, определены те начальные условия, которые приводят к образованию наиболее стабильной молекулы CsBr. Разработан симплексоподобный, так же безградиентный, алгоритм, позволяющий очерчивать области значений начальных параметров, внутри которых результатом взаимодействия всегда является рекомбинация.

Описанный метод определения граничных условий реализации элементарных процессов открывает новые возможности исследования динамики элементарных процессов с точки зрения возможности понимания механизма процесса на границах реализации элементарного процесса, т.е. в «экстремальных условиях» образования продукта, в том числе в заданном состоянии. Метод позволяет точно определить условия, в которых образуются молекулы с минимально возможной степенью возбуждения, найти область значений начальных параметров, в которой результатом взаимодействия частиц всегда является рекомбинация. Представленный метод позволяет точно определять области динамических характеристик прямой рекомбинации ионов. Впервые были определены точки (β , Θ , Φ) с минимальными значениями внутренней энергии молекулы CsBr для каждого из трех R (Hg, Xe, Kr) и при каждом из заданных по сетке E_{ini} и E_{rel} от 1 эВ до 10 эВ с шагом 1 эВ. На основе полученных данных были обнаружены зависимости образования молекул CsBr с наиболее полной стабилизацией от энергии столкновения ионов и энергии третьего тела для трех масс частиц, стабилизирующих продукт рекомбинации. Кроме того, модифицированным симплексным методом определены границы ориентационных углов векторов скоростей движения ионов и третьего тела для трех сильно различающихся масс стабилизирующих частиц, что позволило обнаружить сложную форму зависимостей граничных значений ориентационных углов от прицельного параметра при различных значениях энергии столкновения ионов, энергии третьего тела и массы третьего тела.

Полученные результаты говорят о высокой эффективности метода и о наличии сложных зависимостей образования молекулы CsBr, в том числе, в наиболее стабильном состоянии, от начальных параметров. В дальнейшем планируется выполнить с помощью представленного метода поиск полных областей значений начальных данных, приводящих к образованию молекулы в заданных состояниях.

Имеет смысл сравнить скорость и точность определения начальных условий, приводящих к максимальной стабилизации молекулы CsBr, для используемого в настоящей работе метода деформируемого многогранника с методами Розенброка, Диксона для задач с ограничениями, комплексным методом Бокса, а также сравнить результаты работы применительно к решаемой задаче алгоритмов с различными критериями оптимальности в методе деформируемого симплекса Нелдера-Мида, с отображением оптимального на каждом шаге числа вершин симплекса и переносом вершин. Кроме того, к решению данной задачи можно попробовать применить метод деформируемого симплекса с учетом помех, а также овражный метод Гельфанда и использованием спуска с помощью методов нулевого порядка, метод «Спуск-подъем-перевал» и имитации отжига для борьбы с многоэкстремальностью.

По полученным данным определены основные задачи расчета других характеристик детальной динамики процесса рекомбинации: определение роли каждого из компонентов (β , Θ , Φ) в детальной динамике рекомбинации ионов и детальный анализ получаемых графических данных в областях, представляющих наибольший интерес и получение

количественной информации по графикам. Представленный метод также дает возможность определить диапазоны значений начальных параметров, в которых результатом взаимодействия является рекомбинация с образованием молекулы CsVg в заданных квантовых состояниях, т.е. с заданным уровнем возбуждения. Поскольку процесс столкновительно-индуцированной диссоциации является полностью обратным процессу рекомбинации, то применяемые для исследования граничных и оптимальных условий методы применимы для решения аналогичных задач при исследовании СИД. Кроме того, применяемые и усовершенствованные в данной работе методы решения оптимизационных задач, могут быть в дальнейшем применены для решения более сложных задач, таких, как задачи обработки времяпролетных спектров, в которых необходима оптимизация по более, чем 40 параметрам.

Благодарность

Коллектив авторов выражает благодарность д.-ф.м.н. Севрюку М.Б. за полезные обсуждения и помощь в работе.

Литература

- 1 Колесникова Е.В., Кабанов Д.Б., Русин Л.Ю. Метод исследования граничных условий реализации элементарного процесса прямой трехтельной рекомбинации ионов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2009. Т. 8. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2009-10-13-001.pdf> (27 страниц).
- 2 Азриель В.М., Акимов В.М., Русин Л.Ю. и др. Динамика реакции образования атомных ионов при диссоциации молекул CsVg в столкновениях с ксеноном // Химическая Физика. 1990. Том 9. С. 1463.
- 3 Азриель В.М., Акимов В.М., Русин Л.Ю. Рассеяние ионов Cs⁺ при диссоциации CsVg в скрещенных молекулярных пучках // Химическая Физика. 1990. Том 9. С. 1224.
- 4 Русин Л.Ю. Динамика образования ионных пар, индуцированного столкновениями тяжелых частиц // Известия, сер. Энергетика. 1997. № 1. С. 41.
- 5 Азриель В.М., Кабанов Д.Б., Колесникова Л.И., Русин Л.Ю. Динамика рекомбинации ионов в низкотемпературной плазме // Изв. Академии наук, Энергетика. 2007. №5. С.50.
- 6 Рыков А.С. Системный анализ: модели и методы принятия решений и поисковой оптимизации. М.: Издательский дом МИСиС, 2009, 608 с.
- 7 Русин Л.Ю., Колесникова Е.В., Акимов В.М., Кабанов Д.Б., Колесникова Л.И., Попов Б.Е. Разработка программного комплекса для определения оптимальных условий прямой трехтельной рекомбинации ионов Cs⁺ и Vg⁻ с участием третьего тела. Отчет во ВНТИЦ. М.: ИНЭП ХФ РАН. 2008. 150 с. Инвентарный номер 02200 803401.
- 8 Русин Л.Ю., Колесникова Е.В., Колесникова Л.И., Кабанов Д.Б. Определение диапазонов значений кинематических параметров прямой трехтельной рекомбинации ионов Cs⁺ и Vg⁻ с участием третьего тела. Отчет во ВНТИЦ. М.: ИНЭП ХФ РАН. 2009. 57 с. Инвентарный номер 02200 900519.
- 9 Русин Л.Ю., Колесникова Е.В., Колесникова Л.И., Кабанов Д.Б. Обзор и сравнение безградиентных методов оптимизации применительно к задаче определения оптимальных кинематических параметров прямой трехтельной рекомбинации ионов Cs⁺ и Vg⁻ с участием третьего тела. Отчет во ВНТИЦ. М.: ИНЭП ХФ РАН. 2010., 83 с. Инвентарный номер 02201 050101.
10. Русин Л.Ю., Колесникова Е.В., Колесникова Л.И., Кабанов Д.Б. Количественное сравнение безградиентных методов оптимизации для определения оптимальных кинематических параметров прямой трехтельной рекомбинации ионов. Отчет во ВНТИЦ. М.: ИНЭП ХФ РАН. 2010. 114 с. Инвентарный номер 02201056569.
- 11 Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс: Пер. с англ. М.: Радио и связь, 1988, 128 с.
- 12 Spendley W., Hext G.R., Himsforth F.R. Sequential application of simplex designs in optimization and evolutionary operation // Technometrics. 1962. V. 4. № 4. P. 441.

- 13 Nelder J.A., Mead R. A simplex method for function minimization // *Comp. J.* 1964. V. 7. № 4. P. 308.
- 14 Рыков А.С. Поисковая оптимизация. Методы деформируемых конфигураций. М.: Наука, 1993, 216 с.
- 15 Рыков А.С. Методы деформируемых конфигураций // *Информационная математика.* – 2001. - № 1. – С. 167-183.
- 16 Рыков А.С. Методы системного анализа: оптимизация. – М.: Экономика, 1999. 255 с.
- 17 Рыков А.С. О методах деформируемых конфигураций // *Докл. РАН.* 2000. Т.375. № 1.
- 18 Рыков А.С. Принципы построения методов управляемого прямого поиска // *Докл. АН СССР.* – 1982. Т.266. № 5. С. 1082-1086
- 19 Rykov A.S. Deformed Configuration Methods for Unconstrained Optimization. Department of Mathematics and Statistics. Edinburgh: University of Edinburgh, 1999. 110 p.
- 20 А.С. Рыков Методы системного анализа: оптимизация. М.: Экономика, 1999, 256 с.
- 21 The complex method applied to optimal truss configuration. Samuel L. Lipson and Larry B. Gwin. *Computers & Structures*, V.7. I. 3. 1977. P. 461-468
- 22 Ф.П. Васильев. Основы численных методов решения экстремальных задач. М.: Наука, 1972, 136 с.
- 23 И. М. Гельфанд, М. Л. Цетлин. О некоторых способах управления сложными системами. *УМН.* 17:1(103) 1962. С. 3–25.
- 24 Metropolis N. and al. Equation of calculation by fast computing machines. // *J. of Chem. Phys.* 1998. V. 21. N. 6.

Статья поступила в редакцию 11 октября 2010 г.

Приложение А

Блок-схема метода деформируемого многогранника для определения значений начальных кинематических параметров, приводящих к максимальной стабилизации молекулы CsBr

