

Лекция № 5

Методы нулевого порядка

(8) Метод Нелдера–Мида (деформируемого многогранника)

Алгоритм метода:

1) Задается начальная система точек (многогранник), включающая в себя $n+1$ точку: $X^{0(1)}, X^{0(2)} \dots X^{0(n+1)}$.

(для функции 2-х переменных задается три начальные точки: $X^{0(1)}, X^{0(2)}, X^{0(3)}$).

2) Вычисляется значение функции во всех точках многогранника и выбирается:

лучшая точка $X^{(л)}: f(X^{(л)}) = \min_i [f(X^{k(i)})]$ (здесь k – номер итерации, i – номер точки)

худшая точка $X^{(х)}: f(X^{(х)}) = \max_i [f(X^{k(i)})]$

3) Далее заданная система из $n+1$ точки перестраивается, для этого строится центр тяжести системы заданных точек за исключением худшей:

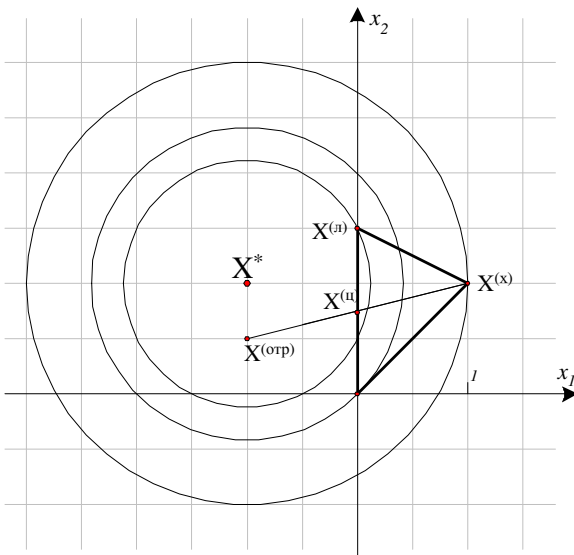
$$X^{(ц)} = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^{n+1} X^{k(i)} - X^{(х)} \right)$$

(для функции 2-х переменных точка $X^{(ц)}$ – середина отрезка, соединяющего точки за исключением худшей)

4) Выполняется операция отражение худшей точки через центр тяжести:

$$X^{(отр)} = X^{(ц)} + \alpha \cdot (X^{(ц)} - X^{(х)}),$$

здесь $\alpha > 0$ – параметр отражения (рекомендуемое значение $\alpha = 1$).

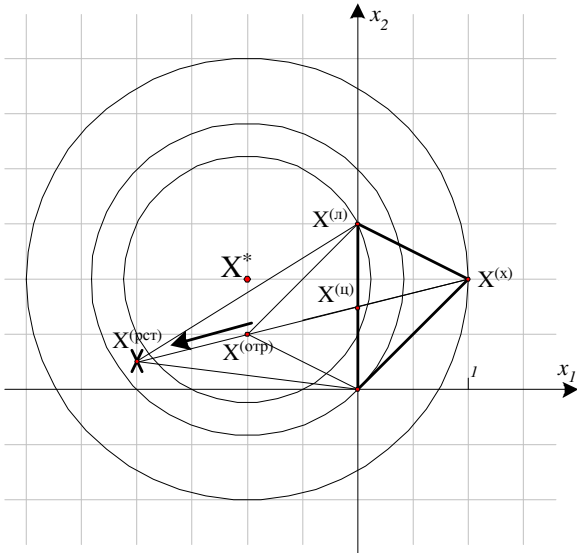


5) Формируется новая система точек (многогранник). Для этого в точке $X^{(отр)}$ вычисляется значение функции, полученное значение сравнивается с $f(X^{(л)})$:

- если $f(X^{(отр)}) < f(X^{(л)})$ выполняется операция растяжение:

$$X^{(рст)} = X^{(ц)} + \gamma(X^{(отр)} - X^{(ц)}),$$

здесь $\gamma > 0$ ($\gamma \neq 0$) – параметр растяжения (рекомендованное значение $\gamma \in [2, 3]$)

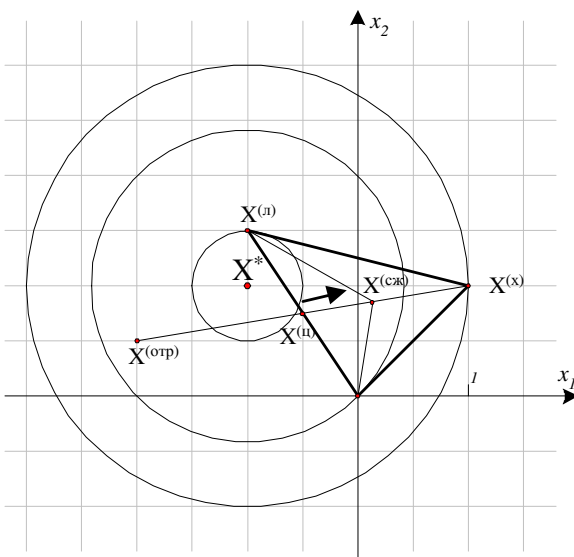


При этом если $f(X^{(рст)}) < f(X^{(отр)})$, то в новой системе точек точка $X^{(х)}$ будет заменена на $X^{(рст)}$, если же $f(X^{(рст)}) \geq f(X^{(отр)})$, то в новой системе точек точка $X^{(х)}$ будет заменена на $X^{(отр)}$.

- если $f(X^{(л)}) \leq f(X^{(отр)}) < f(X^{(х)})$ выполняется операция сжатие:

$$X^{(сж)} = X^{(ц)} + \beta(X^{(х)} - X^{(ц)}),$$

здесь $\beta > 0$ ($\beta \neq 0$) – параметр сжатия (рекомендованное значение $\beta \in [0.4, 0.6]$).



При этом если $f(X^{(сж)}) < f(X^{(отр)})$, то в новой системе точек точка $X^{(х)}$ будет заменена на $X^{(сж)}$, если же $f(X^{(сж)}) \geq f(X^{(отр)})$, то в новой системе точек точка $X^{(х)}$ будет заменена на $X^{(отр)}$.

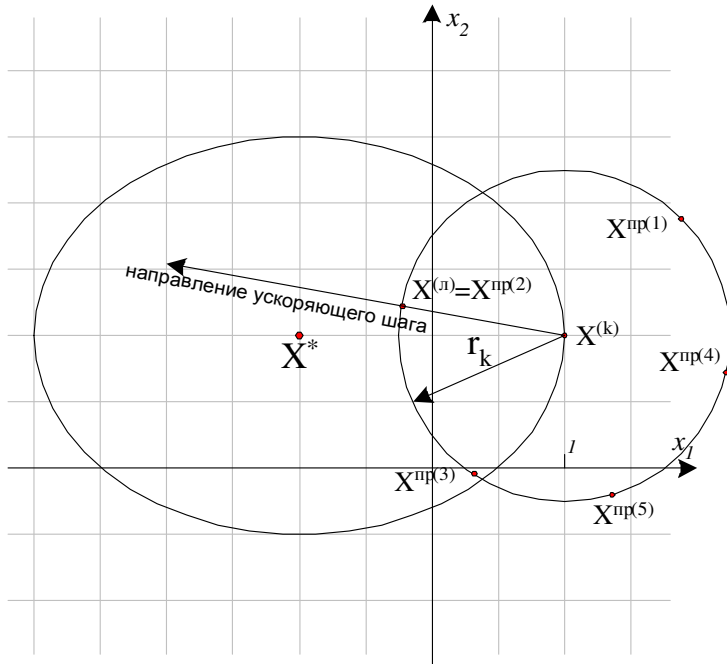
- если $f(X^{(отр)}) \geq f(X^{(х)})$ выполняется операция редукция: при этом формируется новый многогранник, содержащий точку $X^{(л)}$ с уменьшенными вдвое сторонами:

$$X^{k+1(i)} = X^{(л)} + 0.5(X^{k(i)} - X^{(л)}), \quad i = 1..n + 1$$

- если условие выполнено, то система пробных точек считается удачной, далее возможно два продолжения алгоритма:

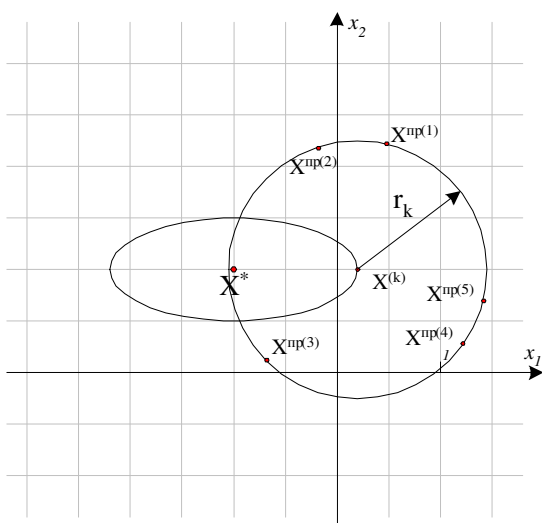
4.1) $X^{k+1} = X^{(л)}$

- 4.2) в направлении, соединяющем точки X^k и $X^{(л)}$ делается ускоряющий шаг:
 $X^{k+1} = X^{(л)} + \lambda(X^{(л)} - X^{(к)})$, в этом случае, если оказывается, что $f(X^{k+1}) \geq f(X^k)$, принимается $X^{k+1} = X^{(л)}$

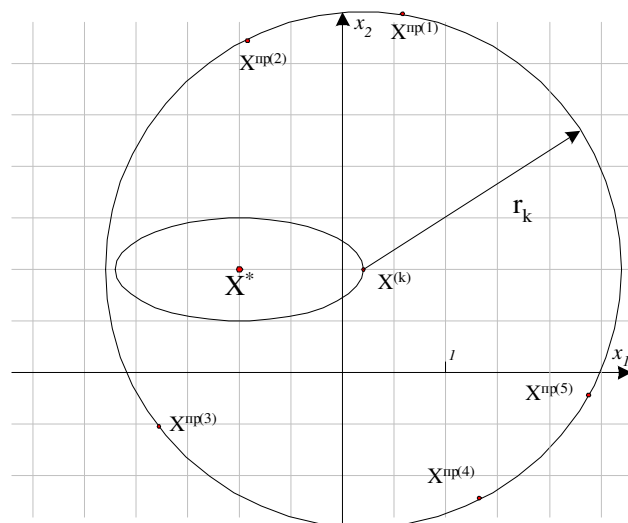


Удачная система пробных точек

- если условие не выполняется, делается попытка построить новую удачную систему пробных точек. если при этом число неудачных попыток достигает некоторого заданного числа P , текущий радиус r_k уменьшается (автоматически или пользователем).



Неудачная система пробных точек
(возможна повторная попытка)



Неудачная система пробных точек
(необходимо уменьшить радиус)

5) Процедура 2)–4) повторяется до выполнения критерия окончания счета.

Основной критерий окончания метода: $r^k < \varepsilon$

Дополнительные критерии окончания метода:

- при выполнении предельного числа итераций: $k = M$;
- при однократном или двукратном одновременном выполнении двух условий:
 $\|X^{k+1} - X^k\| < \tilde{\varepsilon}$, $|f(X^{k+1}) - f(X^k)| < \tilde{\varepsilon}$, где $\tilde{\varepsilon}$ – малое положительное число.

(10) Метод конфигураций (Хука–Дживса)

Метод представляет собой комбинацию *исследующего (исследовательского) поиска* с циклическим изменением переменных и *ускоряющего поиска по образцу*.

Процесс поиска минимума функции всегда начинается с исследующего поиска.

Исследующий поиск осуществляется вдоль координатных направлений, результатом его являются так называемые точки базиса, в которых вычисляется значение функции $f(X)$.

Поиск по образцу осуществляется в направлении, соединяющем две последующие точки базиса. В точках полученных «по образцу» значение функции не вычисляется, они служат лишь для проведения в них исследующего поиска.

Алгоритм метода:

1) Задается начальная точка X^0 и начальные значения приращений $dx_1^0, dx_2^0, \dots, dx_n^0$. Точка X^0 называется точкой старого базиса.

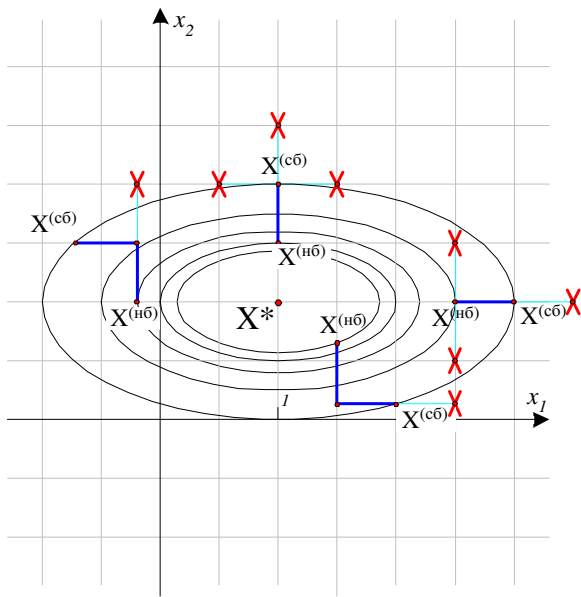
2) Проводится исследующий поиск, в результате которого каждая координата новой точки X^{k+1} вычисляется по алгоритму:

$$x_i^{k+1} = \begin{cases} x_i^k + dx_i^k, & \text{если } f(x_1^k, x_2^k, \dots, x_i^k + dx_i^k, \dots, x_n^k) < f(x_1^k, x_2^k, \dots, x_i^k, \dots, x_n^k) \\ x_i^k - dx_i^k, & \text{если } f(x_1^k, x_2^k, \dots, x_i^k - dx_i^k, \dots, x_n^k) < \min(f(x_1^k, x_2^k, \dots, x_i^k, \dots, x_n^k), f(x_1^k, x_2^k, \dots, x_i^k + dx_i^k, \dots, x_n^k)) \\ x_i^k, & \text{в противном случае} \end{cases} \quad \text{В}$$

результате исследующего поиска получается точка X^{k+1} .

Если при этом $X^{k+1} \neq X^k$, то X^{k+1} – точка нового базиса.

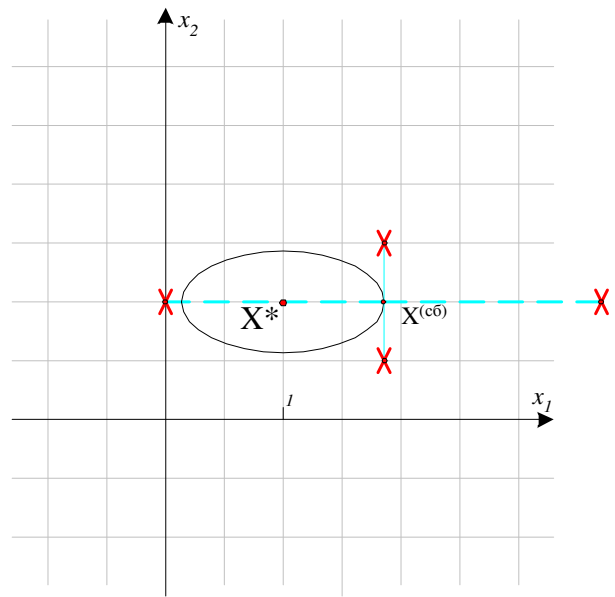
Если $X^{k+1} = X^k$, то исследующий поиск неудачен. В этом случае необходимо уменьшить значения приращений $dx_1^k, dx_2^k, \dots, dx_n^k$ и повторить исследующий поиск.



Удачный исследующий поиск

$X^{сб}$ – точка старого базиса

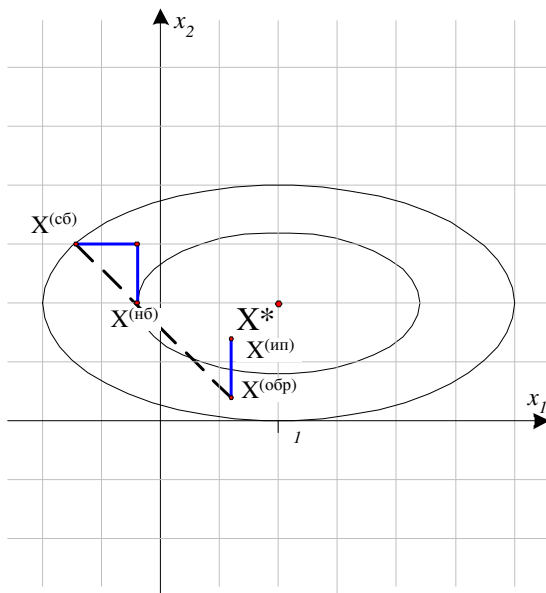
$X^{нб}$ – точка нового базиса



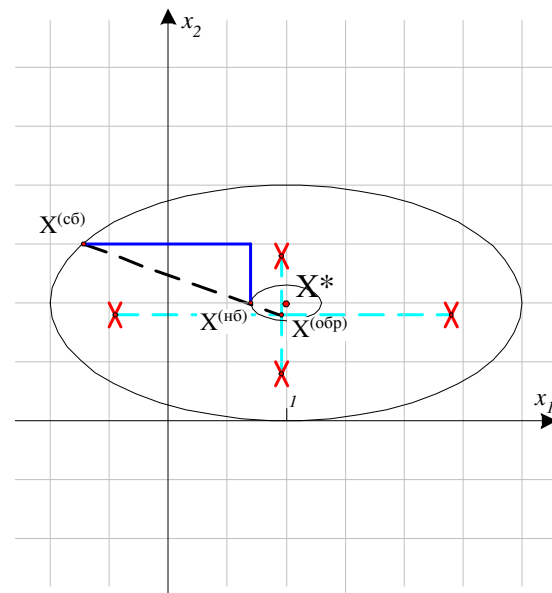
Неудачный исследующий поиск

3) Из точки нового базиса может быть:

- продолжен исследующий поиск со старыми или новыми значениями приращений (шаг 2) алгоритма)
- проведен поиск по образцу по алгоритму: $X^{обр} = X^k + t_k(X^k - X^{k-1})$



Удачный поиск по образцу



Неудачный поиск по образцу

В точке $X^{обр}$ значение функции не вычисляется, из этой точки проводится исследующий поиск, в результате которого получается точка $X^{ип}$.

Если $X^{\text{ип}} \neq X^{\text{обр}}$, то точка $X^{k+1} = X^{\text{ип}}$ становится точкой нового базиса, а X^k – точкой старого базиса.

Если $X^{\text{ип}} = X^{\text{обр}}$, то поиск по образцу считается неудачным, точки $X^{\text{ип}}, X^{\text{обр}}$ – аннулируются, при этом точка X^k остается точкой нового базиса, а X^{k-1} – точкой старого базиса.

4) Процедура 3) повторяется до выполнения критерия окончания счета.

Основной критерий окончания метода: $dx_i^k < \varepsilon, \quad i = 1..n$

Дополнительные критерии окончания метода:

- при выполнении предельного числа итераций: $k = M$;
- при однократном или двукратном одновременном выполнении двух условий:
 $\|X^{k+1} - X^k\| < \tilde{\varepsilon}, \quad |f(X^{k+1}) - f(X^k)| < \tilde{\varepsilon}$, где $\tilde{\varepsilon}$ – малое положительное число.