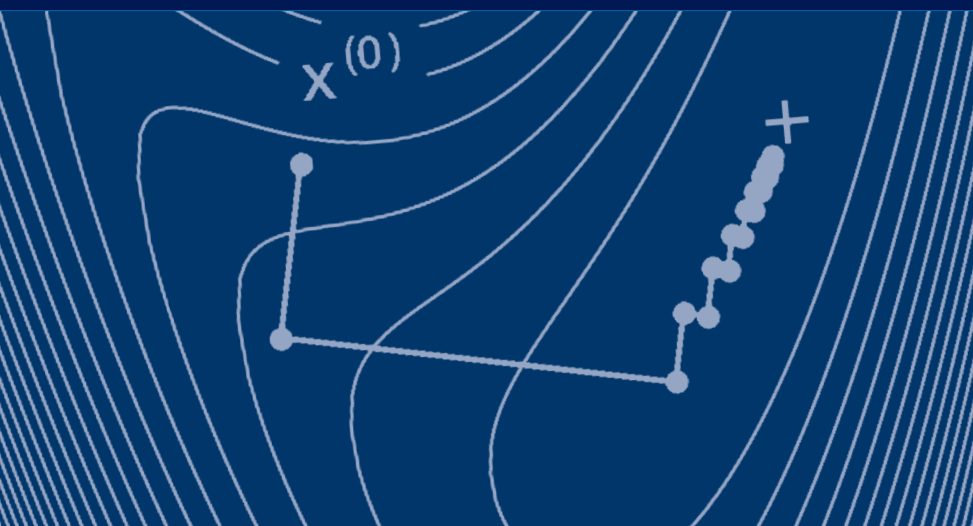


Jan Kusiak
Anna Danielewska-Tuńska
Piotr Oprocha

OPTYMALIZACJA

Wybrane metody
z przykładami zastosowań



OPTYMALIZACJA

naszym Dzieciom

Agnieszce

Tytusowi

Maciusiowi i Michałkowi

i ...

oraz Wnukom

Juleczkowi

i ...

Jan Kusiak
Anna Danielewska-Tutecka
Piotr Oprocha

OPTYMALIZACJA

Wybrane metody
z przykładami zastosowań

Redakcja naukowa
Jan Kusiak



Wydawnictwo Naukowe **PWN**

Warszawa 2009

Projekt okładki i stron tytułowych **Joanna Sobieraj**

Redaktor inicjujący **Agnieszka Grabarczyk**

Redaktor **Anna Głazewska-Czuryło**

Publikacja powstała z udziałem finansowym Akademii Górniczo-Hutniczej
im. St. Staszica w Krakowie

Copyright © by Wydawnictwo Naukowe PWN SA
Warszawa 2009

ISBN 978-83-01-15961-0

Wydawnictwo Naukowe PWN SA
02-676 Warszawa, ul. Postępu 18
tel. 022 69 54 321; faks 022 69 54 031
e-mail: pwn@pwn.com.pl; www.pwn.pl

Spis treści

Przedmowa	IX
Stosowana notacja oraz najważniejsze oznaczenia	XI
1. Wprowadzenie	1
2. Podstawy optymalizacji	4
2.1. Analityczne metody wyznaczania ekstremów	4
2.2. Ekstrema globalne	10
2.3. Podstawowe pojęcia optymalizacji	15
2.3.1. Zbiór rozwiązań dopuszczalnych	15
2.3.2. Funkcja celu	16
2.3.3. Rozwiązanie optymalne	17
2.4. Ogólna strategia szukania rozwiązań optymalnych	18
2.5. Warunki stopu	19
2.6. Klasyfikacja metod optymalizacji	20
3. Metody bezgradientowe (bezpośredniego szukania)	22
3.1. Wstępne oszacowanie przedziału poszukiwań	22
3.1.1. Metoda ekspansji	23
3.1.2. Zmodyfikowana metoda ekspansji Boxa–Davies–Swanna (BDS)	27
3.2. Poszukiwanie minimum w przedziale	31
3.2.1. Metoda złotego podziału	33
3.2.2. Metoda Fibonacciego	37
3.2.3. Metoda oparta na interpolacji Lagrange’a	44
3.3. Metody optymalizacji wielowymiarowej	49
3.3.1. Metoda Hooke’a–Jeevesa	49
3.3.2. Metoda Rosenbrocka	57
3.3.3. Metoda sympleks Nelder–Meada	66
3.3.4. Metoda Powella	77
4. Metody gradientowe	84
4.1. Wspólne cechy metod gradientowych	85
4.2. Metoda największego spadku	88
4.3. Metoda gradientów sprzężonych	96

4.3.1. Schemat metody Fletchera–Reevesa	96
4.3.2. Teoretyczne podstawy metody gradientów sprzężonych	101
4.4. Metoda Newtona	106
4.5. Metody quasi-newtonowskie	110
4.5.1. Metoda Davidona–Fletchera–Powella (DFP)	111
4.5.2. Metoda Broydena–Fletchera–Goldfarba–Shanno (BFGS)	114
5. Optymalizacja z ograniczeniami	118
5.1. Metoda Lagrange’a	121
5.2. Metody funkcji kary	125
5.2.1. Metoda funkcji kary zewnętrznej	125
5.2.2. Metoda funkcji kary wewnętrznej (metoda barier)	130
5.2.3. Metoda Schmita–Foxa	136
6. Programowanie liniowe	140
6.1. Metoda graficzna	141
6.2. Wprowadzenie do metody sympleks	145
6.2.1. Postać standardowa	145
6.2.2. Rozwiązanie optymalne i jego położenie	148
6.3. Najprostszy przypadek metody sympleks	149
6.3.1. Konstrukcja tabeli w metodzie sympleks	152
6.3.2. Dwufazowa metoda sympleks	163
6.3.3. Problem dualny	166
7. Optymalizacja wielokryterialna	170
7.1. Podejście Pareto	173
7.2. Przykładowa metoda redukcji problemów wielokryterialnych	177
8. Metody niedeterministyczne	180
8.1. Metoda Monte Carlo	182
8.2. Algorytmy genetyczne	190
8.3. Algorytmy ewolucyjne	206
8.3.1. Strategia ewolucyjna $(1 + 1)$	207
8.3.2. Strategia ewolucyjna $(\mu + \lambda)$	212
9. Wybrane strategie optymalizacji złożonych procesów przemysłowych	217
9.1. Optymalizacja oparta na metamodelu procesu	218
9.2. Optymalizacja aproksymacyjna	222
10. Przykłady zastosowań optymalizacji w inżynierii metali	227
10.1. Optymalizacja kształtu narzędzi w procesach plastycznej przeróbki metali	228
10.1.1. Optymalizacja procesów wyciskania	230
10.1.2. Optymalizacja procesu ciągnięcia prętów okrągłych	236
10.1.3. Optymalizacja procesu kucia osiowosymetrycznego	238
10.2. Analiza odwrotna (<i>inverse</i>)	242
10.2.1. Interpretacja krzywych umocnienia metali	244
10.2.2. Zastosowanie metamodelu w metodzie analizy odwrotnej	247
10.3. Optymalizacja procesu wytopu miedzi	250

I I. Wybrane zagadnienia i algorytmy	253
11.1. Podstawowe pojęcia z zakresu algebry liniowej	253
11.1.1. Przestrzeń wektorowa	253
11.1.2. Liniowa zależność wektorów	255
11.1.3. Macierze	257
11.1.4. Iloczyn skalarny i ortogonalność	261
11.1.5. Norma wektora	263
11.1.6. Ortogonalizacja Gramma–Schmidta	264
11.1.7. Kierunki sprzężone	266
11.2. Rozwiązywanie układów równań liniowych	266
11.2.1. Rząd macierzy a rozwiązywanie układów równań	267
11.2.2. Postać schodkowa macierzy	269
11.2.3. Eliminacja Gaussa	270
11.2.4. Kolumny bazowe i rozwiązywanie równań	271
11.3. Inne zagadnienia związane z macierzami	274
11.3.1. Odwracanie macierzy metodą Gaussa–Jordana	274
11.3.2. Obliczanie wyznaczników macierzy	275
11.3.3. Weryfikacja określoności macierzy	276
11.3.4. Określoność macierzy a wyznaczniki	278
11.4. Aproksymacja i interpolacja funkcji	280
11.4.1. Aproksymacja funkcji	280
11.4.2. Interpolacja	285
11.5. Sztuczne sieci neuronowe	293
Bibliografia	298
Indeks	302

Przedmowa

Z problemami optymalizacji spotykamy się praktycznie we wszystkich obszarach nauki, przemysłu, ekonomii, zarządzania itp. Do ich analizy niezbędna jest znajomość metod pozwalających na znalezienie optymalnych rozwiązań. Istnieje wiele metod optymalizacji, które z pomocą coraz wydajniejszych komputerów pozwalają na rozwiązywanie złożonych zadań optymalizacji. Ciągły rozwój metod optymalizacji podyktowany jest faktem, że nie istnieją optymalne (uniwersalne) algorytmy w tym zakresie. Każda z metod optymalizacji może bowiem okazać się zawodna lub mało efektywna podczas poszukiwania minimum (maksimum) analizowanej funkcji. Dlatego też, z uwagi na trudności w procesie poszukiwania rozwiązań optymalnych analizowanego zagadnienia (trudności w uzyskaniu zbieżności lub wysokie nakłady czasów obliczeń), niezbędna jest znajomość więcej niż jednej metody optymalizacji. Metody te różnią się mogą efektywnością oraz czasami obliczeń, w zależności od optymalizowanej funkcji.

Głównym celem niniejszej książki jest przybliżenie, w sposób jak najprostszy, najczęściej stosowanych w praktyce metod optymalizacji, które mogą być wykorzystane do rozwiązywania różnorodnych zagadnień związanych z optymalizacją. Inspiracją do jej napisania były prowadzone od wielu lat przez Jana Kusiaka wykłady z „Metod optymalizacji” dla studentów Wydziału Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie.

Założeniem autorów było przedstawienie metod optymalizacji w sposób jak najbardziej przystępny, przy ograniczeniu do minimum teorii matematycznej. Poszczególne metody omówiono z zachowaniem następującego schematu:

- opis idei metody,
- opis algorytmu metody wzbogacony, w większości przypadków, zapisem algorytmu w pseudokodzie oraz rysunkiem schematu blokowego,
- przykład zastosowania omawianej metody do rozwiązania prostych zadań optymalizacji.

We wstępnej części książki zamieszczono opis wybranych metod deterministycznych (bezgradientowych i gradientowych) optymalizacji zagadnień nieliniowych, omówiono zagadnienia i metody optymalizacji liniowej, wielokryterialnej, opisano metody niedeterministyczne.

W dalszej części książki podano przykłady rozwiązywania zagadnień optymalizacji rzeczywistych procesów z zakresu inżynierii metali z wykorzystaniem omówionych wcześniej metod. Omówiono zasady metamodelowania oraz strategii optymalizacji aproksymacyjnej, przydatnych w rozwiązywaniu zadań optymalizacji rzeczywistych procesów, które wymagają czasochłonnych obliczeń numerycznych związanych ze stosowaniem złożonych modeli symulacyjnych. Przedstawiono możliwości wykorzystania technik optymalizacyjnych do zagadnień optymalizacji procesów plastycznej przeróbki metali.

Ostatnia część książki nie dotyczy bezpośrednio zagadnień optymalizacji. Zawiera natomiast przypomnienie podstawowych pojęć z zakresu algebry i analizy matematycznej, które mogą być pomocne w zrozumieniu poszczególnych metod optymalizacji.

Opisane w książce algorytmy zostały zaimplementowane i przetestowane przy użyciu pakietów Mathematica i Matlab. Mamy nadzieję, że będą one przydatne dla wszystkich zainteresowanych problematyką optymalizacji. I choć obecnie można łatwo znaleźć wiele gotowych programów komputerowych rozwiązujących zadania optymalizacji i niewielu Czytelników będzie starało się pisać własne procedury, wykorzystujące zaprezentowane w książce algorytmy, to jednak być może będą one pomocne w zrozumieniu, a w konsekwencji we właściwym stosowaniu odpowiednich metod w rozwiązywaniu zadań optymalizacji.

Chcielibyśmy, by ta książka zainspirowała Czytelników do wykorzystywania omówionych metod optymalizacji w rozwiązywaniu praktycznych problemów napotykaných w ich codziennej pracy zawodowej.

Za pomoc w graficznym opracowaniu części rysunków przygotowanych w programie Matlab dziękujemy Michałowi Oczko, Andrzejowi Stanisławczykowi, a w szczególności Łukaszowi Sztangretowi, który również był pierwszym, wnikliwym Czytelnikiem maszynopisu i którego uwagi bardzo pomogły nam przy korekcie książki.

Przede wszystkim zaś dziękujemy naszym Współmałżonkom za cierpliwość i wyrozumiałość w czasie powstawania tej książki.

Stosowana notacja oraz najważniejsze oznaczenia

$\mathbb{N}, \mathbb{Z}, \mathbb{Q}, \mathbb{R}$	zbiory liczb: naturalnych, całkowitych, wymiernych i rzeczywistych
\mathbb{R}^n	n -krotny iloczyn kartezjański $\mathbb{R} \times \dots \times \mathbb{R}$, tzn. zbiór punktów o n współrzędnych rzeczywistych
A, X	macierze, zbiory
∂X	brzeg zbioru
a, s, t, x	liczby lub elementy zbiorów w zależności od kontekstu
$\{a, b, c\}$	zbiór o elementach a, b, c
\mathbf{x}	punkt (x_1, \dots, x_n) lub wektor $\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$ w \mathbb{R}^n , gdzie $n = 2, 3, \dots$
$\mathbf{e}^1, \mathbf{e}^2, \dots$	wersory
A_{*i}, A_{j*}	odpowiednio i -ta kolumna i j -ty wiersz macierzy A
x_j	j -ta współrzędna wektora \mathbf{x} lub element ciągu liczbowego
$\mathbf{x}^j, \mathbf{x}_j$	j -ty element ciągu wektorów (skończonego lub nieskończonego)
$\mathbf{x}^{(i)}$	punkt w i -tej iteracji
$\mathbf{x}_j^{(i)}$	j -ty element ciągu wektorów otrzymanego w i -tej iteracji
$x_j^{(i)}$	j -ta współrzędna wektora otrzymanego w i -tej iteracji
$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$	iloczyn skalarny wektorów \mathbf{x} i \mathbf{y}
$\ \mathbf{x}\ $	norma wektora \mathbf{x}
$\ \mathbf{x}\ _2$	norma euklidesowa wektora \mathbf{x}
A^T, A^{-1}	macierz transponowana, macierz odwrotna
$f : X \rightarrow Y$	funkcja o argumentach w zbiorze X i wartościach w zbiorze Y
f'	pochodna funkcji f
$\frac{\partial f}{\partial x_i}$	pochodna cząstkowa funkcji $f(x_1, \dots, x_n)$ względem i -tej zmiennej
$\min(x, y)$	mniejsza z liczb x, y
$\max(x, y)$	większa z liczb x, y
\mathbf{x}^{\min}	rzeczywiste rozwiązanie optymalne (minimalne)
\mathbf{x}^*	obliczone algorytmem, przybliżone rozwiązanie optymalne
N_{\max}	maksymalna dopuszczalna liczba iteracji w algorytmie
$(a, b), [a, b]$	odpowiednio, przedział otwarty i domknięty
$\mathbf{0}$	wektor zerowy

1

Wprowadzenie

W wielkim skrócie możemy powiedzieć, że *optymalizacja* to dziedzina matematyki, która umożliwia znalezienie najlepszego rozwiązania, tzn. rozwiązania dającego najmniejszą lub największą (minimum lub maksimum) wartość pewnego wyrażenia nazywanego funkcją celu (także kryterium jakości, kryterium optymalizacji, funkcjonalem jakości).

Początków teorii optymalizacji można się doszukiwać już w czasach starożytnych, kiedy to Euklides (III wiek p.n.e.) zajmował się poszukiwaniem najkrótszej drogi łączącej dwa punkty. Pierwszą technikę optymalizacyjną wiąże się z Gaussem (przełom XVIII i XIX w.), który opracował tzw. metodę największego spadku. Natomiast za „ojca” terminu optymalizacja uważa się amerykańskiego matematyka George B. Dantziga (1914–2005), który zajmował się programowaniem liniowym i jest twórcą metody sympleks.

Rozkwit teorii optymalizacji obserwuje się od początku drugiej połowy XX w., kiedy nastąpił intensywny rozwój metod numerycznych, związany z dynamicznym rozwojem technik komputerowych.

Ogólnie, celem optymalizacji jest wybór najlepszego (minimalnego lub maksymalnego) rozwiązania danego problemu, które spełnia wszystkie ograniczenia i uwarunkowania. W życiu codziennym rozwiązania optymalne zadań praktycznych są wynikiem zdobytego doświadczenia, wiedzy praktycznej i często dochodzi się do nich metodą prób i błędów. Jest to zazwyczaj proces długotrwały i często bardzo kosztowny. Znalezienie w sposób bardziej efektywny tego „optimum” umożliwiają metody optymalizacji, które w sposób algorytmiczny, na drodze analitycznej lub numerycznej, pozwalają na poszukiwanie rozwiązań optymalnych bez konieczności analizowania wszystkich możliwych wariantów.

Z teoretycznego punktu widzenia, zagadnienie poszukiwania rozwiązań optymalnych stanowi odrębną teorię, którą zaliczyć można do dziedziny matematyki stosowanej. Jej zadaniem jest odpowiednie sformułowanie, w sposób matematyczny, analizowanego problemu optymalizacji, zbioru poszukiwań oraz funkcji celu optymalizacji (kryterium

jakości). Dla tak sformułowanego problemu optymalizacji, zadaniem jest znalezienie optymalnego rozwiązania, które spełnia przyjęte kryterium optymalizacji. Ogólnie, poszukiwanie rozwiązań optymalnych związane jest z następującymi zadaniami:

- doborom (opracowaniem) modelu matematycznego analizowanego procesu,
- zdefiniowaniem funkcji celu optymalizacji (funkcjonału jakości, kryterium optymalizacji, kryterium jakości itp.),
- poszukiwaniem optymalnego rozwiązania z zastosowaniem jednej z metod optymalizacji.

O ile pierwsze z wymienionych zadań jest głównie przedmiotem identyfikacji i modelowania procesów, o tyle pozostałe dwa zadania są nierozdzielnie związane z optymalizacją¹.

Założmy, że dane są:

- funkcja celu $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$,
- zbiór $X_d \subset \mathbb{R}^n$.

Zadaniem optymalizacji, nazywanej też programowaniem matematycznym, jest poszukiwanie takiego elementu $\mathbf{x}^{\text{opt}} \in X_d$, że

$$f(\mathbf{x}^{\text{opt}}) \leq f(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in X_d \quad (\text{poszukiwanie minimum, } \mathbf{x}^{\text{min}} = \mathbf{x}^{\text{opt}})$$

lub

$$f(\mathbf{x}^{\text{opt}}) \geq f(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in X_d \quad (\text{poszukiwanie maksimum, } \mathbf{x}^{\text{max}} = \mathbf{x}^{\text{opt}}).$$

Stosowane algorytmy optymalizacyjne wyznaczają pewne rozwiązanie \mathbf{x}^* . Znalezione rozwiązanie \mathbf{x}^* stanowić ma przybliżenie minimum (maksimum) globalnego optymalizowanej funkcji celu (tzn. wartość $f(\mathbf{x}^*)$ powinna być dobrym przybliżeniem liczby $f(\mathbf{x}^{\text{opt}})$). Należy zaznaczyć, że znalezione minimum (maksimum) jest globalne jedynie wewnątrz zdefiniowanego obszaru poszukiwań zmiennych optymalizacji, w którym znajdują się dopuszczalne rozwiązania X_d (zob. punkt 2.3.1), a niekoniecznie w całej dziedzinie funkcji celu.

Często, w analizowanym obszarze poszukiwań, oprócz minimum (maksimum) globalnego występują minima (maksima) lokalne, w których wartość optymalizowanej funkcji przybiera odpowiednio większą (mniejszą) wartość niż dla rozwiązania globalnego. Minima (maksima) lokalne nastroczają wiele problemów podczas poszukiwania tego jednego, właściwego minimum (maksimum) globalnego. Spowodowane jest to tym, że metody optymalizacji „grzęzną” w minimum (maksimum) lokalnym i nie docierają do rozwiązania globalnego. Obrazowo można to przedstawić za pomocą kuli golfowej która, tocząc się po nierównej powierzchni pola golfowego, może zatrzymać się w jednym z *lokalnych* dołków na drodze do tego jedyne, *globalnego*. Dlatego też, jednym z kryteriów oceny jakości metod optymalizacji jest ich zdolność do docierania do tego globalnego minimum, bez względu na napotykaną przeciwności (minima lokalne).

¹ Szczegóły matematyczne zagadnienia optymalizacji omówiono w podrozdziale 2.3.