

МИНИМИЗАЦИЯ С ОГРАНИЧЕНИЯМИ В ВИДЕ РАВЕНСТВ С ПОМОЩЬЮ УРАВНЕНИЙ КОНВЕКТИВНОЙ ДИФFUЗИИ

© 2014

В.В. Федоров, начальник сектора конструкторского бюро
ОАО «ТОЛЬЯТТИАЗОТ», Тольятти (Россия)

Ключевые слова: условная минимизация; многомерная нелинейная оптимизация; конвективно-диффузионный метод.

Аннотация: Приводится новый подход к решению задач условной минимизации нелинейных многомерных функционалов с нелинейными ограничениями в виде равенств. Многомерная условная минимизация сводится к условной минимизации в одномерной области в результате численного решения нестационарной краевой задачи с неоднородными уравнениями конвективной диффузии.

ВВЕДЕНИЕ

В данной статье приводится новый подход к решению задач условной минимизации нелинейных многомерных функционалов с нелинейными ограничениями в виде равенств:

$$f(\mathbf{c}) \rightarrow \min \quad (1)$$

при условиях $g_i(\mathbf{c}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m,$

где $f(\mathbf{c})$ и $g_i(\mathbf{c})$ – непрерывно-дифференцируемые функции, $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_n) \in R^n$.

Как известно, для условной минимизации широко применяются методы со штрафными функциями или множителями Лагранжа [1]. Минимизация с ограничивающими равенствами непосредственно методом Лагранжа основана на решении системы уравнений относительно векторов \mathbf{c} и $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T \in R^m$:

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{c}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(\mathbf{c}) &= 0 \\ g_i(\mathbf{c}) &= 0, \quad i = 1, 2, \dots, m. \end{aligned}$$

В результате задачу (1) можно свести к задаче безусловной минимизации функционала:

$$F(\mathbf{c}, \boldsymbol{\lambda}) = \sum_{j=1}^n \left[\frac{\partial f(\mathbf{c})}{\partial c_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial g_i(\mathbf{c})}{\partial c_j} \right]^2 + \sum_{i=1}^m g_i^2(\mathbf{c}). \quad (2)$$

В инженерной практике функции $f(\mathbf{c})$ и $g_i(\mathbf{c})$, входящие в выражение (2), как правило, представляют собой многомерные нелинейные функционалы, а многомерный нелинейный функционал $F(\mathbf{c}, \boldsymbol{\lambda})$ может иметь несколько экстремумов.

В монографии [2] рассмотрены методы, основанные на последовательном решении вспомогательных задач безусловной минимизации модифицированных функций Лагранжа с уточняющимися значениями $\boldsymbol{\lambda}$ в процессе итераций. Эффективность таких методов зависит от удачного выбора начальных значений $\boldsymbol{\lambda}_0$.

Существует, как известно, более простой, широко применяемый на практике метод штрафа, основанный на минимизации функции со штрафным множителем:

$$f(\mathbf{c}) + \frac{1}{2} \sigma [g(\mathbf{c})]^2, \quad \sigma > 0.$$

Но «овражная» поверхность этой функции при больших значениях σ значительно усложняет процесс минимизации.

С развитием вычислительной техники появилась возможность глобальной безусловной минимизации сложных функций с помощью стохастических методов, например методом роя частиц [3]. Недостаток стохастических методов, основанных на концепции вероятности, в ряде работ, например в [4] предлагается компенсировать применением стохастического метода совместно с детерминированным методом.

Для непрерывно дифференцируемых функций представляется предпочтительным применение детерминированных методов, основанных на вычислении производных первого порядка. Ранее в работах [5], [6] для минимизации многоэкстремальных многомерных функционалов автором данной статьи предлагался метод, основанный на решении нестационарной краевой задачи с однородными уравнениями конвективной диффузии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_i}{\partial \tau} &= D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial l^2} + \frac{\partial F(\mathbf{c})}{\partial c_i} \frac{\partial c_i}{\partial l}, \\ i &= 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (3)$$

где D_i – коэффициенты диффузии.

В отличие от метода уравнений диффузии [7], основанного на концепции *диффузионного сглаживания поверхности* целевой функции с помощью уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi(\mathbf{c}, \tau)}{\partial \tau} &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{c}, \tau)}{\partial c_i^2}, \\ \Phi(\mathbf{c}, 0) &= F(\mathbf{c}) \end{aligned}$$

в методе с уравнениями конвективной диффузии заложены одновременно две концепции: *конвективно-диффузионное перемещение вдоль поверхности* целевой функции и *сведение многомерной минимизации к одномерной*.

Минимизацию функционала $F(\mathbf{c}, \boldsymbol{\lambda})$ можно также выполнить с помощью уравнений конвективной диффузии (3), но для вычисления производных целевого функционала требуется вычисление частных производных второго порядка функций $f(\mathbf{c})$ и $g_i(\mathbf{c})$, что может замедлить расчет при решении практических задач.

В данной статье для решения задачи условной минимизации вида (1) предлагается применение неодно-

родных дифференциальных уравнений конвективной диффузии, с помощью которых одновременно минимизируются целевая функция $f(\mathbf{c})$ и модули функций ограничений $g_i(\mathbf{c})$.

ОПИСАНИЕ МЕТОДА

В предлагаемом методе задача многомерной условной минимизации (1) сводится к задаче условной минимизации в одномерной области. Одномерная область получается в результате решения нестационарной краевой задачи с неоднородными уравнениями конвективной диффузии.

Идея заключается в следующем. Задачу (1) можно записать в виде системы двух задач минимизации:

$$\sigma |g_i(\mathbf{c})| \rightarrow \min, \quad i = 1, 2, \dots, m, \\ f(\mathbf{c}) \rightarrow \min$$

где σ – параметр, выполняющий роль штрафного множителя.

Решение первой задачи градиентным методом можно интерпретировать как решение задачи Коши:

$$\frac{\partial c_i}{\partial \tau} = -\sigma \cdot \sum_{j=1}^m \text{sign}(g_j) \frac{\partial g_j(\mathbf{c})}{\partial c_i}, \quad c_i(0) = c_i^0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (4)$$

С другой стороны, как показано в [5], [6], задачу минимизации функции $f(\mathbf{c})$ можно решить с помощью нестационарной краевой задачи с уравнениями конвективной диффузии:

$$\frac{\partial c_i}{\partial \tau} = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial l^2} + \frac{\partial f(\mathbf{c})}{\partial c_i} \frac{\partial c_i}{\partial l}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (5)$$

В результате сложения уравнений (4) и (5) получается дифференциальное уравнение для функций $f(\mathbf{c})$ и $g_i(\mathbf{c})$:

$$2 \frac{\partial c_i}{\partial \tau} = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial l^2} + \frac{\partial f}{\partial c_i} \frac{\partial c_i}{\partial l} - \sigma \cdot \sum_{j=1}^m \text{sign}(g_j) \frac{\partial g_j}{\partial c_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Для численного расчета полученное уравнение переписано в виде

$$\frac{\partial c_i}{\partial \tau} = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial l^2} - v_i(\mathbf{c}) \frac{\partial c_i}{\partial l} - \sigma \cdot \varphi_i(\mathbf{c}), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (6)$$

с начальными условиями:

$$\text{при } \tau = 0 \quad c_i = \begin{cases} c_{i0} + \Delta c_i, & \text{для } -1 \leq l \leq 0 \\ c_{i0} - \Delta c_i, & \text{для } 0 < l \leq 1 \end{cases} \quad (7)$$

и граничными условиями:

$$c_i = c_{i0} + \Delta c_i \text{ при } l = -1; \\ c_i = c_{i0} - \Delta c_i \text{ при } l = 1 \quad (8)$$

где $c_{i0}, \Delta c_i$ – величины для определения области поиска минимума,

$$v_i(\mathbf{c}) = - \frac{\partial f(\mathbf{c}) / \partial c_i}{\sqrt{\sum_{j=1}^n (\partial f(\mathbf{c}) / \partial c_j)^2}},$$

$$\varphi_i(\mathbf{c}) = \sum_{j=1}^m \frac{\text{sign}(g_j) \partial g_j(\mathbf{c}) / \partial c_i}{\sqrt{\sum_{k=1}^n (\partial g_j(\mathbf{c}) / \partial c_k)^2}},$$

$$\text{(или } \varphi_i(\mathbf{c}) = \frac{\text{sign}(g_r) \partial g_r(\mathbf{c}) / \partial c_i}{\sqrt{\sum_{k=1}^n (\partial g_r(\mathbf{c}) / \partial c_k)^2}},$$

r – индекс максимального значения в векторе $(|g_1(\mathbf{c})|, |g_2(\mathbf{c})|, \dots, |g_m(\mathbf{c})|)^T$).

Таким образом, для решения задачи условной минимизации вида (1) решается нестационарная краевая задача с уравнениями конвективной диффузии (6) и условиями (7), (8). В результате численного интегрирования уравнений до наступления стационарного режима получается одномерная область со значениями переменных c_i , функций $f(\mathbf{c})$ и $g_i(\mathbf{c})$ на отрезке $[-1, 1]$. Искомые значения переменных определяются в точке с минимальным значением $f(\mathbf{c})$ в области малых значений $|g_i(\mathbf{c})|$.

Физическая интерпретация метода.

Метод основан на физическом явлении конвективно-диффузионного перемещения частиц многокомпонентного потока в канале с малыми значениями функций ограничений со скоростями прямо пропорциональными координатам градиента целевой функции с противоположным знаком.

Метод решения краевой задачи с уравнениями конвективной диффузии.

Интегрирование уравнений (6) выполняется методом конечных разностей с разностной схемой:

$$\frac{c_{i,l}^k - c_{i,l}^{k-1}}{\tau} = D \frac{c_{i,l+1}^k - 2c_{i,l}^k + c_{i,l-1}^k}{h^2} - v_{i,l} \frac{c_{i,l+1}^k - c_{i,l-1}^k}{2h} - \sigma \varphi_{i,l}, \quad (9)$$

$i = 1, 2, \dots, n; l = 1, 2, \dots, N; k = 1, 2, \dots; h = \frac{1}{N-1}$; N – количество точек.

Система алгебраических уравнений (9) решается методом прогонки. На каждой итерации вычисляется максимальная разность

$$\varepsilon_k = \max_{i,l} |c_{i,l}^k - c_{i,l}^{k-1}|.$$

Если $\varepsilon_k > \varepsilon_{k-1}$, то шаг интегрирования по времени уменьшается в два раза. Критерием завершения расчетов является $\varepsilon_k < \varepsilon$, где ε – некоторое малое число.

ПРИМЕРЫ

Минимизация многоэкстремальной нелинейной функции.

Задача 1.

Минимизировать

$$f(c_1, c_2) = r + 0.1[(c_1 - r \cos r)^2 + (c_2 - r \sin r)^2]$$

при условии

$$g(c_1, c_2) = r(c_1, c_2) - \pi = 0,$$

$$r(c_1, c_2) = \sqrt{c_1^2 + c_2^2}.$$

Точное решение: $c_1 = -\pi; c_2 = 0; f(-\pi, 0) = \pi$.

Расчеты выполнены с коэффициентами: $D=0,1$ и $\sigma=50$. Результаты расчета приведены на рисунке 1. Минимальное значение функции $f(c_1, c_2)$ находится в точке 40, в которой $c_1 = -3,1416; c_2 = -0,0109; f(-3,1416, -0,0109) = 3,1416; g(-3,1416, -0,0109) = -4,6735 \cdot 10^{-5}$.

Минимизация с нелинейным ограничением.

Задача 2.

Минимизировать

$$f(c_1, c_2) = (c_1 + 1)^2 + (c_1 + 1)(c_2 - 1) + (c_1 - 2)^2$$

при условии

$$g(c_1, c_2) = c_1^3 - c_1^2 - c_2 = 0.$$

Точное решение: $c_1 = 0; c_2 = 0; f(0, 0) = 3$.

Расчеты выполнены с коэффициентами: $D=0,05$ и $\sigma=10$. Результаты расчета приведены на рисунке 2. Минимальное значение функции $f(c_1, c_2)$ находится в точке 19, в которой $c_1 = -0,0063; c_2 = -0,0000; f(-0,0063, -0,0000) = 3,0001; g(-0,0063, -0,0000) = -1,0278 \cdot 10^{-6}$.

Инженерная задача минимизации объема трубопровода.

Задача 3.

Требуется выбрать оптимальные диаметры трубопроводов для подачи жидкости насосом потребителям по схеме, изображенной на рисунке 3.

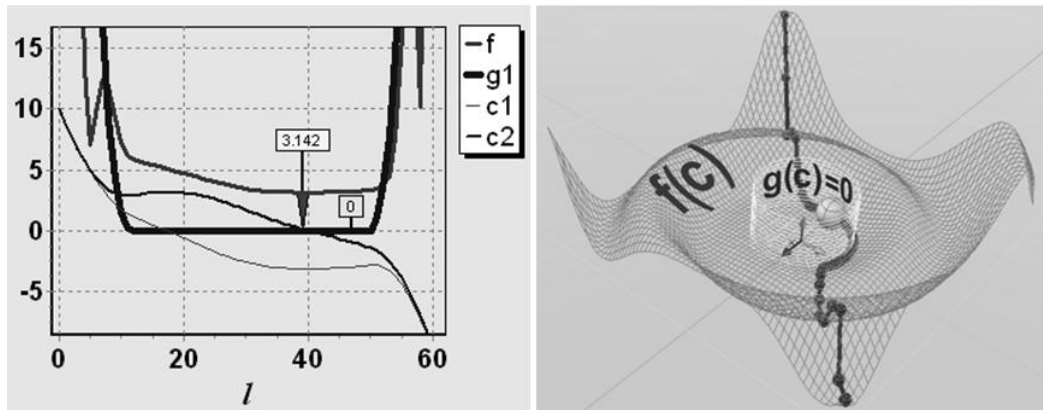


Рис. 1. Графическое изображение результатов для задачи 1

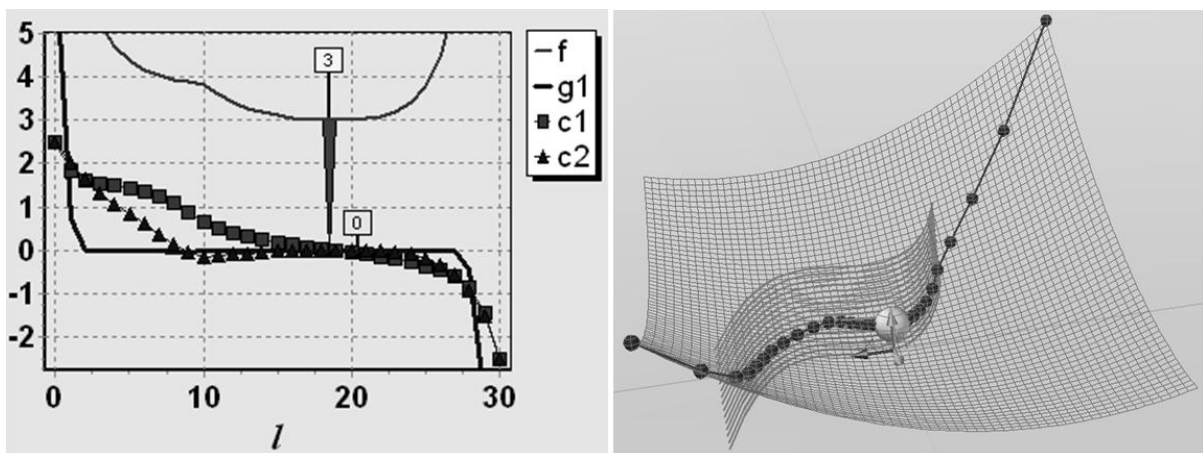


Рис. 2. Графическое изображение результатов для задачи 2

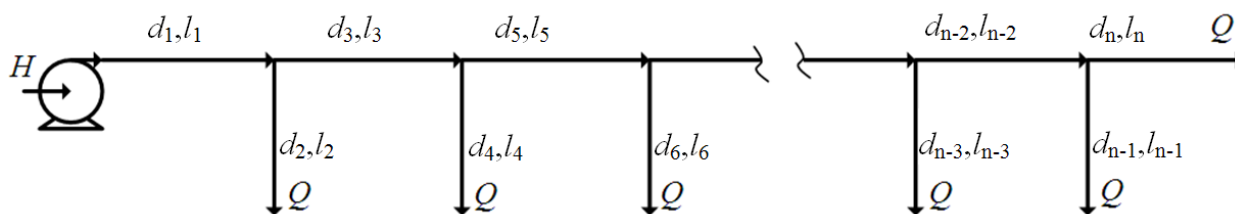


Рис. 3. Схема подачи жидкости
(H – напор насоса; d_i, l_i – диаметр и длина i -го участка, Q – объемный расход)

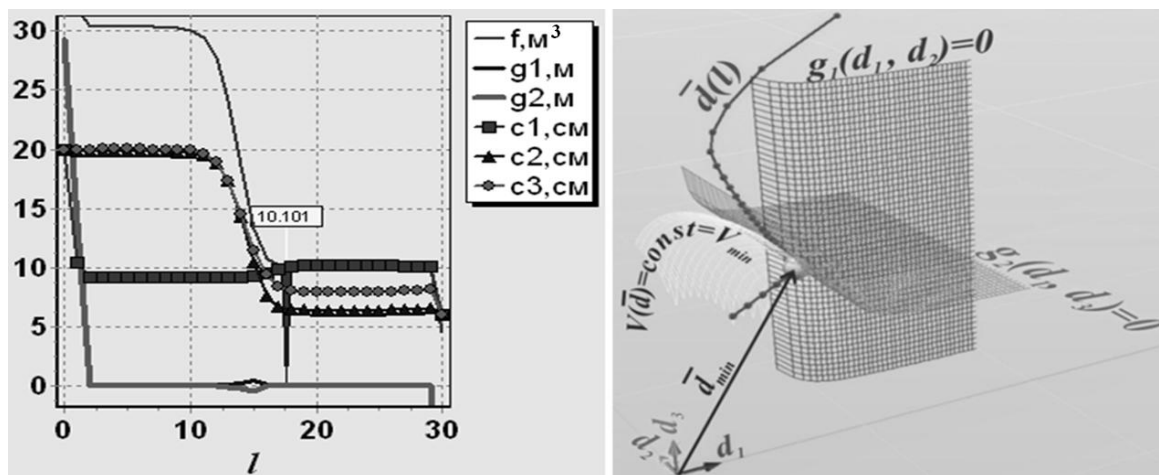


Рис. 4. Графическое изображение результатов для задачи 3

Пренебрегая разностью геометрических высот, запишем задачу условной минимизации объема трубопровода:

Минимизировать

$$V(d_1, d_2, \dots, d_n) = 0,25\pi \sum_{i=1}^n \pi d_i^2 l_i$$

при условиях (суммарные потери напора в параллельных контурах равны):

$$g_j(d_1, \dots, d_j) = H - \sum_{i=1}^j h_i(d_i) = 0, \quad j = 2, 4, \dots, n-1$$

$$g_n(d_1, d_3, \dots, d_n) = H - \sum_{i=1,3,\dots,n} h_i(d_i) = 0,$$

где $h_i(d_i)$ – потери напора (без учета местных сопротивлений) на i -м участке:

$$h_i(d_i) = \lambda_{wi} \frac{8Q_i^2 l_i}{g \pi^2 d_i^5},$$

где λ_{wi} – коэффициент трения, g – ускорение свободного падения.

Данная задача решалась предлагаемым методом с помощью уравнений конвективной диффузии (6) с начальными и граничными условиями:

$$\text{при } \tau = 0 \quad c_i = \begin{cases} 0,2\text{ м}, & \text{для } -1 \leq l \leq 0 \\ 0,06\text{ м}, & \text{для } 0 < l \leq 1 \end{cases};$$

$$c_i = \begin{cases} 0,2\text{ м}, & l = -1 \\ 0,06\text{ м}, & 0 < l = 1 \end{cases}; \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Интегрирование дифференциальных уравнений выполнялось с количеством точек на отрезке 30, с коэффициентами $D=0,1$ и $\sigma=10$ до наступления стационарного состояния с точностью $\varepsilon_k < 10^{-7}$.

При $n=3$ задача решалась со следующими параметрами: $H=30$ м; $l_1=800$ м; $l_2=200$ м; $l_3=600$ м; $Q=0,005$ м³/с; $\lambda_w=0,03$ (при $n>3$ учитывалась нелинейная зависимость λ_w от диаметра). Результаты расчета представлены на рисунке 4 в виде значений искомых переменных на отрезке и в виде точек на кривой в трехмерном пространстве переменных d_1, d_2, d_3 . Для наглядности изображена поверхность $V(\mathbf{d})=V_{\min}$, все точки на которой имеют значения d_1, d_2, d_3 , с которыми объем равен найденному минимальному значению.

Оценка сложности метода для задачи многомерной минимизации.

В работе [6] приведена оценка сложности метода безусловной минимизации с помощью уравнений кон-

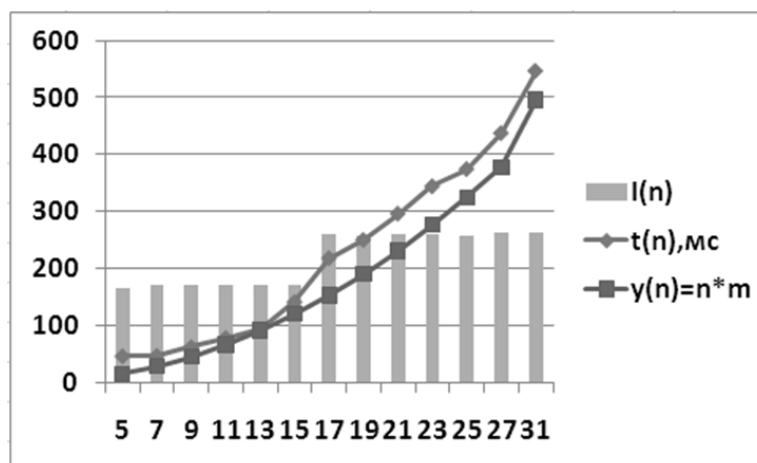


Рис. 5. Зависимость времени расчета t , и функции $y=n \cdot m$ от размерности минимизации n

вективной диффузии для многомерных функций Розенброка и сферических функций в виде:

$$t(n) = I(n) \cdot \varphi(n) \cdot n \cdot \tau,$$

где $I(n)$ – количество необходимых итераций, $\varphi(n)$ – сложность вычисления производной целевой функции, n – размерность минимизации, τ – время одной итерации для одного уравнения конвективной диффузии.

В результате численных экспериментов было установлено, что при $I=const$ и $\varphi=const$ сложность алгоритма имеет порядок $O(n)$.

Для случая условной минимизации сложность алгоритма запишется в виде:

$$t(n) = I(n) \cdot \varphi(n) \cdot n \cdot \tau \cdot \psi(n) \cdot m,$$

где $\psi(n)$ – сложность вычисления производной функции ограничений.

При $I=const$, $\varphi=const$ и $\psi=const$ сложность алгоритма должна иметь порядок $O(n \cdot m)$, что практически подтверждается в результате решения задачи 3 при различных значениях n (рисунок 5).

ВЫВОДЫ

Результаты расчетов в приведенных примерах наглядно подтверждают, что при решении краевой задачи с уравнениями конвективной диффузии (6) задача (1) преобразуется в задачу условной минимизации в одномерной области. Предлагаемый метод может быть полезен для решения нелинейных многомерных задач оптимизации с ограничениями в виде равенств.

MINIMIZATION WITH EQUALITY CONSTRAINTS BY CONVECTION-DIFFUSION EQUATIONS

© 2014

V.V. Fedorov, chief of sector of design office
TOGLIATTIAZOT, Togliatti (Russia)

Keywords: constrained minimization; multivariable nonlinear optimization; convection-diffusion method.

Annotation: A new approach to the solution of problem of constrained minimization of nonlinear multivariable functions with nonlinear equality constraints is given. The constrained multivariable optimization is reduced to the constrained optimization in one-dimensional area by numerical solution of non-stationary boundary problem with non-homogeneous convection-diffusion differential equations.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация: Пер. с англ. М.: Наука, 1984. 280 с.
2. Бертсекас Д. Условная оптимизация и методы множителей Лагранжа: Пер. с англ. М.: Радио и связь, 1987, 400 с.
3. Vaz A.I.F., Vicente L.N. A particle swarm pattern search method for bound constrained global optimization. *Journal of Global Optimization*, 2007, vol. 39, no. 1, pp. 197–219.
4. Сулимов В.Д., Шкапов П.М. Гибридные алгоритмы оптимизации гидромеханических систем с локальным поиском без использования производных. *Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн.* 2013. № 12. DOI: 10.7463/1213.0604100 <http://technomag.bmstu.ru/doc/604100.html>.
5. Федоров В.В. Метод конвективно-диффузионной глобальной минимизации для многопараметрической идентификации математических моделей // *Вектор науки ТГУ. Тольятти.* 2012. № 3 (21). С. 46–48.
6. Федоров В.В. Новый конвективно-диффузионный метод глобальной минимизации для решения обратных задач химической кинетики // *Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн.* 2013. № 4. DOI: 10.7463/0413.0569246 <http://technomag.edu.ru/rub/233644/index.html>.
7. Piela L., Kostrowicki J., Scheraga H.A. The multiple-minima problem in the conformational analysis of molecules. Deformation of the potential energy hypersurface by the diffusion equation method // *Journal of Physical Chemistry.* 1989. vol. 93. pp. 3339–3346.