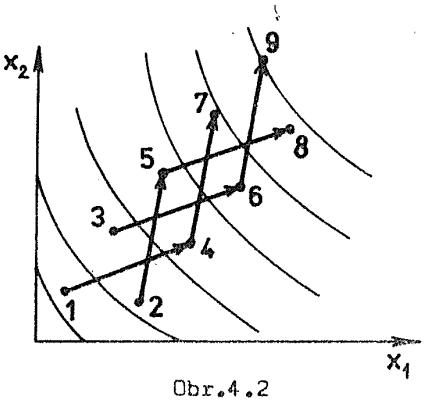
Simplexová metoda

Vybráno z Lederer, P., Brousil, J.: Teorie a optimalizace mechanických systémů II, ČVUT, Praha, 1989

Slovem simplex budeme označovat útvar v n-dimensionálním prostoru s (n + 1) vrcholy, u kterého vzdálenost libovolných dvou vrcholů - hrana simplexu - je stejná. V rovině je simplexem rovnostranný trojúhelník, v trojrozměrném prostoru čtyřstěn.



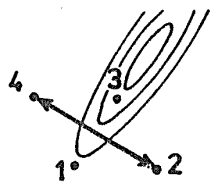
Obr.4.2

Algoritmus simplexové optimalizační metody můžeme shrnout do třech pravidel.

Pravidlo 1. : ve vrcholech simplexu se spočítá cílová funkce, vrchol s nejhorší hodnotou F se vypustí a nahradí se novým vrcholem na spojnici vypouštěného vrcholu a střediska vrcholů zbývajících.

Obrázek 4.2 ilustruje průběh optimalizace od výchozího simplexu s vrcholy 1,2,3 až k simplexu s vrcholy 7,8,9.

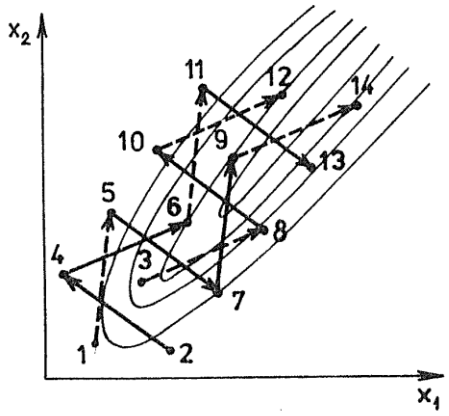
Kdybychom zůstali jen u prvního pravidla, pak u cílových funkcí s ostrými úbočími by často docházelo k ztroskotání na hraně. V obr.4.3 má v simplexu 1,2, 3 cílová funkce nejvyšší hodnotu ve vrcholu 2 , v novém simplexu 1,4,3 pak ve vrcholu 4 a pravidlo 1 výpočet vrátí k původnímu simplexu 1,2,3.



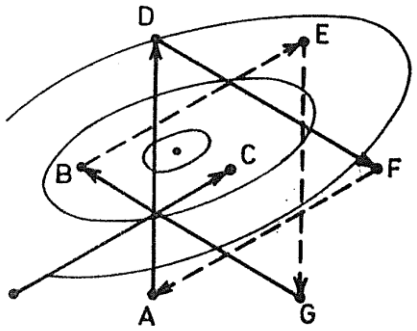
Obr.4.3

Proto připojíme pravidlo 2. : není dovoleno vracet se do právě vypuštěného vrcholu ; má-li v nově generovaném vrcholu cílová funkce nejhorší hodnotu, vypustí se vrchol s druhou nejhorší hodnotou funkce.

V obr.4.4 jsou výměny vrcholů podle prvního pravidla znázorněny plnými čarami a výměny podle druhého pravidla čárkovaně. S těmito dvěma pravidly metoda zvládne i cílové funkce s ostrými úbočími ; ve srovnání s případy "povlovných" funkcí je ovšem průběh optimalizace pomalejší, poněvadž se musí víckrát vyčíslovat cílová funkce - srovnej obr. 4.2 a 4.4.



Obr.4.4



Obr.4.5

Obrázek 4.5 znázorňuje situaci v blízkosti minima cílové funkce. Vrchol C je nejblíž k hledanému extremálnímu bodu a nezúčastňuje se proto výměn. Od výchozího simplexu ABC se přes BCD , DCE ... atd. dojde opět na začátek k ABC.

Těsnější přiblížení k optimu umožňuje pravidlo 3. : jestliže vrchol s nejlepší hodnotou cílové funkce zůstává na místě více než m výměn, redukuje se délka hrany simplexu. Číslo m se doporučuje volit podle vztahu $m = 1{,}65n + 0{,}05n^2$, kde n je dimense problému /počet optimalizačních proměnných/ .

Při generování výchozího simplexu v n-dimensionálním prostoru se výhodně využije symetrie a optimalizační proměnné v $n + 1$ vrcholech se volí tímto způsobem :

vrchol	optimalizační proměnné				
	$x_{1,j}$	$x_{2,j}$ ...	$x_{i,j}$ ...	$x_{n-1,j}$	$x_{n,j}$
$\vec{X}_1$	0	0	0	0	0
$\vec{X}_2$	p	q	q	q	q
⋮					
$\vec{X}_{i+1}$	q	q	p	q	q
⋮					
$\vec{X}_n$	q	q	q	p	q
$\vec{X}_{n+1}$	q	q	q	q	p

Označíme-li délku hrany simplexu a , pak z podmínky pro vzdálenost prvního vrcholu od některého z vrcholů zbývajících

$$(0 - p)^2 + (n - 1)(0 - q)^2 = a^2$$

a z podmínky pro vzdálenost libovolných dvou vrcholů s vyjímkou vrcholu prvního

$$2(p - q)^2 + (n - 2)(q - q)^2 = a^2$$

vypočítáme hodnoty p a q :

$$p = \frac{a}{n\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1} + n - 1\right) \qquad /4,5/$$

$$q = \frac{a}{n\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1} - 1\right)$$

Má-li být první vrchol simplexu nikoli v počátku, ale v bodě $\vec{Y}$, přemístíme celý simplex translací podle vztahů

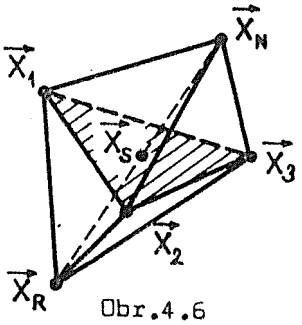
$$\vec{X}_j^Y = \vec{Y} + \vec{X}_j \quad , \quad j = 1,2,\dots,n+1 \quad . \qquad /4,6/$$

Pro hodnoty optimalizačních proměnných ve vrcholech posunutého simplexu platí

$$x_{i,j}^Y = x_{i,Y} + x_{i,j} \quad , \quad i = 1,2,\dots,n \; ; \; j = 1,2,\dots,n+1 \quad . \qquad /4,7/$$

Předpokládejme, že vrchol $\vec{X}_R$ se podle pravidla 1. nebo 2. vypouští. Optimalizační proměnné ve středisku $\vec{X}_S$ zbývajících vrcholů vypočítáme z rovnic

$$n \cdot x_{i,S} = \sum_{j=1}^{n+1} (x_{i,j}) - x_{i,R} \quad , \quad i = 1,2,\dots,n \qquad /4,8/$$



Obr.4.6

a nový bod $\vec{X}_N$ je určen podmínkou /obr.4.6/

$$\vec{X}_S = \frac{\vec{X}_N + \vec{X}_R}{2} \quad , \qquad /4,9/$$

ze které pro optimalizační proměnné vyplývají vzorce

$$x_{i,N} = \frac{2}{n}\left[\sum_{j=1}^{n+1}(x_{i,j}) - x_{i,R}\right] - x_{i,R} \, , \; i = 1,2,\dots,n. \qquad /4,10/$$