

**© Методические материалы к  
лабораторной работе  
«Вычислительные методы поиска  
локальных минимумов функций»**

**Кафедра ТУиДМ факультета ВМК**

**Составитель, к.ф.–м. н., доцент Городецкий С.Ю.**

**Н.Новгород, 2001**

# Содержание

|  |          |
|--|----------|
| <b>Глава 4. Модели и методы поиска локально-оптимальных решений .....</b>  | <b>3</b> |
| 4.1. Постановка задачи поиска локально-оптимальных решений.....  | 3        |
| 4.2. Общие принципы построения методов локальной оптимизации.....  | 4        |
| 4.2.1. Структура методов поиска локального минимума функций.....   | 4        |
| 4.2.2. Измерения локальной информации и роль модели задачи в их интерпретации .....  | 5        |
| 4.2.3. Классификация методов локального поиска.....  | 6        |
| 4.2.4. Эффективные стратегии поиска вдоль направлений. Регуляризованные алгоритмы<br>одномерного поиска .....                                | 7        |
| 4.3. Классические методы локальной оптимизации .....   | 9        |
| 4.4. Методы локальной оптимизации, основанные на квадратичной модели<br>поведения функций .....  | 15       |
| 4.4.1. Методы второго порядка для гладких задач .....  | 15       |
| 4.4.1.1. Недостатки классического метода Ньютона. Анализ влияния регулировки величин<br>одномерных смещений на свойства метода .....         | 15       |
| 4.4.1.2. Стратегии модификации матриц Гессе при нарушении их положительной<br>определенности .....   | 16       |
| 4.4.2. Методы первого порядка для гладких задач .....  | 22       |
| 4.4.2.1. Квазиньютоновские методы. Рекуррентные соотношения для оценок матриц Гессе<br>по измерениям градиента в основных точках поиска..... | 22       |
| 4.4.2.2. Модифицированные квазиньютоновские методы .....   | 26       |
| 4.4.2.3. Эвристические методы коррекции метрики пространства поиска. R-алгоритмы<br>Шора растяжения пространства .....                       | 27       |
| 4.4.2.4. Сопряженные направления и их свойства .....   | 29       |
| 4.4.2.5. Метод сопряженных градиентов Флетчера-Ривса .....   | 31       |
| 4.5. Некоторые методы прямого поиска для негладких задач.....  | 33       |
| 4.5.1. Метод Нелдера–Мида .....  | 34       |
| 4.5.2. Метод Хука-Дживса .....   | 35       |
| 4.6. Особенности применения методов локального поиска при двусторонних<br>ограничениях на переменные.....                                    | 37       |
| 4.6.1. Особенности учета двусторонних ограничений на переменные в методах гладкой<br>оптимизации.....  | 37       |
| 4.6.2. Учет двусторонних ограничений в методах прямого поиска.....   | 40       |
| 4.7. Учет ограничений общего вида на основе метода штрафов.....  | 40       |
| 4.7.1. Метод внешнего штрафа. Общие условия сходимости .....   | 41       |
| 4.7.2. Структура возникающих задач со штрафом и характер приближения оценок к решению<br>.....   | 45       |
| 4.7.3. Недостаточность локальных методов при использовании метода штрафов.....   | 48       |
| 4.7.4. Сочетание локальных методов с методами покрытий области.....  | 49       |
| Краткий обзор главы.....   | 49       |
| Литература .....   | 52       |

## Глава 4. Модели и методы поиска локально-оптимальных решений

### 4.1. Постановка задачи поиска локально-оптимальных решений

В предыдущих главах уже отмечалось, что в задачах математического программирования

$$f(y) \rightarrow \min, y \in Q \subseteq R^N, \quad (4.1)$$

$$Q = \{y \in D : g_j(y) \leq g_j^+, j = 1, \dots, m\}, \quad (4.2)$$

$$D = \{y \in R^N : a_i \leq y_i \leq b_i, i = 1, \dots, N\}, \quad (4.3)$$

возникающих в рамках общей модели рационального выбора, используются два понятия решения, глобальное и локальное.

Всякий локальный минимум  $\hat{y} \in Q$  в задаче математического программирования определяет ее *локальное (локально-оптимальное) решение*.

Глобальный минимум  $y^* \in Q$ , являясь одним из локальных, характеризует наилучшее (по значению целевой функции) из локально-оптимальных решений задачи.

Напомним, что точка  $\hat{y} \in Q$  называется точкой *локального минимума* функции  $f(y)$  на множестве  $Q$ , если существует такое число  $\varepsilon > 0$ , что для всех  $y \in Q$  таких, что  $|y - \hat{y}| < \varepsilon$  выполняется  $f(\hat{y}) \leq f(y)$ .

Задача поиска локально-оптимального решения возникает, как правило, тогда, когда известна приближенная оценка  $y^0$  глобально-оптимального решения, найденная с неудовлетворительной точностью. В этом случае достаточно найти с высокой точностью локально-оптимальное решение, соответствующее начальной точке поиска  $y^0$ . Если эта точка была выбрана правильно, то найденный локальный минимум  $\hat{y}(y^0)$ , зависящий от  $y^0$ , будет являться глобальным минимумом задачи.

В общем случае, вычислительные затраты на локальное уточнение решения оказываются меньшими тех затрат, которые были бы необходимы процедурам многоэкстремальной оптимизации для достижения той же точности, что и локальный метод.

Следует указать и на другие ситуации, в которых целесообразно ставить задачу о поиске локального решения. Они могут возникнуть при необходимости предварительного исследования структуры решаемой задачи. Например, если из нескольких начальных точек метод локальной оптимизации получил существенно разные решения, то это говорит о многоэкстремальном характере задачи оптимального выбора и о необходимости применения к ее решению методов глобального поиска.

Наконец, следует учитывать, что в задачах высокой размерности регулярные методы поиска глобального решения не могут быть применены из-за чрезвычайно больших вычислительных затрат на покрытие области точками испытаний. Это остается справедливым даже в случае использования эффективных методов, строящих адаптивные существенно неравномерные покрытия области (такие методы были рассмотрены в третьей главе). В задачах высокой размерности практически единственным средством их решения остаются методы локальной оптимизации,

совмещенные, как это было описано в разделе 3.1, с процедурами предварительного отбора начальных точек, используемых при локальной оптимизации.

*Проблема локальной оптимизации* заключается в том, чтобы в задаче математического программирования (4.1) по заданной начальной точке  $y^0 \in Q$  определить локальный минимум  $\hat{y}(y^0)$  со значением целевой функции, не превосходящим  $f(y^0)$ .

Прежде чем рассматривать методы локальной оптимизации для задач с ограничениями в постановке (4.1)–(4.3), следует изучить необходимый материал по методам локальной оптимизации в более простых задачах, не содержащих ограничений. Этому вопросу помещены второй и третий разделы четвертой главы. В следующих за ними разделах приведены модификации методов локальной оптимизации применительно к задачам с ограничениями.

Итак, вначале рассмотрим задачи без ограничений

$$f(y) \rightarrow \min, y \in R^N. \quad (4.4)$$

В них кроме целевой функции  $f(y)$ , определенной для  $y \in R^N$ , будем также задавать начальную точку  $y^0$ . Предполагается, что минимум в задаче существует. Требуется определить локальный минимум функции  $f(y)$ , соответствующий начальной точке  $y^0$ .

В дальнейшем, для удобства изложения, будем дополнительно предполагать, что задача (4.4) является *одноэкстремальной*, т.е. имеет единственный локальный минимум, который в этом случае  $\hat{y}(y^0)$  является точкой  $y^*$  ее глобального минимума.



**Замечание.** Для одноэкстремальных задач при дальнейшем изложении в обозначениях не будет проводиться различий между локальным и глобальным минимумами. Всегда будет использоваться обозначение  $y^*$ .

## 4.2. Общие принципы построения методов локальной оптимизации

### 4.2.1. Структура методов поиска локального минимума функций

К настоящему времени разработано огромное количество разнообразных методов локальной оптимизации. Большинство из них реализует идею *локального спуска*, когда метод последовательно на каждом шаге переходит к точкам с меньшими значениями целевой функции. Почти все эти методы могут быть представлены в виде итерационного соотношения

$$y^{k+1} = y^k + x^k d^k, \quad (4.5)$$

где  $y^k$  — точки *основных испытаний*, состоящих в вычислении  $I^k = I(y^k)$  — набора тех или иных *локальных характеристик* целевой функции в точке  $y^k$ ,  $d^k$  — направления смещения из точек  $y^k$ , вычисляемые по результатам основных испытаний, а  $x^k$  — коэффициенты, определяющие величины смещений вдоль выбранных направлений.

В набор вычисляемых для функции локальных характеристик  $I^k = I(y^k)$  могут входить: значение функции  $f^k = f(y^k)$ , вектор градиента  $\nabla f^k = \nabla f(y^k)$ , матрица вторых производных (гессиан)  $\Gamma_k = \Gamma(y^k)$ . Какой именно набор характеристик измеряется — зависит как от свойств решаемой задачи, так и от выбранного метода оптимизации.

Для определения величин смещений  $x^k$  вдоль направлений  $d^k$  методы могут выполнять вспомогательные (*рабочие*) шаги. Это приводит к дополнительным измерениям локальных характеристик целевой функции вдоль направления  $d^k$ .

Переходы от точек  $y^k$  к точкам  $y^{k+1}$  выполняются таким образом, чтобы обеспечить существенное убывание значений функции  $f^k = f(y^k)$  в результате шага. Заметим, что простого выполнения условия убывания значений  $f^k$ , когда для всякого  $k$  выполняется  $f^{k+1} \leq f^k$ , для обеспечения сходимости к решению задачи недостаточно.

Останов вычислений в методах локальной оптимизации, применяемых в задачах без ограничений (4.4) с непрерывно дифференцируемыми целевыми функциями, происходит при выполнении условия достаточной малости нормы градиента

$$\|\nabla f(y^k)\| \leq \varepsilon. \quad (4.6)$$

Нужно отметить, что выполнение условия (4.6), в общем случае, не гарантирует близость точки  $y^k$  к решению задачи. Для методов, не использующих вычисление градиента (например, для методов прямого поиска Хука-Дживса или Нелдера-Мида), останов производится по другим правилам, своим для каждого из методов.

#### 4.2.2. Измерения локальной информации и роль модели задачи в их интерпретации

Выбор направлений  $d^k$  при выполнении итераций методов локального поиска в большинстве методов происходит по результатам основных испытаний  $I^k$ . Для того, чтобы было возможно определить  $d^k$ , необходимо использовать имеющуюся информацию или принятые предположения о свойствах решаемой задачи. Очевидно, что при отсутствии таких предположений, обоснованный выбор точек очередных испытаний был бы невозможен.

Совокупность предположений относительно свойств решаемой задачи будем называть *моделью задачи*. В большинстве случаев, принятая модель задачи (4.4) может быть описана в терминах принадлежности целевой функции  $f(y)$  некоторому классу функций. Будем записывать это следующим образом:  $f \in \Phi$ .

Принятая модель задачи существенно влияет на интерпретацию результатов проведенных испытаний. Поясним это на нескольких примерах, напомнив предварительно некоторые известные определения и факты, касающиеся выпуклых функций.

Функция  $f(y)$ , определенная в выпуклой области  $Q$ , называется *выпуклой (вниз)*, если для любых двух точек  $y^1$  и  $y^2$  из  $Q$  и  $\forall \alpha \in [0, 1]$  выполняется неравенство

$$f(\alpha \cdot y^1 + (1 - \alpha)y^2) \leq \alpha \cdot f(y^1) + (1 - \alpha)f(y^2). \quad (4.7)$$

Если неравенство (4.7) является строгим  $\forall \alpha \in (0, 1)$ , то функция — *строго выпукла*.

Непрерывно дифференцируемая функция  $f(y)$ , определенная в выпуклой области  $Q$ , выпукла тогда и только тогда, когда для любых двух точек  $y^1$  и  $y^2$  из  $Q$  выполняется неравенство

$$f(y^2) \geq f(y^1) + (\nabla f(y^1), y^2 - y^1). \quad (4.8)$$

Оно означает, что свойство выпуклости функции равносильно тому, что значения любой ее линейной аппроксимации не превосходят значений самой функции.

**ПРИМЕР 1.** Пусть функция  $f$  принадлежит классу непрерывно дифференцируемых выпуклых (вниз) функций, а ее испытания включают измерение градиента. Тогда по результату испытания в некоторой точке  $y^k$  можно построить оценку  $\bar{Q}(f^k)$  множества точек  $Q(f^k)$ , в которых функция  $f(y)$  принимает значения, не превосходящие величины  $f^k = f(y^k)$ . С учетом (4.8),  $f^k + (\nabla f^k, y - y^k) \leq f(y)$ . Поэтому оценка будет иметь следующий вид

$$Q(f^k) = \{y \in Q : f(y) \leq f^k\} \subseteq \bar{Q}(f^k) = Q \cap \{y \in R^N : f^k + (\nabla f^k, y - y^k) \leq f^k\} = \\ = Q \cap \{y \in R^N : (\nabla f^k, y - y^k) \leq 0\}.$$

Таким образом, проведение каждого испытания позволяет отсеять часть допустимой области, не содержащую решения.

**ПРИМЕР 2.** Пусть функция  $f$  принадлежит классу функций, липшицевых в области  $Q$  с константой  $L^f$  (функции этого класса рассматривались в главах 2 и 3), а испытание включает только вычисление значения функции, т.е.  $I^k = f^k$ . Пусть, кроме того, уже известны результаты первых  $(k-1)$ -го испытания с результатами вычислений функции  $f^1, \dots, f^{k-1}$ . Допустим также, что ранее проведенные испытания позволили сократить исходную область поиска  $Q$  до новой области  $Q^{k-1}$ , имеющей меньшую меру по сравнению с  $Q$ .

Тогда после проведения  $k$ -го испытания можно применить следующее правило уточнения оценки множества, содержащего решение задачи

$$Q^k = Q^{k-1} \cap \{y : f^k - L^f \|y - y^k\| \leq \min\{f^j : j = 1, \dots, k\}\}.$$

**ПРИМЕР 3.** Пусть о функции  $f$  известно только то, что она непрерывно дифференцируема, т.е. принадлежит классу  $\Phi^C = C(D)$ , а испытание в точке  $y^k$  состоит в вычислении значения функции  $f^k$  и градиента  $\nabla f^k$  (также, как и в примере 1). В этом случае нельзя указать никаких правил сокращения области поиска решения по результатам испытаний. Однако можно использовать информацию о векторе градиента для выбора направления  $d^k$  смещения текущей точки  $y^k$ . А именно, в качестве такого направления целесообразно принять направление *антиградиента*  $d^k = -\nabla f^k$ , определяющего направление скорейшего локального убывания функции.



**Замечание.** Классы функций, наиболее характерные для задач локальной оптимизации, обычно таковы, что не позволяют сокращать по результатам конечного числа испытаний область возможного положения решения. Именно по этой причине методы локальной оптимизации имеют структуру (4.5), существенно отличающуюся от структуры методов многоэкстремальной оптимизации, рассмотренной в разделах 2.4 и 3.2. Локальный поиск почти всегда основан на выборе направлений существенного локального убывания функции и смещениях вдоль них.

### 4.2.3. Классификация методов локального поиска

Обычно используют классификацию методов в зависимости от той локальной информации, которую метод получает при выполнении основных испытаний.

Если метод использует результаты испытаний, включающие вычисление производных функции до  $k$ -го порядка, то его относят к *методам  $k$ -го порядка*. Обычно выделяют методы *второго порядка* (используют вычисления функции, ее градиента и матрицы Гессе), *первого порядка* (используют вычисления функции и ее градиента), а также *нулевого порядка* (используют только вычисления функции). Если метод нулевого порядка не использует предположений о гладкости функции, то его называют *методом прямого поиска*.

Методы прямого поиска основаны на эвристических правилах определения направлений убывания минимизируемой функции и их структура может отличаться от описанной в разделе 4.2.1. Почти все остальные методы соответствуют структуре (4.5), и, следовательно, требуют для своей реализации разработки специальных вычислительных процедур, позволяющих определять в (4.5) коэффициенты одномерных смещений  $x^k$  вдоль выбираемых направлений  $d^k$ .

#### 4.2.4. Эффективные стратегии поиска вдоль направлений. Регуляризованные алгоритмы одномерного поиска

Вычислительная схема методов локального поиска (4.5) требует многократного применения процедур выбора одномерных смещений  $x^k$  вдоль направлений  $d^k$ . В процессе работы метода эти процедуры могут выполняться сотни раз. Это накладывает повышенные требования к эффективности таких процедур. Остановимся на принципах и алгоритмах определения смещений.

Величина коэффициента  $x^k$ , определяющего длину шага вдоль направления  $d^k$ , может выбираться на основе нескольких критериев. Наиболее распространенными при построении методов являются следующие [1], [2]: критерий близости к минимуму по направлению, критерий существенности убывания функции, а также требование по степени уменьшения первоначального интервала возможных значений  $x^k$ .

В основе первого критерия лежит требование, чтобы в точке  $y^k + x^k d^k$  величина скорости изменения функции  $f$  в направлении  $d^k$  была в заданное число раз меньше скорости ее изменения в точке  $x_k$ . Это требование формализуется следующим образом. Задается малый положительный коэффициент  $\eta$  и величина  $x^k$  определяется условием

$$x^k \in \Pi_1(\eta), \quad 0 \leq \eta < 1 \quad (4.9)$$

$$\Pi_1(\eta) = \{x \geq 0 : |(\nabla f(y^k + x \cdot d^k), d^k)| \leq \eta \cdot (-\nabla f(y^k), d^k)\}. \quad (4.10)$$

В основе второго критерия (существенности убывания функции) лежит требование

$$x^k \in \Pi_2(\mu), \quad 0 < \mu < 1 \quad (4.11)$$

$$\Pi_2(\mu) = \{x \geq 0 : f(y^k + x \cdot d^k) \leq f(y^k) + \mu \cdot x \cdot (\nabla f(y^k), d^k)\}. \quad (4.12)$$

Эти два критерия используются совместно, и окончательное условие выбора  $x^k$  состоит в одновременном выполнении требований (4.9)-(4.12). При этом для их непротиворечивости на значения параметров  $\mu$  и  $\eta$  накладывается дополнительное требование вида  $\mu < \eta$ , т.е.

$$x^k \in \Pi = \Pi_1(\eta) \cap \Pi_2(\mu), \quad 0 < \mu < \eta < 1. \quad (4.13)$$

Напомним, что используемые в формулах (4.10), (4.12) скалярные произведения градиента функции  $f(y)$  на вектор направления  $d$  определяют производные функции  $f$  в точке  $y$  в направлении  $d$ , а именно  $\partial f(y)/\partial d = (\nabla f(y), d)$ .

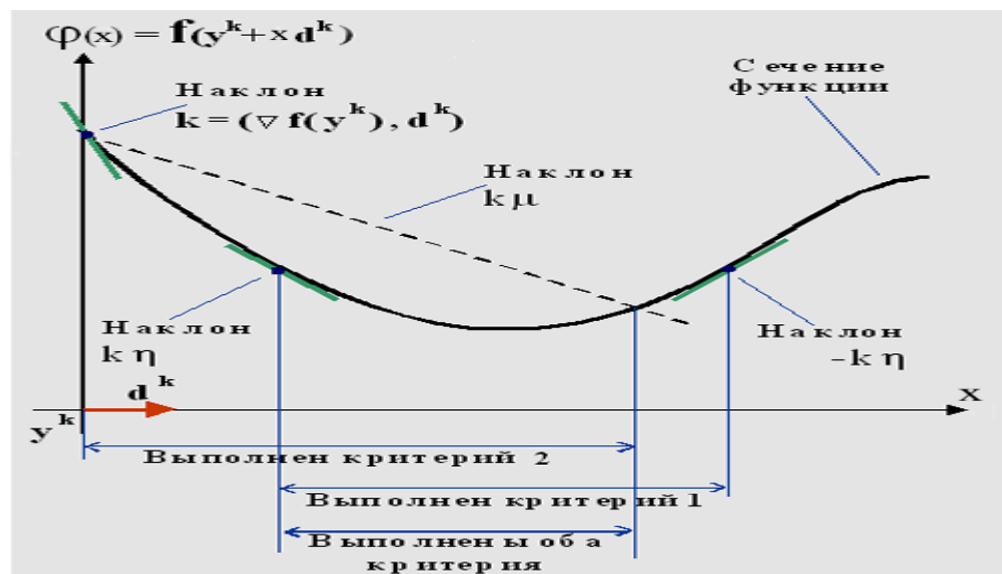


Рис. 4.1. Критерии выбора коэффициента одномерного шага

На рис.4.1 дана иллюстрация выбора  $x^k$  на основе этих двух критериев. Если при выборе коэффициента одномерного шага используется условие (4.10) с  $\eta \ll 1$ , то говорят, что длина шага выбирается из условия "аккуратного" одномерного поиска.

При исследовании сходимости методов считается, что такой выбор соответствует выбору  $x^k$  из условия достижения минимума функции одномерного сечения

$$\varphi(x) = f(y^k + x d^k). \quad (4.14)$$

Как организовать выбор  $x^k$  алгоритмически? Процесс выбора разбивается на два этапа. На первом этапе определяется промежуток  $[0, X]$ , на котором следует искать значение  $x^k$ . В задачах без ограничений этот промежуток должен иметь пересечение с искомым множеством  $\Pi$  из (4.13). Если же в задаче есть ограничения, то такого пересечения может не существовать, и тогда значение  $X$  определяется из условия попадания на границу области  $D$  из (4.3).

#### АЛГОРИТМ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРОМЕЖУТКА $[0, X]$

ШАГ 0. При решении задачи без ограничений (4.4) выбирается начальное значение  $X^0 = \infty$ . При решении задачи с ограничениями (4.1)–(4.3), включающими принадлежность точки  $y$  параллелепипеду  $D$ , по текущей точке  $y^k$  и направлению  $d^k$  начальное значение  $X^0$  определяется как наименьшее значение  $x$ , при котором точка  $y^k + x d^k$  попадает на границу этого параллелепипеда.

ШАГ 1. Выбирается малое  $\delta > 0$  и  $x = 0$ .

ШАГ 2. Полагается  $x = x + \delta$ .

ШАГ 3. Если точка  $y^k + x d^k \notin D$ , то окончательно принимается  $X = X^0$  и процесс останавливается. Если  $y^k + x d^k \in D$  и  $p = (\nabla f(y^k + x d^k), d^k) > 0$ , т.е. обнаружено значение  $x$ , при котором функция  $f$  в одномерном сечении возрастает, то полагается  $X = x$  и процесс останавливается. В противном случае удваивается величина шага  $\delta := 2\delta$  и происходит возврат на шаг 2.

На втором этапе определения  $x^k$  на промежутке  $[0, X]$  осуществляется процедура поиска минимума функции одного переменного  $\varphi(x)$  из (4.14), являющейся одномерным сечением функции  $f(y)$  в направлении  $d^k$ . Поиск продолжается до момента первого попадания значения  $x$  в множество  $\Pi$  или же до того момента, когда будет достигнут заданный коэффициент сжатия  $\sigma$  ( $0 < \sigma < 1$ ) для текущего интервала, содержащего решение, по отношению к длине исходного интервала  $[0, X]$ .

Дополнительное условие останова (по коэффициенту сжатия интервала) необходимо для задач с нарушением гладкости, а также для задач с ограничениями, в которых минимум может достигаться на границе интервала.

Заметим, что при поиске минимума функция  $\varphi(x)$  всегда считается *униmodalной*, что позволяет применить известный *алгоритм золотого сечения*, близкий к  $\epsilon$ -оптимальному методу Фибоначчи ([3], [4], а также [5] и [6]). Однако во многих задачах локальной оптимизации функции  $\varphi(x)$  являются достаточно гладкими, что позволяет применять к поиску минимума алгоритмы, основанные на построении квадратичных аппроксимаций  $\varphi(x)$  по результатам ее измерений. Такие методы называют *квазиньютоновскими*. Известно, что при определенных условиях они способны обеспечить скорость сходимости более высокого порядка, чем метод золотого сечения [7]. Если же условия их сходимости будут нарушены, то такие методы могут расходиться.

Для осуществления одномерного поиска гладкой *униmodalной* функции наиболее подходящими являются *регуляризованные алгоритмы*, представляющие комбинацию метода золотого сечения с квазиньютоновским алгоритмом [2].



РЕГУЛЯРИЗОВАННАЯ ПРОЦЕДУРА ОДНОМЕРНОГО ПОИСКА СОСТОИТ В СЛЕДУЮЩЕМ.

ШАГ 0. Полагаем  $A=0$ ,  $B=X$ ,  $\tau = (-1+5^{1/2})/2$ ,  $0 < \delta < \tau$ .

ШАГ 1. Выполняем три вычисления по методу золотого сечения:

ШАГ 1.1. Вычисляем  $x_1 = B - (B-A)\tau$ ,  $x_2 = A + \tau(B-A)$  и  $\varphi_1 = \varphi(x_1)$ ,  $\varphi_2 = \varphi(x_2)$ .

ШАГ 1.2. Если  $\varphi_1 \leq \varphi_2$ , то полагаем  $B = x_2$  и  $x_3 = B - (B-A)x$ ,  $\varphi_3 = \varphi(x_3)$ . При  $\varphi_1 \leq \varphi_3$  полагаем  $A = x_3$ ,  $x = x_1$ , иначе  $B = x_1$ ,  $x = x_3$ . Если  $\varphi_1 > \varphi_2$ , то полагаем  $A = x_1$  и  $x_3 = A + (B-A)\tau$ ,  $\varphi_3 = \varphi(x_3)$ . При  $\varphi_2 > \varphi_3$ , полагаем  $A = x_2$ ,  $x = x_3$ , иначе  $B = x_3$ ,  $x = x_2$ . В результате выполнения шага 1 получаем три точки с вычисленными значениями функции, а также интервал  $[A, B]$  с расположенной внутри него точкой  $x$ , соответствующей лучшему вычисленному значению функции.

ШАГ 2. Определяем  $u$  — точку измерения функции по квазиньютоновскому правилу.  $u$  определяется как точка минимума квадратичной аппроксимации функции  $\varphi(x)$ , построенной по значениям  $x_1, \varphi_1$ ;  $x_2, \varphi_2$ ;  $x_3, \varphi_3$ :

$$u = (-\varphi_1(x_3^2 - x_2^2) + \varphi_2(x_3^2 - x_1^2) - \varphi_3(x_2^2 - x_1^2)) / (2(\varphi_1(x_3 - x_2) - \varphi_2(x_3 - x_1) + \varphi_3(x_2 - x_1))).$$

ШАГ 3. Определяем  $v$  — точку измерения функции по правилу золотого сечения

$$v = \begin{cases} A + (x - A)\tau & \text{при } x > (A + B)/2 \\ B - (B - x)\tau & \text{при } x < (A + B)/2 \end{cases}.$$

ШАГ 4. Выбираем точку  $w$  для очередного вычисления функции: Если  $u \in [\min(v; x); \max(v; x)]$ ; т.е. если точка квазиньютоновского шага  $u$  незначительно уклоняется от середины отрезка  $[A, B]$ , то в качестве точки нового измерения выбирается точка  $w = u$ , однако, чтобы предотвратить ее слишком близкое размещение к точке прежнего измерения  $x$ , ее положение корректируется

$$w = \begin{cases} u + \delta \cdot \text{sign}(u - x) & \text{при } |u - x| < \delta \\ u & \text{при } |u - x| > \delta \end{cases}.$$

Если же  $u$  не принадлежит указанному интервалу, полагаем  $w = v$ .

ШАГ 5. Вычисляем  $\varphi_w = \varphi(w)$ . Проверяем, принадлежит ли  $w$  множеству  $\Pi$  из (4.13). Если она принадлежит, или же  $|B - A| < \sigma X$ , то переходим на шаг 7, если нет, переходим на шаг 6.

ШАГ 6. Через  $y$  обозначим левую из точек  $w, x$ , (а через  $\varphi_y$  соответствующее ей значение функции), через  $z$  - правую из точек  $w, x$  (а через  $\varphi_z$  - соответствующее значение функции). Если  $\varphi_y \leq \varphi_z$ , то полагаем  $B = z$ ,  $x = y$ . Если  $\varphi_y > \varphi_z$ , то полагаем  $A = y$ ,  $x = z$ . Выделяем из точек  $x_1, x_2, x_3, w$  три точки с наименьшими значениями функции и обозначаем их через  $x_1, x_2, x_3$ , а соответствующие им значения функции — через  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ . Переходим на шаг 2.

ШАГ 7. Выполняем завершающие операции: вычисляем  $\varphi(x)$  на концах интервала  $[A, B]$ , в качестве  $x^k$  выбираем ту из трех точек  $w, A, B$ , где достигается меньшее значение функции  $\varphi$ , останавливаем поиск.

### 4.3. Классические методы локальной оптимизации

Прежде чем перейти к изучению эффективных методов поиска локально-оптимальных решений, следует рассмотреть простейшие классические методы. К ним следует отнести градиентные методы и метод Ньютона [2, 6–10].

Идея градиентного метода была высказана О. Коши в середине XVIII века, но еще в 40-ые годы XX века градиентные методы представлялись вполне достаточным средством практического решения задач.

Градиентные методы предельно просты. Их можно описать общим итерационным соотношением (4.5), имеющим вид  $y^{k+1} = y^k + x^k d^k$ , где направление смещения из точки  $y^k$  совпадает с направлением антиградиента  $d^k = -\nabla f^k$ .

В этом направлении дифференцируемая функция  $f(y)$  локально (в бесконечно малой окрестности точки  $y^k$ ) убывает быстрее всего, т.к. производная  $\partial f(y^k)/\partial v^k$  функции  $f$  в точке  $y^k$ , вычисленная в некотором направлении  $v^k$  ( $\|v^k\|=1$ ), может быть представлена в виде скалярного произведения  $\partial f(y^k)/\partial v^k = (\nabla f(y^k), v^k)$ , которое достигает своего минимума именно в направлении антиградиента.

Заметьте, что в общем случае направление антиградиента в точке  $y^k$  не совпадает с направлением на локальный минимум (рис.4.2). Более того, это направление не инвариантно по отношению к растяжениям пространства переменных.

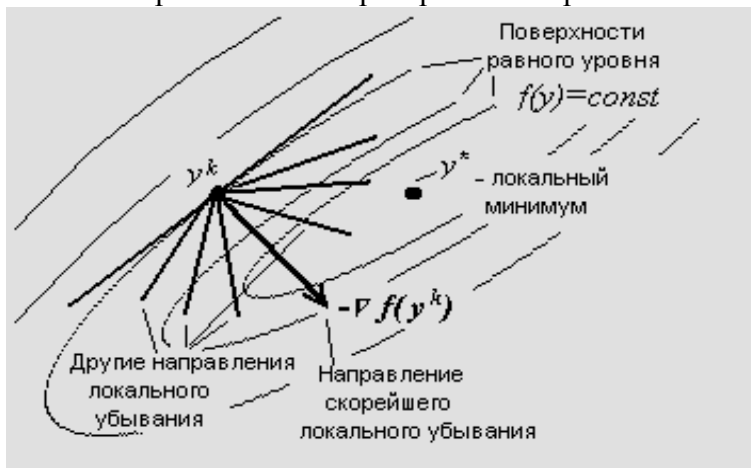


Рис. 4. 2. Отличие направления антиградиента от направления на локальный минимум

Существует несколько модификаций градиентного метода, различающихся правилом выбора величины смещения  $x^k$  в направлении антиградиента. Рассмотрим один из наиболее распространенных вариантов градиентного метода (метод *наискорейшего градиентного поиска*). Приведем правило выполнения шага в этом методе в том случае, когда в задаче оптимизации отсутствуют ограничения–неравенства из (4.2), то есть допустимая область  $Q=D$  (общие принципы учета ограничений–неравенств рассмотрены в разделе 4.6). Применительно к этой задаче в методе наискорейшего градиентного поиска величина одномерного смещения  $x^k$  определяется из условия

$$f(y^k + x^k d^k) = \min \{f(y^k + x d^k) : x \geq 0, y^k + x d^k \in Q=D\}, \quad (4.15)$$

Таким образом,  $x$  — величина, определяющая смещение вдоль  $d^k$ , выбирается из условия достижения минимума функции  $f$  в области  $Q$  на луче  $y^k + x d^k$ , где  $x \geq 0$ . С вычислительной точки зрения правило (4.15) реализуется методом аккуратного одномерного поиска, описанным в разделе 4.2.4.

На градиентные методы можно также посмотреть с несколько иных позиций, а именно с позиций тех представлений о поведении минимизируемой функции, на которых основано правило выбора направления поиска. Градиентные методы основаны на локальной линейной модели функции  $f(y)$  в окрестности точки  $y^k$  последнего испытания. Именно для линейной модели функции направление антиградиента является наилучшим с точки зрения задачи поиска минимума (для квадратичной модели это уже не так). Заметим, что методом используется только локальная линейная модель. Выбор величины смещения по правилу (4.15) неявно предполагает нелинейность функции, особенно в задаче без ограничений.

В случае двух переменных правила поиска в методе наискорейшего градиентного поиска иллюстрирует рис. 4.3. Следует заметить, что направления поиска на двух последовательных шагах  $d^k$  и  $d^{k+1}$  взаимно ортогональны, если решение вспомогательной задачи (4.15) достигается во внутренней точке допустимой области.

Сходимость процедур градиентного поиска может быть доказана при достаточно слабых предположениях о функции, минимум которой ищется. Одна из теорем о сходимости для случая использования метода при отсутствии ограничений (когда  $Q = R^N$ ) имеет следующую формулировку.

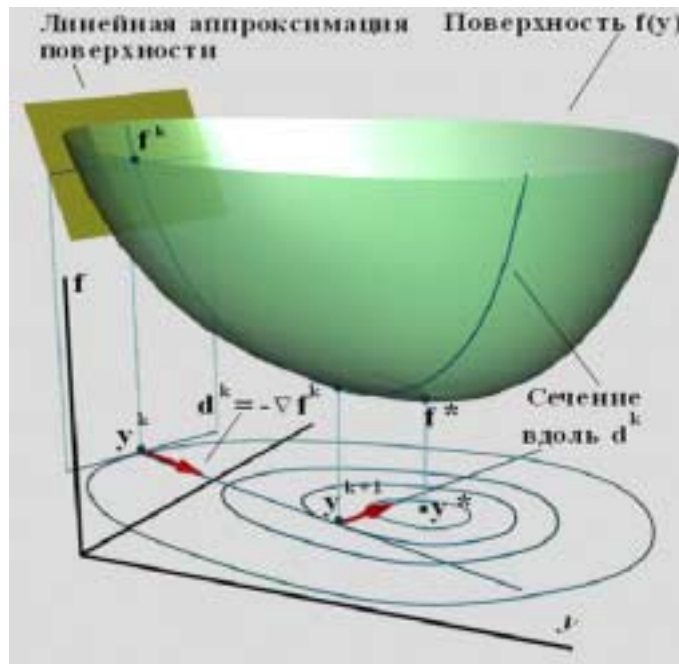


Рис. 4.3. Наискорейший градиентный поиск

**Теорема 4.1.** Пусть в задаче (4.4) функция  $f(y)$  непрерывно дифференцируема, ограничена снизу и ее градиент удовлетворяет условию Липшица с некоторой константой  $L$ . Тогда метод наискорейшего градиентного поиска для любой начальной точки  $y^0$  строит последовательность  $y^k$  такую, что  $\|\nabla f(y^k)\| \rightarrow 0$  при  $k \rightarrow \infty$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО можно найти, например, в [1]. При определенных дополнительных предположения относительно функции  $f$  из утверждения теоремы будет следовать сходимость  $y^k$  к точке минимума  $y^*$ .

Сам факт сходимости еще не говорит об эффективности градиентного метода. Более того, ряд аналитических оценок показывают, что его эффективность в общем случае достаточно низка. Рассмотрим работу метода наискорейшего градиентного поиска на квадратичных функциях вида

$$f(y) = (y^T \Gamma y) / 2 + c^T y, \quad \Gamma^T = \Gamma \quad (4.16)$$

с положительно определенной матрицей  $\Gamma$  (т.е. строго выпуклых).

Известно, что на таких функциях метод наискорейшего градиентного поиска не обладает, в общем случае, конечной сходимостью (т.е. не определяет точку минимума за конечное число итераций), а порождает последовательность точек, сходящуюся к точке минимума  $y^*$  со скоростью геометрической прогрессии, знаменатель которой может быть близок к единице.

**Теорема 4.2.** Для квадратичной функции (4.16) с симметричной положительно определенной матрицей метод наискорейшего градиентного поиска сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем, не превосходящим значения  $q$  из (4.16). При этом справедливы следующие оценки

$$\begin{aligned} \exists a = a(y^0), T > 0 : 0 \leq a \leq q &= (\lambda_{\min}/\lambda_{\max} - 1)^2 / (\lambda_{\min}/\lambda_{\max} + 1)^2, \\ f(y^k) - f(y^*) &\leq a^k (f(y^0) - f(y^*)), \\ \|y^k - y^*\| &\leq T a^{k/2} \|y^0 - y^*\|, \end{aligned}$$

где  $\lambda_{\min}$  и  $\lambda_{\max}$  — минимальное и максимальное собственные числа матрицы вторых производных  $\Gamma^f = \Gamma$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО этого свойства можно найти в книге [8].

Из оценок теоремы 4.2 следует, что конечная сходимость из любой начальной точки  $y^0$  возможна только при  $q=0$  ( $\lambda_{\min} = \lambda_{\max}$ ), когда поверхности равного уровня функции  $f$  являются сферами.

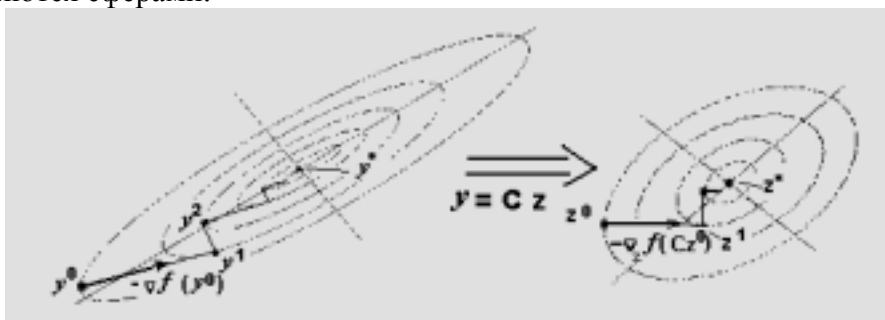


Рис. 4. 4. Влияние масштабирования на скорость сходимости наискорейшего градиентного поиска

Если же поверхности равного уровня сильно вытянуты (рис.4.4), что соответствует  $\lambda_{\min} < \lambda_{\max}$ , то в (4.16)  $q$  будет близко к единице, и скорость сходимости к решению окажется чрезвычайно низкой, за исключением точек  $y^0$ , лежащих на главных осях эллипсоидов  $f(y) = const$  (в этих точках  $a(y^0) = 0$ ).

Таким образом, высокая скорость сходимости градиентного метода может быть обеспечена только за счет предварительного масштабирования задачи, т.е. выполнения такой замены переменных  $y = Cz$ , которая приводила бы (в новых переменных) к выполнению условия  $\lambda_{\min} \approx \lambda_{\max}$ .

Как уже отмечалось выше, направление антиградиента не инвариантно по отношению к линейным заменам переменных. Если выполнен переход к переменным  $z$ :  $y = Cz$  ( $C$  — матрица преобразования), то градиент функции в новых переменных  $z$  может быть вычислен как

$$\nabla_z f(Cz) = C^T \nabla f(y). \tag{4.17}$$

То же правило пересчета сохраняется, очевидно, и для антиградиента. Если перевести антиградиентное направление, вычисленное в пространстве  $z$ , в направление в пространстве старых переменных  $y$ , то получим скорректированное направление поиска

$$\bar{d}^k = C(-\nabla_z f(Cz^k)) = CC^T(-\nabla f(y^k)). \tag{4.18}$$

Возникающая матрица  $CC^T$  для коррекции направления антиградиента легко вычисляется для строго выпуклых квадратичных функций вида (4.16). Действительно, пусть в точке  $y^k$  для  $f(y)$  измерено значение  $f^k$ , градиент  $\nabla f^k$  и матрица вторых производных  $\Gamma_k^f = \Gamma$ . В силу равенства нулю всех производных выше второго порядка  $f(y)$  из (4.16) совпадает со своей квадратичной аппроксимацией  $P^k(y)$ , построенной по измерениям  $f^k$ ,  $\nabla f^k$ ,  $\Gamma_k^f$ , выполненным в точке  $y^k$

$$P^k(y) = (y - y^k)^T \Gamma_k^f (y - y^k) / 2 + (\nabla f^k, (y - y^k)) + f^k. \tag{4.19}$$

Условие, определяющее  $y^*$  — точку минимума для  $P^k(y)$ , примет вид

$$\nabla P^k(y^*) = \Gamma_k^f(y^* - y^k) + \nabla f^k = 0, \quad (4.20)$$

откуда  $y^* - y^k = (\Gamma_k^f)^{-1}(-\nabla f(y^k))$ . Сравнивая полученное направление с направлением (4.18), видим, что в качестве матрицы преобразования в (4.18) можно использовать  $CC^T = (\Gamma_k^f)^{-1}$ .

Если бы  $f(y)$  была произвольной дважды непрерывно дифференцируемой функцией, то в (4.19) квадратичная аппроксимация  $P^k(y)$  уже не совпадала бы с исходной функцией, а условие (4.20) определяло бы лишь стационарную точку для этой аппроксимации. Если именно в этой точке проводить очередное измерение локальных характеристик функции  $f$  (значения, градиента и матрицы вторых производных), приняв ее за  $y^{k+1}$ , получим классический метод Ньютона, имеющего вид итерации

$$y^{k+1} = y^k + (\Gamma^f(y^k))^{-1}(-\nabla f(y^k)) \quad (4.21)$$

(направление шага  $d^k = (\Gamma^f(y^k))^{-1}(-\nabla f(y^k))$ , коэффициент длины шага  $\alpha^k = 1$ ). Полезно обратить внимание на то, что этот метод, выполняя на каждом шаге некоторое преобразование пространства переменных. Построенное им направление  $d^k$  соответствует антиградиентному направлению функции  $f$ , если его вычислить в преобразованном пространстве.

На метод Ньютона можно посмотреть с другой точки зрения. А именно, правило итерации (4.21) основано на использовании квадратичной модели поведения функции  $f(y)$ , минимум которой ищется. Использование квадратичной модели приводит к отказу от использования направления антиградиента функции и применению вместо него скорректированного антиградиентного направления, приводящего в результате шага в стационарную точку текущей квадратичной аппроксимации функции.

Геометрическая интерпретация правила выбора направления поиска в методе Ньютона для выпуклой квадратичной функции приведена на рис.4.5.

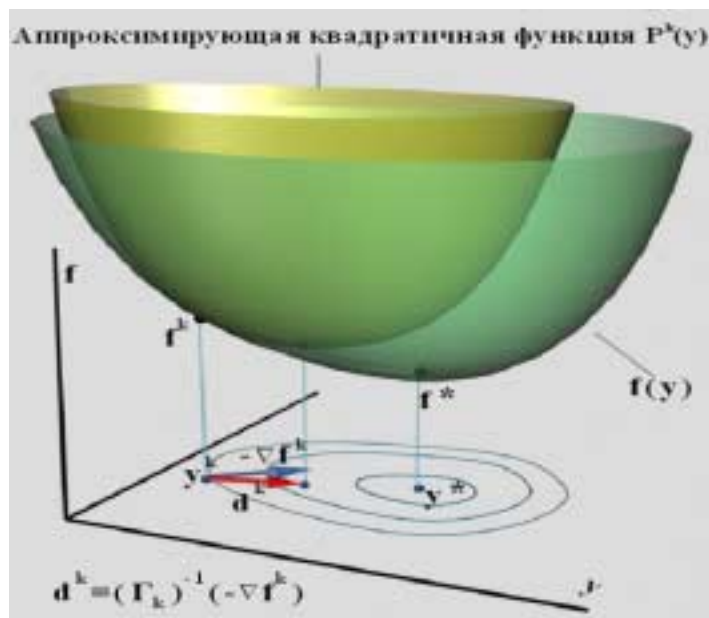


Рис. 4. 5. Выбор направления в методе Ньютона

Что можно в достаточно общем случае сказать о сходимости метода Ньютона?

**Теорема 4.3.** Для дважды непрерывно дифференцируемых функций с невырожденной матрицей  $\Gamma^f(y^*)$  всегда существует такая  $\varepsilon$  — окрестность стационарной точки  $y^*$  функции  $f(y)$ , что для любой начальной точки  $y^0$  из этой окрестности метод Ньютона

будет сходиться сверхлинейно. Если функция трижды непрерывно дифференцируема, то метод сходится квадратично.

Доказательство приведено, например, в [7]. Поясним терминологию.

**Определение.** *Линейной сходимостью* называют сходимость по закону геометрической прогрессии. Линейная сходимость характерна для метода наискорейшего градиентного поиска (теорема 4.2).

**Определение.** Говорят, что метод *сходится сверхлинейно*, если  $\exists k > 0$  и последовательность чисел  $\alpha_{k+1}, \dots, \alpha_{k+m}$  из интервала  $(0, 1)$ , стремящаяся к 0 при  $m \rightarrow \infty$ , что  $\forall t > 0$  будет выполнено неравенство  $\|y^{k+m} - y^*\| \leq \alpha_{k+1} \dots \alpha_{k+m} \|y^k - y^*\|$ .

**Определение.** Говорят, что метод *сходится квадратично*, если  $\exists T > 0$ , что  $\|y^{k+1} - y^*\| \leq T \|y^k - y^*\|^2$  при  $\|y^0 - y^*\| < \varepsilon$ .

**Замечание.** Квадратично сходящаяся последовательность обладает скоростью сходимости более высокой (точнее говоря, более высокого порядка), чем у любой геометрической прогрессии. Сверхлинейная сходимость занимает промежуточное положение между квадратичной и линейной.

Таким образом, из теоремы 4.3 следует, что при достаточно общих условиях метод Ньютона обладает тем, чего лишены градиентные методы — высокой скоростью сходимости. Однако это свойство сохраняется только в некоторой (заранее не известной!) окрестности решения. Вне этой окрестности метод Ньютона может вообще расходиться. Кроме того, итерация (4.21) требует обращения матрицы. Существенно также то, что в прикладных задачах достаточно часто встречаются ситуации, когда в точках последовательности  $y^k$  матрица  $\Gamma^f(y^k)$  оказывается отрицательно определенной, знаконеопределенной или вырожденной. В последнем случае итерация (4.21) неприменима. Если же  $\Gamma^f(y^*)$  не вырождена, но не знакоположительна то, как следует

из приведенной выше теоремы, метод Ньютона может сходиться к стационарной точке функции  $f$ , не являющейся точкой минимума, а представляющей собой точку максимума или седловую точку.

Пример ситуации, в которой наблюдается сложное и несколько неожиданное поведение метода Ньютона, вызванное изменением знакоопределенности матриц вторых производных вдоль траектории поиска, показан на рис.4.6.

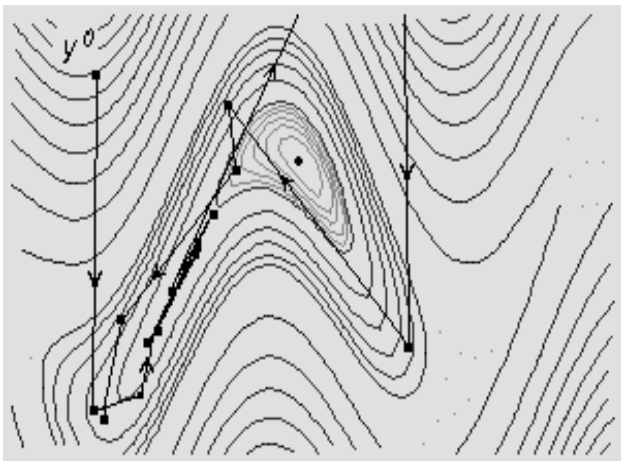


Рис. 4.6. Неожиданное поведение метода Ньютона

Все сказанное выше позволяет прийти к следующему выводу: для эффективного решения прикладных задач, характеризующихся плохим масштабированием, возможным вырождением и знаконеопределенностью матриц вторых производных, классические методы поиска локального экстремума являются малоприспособными. Необходимы методы, сочетающие сходимость из любой начальной точки с высокой скоростью сходимости вблизи решения и сохраняющие свои свойства в ситуациях, характерных для прикладных задач.

#### 4.4. Методы локальной оптимизации, основанные на квадратичной модели поведения функций

Существует большая группа методов, в которых при выборе направления очередного шага используется предположение о том, что минимизируемая функция хорошо приближается ее квадратичной аппроксимацией. Будем говорить, что такие методы основаны на квадратичной модели поведения функции.

Использование методом квадратичной модели вовсе не предполагает, что в нем обязательно явно используется матрица вторых производных функции или ее оценка. Есть методы, которые действительно явно используют матрицу Гессе. Есть методы, которые строят ее оценку, измеряя вдоль траектории поиска только вектор градиента, и, наконец, есть методы, которые явно матрицу Гессе не используют и не оценивают, хотя близость функции к квадратичной предполагают. В разделах 4.4.1, 4.4.2 рассмотрены методы каждого из этих видов.

##### 4.4.1. Методы второго порядка для гладких задач

В этом разделе изучаются методы локальной оптимизации, которые вычисляют в точке поиска  $y^k$  значения  $f(y^k)$ ,  $\nabla f(y^k)$ ,  $\Gamma^f(y^k)$ , т. е. явно используют значения матриц вторых производных.

##### 4.4.1.1. Недостатки классического метода Ньютона. Анализ влияния регулировки величин одномерных смещений на свойства метода

Классический метод Ньютона обладает тремя существенными недостатками: возможной расходимостью для начальных точек, взятых вне некоторой окрестности решения, неприменимостью при вырождении матрицы вторых производных минимизируемой функции и возможной сходимостью к точкам максимумов или седловых точек в случае знакоотрицательности или знаконеопределенности этих матриц. Эти недостатки могут быть преодолены за счет модификаций метода Ньютона.

Первая модификация связана с изменением правила выбора длины шага. Ее изучению посвящен данный раздел.

В классическом методе Ньютона коэффициент длины шага  $x^k \equiv 1$ . В модифицированном методе (методе с регулировкой шага)  $x^k$  выбирается по алгоритму "аккуратного" одномерного поиска. Это приводит к сходимости из любой начальной точки для достаточно широкого класса функций и сохранению высокой (обычно сверхлинейной) скорости сходимости в окрестности решения. Метод Ньютона с регулировкой шага называют *методом Ньютона–Рафсона*.

Рассмотрим свойства данного метода. Выберем класс  $\Phi$  одноэкстремальных тестовых функций, часто используемый для изучения свойств методов локального поиска. В качестве  $\Phi$  возьмем класс  $\Phi_{m,M}$  дважды непрерывно дифференцируемых функций, обладающих тем свойством, что  $\exists m > 0$  и  $M < \infty$ ,  $m < M$ , что  $\forall y \in R^N$ ,  $z \in R^N$ .

$$m\|z\|^2 \leq z^T \Gamma^f(y)z \leq M\|z\|^2 \quad (4.22)$$

Такие функции будут сильно выпуклы [1].

Можно показать, что условие (4.22) равносильно тому, что все собственные числа  $\lambda_1(y), \dots, \lambda_N(y)$  матриц  $\Gamma^f(y)$  лежат между  $m$  и  $M$ .



**Замечание.** Условие (4.22) гарантирует положительную определенность матрицы  $\Gamma^f(y)$ , достаточную для сходимости метода Ньютона к минимуму  $f(y)$  из любой начальной точки, выбранной в достаточной близости от него. Однако из произвольно выбранной точки  $y^0$  метод Ньютона для функции  $f(y)$  из  $\Phi_{m,M}$  может не сходиться.

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Достаточно привести контр пример. Рассмотрим скалярный случай, когда  $y \in R^1$ . Построим четную функцию с минимумом в точке  $\theta$  (ее производная при этом будет функцией нечетной), для которой при  $y^0 > \theta$  следующая точка  $y^1 = y^0 - f_0' / f_0''$  равнялась бы  $(-y^0)$ . В силу нечетности первой производной и четности второй производной, обязательно на следующем шаге выполнится равенство  $y^2 = -y^1 = y^0$ . Поэтому сходимости к точке минимума из точки  $y^0$  не будет.

Таким образом, для классического метода Ньютона выбранный тестовый класс, с точки зрения сходимости из любой начальной точки, хорошим не является. Если бы удалось доказать, что метод Ньютона–Рафсона обладает на этом классе сходимостью из любой точки, это означало бы, что данный метод является улучшенной модификацией метода Ньютона.

Предварительно укажем на некоторые свойства выбранного класса функций.

**Свойство 1.** Любая функция  $f(y)$  из класса  $\Phi_{m,M}$  имеет единственный минимум  $y^*$ .

**Свойство 2.** Для функций  $f(y)$  из класса  $\Phi_{m,M}$  существует взаимосвязь между ошибкой по координате и ошибкой по значению функции, выражаемая соотношением

$$0,5m \|y - y^*\|^2 \leq f(y) - f(y^*) \leq 0,5M \|y - y^*\|^2.$$

**Свойство 3.** Для функций  $f(y)$  из класса  $\Phi_{m,M}$  существует взаимосвязь между ошибкой по значению функции и нормой градиента

$$M(1+m/M)(f(y) - f(y^*)) \leq \|\nabla f(y)\|^2.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО этих свойств можно найти в [1].

Свойства метода Ньютона с регулировкой шага на классе  $\Phi_{m,M}$  определяются следующей теоремой [1]. Ее доказательство опирается на приведенные выше свойства.

**Теорема 4.4** Метод Ньютона с регулировкой шага на функциях  $f \in \Phi_{m,M}$  для любой начальной точки  $y^0$  порождает последовательность точек  $y^k$ , сходящуюся к точке минимума  $y^*$  со сверхлинейной скоростью.



**Замечание.** Если дополнительно потребовать от функции  $f$  существование непрерывных третьих производных, можно доказать, что метод будет сходиться квадратично.

Таким образом, модификация Ньютона–Рафсона расширяет область сходимости метода Ньютона.

#### 4.4.1.2. Стратегии модификации матриц Гессе при нарушении их положительной определенности

Вторая модификация метода Ньютона связана с преодолением случаев отсутствия положительной определенности матрицы вторых производных. Следует обратить внимание на то, что при нарушении положительной определенности  $\Gamma_k$  (а значит и  $(\Gamma_k)^{-1}$ , если она существует) направление смещения  $d^k = (\Gamma_k)^{-1}(-\nabla f(y^k))$  может не быть направлением убывания. Действительно, производная функции  $f$  в точке  $y^k$  по направлению  $d^k$  оценивается следующим образом

$$\partial f(y^k) / \partial d^k = (\nabla f(y^k), d^k) = -(\nabla f(y^k), (\Gamma_k)^{-1} \nabla f(y^k)).$$

В рассматриваемом случае знак этого произведения не определен и может оказаться положительным. В этом случае метод Ньютона–Рафсона применить нельзя, т.к. при его использовании смещение вдоль  $d^k$  будет нулевым. Таким образом, матрицу  $\Gamma_k$  использовать нельзя.



Основная идея, на основе которой выполняется модификация матриц, состоит в том, чтобы заменить матрицу  $\Gamma_k$  на достаточно близкую к ней (в смысле некоторой нормы) положительно определенную матрицу  $\bar{\Gamma}_k$  и затем использовать ее в итерационном соотношении метода Ньютона–Рафсона

$$\begin{aligned} y^{k+1} &= y^k + x^k \bar{d}^k \\ \bar{d}^k &= (\bar{\Gamma}_k)^{-1} (-\nabla f(y^k)) \\ x^k &\in \Pi_1(\eta) \cap \Pi_2(\mu). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Переход от  $\Gamma_k$  к положительно определенной матрице  $\bar{\Gamma}_k$  обычно выполняется с помощью факторизации  $\Gamma_k$ , т.е. разложения ее в произведение матриц определенного вида.

Наиболее естественным представляется использование *спектрального разложения*. Определим для  $\Gamma_k$  набор собственных чисел  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  и систему ортонормированных собственных векторов  $u^1, \dots, u^N$ . Тогда возможно следующее представление

$$\Gamma_k = \lambda_1 u^1 (u^1)^T + \dots + \lambda_N u^N (u^N)^T = \mathbf{U} \mathbf{L} \mathbf{U}^T,$$

где матрица  $\mathbf{U}$  составлена из вектор–столбцов  $u^1, \dots, u^N$ ,  $\mathbf{L}$  – диагональная матрица с числами  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  по диагонали. Такое представление матрицы называется спектральным разложением. Если положительная определенность  $\Gamma_k$  нарушена, то существует  $\lambda_i \leq 0$ . Матрица  $\bar{\Gamma}_k$  строится так, что у нее сохраняются все собственные векторы  $u_1, \dots, u_N$ , а собственные числа заменяются на новые  $\bar{\lambda}_i$  так, что

$$\bar{\lambda}_i = \begin{cases} \lambda_i, & \text{при } \lambda_i > \delta \\ \delta, & \text{при } \lambda_i \leq \delta, \end{cases} \quad (4.24)$$

где  $\delta$  – малое положительное число. После этого полагается

$$\bar{\Gamma}_k = \mathbf{U} \bar{\mathbf{L}} \mathbf{U}^T, \quad (4.25)$$

где в диагональной матрице  $\bar{\mathbf{L}}$  на диагонали используются числа  $\bar{\lambda}_1, \dots, \bar{\lambda}_N$ .

При этом подпространство локальной положительной кривизны функции  $f(y)$  сохраняется, а подпространство отрицательной кривизны становится подпространством малой положительной кривизны. Если построить квадратичную аппроксимацию функции  $f(y)$  по результатам ее испытания в точке  $y^k$  и затем заменить в ней матрицу вторых производных  $\Gamma_k$  на модифицированную матрицу (4.24)–(4.25), то произойдут качественные изменения в структуре аппроксимации. На рис.4.7 на примере пространства двух переменных показаны изменения в линиях равного уровня квадратичной аппроксимации  $P^k(y)$  после замены знаконеопределенной матрицы  $\Gamma_k$  на положительно определенную  $\bar{\Gamma}_k$ . На этом рисунке видно, как направление метода Ньютона  $d^k$ , приводящее в стационарную точку поверхности  $P^k(x)$  заменяется новым направлением  $\bar{d}^k$ .

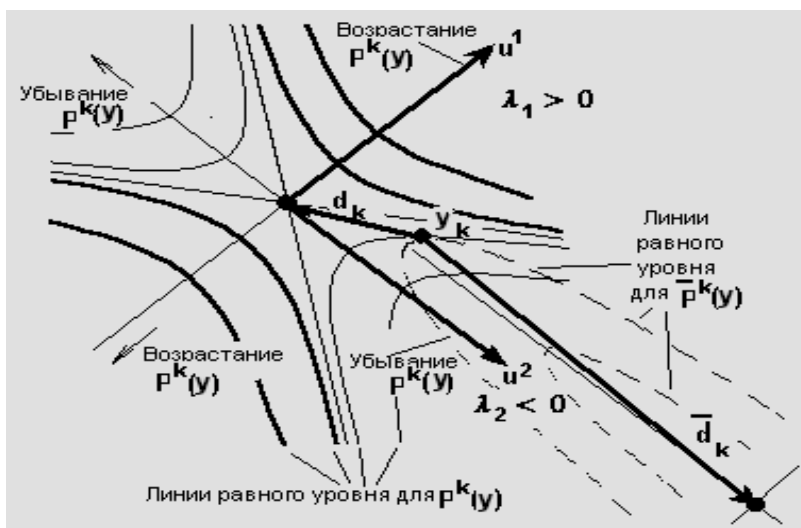


Рис. 4. 7. Изменение изолиний при замене матрицы

Для создания наглядных представлений об изменении характера аппроксимирующей поверхности при замене  $\Gamma_k$  на положительно определенную  $\bar{\Gamma}_k$ , полезно обратиться к иллюстрациям, представленным на рис. 4.8– 4.9.

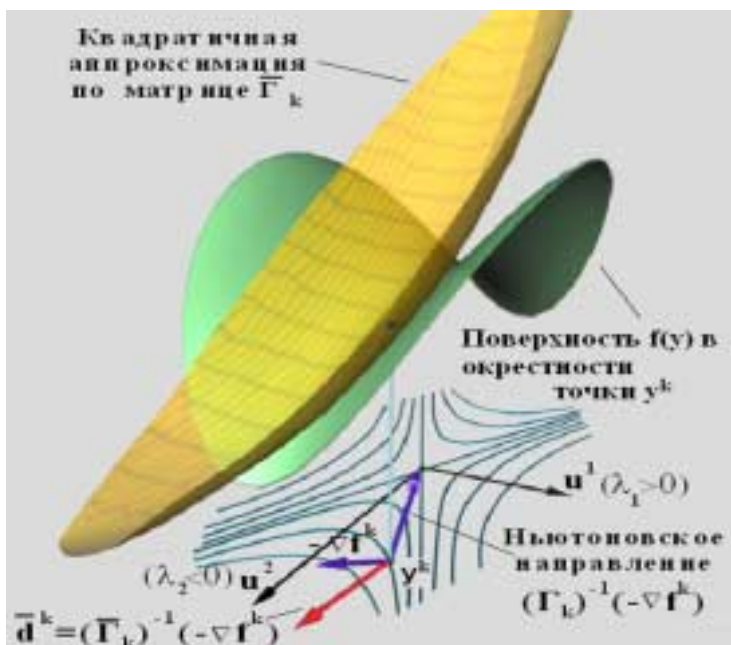


Рис. 4. 8. Изменение вида аппроксимирующей поверхности в случае знакоопределенной матрицы Гессе

Поведение функции  $f(x)$ , представленное на рис.4.8, соответствует изолиниям, показанным на рис.4.7. Следует обратить внимание на то, что кривизна модифицированной аппроксимирующей поверхности  $\bar{P}^k(y)$ , построенной по измененной матрице  $\bar{\Gamma}_k$ , рассматриваемая в направлении  $u^1$  положительной локальной кривизны поверхности  $f(y)$ , совпадает с локальной кривизной самой  $f(y)$  в этом направлении. В тоже время, в направлении  $u^2$  отрицательная кривизна заменяется малой положительной кривизной.

Несколько иное соответствие между первоначальной и модифицированной аппроксимациями возникает в том случае, когда матрица  $\Gamma_k$  отрицательно определена. В этом случае все собственные направления матрицы  $\Gamma_k$  трансформируются в направления малой положительной кривизны (рис.4.9). Это приводит к замене

направления Ньютона  $d^k$  на новое —  $\bar{d}^k$ , ориентированное на точку минимума измененной аппроксимации.

Таким образом, метод коррекции матрицы на основе спектрального разложения весьма нагляден и прост для понимания. Однако этот подход имеет один существенный недостаток – большие затраты по вычислениям, связанные с поиском собственных векторов и чисел симметричной матрицы. Необходимый объем вычислений для построения спектрального разложения оценивается как  $4N^3$ .

При разработке вычислительных методов оптимизации для построения положительно определенных матриц  $\bar{\Gamma}_k$  по исходным матрицам  $\Gamma_k$  вместо спектрального разложения часто используется модифицированное разложение Холецкого [2], вычислительная реализация которого проще и требует меньшего числа операций.

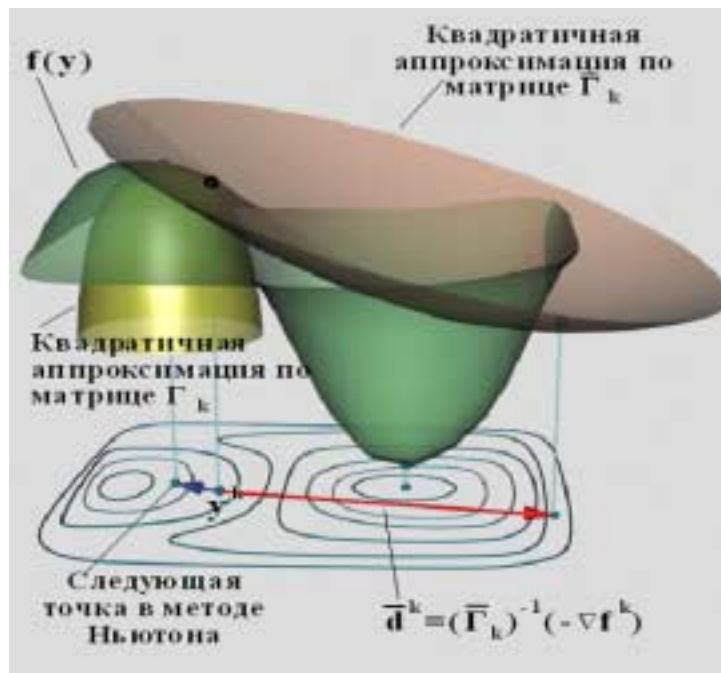


Рис. 4. 9. Влияние модификации матрицы при ее отрицательной определенности

В теории матриц известно, что для любой симметричной положительно определенной матрицы  $\Gamma$  существует нижняя треугольная матрица  $L$  с единичной диагональю и диагональная матрица  $D$  с положительной диагональю, что справедливо разложение Холецкого  $\Gamma = LDL^T$ , т.е.

$$\begin{pmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \dots & \gamma_{1N} \\ \gamma_{12} & \gamma_{22} & \dots & \gamma_{2N} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \gamma_{1N} & \gamma_{2N} & \dots & \gamma_{NN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{12} & 1 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ l_{1N} & l_{2N} & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_{22} & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & d_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & l_{12} & \dots & l_{1N} \\ 0 & 1 & \dots & l_{2N} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

где  $d_{11}, \dots, d_{NN} > 0$ .

Отсюда вытекает, что

$$\gamma_{11} = d_{11}, \gamma_{1j} = d_{11}l_{1j}, (j > 1) \quad (4.27)$$

$$\gamma_{ii} = d_{ii} + (l_{1i})^2 d_{11} + (l_{2i})^2 d_{22} + \dots + (l_{(i-1)i})^2 d_{(i-1)(i-1)}, (i = 2, \dots, N) \quad (4.28)$$

$$\gamma_{ij} = (l_{1i})(l_{1j})d_{11} + (l_{2i})(l_{2j})d_{22} + \dots + (l_{(i-1)i})(l_{(i-1)j})d_{(i-1)(i-1)} + (l_{ij})d_{ii}, \quad (4.29)$$

для  $i < j \leq N$ .

Из (4.27)–(4.29) легко получить формулы Холецкого для вычисления коэффициентов разложения Холецкого. Расчет их значений производится строка за строкой для матриц  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{L}^T$ . Порядок вычисления этих коэффициентов удобно пояснить следующей диаграммой:

$$d_{11} \Rightarrow l_{12}, l_{13}, l_{14}, \dots; d_{22} \Rightarrow l_{23}, l_{24}, \dots; d_{33} \Rightarrow l_{34}, l_{35}, \dots$$

Получим

$$d_{11} = \gamma_{11}, \quad l_{1j} = (1/d_{11})\gamma_{1j}, \quad (j = 2, \dots, N) \quad (4.30)$$

$$d_{ii} = \gamma_{ii} - \sum_{s=1}^{i-1} (l_{si})^2 d_{ss}, \quad (i > 1)$$

$$l_{ij} = \left( \gamma_{ij} - \sum_{s=1}^{i-1} (l_{si})(l_{sj})d_{ss} \right) / d_{ii}, \quad (i > 1, j = i+1, \dots, N) \quad (4.31)$$

Построим теперь *модифицированное разложение Холецкого* для произвольной (не обязательно положительно определенной) симметричной матрицы  $\mathbf{\Gamma}$ . В процессе разложения будем производить коррекцию получаемых элементов  $d_{ij}$  так, чтобы модифицированные элементы  $\bar{d}_{ij}$  удовлетворяли условию

$$\bar{d}_{ij} \geq \delta > 0 \quad (4.32)$$

Это обеспечит положительность с «запасом» элементов модифицированной диагональной матрицы  $\bar{\mathbf{D}}$ . Отметим, что условие (4.32) не может являться единственным условием модификации. Действительно, близость к нулю некоторых модифицированных элементов  $\bar{d}_{ij}$  при их дальнейшем использовании в (4.31) может привести к лавинообразному росту элементов  $l_{ij}$  при вычислениях. При обычном разложении Холецкого это невозможно, т.к. из (4.28) вытекает, что

$$(l_{si})^2 d_{ss} \leq \gamma_{ii} \leq \max\{\gamma_{ii}; i = 1, \dots, N\}, \quad (s=1, \dots, i).$$

Обозначим через  $\gamma^* = \max\{\gamma_{ii}; i = 1, \dots, N\}$  и введем  $\beta^2 \geq \gamma^*$ . Наложим требование, чтобы для модифицированных элементов разложения выполнялось

$$d_{ss} \leq \beta^2; \quad ((\bar{l}_{si})^2 \bar{d}_{ss}) \leq \beta^2 \quad (s = 1, \dots, N, i > s) \quad (4.33)$$

Выполним необходимую модификацию за счет изменения только диагональных элементов матрицы  $\mathbf{\Gamma}$ . Обозначим через  $\Delta_i$  добавки к элементам  $\gamma_{ii}$ . Тогда согласно (4.32)–(4.33) должно выполняться:

$$\bar{d}_{ii} = \gamma_{ii} + \Delta_{ii} - \sum_{s=1}^{i-1} (\bar{l}_{si})^2 \bar{d}_{ss} \geq \delta > 0,$$

$$\max_{j=i+1, \dots, N} (\bar{l}_{ij})^2 \bar{d}_{ii} = \left( \left( \max_{j=i+1, \dots, N} \left( \gamma_{ij} - \sum_{s=1}^{i-1} (\bar{l}_{si})(\bar{l}_{sj})\bar{d}_{ss} \right) \right)^2 / \left( \gamma_{ii} + \Delta_{ii} - \sum_{s=1}^{i-1} (\bar{l}_{si})^2 \bar{d}_{ss} \right) \right) \leq \beta^2.$$

Если обозначить

$$c_i^2 = \max_{j=i+1, \dots, N} \left( \gamma_{ij} - \sum_{s=1}^{i-1} (\bar{l}_{si})(\bar{l}_{sj})\bar{d}_{ss} \right)^2 \quad (4.34)$$

$$\tilde{d}_{ii} = \gamma_{ii} - \sum_{s=1}^{i-1} (\bar{l}_{si})^2 \bar{d}_{ss}, \quad (4.35)$$

то

$$\Delta_i = \max \{0; c_i^2 / \beta^2 - \tilde{d}_{ii}; \delta - \tilde{d}_{ii}\}.$$

Это соответствует выбору

$$\bar{d}_{ii} = \max \{ \tilde{d}_{ii}; c_i^2 / \beta^2; \delta \} \quad (4.36)$$

$$\bar{l}_{ij} = \left( \gamma_{ij} - \sum_{s=1}^{i-1} (\bar{l}_{si})(\bar{l}_{sj})\bar{d}_{ss} \right) / \bar{d}_{ii} \quad (4.37)$$

Элементы (4.36), (4.37) определяют модифицированные матрицы  $\bar{L}^T$ ,  $\bar{D}$ . В качестве положительно определенной матрицы – приближения для  $\Gamma$  используется  $\bar{\Gamma} = \bar{L} \bar{D} \bar{L}^T$ .

Заметим, что сумма квадратов поправок к элементам матрицы  $\Gamma$  равна  $\Delta_1^2 + \dots + \Delta_N^2$ . Для уменьшения этой величины в [2] рекомендуется выбирать

$$\beta^2 = \max \{ \gamma^*; \xi / (N^2 - 1)^{1/2}; \varepsilon_M \}, \quad (4.38)$$

где  $\varepsilon_M$  — наименьшее положительное вещественное число в машинной арифметике, а

$$\gamma^* = \max \{ \gamma_{ii} : i = 1, \dots, N \}, \quad \xi = \max \{ |\gamma_{ij}| : 1 \leq i \leq N, 1 \leq j \leq N, i \neq j \}. \quad (4.39)$$

Приведем пошаговое описание метода Ньютона с регулировкой шага и модификацией матрицы вторых производных на положительную определенность с использованием модифицированного преобразования Холесского.

ШАГ 0. Задаются начальная точка  $y^0$ , параметры выбора коэффициента одномерного шага  $0 < \mu < \eta < 1$ ,  $0 < \sigma < 1$ ; параметр останова  $\varepsilon$  и параметр модификации  $\delta > 0$ . Полагается  $k = 0$ .

ШАГ 1. Вычисляются  $f^k = f(y^k)$ ,  $\nabla f^k = \nabla f(y^k)$ ,  $\Gamma_k = \Gamma^f(y^k)$ .

ШАГ 2. Вычисляется  $\beta^2$  по формулам (4.38), (4.39). Строится модифицированное разложение Холесского  $\bar{L}_k, \bar{D}_k$  для матрицы  $\Gamma_k$ .

ШАГ 3. Определяется модифицированное направление Ньютоновского шага  $\bar{d}^k = (\bar{\Gamma}_k)^{-1}(-\nabla f^k)$  путем последовательного решения двух систем линейных уравнений с треугольными матрицами

$$\begin{aligned} \bar{L}_k v^k &= -\nabla f^k \\ (\bar{D}_k (\bar{L}_k)^T) \bar{d}^k &= v^k \end{aligned}$$

ШАГ 4. Определяется  $x^k$  по алгоритму выбора коэффициента одномерного шага  $x^k \in \Pi$  из (4.13). Определяется  $y^{k+1} = y^k + x^k \bar{d}^k$

ШАГ 5. Вычисляется  $f^{k+1} = f(y^{k+1})$ ,  $\nabla f^{k+1} = \nabla f(y^{k+1})$ ,  $\Gamma^{k+1} = \Gamma^f(y^{k+1})$ , полагается  $k := k+1$ .

ШАГ 6. Если  $\|\nabla f^k\| \leq \varepsilon$ , то производится останов. Точка  $y^k$  выдается в качестве оценки решения. Если же  $\|\nabla f^k\| \geq \varepsilon$ , то осуществляется переход на шаг 2.



Известно, что выполнение модифицированного разложения Холесского требует около  $(1/6)N^3$  операций, а последующее определение  $\bar{d}^k$  требует числа операций порядка  $N^2$ .

**Замечание.** Модифицированный метод Ньютона сохраняет поисковые возможности на функциях с областями плохого поведения (вырожденность, знаконеопределенность матриц  $\Gamma_k$ ), поскольку новое направление поиска  $\bar{d}^k$ , в силу гарантированной положительной определенности матриц  $\bar{\Gamma}_k$ , обязательно является направлением строгого локального убывания и соответствует направлению антиградиента в некоторой новой метрике пространства. Кроме того, метод обладает сверхлинейной скоростью сходимости в окрестности решения, если функция в этой окрестности дважды непрерывно дифференцируема и обладает свойством (4.22). Это следует из того, что в такой области модификация матрицы производиться не будет, т.е.  $\bar{\Gamma}_k = \Gamma_k$ , а, следовательно, метод будет точно совпадать с методом Ньютона–Рафсона.

#### 4.4.2. Методы первого порядка для гладких задач

В этом разделе будет продолжено изучение методов, основанных на квадратичной модели поведения минимизируемой функции. В отличие от предыдущего раздела, будет рассмотрена группа методов, которые хотя и используют предположение о гладкости функции и близости ее к квадратичной, но не измеряют матриц вторых производных. Будет рассмотрено несколько групп таких методов. Методы первой группы (квазиньютоновские методы) строят оценки матриц Гессе и используют их вместо истинных матриц вторых производных, точно также, как это делает метод Ньютона–Рафсона. Методы второй группы — методы растяжения также основаны на построении вспомогательных матриц, используемых для перемасштабирования пространства, но эти матрицы не являются оценками Гессе и строятся на основе эвристических принципов. Методы третьей группы явно никаких матриц не строят, хотя неявно метрику пространства изменяют (методы сопряженных направлений).

##### 4.4.2.1. Квазиньютоновские методы. Рекуррентные соотношения для оценок матриц Гессе по измерениям градиента в основных точках поиска

Методы этого класса относятся к методам первого порядка. Они используют результаты испытаний, состоящих в вычислении  $f(y^k)$ ,  $\nabla f(y^k)$ . Предполагается, что функция  $f$  обладает свойствами, соответствующими квадратичной модели. Следовательно, у функции  $f$  существует симметричная матрица вторых производных, недоступная непосредственному измерению.

Казалось бы, в этих условиях самым естественным являлось конечно-разностное оценивание Гессе в каждой точке  $y^k$  по измерениям градиента на множестве узлов, размещенных с некоторым шагом  $h$  в окрестности данной точки. Получив оценку можно применить модифицированный метод Ньютона–Рафсона. Однако данный подход требует слишком большого объема вычислений и, кроме того, связан со значительными погрешностями оценивания. Это приводит к тому, что данный подход обычно не применяется. Оказывается оценки Гессе можно строить без дополнительных вычислений градиента функции  $f(y)$ . Именно такой подход используется в квазиньютоновских методах.

Идея, положенная в основу *квазиньютоновских методов*, состоит в том, чтобы по результатам измерения градиентов функции  $f$  в точках  $y^k$  траектории поиска попытаться построить матрицу  $G_k$ , являющуюся оценкой кривизны поверхности  $f(y)$  на траектории поиска. После выполнения  $k-1$  испытаний,  $G_k$  рассматривается как оценка матрицы вторых производных  $\Gamma^f(y^k)$ . Точка очередного измерения будет выбираться по правилу

$$y^{k+1} = y^k + x^k d^k, \quad (4.40)$$

$$d^k = (G_k)^{-1} (-\nabla f^k), \quad (4.41)$$

$$x^k \in \Pi.$$

Методы вида (4.40), (4.41) выбирают направления перемещения, совпадающие с антиградиентными направлениями функции  $f$ , вычисленными в некотором измененном пространстве. Фактически, на каждом шаге выполняется изменение метрики пространства переменных (поворот осей и перемасштабирование) за счет домножения градиента на матрицу  $G_k$ . Поэтому второе название этих методов – *методы переменной метрики*. При определенных условиях через  $N$  шагов матрица  $G_N$  будет близка к матрице  $\Gamma^f(y^N)$ .

Рассмотрим основные идеи, лежащие в основе построения оценки  $G_k$ . Рассмотрим случай, когда  $f(y) = (y^T \Gamma y)/2 + (c, y) + b$  – квадратичная функция с симметричной положительно определенной матрицей  $\Gamma$ .

Пусть

$$\begin{aligned}\Delta^k &= y^{k+1} - y^k, \\ z^k &= \nabla f^{k+1} - \nabla f^k,\end{aligned}\quad (4.42)$$

где  $\nabla f^k = \nabla f(y^k)$ ,  $\nabla f^{k+1} = \nabla f(y^{k+1})$ . Тогда, очевидно, будет выполняться равенство

$$z^k = \nabla f(y^k + \Delta^k) - \nabla f(y^k) = \Gamma \Delta^k.$$

Потребуем, чтобы такому же условию удовлетворяла оценка  $\mathbf{G}_{k+1}$  матрицы  $\Gamma$ , построенная по  $(k+2)$ -м измерениям градиента. А именно, пусть выполняется требование

$$z^k = \mathbf{G}_{k+1} \Delta^k. \quad (4.43)$$

Условие (4.43) называется *квазиньютоновским условием*.

Наложим дополнительные требования на матрицы оценок. Поскольку сама матрица  $\Gamma$  симметрична, потребуем выполнения свойства симметрии от матрицы  $\mathbf{G}_{k+1}$ , положив

$$\mathbf{G}_{k+1} = (\mathbf{G}_{k+1})^T. \quad (4.44)$$

Будем определять ее новое значение путем коррекции предыдущей матрицы

$$\mathbf{G}_{k+1} = \mathbf{G}_k + U_k.$$

где поправки  $U_k$  строятся в виде матриц ранга 1 и находятся из условий (4.43), (4.44).

Эти условия определяют поправку неединственным образом. Простейший способ ее определения, предложенный Бройденом, состоит в том, чтобы составить ее из вектор–столбцов вида  $z^k - \mathbf{G}_k \Delta^k$ , помноженных на специально подобранные числа. Нетрудно проверить, что при произвольных  $v^k$ , для которых  $(v^k)^T \Delta^k \neq 0$ , нужная оценка определяется следующей формулой

$$\mathbf{G}_{k+1} = \mathbf{G}_k + (z^k - \mathbf{G}_k \Delta^k)(v^k)^T / ((v^k)^T \Delta^k). \quad (4.45)$$

Если положить в ней  $v^k = (z^k - \mathbf{G}_k \Delta^k)$ , то получим *формулу Бройдена (B-формулу)*

$$\mathbf{G}_{k+1} = \mathbf{G}_k + (z^k - \mathbf{G}_k \Delta^k)(z^k - \mathbf{G}_k \Delta^k)^T / ((z^k - \mathbf{G}_k \Delta^k)^T \Delta^k) \quad (4.46)$$

Существуют и другие способы оценивания. Например, можно несимметричную поправку в формуле (4.45) заменить похожей симметричной. Непосредственной проверкой можно убедиться (выполните эту проверку!), что для любого вектора  $v^k$  такого, что  $(v^k)^T \Delta^k \neq 0$ , соотношение

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_{k+1} &= \mathbf{G}_k + ((z^k - \mathbf{G}_k \Delta^k)(v^k)^T + v^k(z^k - \mathbf{G}_k \Delta^k)^T) / ((v^k)^T \Delta^k) - \\ &\quad - (v^k)(v^k)^T (z^k - \mathbf{G}_k \Delta^k)^T \Delta^k / ((v^k)^T \Delta^k)^2\end{aligned}\quad (4.47)$$

дает оценочную матрицу, удовлетворяющую (4.43), (4.44).

Положив в (4.45)  $v^k = z^k$ , получим *формулу Дэвидона–Флетчера–Пауэлла (DFP-формулу)*, представимую в следующем виде

$$\mathbf{G}_{k+1} = \mathbf{G}_k - \mathbf{G}_k \Delta^k (\Delta^k)^T \mathbf{G}_k / ((\Delta^k)^T \mathbf{G}_k \Delta^k) + z^k (z^k)^T / ((z^k)^T \Delta^k) + (\Delta^k)^T \mathbf{G}_k \Delta^k w^k (w^k)^T, \quad (4.48)$$

где

$$w^k = z^k / ((z^k)^T \Delta^k) - \mathbf{G}_k \Delta^k / ((\Delta^k)^T \mathbf{G}_k \Delta^k). \quad (4.49)$$

Поскольку в (4.48), (4.49)  $w^k (w^k)^T$  – симметричная матрица и, как можно показать,  $(w^k)^T \Delta^k = 0$  (проверьте это в качестве упражнения), то, в силу (4.43), последнее слагаемое в (4.48) можно отбросить. Получаемая таким образом укороченная формула называется *формулой Бройдена–Флетчера–Гольдфарба–Шанно (BFGH-формула)*.

В приведенных итерационных соотношениях начальное значение выбирается в виде  $\mathbf{G}_0 = \mathbf{E}$  (единичная матрица).

В теории оптимизации известно удивительное свойство описанных выше матричных оценок. Сформулируем его в виде теоремы.

**Теорема 4.5.** Для квадратичных функций  $f$  с положительно определенными матрицами вторых производных матрица  $G_N$ , полученная с использованием процедур (4.40)–(4.42), а также  $B$ , DFP или BFGH-формул, будет совпадать с матрицей вторых производных  $\Gamma^f$  функции  $f$ , а матрицы  $G_k$  ( $k \leq N$ ) будут симметричны и положительно определены.

Доказательство этого факта можно найти в [11].

**Следствие.** Для квадратичной функции  $f$  с положительно определенной матрицей Гессе квазиньютоновский метод (4.40)–(4.42), использующий матричные оценки, построенные по  $B$ , DFP или BFGH-формулам попадет в минимум функции  $f$  на  $(N+1)$ -м шаге, т.е. точка  $y^{N+1} = y^*$ .

Действительно, если теорема верна, то после  $(N+1)$ -го измерения градиента в основных точках траектории поиска метод построит оценку  $G_N = \Gamma^f$ , поэтому следующий шаг будет выполнен, фактически, по правилу метода Ньютона и приведет в точку минимума  $f$ .

Построенные алгоритмы могут быть применены для достаточно произвольных функций  $f$ , не являющихся квадратичными. В этом случае обычно  $G_N \neq \Gamma^f(y_N)$ , поскольку матрица вторых производных не постоянна. После каждого  $N$ -го шага необходим повторный запуск метода из получаемой точки  $y^{N+1}$ . Кроме того, процесс поиска может привести к тому, что матрицы  $G_k$  могут оказаться вырожденными или знаконеопределенными. При этом направление шага  $d^k$  в (4.41) перестанет быть направлением убывания функции и величина смещения  $x^k$  в (4.40) окажется равной нулю. Простейший способ коррекции в этом случае состоит в замене направления, построенного по правилу (4.41), на обычное антиградиентное направление. Стратегия поиска в квазиньютоновских методах проиллюстрирована на рис.4.10.

На этом рисунке показан (пунктиром) возможный вид линий равного уровня для квадратичных аппроксимаций функции  $f(y)$ , построенных по матричным оценкам  $G_k$ . Поскольку  $G_0 = E$ , то первая из этих линий уровня, построенная для точки  $y^0$ , является окружностью, а на остальных шагах окружности преобразуются в эллипсы. Выбираемые далее методом направления поиска  $d^k$  проходят через центры этих эллипсов, являющиеся стационарными точками построенных квадратичных аппроксимаций. Эти направления являются антиградиентными направлениями в пространстве с новой метрикой, связанной с матрицами  $G_k$ . Они могут сильно отличаться от направлений градиента в исходном пространстве.





Рис. 4.10. Направления поиска в квазиньютоновских методах

**Замечание.** При реализации алгоритма требуется проверка положительной определенности матриц  $G_k$ , а также вычисление направления поиска согласно (4.41), т.е. определение  $d^k = (G_k)^{-1}(-\nabla f^k)$ . Эти операции можно выполнить совместно. Для этого достаточно выполнить для матрицы  $G_k$  разложение Холесского. Если при этом для диагональных элементов матрицы  $D$  нарушится условие положительности  $d_{ii} > 0$ , то в качестве направления поиска нужно выбрать обычное антиградиентное направление, если же разложение  $G_k = L_k D_k L_k^T$  будет построено, то определение вектора  $d^k$  сведется к решению двух линейных систем с треугольными матрицами  $L_k v = -\nabla f^k$  и  $D_k (L_k)^T d^k = v$ .

ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМА.

ШАГ 0. Определяем  $\varepsilon > 0$  — параметр останова,  $\mu$ ,  $\eta$  и  $\sigma$  — параметры одномерного поиска ( $0 < \mu < \eta < 1$ ,  $0 < \sigma < 1$ ). Задаем точку начала поиска  $y^0$ .

ШАГ 1. Полагаем  $G_0 = E$  и вычисляем  $f^0 = f(y^0)$ ,  $\nabla f^0 = \nabla f(y^0)$ ,  $k = 0$ .

ШАГ 2. Выполняем преобразование Холесского для матрицы  $G_k$ . Если преобразование выполнить не удалось, полагаем  $d^k = (-\nabla f^k)$  и переходим на шаг 4. В противном случае получаем  $G_k = L_k D_k L_k^T$ .

ШАГ 3. Определяем направление поиска  $d^k = (G_k)^{-1}(-\nabla f^k)$  путем решения двух систем с треугольными матрицами

$$\begin{aligned} L_k v &= -\nabla f^k \\ D_k (L_k)^T d^k &= v \end{aligned} \quad (4.50)$$

ШАГ 4. Определяем  $x^k \in \Pi$  с помощью алгоритма выбора одномерного шага, вычисляем

$$\begin{aligned} y^{k+1} &= y^k + x^k d^k \\ f^{k+1} &= f(y^{k+1}), \quad \nabla f^{k+1} = \nabla f(y^{k+1}) \\ \Delta^k &= y^{k+1} - y^k, \quad z^k = \nabla f^{k+1} - \nabla f^k. \end{aligned}$$

ШАГ 5. Если  $k=N$ , проверяем критерий останова: при  $\|\nabla f^{k+1}\| \leq \varepsilon$  останавливаем поиск и принимаем  $y^{k+1}$  в качестве решения; при  $\|\nabla f^{k+1}\| > \varepsilon$  полагаем  $y^0=y^{k+1}$  и переходим к шагу 1. Если  $k \neq N$ , то полагаем  $k = k+1$  и переходим к шагу 6.

ШАГ 6. Производим вычисление матрицы  $G_{k+1}$  по  $B$ -формуле (4.46),  $DFP$ -формуле (4.48) или по  $BFGH$ -формуле. Переходим на шаг 2.

#### 4.4.2.2. Модифицированные квазиньютоновские методы

В этих методах в случаях нарушения положительной определенности оценочных матриц  $G_k$  вместо использования антиградиентного направления выполняется замена матрицы  $G_k$  на близкую к ней положительно определенную матрицу  $\bar{G}_k$ , построенную с использованием модифицированного преобразования Холецкого (или другого подобного преобразования). Рис.4.11 показывает изменения вида квадратичной аппроксимации функции  $f(y)$  в результате выполнения указанного преобразования для случаев различной знакоопределенности матрицы  $G_k$ .

ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМА.

ШАГ 0. Определяем  $\varepsilon > 0$  — параметр останова,  $\delta$  — параметр модификации матрицы в модифицированном преобразовании Холецкого ( $\delta > 0$ ),  $\mu$ ,  $\eta$  и  $\sigma$  — параметры одномерного поиска ( $0 < \mu < \eta < < 1$ ,  $0 < \sigma < < 1$ ). Задаем точку начала поиска  $y^0$ .

ШАГ 1. Полагаем  $G_0 = E$  и вычисляем  $f^0 = f(y^0)$ ,  $\nabla f^0 = \nabla f(y^0)$ ,  $k = 0$ .

ШАГ 2. Выполняем модифицированное преобразование Холецкого для матрицы  $G_k$ , получаем  $G_k \Rightarrow \bar{G}_k = \bar{L}_k \bar{D}_k \bar{L}_k^T$ .

ШАГ 3. Определяем направление поиска  $d^k = (\bar{G}_k)^{-1}(-\nabla f^k)$  путем решения двух систем с треугольными матрицами

$$\begin{aligned} \bar{L}_k v &= -\nabla f^k \\ \bar{D}_k (\bar{L}_k)^T d^k &= v \end{aligned}$$

ШАГ 4. Определяем  $x^k \in P$  с помощью алгоритма одномерного шага, вычисляем

$$\begin{aligned} y^{k+1} &= y^k + x^k d^k, \\ f^{k+1} &= f(y^{k+1}), \nabla f^{k+1} = \nabla f(y^{k+1}), \\ \Delta_k &= y^{k+1} - y^k, z^k = \nabla f^{k+1} - \nabla f^k. \end{aligned}$$

ШАГ 5. Если  $k=N$ , проверяем критерий останова: при  $\|\nabla f^{k+1}\| \leq \varepsilon$  останавливаем поиск и принимаем  $y^{k+1}$  в качестве решения; при  $\|\nabla f^{k+1}\| > \varepsilon$  полагаем  $y^0=y^{k+1}$  и переходим к шагу 1. Если  $k \neq N$ , то полагаем  $k = k+1$  и переходим к шагу 6.

ШАГ 6. Производим вычисление матрицы  $G_{k+1}$  по  $B$ -формуле (4.46),  $DFP$ -формуле (4.48) или по  $BFGH$ -формуле. Переходим на шаг 2.

Практический опыт показывает, что для широкого класса гладких задач описанные алгоритмы достаточно экономичны по числу шагов.

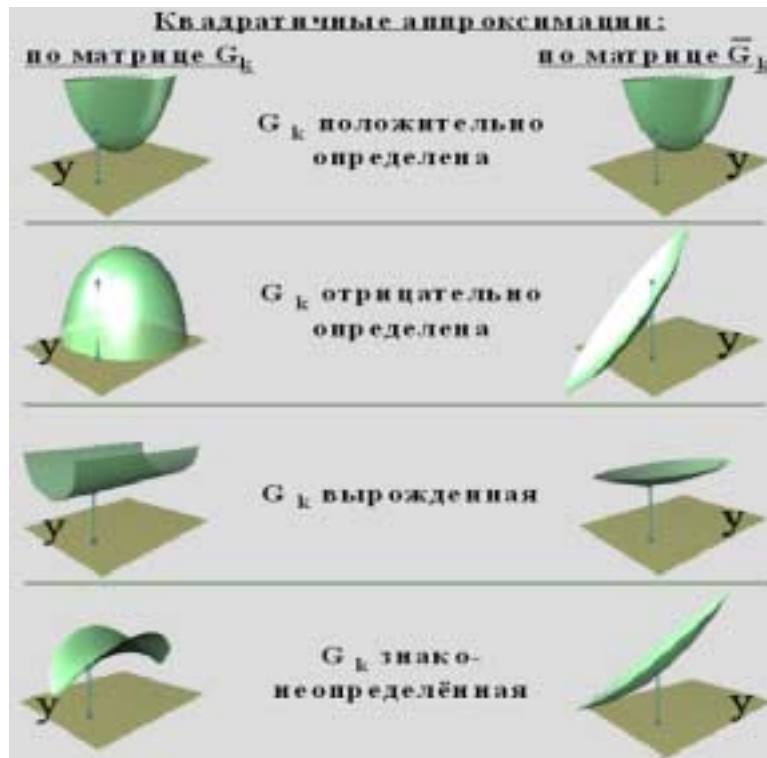


Рис. 4. 11. Влияние модификации матрицы  $G_k$  на вид аппроксимирующей поверхности

4.4.2.3. Эвристические методы коррекции метрики пространства поиска. R-алгоритмы Шора растяжения пространства

Автором этой группы методов является украинский математик Шор Н.З. Предложенные им методы основаны на эвристическом подборе матрицы преобразования пространства. Преобразования сводятся к последовательным растяжениям в специально подбираемых направлениях. Эти методы называют *R – алгоритмами*. Они по структуре близки к квазиньютоновским методам переменной метрики, но основаны не на оценке матрицы вторых производных, а на построении матрицы преобразования  $B_k$ , определяющей возврат от некоторых новых координат  $z$  к исходным:  $y = B_k z$ . Матрица  $B_k$  строится как произведение матриц преобразования  $R_\beta(\xi^e)$ , выполняющих растяжение или сжатие пространства  $z$  в  $\beta$  раз в направлениях  $\xi^e$  ( $e = 1, 2, \dots, k$ ),  $\|\xi^e\| = 1$ .

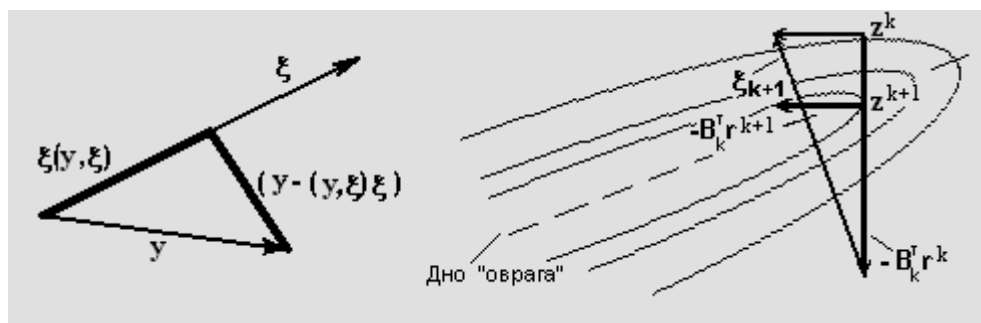


Рис. 4. 12. Стратегия построения матрицы растяжения пространства

Нетрудно увидеть (рис. 4.12), что

$$R_\beta(\xi) y = (y - (y, \xi)\xi) + \beta(y, \xi)\xi = (E + (\beta - 1)\xi\xi^T)y. \tag{4.51}$$

Следовательно,  $R_\beta(\xi) = E + (\beta - 1)\xi\xi^T$ .

Пусть  $r^k = \nabla f(y^k)$  – градиент функции в исходном пространстве, а  $\bar{r}^k$  — это значение градиента, подсчитанного в соответствующей точке  $z$  в новом пространстве переменных. Тогда

$$\bar{r}^k = \nabla_z f(\mathbf{B}_k z^k) = \mathbf{B}_k^T r^k.$$

Для отыскания минимума функции  $f(y)$  будем использовать схему метода наискорейшего градиентного поиска, но так, чтобы на каждом шаге  $k$  градиент вычислялся в новом пространстве, связанном с матрицей преобразования  $\mathbf{B}_k$ . В этом пространстве будем в качестве очередного направления растяжения выбирать вектор  $\xi^{k+1} = \mathbf{B}_k^T(r^k - r^{k-1})$ , определяющий разность двух последовательных измерений вектора градиента в пространстве, связанном с  $\mathbf{B}_k$ . Этот вектор будет близок к нормали для многообразия, на котором лежит дно оврага минимизируемой функции (рис.4.13).

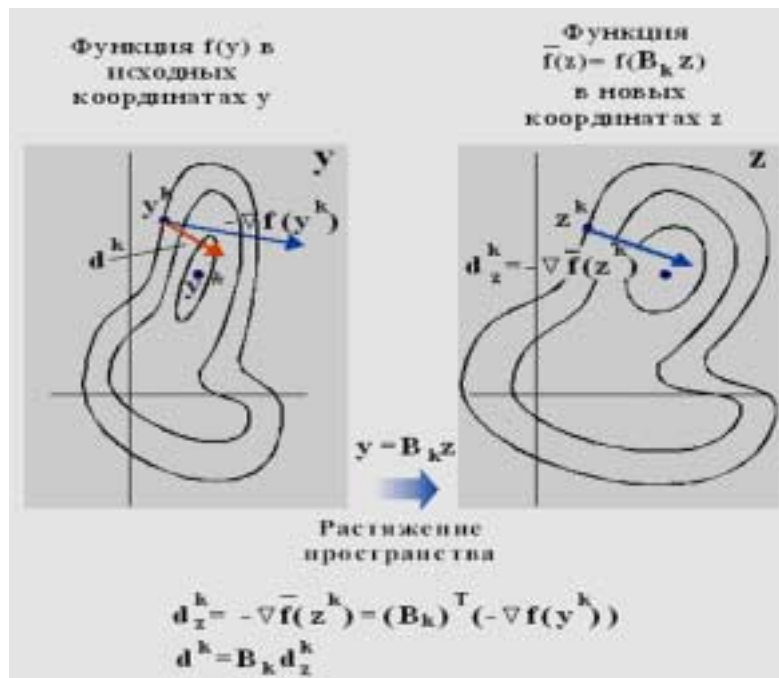


Рис. 4.13. Выбор направления в методе растяжения пространства

В найденном направлении  $\xi^{k+1}$  будем осуществлять дополнительное растяжение пространства в фиксированное число раз (с коэффициентом  $\alpha \approx 2$  или  $3$ ). При возврате к исходным координатам этой операции будет соответствовать сжатие в направлении  $\xi^{k+1}$  с коэффициентом  $\beta = 1/\alpha$ . Следовательно,  $\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k \mathbf{R}_{1/\alpha}(\xi^{k+1})$ .

Мы приходим к следующему АЛГОРИТМУ.

ШАГ 0. Задаются  $\varepsilon > 0$  — параметр критерия останова,  $0 < \mu < \eta \ll 1$ ,  $0 < \sigma \ll 1$  — параметры алгоритма выбора коэффициента одномерного шага,  $y^0$  — начальная точка поиска,  $\alpha$  — коэффициент растяжения пространства.

ШАГ 1. Вычисляются  $f^0 = f(y^0)$ ,  $r^0 = \nabla f(y^0)$ , полагается  $\mathbf{B}_0 = \mathbf{E}$ ,  $k = 0$ .

ШАГ 2. Вычисляется величина коэффициента одномерного шага  $x^k$  методом "аккуратного" одномерного поиска. Определяются

$$\begin{aligned} y^{k+1} &= y^k + x^k \mathbf{B}_k (\mathbf{B}_k)^T (-r^k), \\ f^{k+1} &= f(y^{k+1}), \quad r^{k+1} = \nabla f(y^{k+1}). \end{aligned} \tag{4.52}$$

ШАГ 3. Если  $\|r^{k+1}\| < \varepsilon$ , то выполняется останов метода поиска, иначе переходим к шагу 4.

ШАГ 4. Выбирается направление дополнительного растяжения

$\xi^{k+1} = (\mathbf{B}_k)^T (r^{k+1} - r^k)$  и выполняется его нормировка  $\xi^{k+1} := \xi^{k+1} / \|\xi^{k+1}\|$ .

ШАГ 5. Пересчитывается матрица преобразования с учетом растяжения пространства в  $\alpha$  раз вдоль  $\xi^{k+1}$ :

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k \mathbf{R}_{1/\alpha}(\xi^{k+1}). \quad (4.53)$$

ШАГ 6. Если хотя бы один из элементов  $b_{ij}$  матрицы  $\mathbf{B}_{k+1}$  превысит по модулю некоторое заранее установленное пороговое значение, то все элементы этой матрицы делятся на модуль элемента  $b_{ij}$ . Изменяется  $k=k+1$  и выполняется переход к шагу 2.

#### 4.4.2.4. Сопряженные направления и их свойства

Построение методов *сопряженных направлений* основано на квадратичной модели поведения минимизируемой функции. Предположим, что  $f(y)$  — квадратичная функция (4.15) с положительно определенной матрицей.

**Определение.** Система линейно-независимых векторов  $p^0, p^1, \dots, p^{N-1}$  для симметричной матрицы  $\mathbf{\Gamma}$  называется  $\mathbf{\Gamma}$ -сопряженной, если

$$\forall i=1, \dots, N; j=1, \dots, N; i \neq j: (p^i, \mathbf{\Gamma} p^j) = 0. \quad (4.54)$$

**Определение.** Пусть  $M$  — линейное многообразие,  $\mathbf{\Gamma}$  — симметричная матрица,  $x \neq 0$  и  $x \in M$  и

$$\forall z \in M: (x, \mathbf{\Gamma} z) = 0, \quad (4.55)$$

тогда вектор  $x$  называется  $\mathbf{\Gamma}$ -сопряженным с многообразием  $M$ .

Можно легко доказать следующую лемму.

**Лемма 4.1** Если  $p^0, p^1, \dots, p^{N-1}$  — все отличны от нуля,  $\mathbf{\Gamma}$  — не только симметрична, но еще и положительно определена, тогда из (4.54) следует линейная независимость векторов  $p^0, p^1, \dots, p^{N-1}$ .

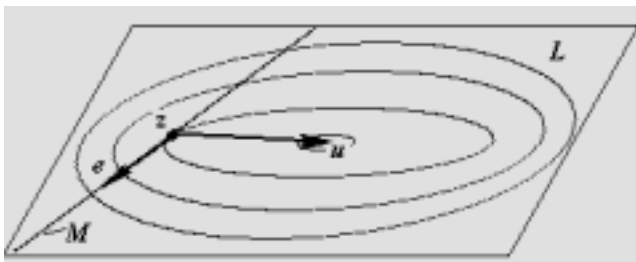


**Замечание.** В условиях леммы сопряженность означает ортогональность в смысле некоторого нового скалярного произведения.

Для построения методов, использующих сопряженные направления, чрезвычайно важным является свойство, определяемое следующей леммой.

**Лемма 4.2** Пусть  $f(y)$  — квадратичная функция вида (4.15) с симметричной положительно определенной матрицей  $\mathbf{\Gamma}$ , а  $M$  и  $L$  — линейные многообразия, причем  $M \subset L$ , тогда, если  $z$  — точка минимума  $f(y)$  на  $M$ , а  $u$  — точка минимума  $f(y)$  на  $L$ , то вектор  $(u-z)$  будет  $\mathbf{\Gamma}$ -сопряжен с многообразием  $M$ .

Это утверждение иллюстрируется на рис.4.14. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО проведем следующим образом. Рассмотрим произвольный вектор  $e \in M$ . Поскольку  $\nabla f(y) = \mathbf{\Gamma}y + c$ , а матрица  $\mathbf{\Gamma}$  симметрична, то  $(u-z, \mathbf{\Gamma}e) = (\mathbf{\Gamma}u - \mathbf{\Gamma}z, e) = (\nabla f(u) - \nabla f(z), e)$ . Последнее скалярное произведение равно нулю, т.к. по теореме Лагранжа в точках минимума  $u$  и  $z$



на линейных многообразиях  $L$  и  $M$  градиенты функции ортогональны этим многообразиям, а поскольку  $e \in M \subset L$ , то  $\forall e \in M: (\nabla f(u), e) = 0, (\nabla f(z), e) = 0$ . Таким образом, для  $x = u - z$  выполнено (4.55), следовательно  $(u-z)$  будет  $\mathbf{\Gamma}$ -сопряжен с многообразием  $M$ .

Рис. 4.14. Иллюстрация к лемме 4.2

Построим теперь вычислительные процедуры поиска минимума квадратичной функции  $f(y)$ , использующие  $\Gamma$ -сопряженные направления.

**Определение.** Поисковые процедуры вида (4.56), (4.57) называются методами сопряженных направлений.

$$y^{k+1} = y^k + x^k p^k \quad (4.56)$$

$$f(y^k + x^k p^k) = \min\{f(y^k + x p^k): -\infty < x < +\infty\}. \quad (4.57)$$

Применение сопряженных направлений при построении методов оптимизации связано с замечательным свойством этих направлений приводить в минимум строго выпуклой квадратичной функции не более чем за  $N$  шагов.

**Теорема 4.6.** Пусть  $f(y)$  — квадратичная функция вида (4.15) с симметричной положительно определенной матрицей  $\Gamma$ , а  $p^0, p^1, \dots, p^{N-1}$  — система  $\Gamma$ -сопряженных векторов. Тогда для любой начальной точки  $y^0$  процедура поиска вида (4.56), (4.57) приводит в минимум квадратичной функции с симметричной положительно определенной матрицей  $\Gamma$  ровно за  $N$  шагов, т.е.  $y^N = y^*$ ,  $f(y^N) = f(y^*)$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО [8]. При поиске вдоль направления  $p^0$  метод определит точку  $y^1$  — минимум на одномерном многообразии  $L(p^0)$ , натянутом на  $p^0$ . На втором шаге при поиске вдоль направления  $p^1$  метод определит точку  $y^2$ . По построению вектор  $y^2 - y^1$  будет сопряжен с  $L(p^0)$ , т.е. ортогонален к  $p^0$  в смысле нового скалярного произведения. Если теперь рассмотреть линейное многообразие  $L(p^0, p^1)$ , натянутое на  $p^0, p^1$  и предположить, что минимум функции  $f(y)$  достигается на нем в некоторой точке  $\bar{y}^2 \neq y^2$ , то возникнет противоречие. Действительно, по лемме 4.2 мы получим еще один вектор  $\bar{y}^2 - y^1$ , не принадлежащий прямой, проходящей через  $y^2$  и  $y^1$ , лежащий в том же двумерном многообразии  $L(p^0, p^1)$  и ортогональный к  $p^0$ . Значит  $\bar{y}^2 = y^2$  и на втором шаге метод сопряженных направлений найдет минимум на двумерном многообразии  $L(p^0, p^1)$ .

Продолжая аналогичные рассуждения можно придти к выводу, что за  $N$  шагов метод найдет минимум на линейном многообразии  $L(p^0, \dots, p^{N-1})$  размерности  $N$ , т.е. во всем пространстве (рис.4.15).

Для того, чтобы можно было воспользоваться методом сопряженных направлений необходим алгоритм вычисления  $\Gamma$ -сопряженных векторов  $p^0, \dots, p^{N-1}$ . Проблема, которая на первый взгляд кажется непреодолимой, заключается в том, чтобы построить  $\Gamma$ -сопряженные векторы не зная самой матрицы  $\Gamma$ . Однако, как будет показано в следующем разделе, эта задача может быть решена с использованием результатов испытаний функции  $f(y)$ .

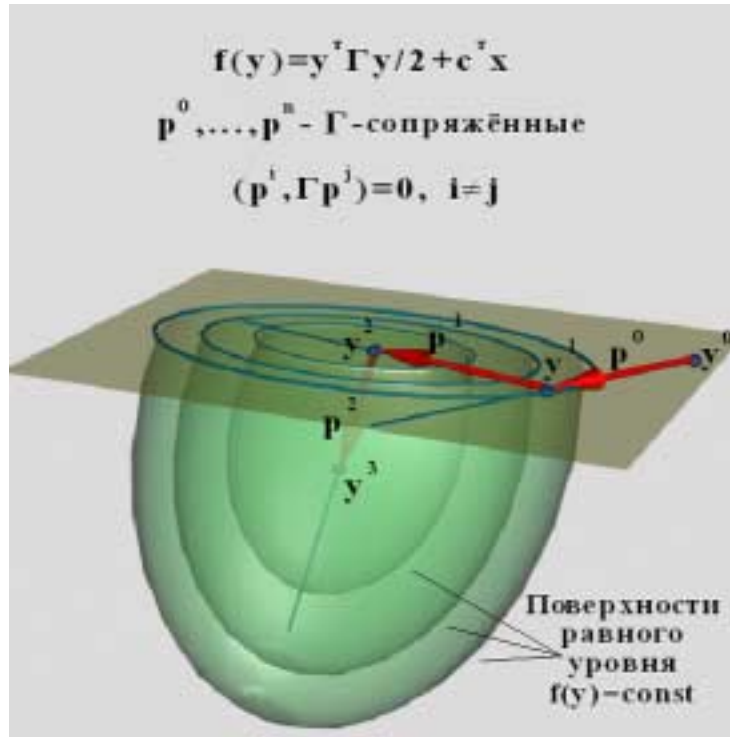


Рис. 4.15. Замечательное свойство сопряженных направлений

#### 4.4.2.5. Метод сопряженных градиентов Флетчера-Ривса

Рассмотрим класс методов сопряженных направлений первого порядка, когда в результате испытания функции  $f$  в точке  $y^k$  определяются значения  $f(y^k)$  и  $\nabla f(y^k)$ . Для построения метода сопряженных направлений необходимо по результатам испытаний построить систему  $\Gamma$ -сопряженных векторов  $p^0, \dots, p^{N-1}$  при условии, что сама матрица  $\Gamma$  является неизвестной.

Построим один из возможных методов такого типа – *метод сопряженных градиентов* Флетчера-Ривса (1964 год) [8]. Выберем

$$p^0 = -\nabla f^0, \quad \nabla f^0 = \nabla f(y^0). \quad (4.58)$$

Пусть векторы  $p^0, \dots, p^{k-1}$  построены. Положим

$$p^k = -\nabla f^k + \beta^{k-1} p^{k-1}, \quad \nabla f^k = \nabla f(y^k), \quad (4.59)$$

где  $y^k$  определяется условиями (4.56), (4.57). Подберем  $\beta^{k-1}$  из условия

$$(p^k, \Gamma p^{k-1}) = 0.$$

Получим

$$\beta^{k-1} = ((\nabla f^k)^T \Gamma p^{k-1}) / ((p^{k-1})^T \Gamma p^{k-1}) \quad (4.60)$$

Значение  $x^k$ , удовлетворяющее (4.57) для функции  $f$ , можно получить из условия  $(\nabla f(y^k + x^k p^k), p^k) = 0$ , если его переписать в виде  $((\nabla f^k)^T p^k) + ((p^k)^T \Gamma p^k) x^k = 0$ . Отсюда можно показать, что  $x^k$  будет иметь вид

$$x^k = -((p^k)^T \nabla f^k) / ((p^k)^T \Gamma p^k) = -((\nabla f^k)^T \nabla f^k) / ((\nabla f^k)^T \Gamma p^k). \quad (4.61)$$

Для этого в числителе и знаменателе первой дроби необходимо выразить  $p^k$  из (4.59) и воспользоваться тем, что  $((p^{k-1})^T \nabla f^k) = 0$  по теореме Лагранжа, и  $(p^{k-1}, \Gamma p^k) = 0$  по построению.

Кроме того, умножая (4.56) на  $\Gamma$ , получим дополнительное соотношение

$$\nabla f^{k+1} = \nabla f^k + x^k \Gamma p^k. \quad (4.62)$$

**Лемма 4.3.** Последовательность векторов градиентов  $\nabla f^0, \nabla f^1, \dots, \nabla f^{N-1}$  образует взаимно ортогональную систему, а направления  $p^0, p^1, \dots, p^{N-1}$   $\Gamma$ -сопряжены.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пользуясь соотношением (4.59), (4.62), (4.61), лемму можно доказать методом математической индукции [8].

По построению,  $p^1$  сопряжен с  $p^0$ . Кроме того,  $p^0 = -\nabla f^0$ , а по теореме Лагранжа  $\nabla f^1$  ортогонально  $p^0$ , следовательно,  $\nabla f^1$  ортогонально  $\nabla f^0$ . Таким образом, для двух векторов лемма верна.

Предположим, что при  $k < (N-1)$  векторы в системе  $p^0, p^1, \dots, p^k$  взаимно сопряжены, а векторы  $\nabla f^0, \nabla f^1, \dots, \nabla f^k$  — взаимно ортогональны. Покажем, что эти свойства сохраняются у данных систем векторов при включении в них  $p^{k+1}$  и  $\nabla f^{k+1}$ .

Рассмотрим значения  $i < k$  тогда

$$((\nabla f^{k+1})^T \nabla f^i) = ((\nabla f^k + x^k \Gamma p^k)^T \nabla f^i) = x^k (\Gamma p^k)^T (-p^i + \beta^{i-1} p^{i-1}) = 0.$$

Равенство нулю получается за счет сопряженности  $p^k$  с векторами  $p^i$  и  $p^{i-1}$ .

Рассмотрим теперь  $i=k$ . Аналогично предыдущему  $((\nabla f^{k+1})^T \nabla f^k) = ((\nabla f^k + x^k \Gamma p^k)^T \nabla f^k) = 0$ . Равенство нулю можно получить, используя выражение из (4.61) для величины  $x^k$ .

Осталось доказать сопряженность системы векторов  $p^i$  для  $i=1, \dots, k+1$ . Сопряженность двух последних векторов следует из способа их построения. Осталось рассмотреть только  $i < k$ .

$$((p^{k+1})^T \Gamma p^i) = (-\nabla f^{k+1} + \beta^k p^k)^T \Gamma p^i = (-\nabla f^{k+1})^T \Gamma p^i = (-\nabla f^{k+1})^T (\nabla f^{i+1} - \nabla f^i) / x^i = 0.$$

Последнее равенство нулю вытекает из уже доказанной ортогональности градиентов.

Метод сопряженных направлений для положительно определенной квадратичной формы  $f(y)$  построен. Однако, в формулу (4.60) для вычисления коэффициента  $\beta^{k-1}$  вошла неизвестная матрица  $\Gamma$ . Это не является существенным, поскольку формула (4.60) может быть переписана в другом виде. Чтобы показать это, выразим  $\Gamma p^{k-1}$  в числителе (4.60) из (4.62), а  $p^{k-1}$  в знаменателе (4.60) из (4.59). Тогда

$$\begin{aligned} \beta^{k-1} &= (\nabla f^k, (\nabla f^k - \nabla f^{k-1})) / (x^{k-1} (-\nabla f^{k-1} + \beta^{k-2} p^{k-2})^T \Gamma p^{k-1}) = \\ &= (\nabla f^k, \nabla f^k) / (-\nabla f^{k-1})^T x^{k-1} \Gamma p^{k-1}. \end{aligned}$$

Выражая  $x^{k-1} \Gamma p^{k-1}$  из (4.62) и пользуясь ортогональностью  $\nabla f^k$  и  $\nabla f^{k-1}$ , окончательно получим

$$\beta_{k-1} = \|\nabla f^k\|^2 / \|\nabla f^{k-1}\|^2 \tag{4.63}$$

Построенный метод определяет минимум любой квадратичной функции с положительно определенной матрицей Гессе за  $N$  шагов. Заметим, что для определения  $x^k$  должен быть использован "аккуратный" одномерный поиск (т.е. параметр  $\eta$  одномерного поиска должен быть выбран близким к нулю).

Применение метода сопряженных градиентов к достаточно произвольной функции  $f(y)$ , естественно, не может обеспечить конечность процедуры поиска минимума. После выполнения серии из  $N$  шагов метод, как правило, повторно запускается из последней найденной точки. Соответствующий алгоритм может быть записан следующим образом.

АЛГОРИТМ метода сопряженных градиентов Флетчера–Ривса.

ШАГ 0. Задаются  $\varepsilon > 0$  — параметр останова,  $0 < \mu < \eta < 1$ ,  $0 < \sigma < 1$  — параметры одномерного поиска,  $y^0$  — начальная точка.

ШАГ 1. Вычисляются  $f^0 = f(y^0)$ ,  $\nabla f^0 = \nabla f(y^0)$ ,  $p^0 = -\nabla f^0$ ,  $k = 0$ .

ШАГ 2. Если  $(\nabla f^k, p^k) \geq 0$ , то направление  $p^k$  не является направлением локального убывания функции, поэтому заменяем  $p^k = -\nabla f^k$  и полагаем  $k = 0$ . Иначе переходим на шаг 3.



ШАГ 3. Вычисляется величина коэффициента одномерного шага  $x^k$  методом "аккуратного" одномерного поиска. Определяются

$$y^{k+1} = y^k + x^k p^k$$

$$f^{k+1} = f(x^{k+1}), \nabla f^{k+1} = \nabla f(x^{k+1}).$$

Полагается  $k = k + 1$ .

ШАГ 4. Проверяется критерий останова: при  $\|\nabla f^k\| \leq \varepsilon$  поиск прекращается и  $y^k$  выдается как оценка решения; при  $\|\nabla f^k\| > \varepsilon$  переходим к шагу 5.

ШАГ 5. Если  $k = N$ , полагается  $y^0 = y^N$  и происходит возврат на шаг 1.

Если  $k < N$ , то переходим на шаг 6.

ШАГ 6. Вычисляем  $\beta^{k-1}$  по формуле (4.63) и  $p^k$  по формуле (4.59). Переходим на шаг 2.

Что известно о скорости сходимости построенного метода? Можно показать [1], что для функций из класса  $\Phi_{m,M}$ , описанного в (4.22), метод Флетчера-Ривса сходится со сверхлинейной скоростью.



**Замечание.** Метод чувствителен к "аккуратности" одномерного поиска и нарушению положительной определенности матрицы вторых производных минимизируемой функции. В указанном случае метод может построить направление  $p^k$ , не являющееся направлением локального убывания функции. В этом случае  $p^k$  заменяется на антиградиентное направление. Учет этой ситуации происходит на шаге 2 описания алгоритма.

#### 4.5. Некоторые методы прямого поиска для негладких задач

В отличие от рассмотренных ранее, методы прямого поиска не используют каких-либо предположений о гладкости минимизируемой функции. Она не только может не иметь производных, но может содержать разрывы. При поиске минимума эти методы измеряют только значения функции. Поскольку гладкости нет, то при выборе направлений смещения методы не могут использовать аппроксимаций функции по результатам ее измерения. Правила размещения измерений в них основываются на некоторых эвристических логических схемах.

Наиболее популярными в практике расчетов являются следующие методы прямого поиска: Хука-Дживса [3], метод деформируемого многогранника Нелдера-Мида [12] и его модификация – комплексный метод Бокса [13]. Нужно заметить, что последний метод применим только к выпуклым функциям. Поэтому здесь он не рассматривается. Ниже будут описаны первые два метода.



**Замечание.** Несмотря на кажущуюся простоту и теоретическую необоснованность методов прямого поиска, они хорошо зарекомендовали себя в реальных расчетах.

Это можно объяснить следующим образом. Многие методы гладкой оптимизации чрезвычайно чувствительны к наличию вычислительных ошибок в значениях функций, превращающих теоретически гладкую функцию в фактически негладкую. За счет этого в реальных расчетах они зачастую утрачивают те положительные свойства, которые для них обещает теория. Использование методов прямого поиска позволяет в этих условиях добиться лучших результатов.

### 4.5.1. Метод Нелдера–Мида

В методе Нелдера–Мида вокруг начальной точки поиска в пространстве переменных размещается начальный симплекс – конфигурация из  $(n+1)$ -й точки (в пространстве  $R^2$  они образуют вершины треугольника, а в  $R^3$  – вершины пирамиды). Затем происходит перемещение симплекса путем отражения вершины с наибольшим значением функции относительно центра тяжести противоположащего основания симплекса. При этом используются специальные операции, связанные с растяжением симплекса в направлении убывания функции и операции сжатия при неудачных пробных перемещениях. Дадим формальное описание алгоритма.

АЛГОРИТМ метода Нелдера–Мида.

ШАГ 0. Задаем векторы  $h^1, h^2, \dots, h^{N+1}$ , определяющие положение вершин стандартного симплекса с центром в начале координат, и числа  $S_1, S_2, \dots, S_{N+1}$ , определяющие размеры начального симплекса;  $\varepsilon_y > 0, \varepsilon_f > 0$  — параметры останова;  $a, b, c, d$  – параметры отражения, растяжения, сжатия к основанию, сжатия к лучшей вершине ( $a > 0, b > 1, 0 < c < 1, 0 < d < 1$ ). Задаем также начальную точку  $y^0$ .

ШАГ 1. Формируем начальный симплекс с координатами вершин  $y^1, \dots, y^{N+1}$

$$y^j = y^0 + S_j h^j; \quad (j = 1, \dots, N+1).$$

Вычисляем  $f^j = f(y^j)$ . (При этом в  $y^0$  вычисление не выполняется).

ШАГ 2. Определяем номера худшей и лучшей вершины

$$f^h = \max\{f_j : j=1, \dots, N+1\}; \quad f^e = \min\{f_j : j=1, \dots, N+1\}.$$

ШАГ 3. Определяем центр тяжести основания

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \left( \sum_{j=1, j \neq h}^{N+1} y^j \right)$$

ШАГ 4. Проверяем критерий останова. Вычисляем

$$\bar{y} = \frac{1}{N+1} \left( \sum_{j=1}^{N+1} y^j \right), \quad \bar{f} = \frac{1}{N+1} \left( \sum_{j=1}^{N+1} f^j \right), \quad \delta_y = \frac{1}{N+1} \left( \sum_{j=1}^{N+1} (y^j - \bar{y})^2 \right)^{1/2},$$

$$\delta_f = \frac{1}{N+1} \left( \sum_{j=1}^{N+1} (f^j - \bar{f})^2 \right)^{1/2}.$$

Если  $\delta_y < \varepsilon_y$  и  $\delta_f < \varepsilon_f$ , то выполняем останов, выдаем оценку решения  $y^e, f^e$ . Если условия останова не выполнены, переходим на шаг 5.

ШАГ 5. Выполняем отражение с коэффициентом  $a > 0$

$$y^* = \bar{y} + a (\bar{y} - y^h)$$

и вычисляем  $f^* = f(y^*)$ .

ШАГ 6. Если  $f^* \leq f^e$ , то выполняем растяжение

$$y^{**} = \bar{y} + b (y^* - \bar{y}), \quad b > 1, \quad f^{**} = f(y^{**});$$

при  $f^{**} \leq f^*$  заменяем  $y^h := y^{**}, f^h := f^{**}$  и переходим на шаг 2;

при  $f^{**} > f^*$  заменяем  $y^h := y^*, f^h := f^*$  и переходим на шаг 2;

если  $f^* > f^e$ , то переходим на шаг 7.

ШАГ 7. Если для любого  $j=1, \dots, N+1$ , но  $j \neq e$ , выполняется  $f^e < f^* < f^j$ , то заменяем  $y^h := y^*, f^h := f^*$  и переходим на шаг 2, иначе — на шаг 8.

ШАГ 8. Если  $f^* < f^h$ , то выполняем сжатие к основанию. Для этого вычисляем

$$y^\wedge = \bar{y} + c (y^h - \bar{y}), \quad f^\wedge = f(y^\wedge), \quad 0 < c < 1,$$

заменяем  $y^h := \hat{y}$ ,  $f^h := \hat{f}$  и переходим на шаг 2.

Если  $f^* \geq f^h$ , то выполняем сжатие к лучшей вершине:

$$y^j := y^e + d(y^j - y^e), \quad 0 < d < 1 \quad f^j := f(y^j) \quad (j = 1, \dots, N+1), \quad j \neq e$$

Переходим на шаг 2.

Авторы метода рекомендовали следующие значения параметров  $a = 1$ ;  $b = 1,5$ ;  $c = 0,5$ ;  $d = 0,5$  (кстати, метод чувствителен к их изменениям).

Преобразования симплекса в пространстве  $R^2$  при операциях отражения, растяжения и сжатия показаны на рис.4.16.

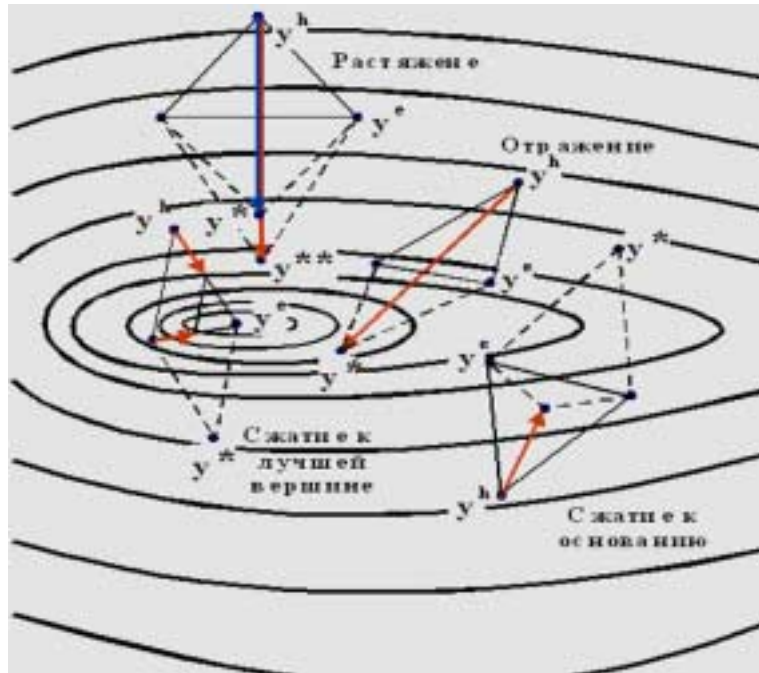


Рис. 4.16. Типовые операции с симплексом в методе Нелдера–Мида

Метод Нелдера–Мида имеет тот недостаток, что для сильно овражных функций может происходить *вырождение симплекса*, особенно при числе переменных  $N > 2$ .

Термин «вырождение» означает, что все точки симплекса с некоторого шага размещаются в многообразии размерности меньшей, чем  $N$ , или же попадают в малую его окрестность, величина которой много меньше расстояния между точками симплекса.

#### 4.5.2. Метод Хука-Дживса

В этом разделе приводится краткое описание метода Хука-Дживса, который был специально разработан именно для задач с оврагами [3]. В этом методе поиск минимума на каждом шаге происходит в результате смещения вдоль некоторого направления – образца (шаг по образцу), которое строится, а затем корректируется в результате специальных пробных по координатным перемещений, называемых построением конфигурации.

Построение конфигурации из точки  $z$  осуществляет отображение  $z$  в точку  $\bar{y} = F(z)$ , где  $F$  – оператор построения конфигурации. Он устроен так, что направление  $(\bar{y} - z)$  является направлением убывания функции  $f$  в окрестности  $z$ . Для описания оператора  $F$  введем следующие обозначения:  $e^i$  –  $i$ -й координатный орт,  $h$  – параметр, определяющий величину координатного перемещения. Тогда переход от  $z$  к  $\bar{y}$  осуществляется согласно следующему алгоритму.

АЛГОРИТМ ПОСТРОЕНИЯ КОНФИГУРАЦИИ  $\bar{y}=F(z)$ :

ШАГ 0. Полагаем  $\bar{y} = z$ .

ШАГ 1. Для  $i$  от 1 до  $N$  выполнить:

если  $f(\bar{y}+he^i) < f(\bar{y})$ , то полагаем  $\bar{y} := \bar{y} + he^i$ , иначе, если  $f(\bar{y} - he^i) < f(\bar{y})$ , то  $\bar{y} := \bar{y} - he^i$ .

На рис.4.17 показаны примеры построения конфигураций для нескольких случаев положения точки  $z$ . На рисунке пунктирными линиями отмечены пробные перемещения, не приведшие к уменьшению значения функции. Приведем пошаговое описание метода.

АЛГОРИТМ метода Хука-Дживса:

ШАГ 0. Задаются начальная точка  $y^0$ , параметр останова  $\varepsilon > 0$  параметр построения конфигурации  $h \gg \varepsilon$ , а также параметр увеличения шага  $\alpha=2$ .

ШАГ 1. Полагаем  $z^1 = y^0, k = 0$ .

ШАГ 2. Строим конфигурацию  $y^{k+1} = F(z^{k+1})$ .

ШАГ 3. Если  $f(y^{k+1}) < f(y^k)$ , то  $k := k+1$  и переходим на шаг 4, иначе, если  $h \leq \varepsilon$ , выполняем ОСТАНОВ поиска, если  $h > \varepsilon$ , то дальнейшие действия зависят от того, как была построена точка  $y^{k+1}$ : строилась ли конфигурация с использованием шага по образцу (в этом случае  $k > 0$ ) или она строилась от точки  $y^0$  (в этом случае  $k = 0$ ). Если окажется, что  $k=0$ , то сокращаем  $h$  вдвое ( $h := h/2$ ) и переходим на шаг 1, если же  $k > 0$ , то полагаем  $y^0 = y^k, k=0$  и также переходим на шаг 1.

ШАГ 4. Выполняем шаг по образцу  $z^{k+1} = y^k + \alpha(y^k - y^{k-1})$  и переходим на шаг 2.

Одна из возможных ситуаций, связанных с использованием этого метода, показана на рис.4.17.

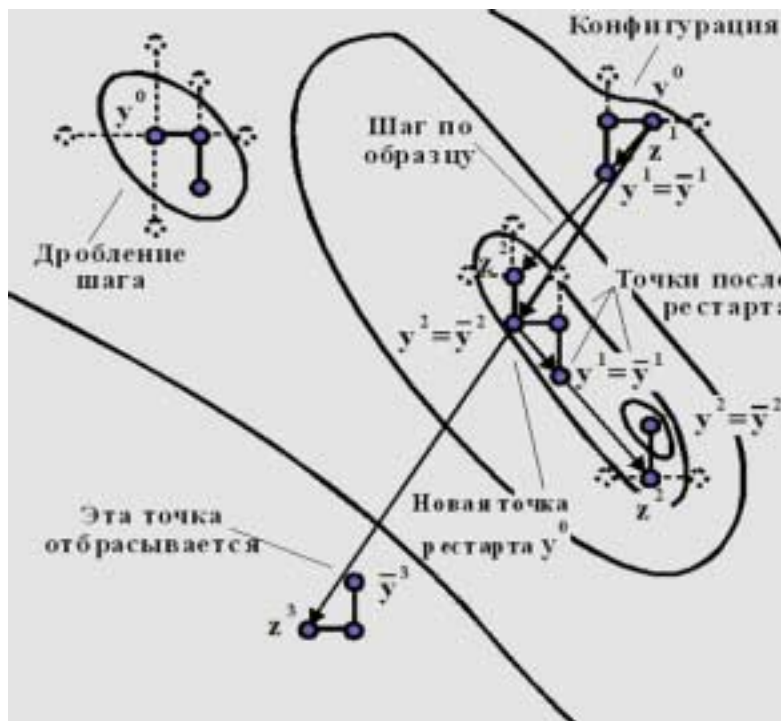


Рис. 4.17. Перемещения точки в методе Хука-Дживса

Можно следующим образом пояснить смысл действий, выполняемых на шагах 2,3,4. Шаг 4 введен для того, чтобы метод обладал способностью быстрого увеличения

величины смещения на одной итерации в том случае, когда точка  $y^k$  находится достаточно далеко от решения. При этом, прежде чем сделать  $z^{k+1}$  текущей точкой итерации, из точки  $z^{k+1}$  выполняется построение конфигурации.

За счет этого, в случае получения точки с  $f(y^{k+1}) < f(y^k)$ , следующий шаг по образцу в общем случае будет выполняться в измененном, по отношению к предыдущему, направлении, что позволяет методу адаптироваться к изменению рельефа функции.

Наконец, при получении значения  $f(y^{k+1}) \geq f(y^k)$  на шаге 3 совершается попытка запустить метод сначала из точки  $y^0 = y^k$  – лучшей найденной точки. При этом, если такой попытки еще не было, то параметр  $h$  не изменяется, а если она уже была,  $h$  предварительно сокращается вдвое.

#### **4.6. Особенности применения методов локального поиска при двусторонних ограничениях на переменные**

В предыдущих разделах были подробно рассмотрены несколько групп методов поиска локально-оптимальных решений в задачах без ограничений. В действительности, ограничения почти всегда присутствуют. В первую очередь это относится к ограничениям, определяющим диапазоны изменения переменных. Если задача имеет естественнонаучную или техническую природу, то ограничения на переменные возникают из их «физического» смысла, не позволяя переменным принимать сколь угодно большие или сколь угодно малые значения.

Кроме двусторонних ограничений на переменные вида (4.3) в задачах могут присутствовать функциональные ограничения общего вида (4.2). В дальнейшем мы будем разделять два вида этих ограничений.

Общие ограничения, определяемые через функции ограничений, проще всего учесть с помощью одного из общих методов учета ограничений (такого, например, как метод внутренних [14] и внешних штрафов [6, 10], метод модифицированных функций Лагранжа [15] и другие [6, 16]), сводящего задачу с функциональными ограничениями к серии задач без функциональных ограничений. Такой подход позволяет применить к решению задач с ограничениями методы, ранее разработанные для задач без ограничений.

*Двусторонние ограничения на переменные также можно было бы учесть на основе такой же методики. Однако их вид настолько прост, с одной стороны, а, с другой стороны, специфичен, что наиболее правильным решением является использование специальных методов для их учета. Это неизбежно приводит к пересмотру ранее рассмотренных алгоритмов и созданию их модификаций для задач с двусторонними ограничениями. Заметим, что двусторонние ограничения являются частным случаем линейных ограничений, специальные алгоритмы учета которых рассмотрены, например, в [2].*

В зависимости от типа метода его модификация выполняется по-разному. Общие принципы построения модифицированных методов можно предложить для методов гладкой оптимизации, а для методов прямого поиска приходится использовать в каждом случае свои уникальные подходы.

##### **4.6.1. Особенности учета двусторонних ограничений на переменные в методах гладкой оптимизации**

Характерными чертами многих методов гладкой оптимизации (для задач без ограничений) являются:

- выполнение рестартов из последней достигнутой точки через определенное число шагов, которое зависит от размерности пространства поиска (например, методы квазиньютоновского типа, метод сопряженных градиентов);
- выполнение одномерного поиска в выбранном направлении или же перемещения в выбранном направлении с заранее заданным коэффициентом величины шага.

Наличие двусторонних ограничений будет оказывать влияние на реализацию каждого из этих двух процессов. А именно, процессы одномерных перемещений могут выводить на фрагменты границы области  $D$  из (4.3), определяемой ограничениями на переменные. После выхода на границу поиск должен продолжаться на линейном многообразии меньшей размерности. Одномерные перемещения в этом многообразии могут выводить процесс поиска на ограничения по другим переменным, что будет приводить к дальнейшему понижению размерности многообразия поиска. Кроме того, поиск на возникающих многообразиях, кроме контроля пересечения границ области, будет иметь также ту особенность, что методы, выполняющие рестарты, должны будут производить их чаще, чем при поиске во всем пространстве. Это связано с тем, что периодичность рестартов определяется размерностью многообразия, на котором выполняется поиск. Еще одним важным моментом является правило возврата процесса поиска с текущего многообразия на многообразие (или в пространство) более высокой размерности в том случае, когда это приводит к уменьшению значения функции.

Дадим более точное описание правил выполнения всех следующих операций:

- учет выходов на новые фрагменты границы при одномерных перемещениях;
- организация поиска на многообразиях размерности  $n < N$ ;
- определение моментов возврата с многообразий текущей размерности  $n$  в многообразия большей размерности.

Для описания текущего многообразия поиска введем два множества  $J_a$  и  $J_b$ . В последующем они будут содержать наборы номеров переменных, по которым текущая точка поиска выведена на нижние или верхние граничные значения. Если хотя бы одно из этих множеств не пусто, то их совокупность идентифицирует линейное многообразие размерности  $n < N$ , в котором происходит поиск. Это многообразие соответствует фиксации части компонент  $y_i$  вектора  $y$  на граничных значениях. Перед началом поиска множества  $J_a$  и  $J_b$  должны быть пустыми.

Пусть в результате очередного шага, выполненного в направлении  $d^{k-1}$ , процесс поиска вышел на границу области  $D$  в точке  $y^k$ . Пусть этот участок границы имеет размерность  $n < N$ . Для текущей точки  $y^k$  и направления  $d^{k-1}$  скорректируем множества  $J_a$  и  $J_b$ , включив в них номера переменных по которым процесс поиска вышел, соответственно, на верхние или нижние границы их изменения. Формально определим правило коррекции следующим образом.

$$J_a := J_a \cup \{i: 1 \leq i \leq N; y_i^k = a_i; d_i^{k-1} < 0\} \quad (4.64)$$

$$J_b = J_b \cup \{i: 1 \leq i \leq N; y_i^k = b_i; d_i^{k-1} > 0\} \quad (4.65)$$

Первое изменение множеств  $J_a$  и  $J_b$  соответствует переходу процесса поиска из пространства размерности  $N$  на линейное многообразие меньшей размерности за счет фиксации дополнительных компонент  $y_i$  вектора  $y$ . Введем базис в пространстве незафиксированных компонент. Для этого из набора единичных координатных ортов  $e^1, \dots, e^N$  выделим те векторы  $e^j$  для которых  $j \notin (J_a \cup J_b)$ . Составим из этих векторов матрицу  $Z_k$ , используя их как вектор-столбцы

$$Z_k = (e^{j^1}, \dots, e^{j^n}).$$

Введем вектор переменных  $u$  для возникшего линейного подпространства  $R^n$ . Переход процесса поиска на линейное многообразие в исходном пространстве  $R^N$  равносильен замене переменных  $y = y^k + Z_k u$  с переходом к поиску в пространстве переменных  $u$ .

Вычисляя в старых переменных значения  $\nabla f^k$  и  $\Gamma_k$  легко пересчитать их в соответствующие значения в новых переменных, используя известные соотношения

$$\nabla_u f^k = (Z_k)^T \nabla f^k; \quad \Gamma_{uk} = (Z_k)^T \Gamma_k Z_k$$

Нужно обратить внимание на то, что в пространстве новых переменных методы гладкой оптимизации должны быть запущены заново из точки  $u^0=0$ , соответствующей текущей точке поиска  $y^k$ . Заметим также, что если используемый метод включает рестарты, то при поиске минимума по переменным  $u$  эти рестарты необходимо выполнять через число шагов, согласованное с размерностью  $n$  многообразия поиска. Например, для квазиньютоновских методов и метода сопряженных градиентов рестарты следует выполнять через  $n$  шагов.

Рассмотрим процесс поиска на многообразии. Выбор очередного направления поиска в переменных  $u$  происходит по обычным правилам, характерным для выбранного метода. Однако, при реализации этих правил необходимо все вектора и матрицы использовать для размерности  $n$  нового пространства, т.е., в частности, вместо значений  $\nabla f^k$  и  $\Gamma_k$  необходимо использовать  $\nabla_u f^k$  и  $\Gamma_{uk}$ .

Работа методов в пространстве переменных  $u$  имеет дополнительную специфику, связанную с тем, что в действительности метод решает исходную  $N$ -мерную задачу с двусторонними ограничениями, наличие которых влияет на правила выполнения шага методом. Допустим, метод находится в точке  $y^k$  и, согласно правилам применяемого алгоритма, в пространстве переменных  $u$  выбрано направление поиска  $d^k_u$ . Тогда выполняется пересчет направления  $d^k_u$  в направление  $d^k$  в исходном пространстве переменных:

$$d^k = Z_k d^k_u.$$

После выбора направления поиска происходит перемещение в этом направлении. Смещение выполняется в многообразии, соответствующем множествам  $J_a$  и  $J_b$ . В зависимости от типа метода это перемещение выполняется либо с фиксированным коэффициентом одномерного шага  $x=const$ , либо за счет поиска минимума вдоль выбранного направления. В обоих случаях учитываются ограничения на переменные.

Процедура одномерного поиска, приведенная в разделе 4.2.4, учитывает их автоматически. Если при ее выполнении точка  $y^{k+1} = y^k + x^k d^k$ , переместившись вдоль многообразия, выходит на границу области по новым переменным, то их номера следует добавить в множества  $J_a$  или  $J_b$ , соответственно, повторно применив правила их коррекции (4.64), (4.65) для  $k=k+1$ .

Если же перемещение точки должно быть выполнено с фиксированным коэффициентом длины шага (как это происходит, например, в методе Ньютона), то, в случае выхода точки за пределы изменения переменных, коэффициент  $x$  длины шага уменьшается таким образом, чтобы точка  $y^{k+1} = y^k + x^k d^k$  оказалась на границе области  $D$ . Далее выполняется описанная выше коррекция множеств  $J_a$  и  $J_b$ .

Осталось рассмотреть случай, когда одномерное перемещение в пространстве переменных  $u$  не привело к выходу точки  $y^{k+1}$  на новые фрагменты границы. В этом случае необходимо проверить условия возврата к многообразию или пространству более высокой размерности за счет исключения из множеств  $J_a$  или  $J_b$  номеров части переменных. Правила исключения следующие:

$$J_a := J_a \setminus \{i \in J_a: \partial f(y^k)/\partial y_i < 0\} \quad (4.66)$$

$$J_b := J_b \setminus \{i \in J_b: \partial f(y^k)/\partial y_i > 0\}. \quad (4.67)$$

Условия исключения переменной в (4.66), (4.67) определяются тем, что в текущей точке поиска становится положительной проекция антиградиента функции  $f$  на внутреннюю (по отношению к области  $D$ ) нормаль к гиперплоскости  $y_i = a_i$ . При выполнении этого условия существует направление смещения с этой гиперплоскости внутрь области, при котором функция  $f$  будет локально убывать. Таким образом, если в результате коррекции (4.66), (4.67) хотя бы одно из множеств  $J_a$  или  $J_b$  изменится, необходимо перейти к поиску в многообразии более высокой размерности, выполнив в нем рестарт метода из последней точки предшествующего поиска, аналогично тому, как это было описано выше.

#### 4.6.2. Учет двусторонних ограничений в методах прямого поиска

В методах прямого поиска способ учета двусторонних ограничений уникален для каждого из этих методов. Более того, некоторые из них не имеют точных модификаций для задач с двусторонними ограничениями. Типичным примером является метод Нелдера–Мида. Некоторые же методы, например метод Хука–Дживса, напротив, легко обобщаются на такие задачи.

Рассмотрим принципы модификации для метода Хука–Дживса. В нем выполняются действия только двух типов: шаг по образцу и построение конфигурации.

С учетом ограничений шаг по образцу выполняется таким образом, что при выходе рабочей точки за границы области  $D$  величина последнего смещения корректируется так, чтобы точка оказалась на границе  $D$ . При построении конфигурации в обычном методе координатные перемещения выполняются с шагом  $h$ . В модифицированном методе величины координатных перемещений не превосходят  $h$ , а в случае, если эти перемещения выводят из области  $D$ , заменяются на перемещения до границ этой области.

Рассмотрим метод Нелдера–Мида. На первый взгляд правила метода допускают аналогичный способ модификации. Однако при этом границы области будут трансформировать правила отражения и растяжения симплекса. Очевидно, что это будет способствовать быстрому его вырождению в окрестности границ области. Следовательно, такой подход не применим, хотя возможна специальная модификация этого метода для случая ограничений, рассмотренная, например, в [17]. Учет двусторонних ограничений на переменные в этом методе можно выполнить с использованием общего метода внешнего штрафа, который рассматривается в следующем разделе.

#### 4.7. Учет ограничений общего вида на основе метода штрафов

Ограничения на переменные в задачах оптимизации можно разделить на две группы: *специальные ограничения* и *ограничения общего вида*. Специальными называют такие ограничения, для учета которых существуют и применяются в программной системе особые приемы и алгоритмы. К специальным ограничениям в первую очередь следует отнести линейные ограничения. В простейшем и, одновременно, наиболее распространенном случае линейные ограничения–неравенства присутствуют в виде двусторонних ограничений на переменные. Именно этот частный, но чрезвычайно важный случай был рассмотрен в предыдущем разделе.

Все те ограничения, для учета которых специальные алгоритмы не применяются, называют ограничениями общего вида. Если, например, специфика линейного ограничения не будет специально учитываться методом оптимизации, то это ограничение следует рассматривать как ограничение общего вида.

Ограничения общего вида наиболее просто учитываются с помощью сведения задачи с такими ограничениями к одной или последовательности задач, в которых



подобные ограничения отсутствуют. Это достигается за счет использования вспомогательных задач, минимизируемые функции которых строятся с учетом не только целевой функции исходной задачи, но и функций всех общих ограничений. В наиболее наглядной форме эта идея реализована в методе внешних штрафных функций, рассмотренных в следующем разделе.

#### 4.7.1. Метод внешнего штрафа. Общие условия сходимости

Рассмотрим задачу в постановке (4.1)–(4.3). Через  $Q$  в ней обозначено множество допустимых точек, а через  $D$  — множество точек, удовлетворяющих двусторонним ограничениям на переменные ( $Q \subseteq D$ ). Построим непрерывную в  $D$  функцию  $H(y)$  так, чтобы она была положительной тогда и только тогда, когда  $y \notin Q$ , а в остальных точках обращалась в ноль:

$$H(y) > 0 \text{ при } y \notin Q \text{ и } H(y) = 0 \text{ при } y \in Q. \quad (4.68)$$

Функция такого вида называется *функцией штрафа*. Она определяет величину штрафа, накладываемого за выход точки  $y$  из допустимой области  $Q$ . В самой допустимой области штраф равен нулю.

При построении вспомогательных задач штрафная добавка добавляется к минимизируемой функции для того, чтобы препятствовать выходу точки поиска из допустимой области. В последующем штрафная добавка формируется в виде произведения функции штрафа на положительный числовой множитель, называемый *коэффициентом штрафа*. Использование коэффициента штрафа позволяет легко изменять (увеличивать) значение штрафной добавки, что, в общем случае, необходимо для существования подпоследовательностей решений возникающих вспомогательных задач, сходящихся к решениям исходной задачи.

Для реализации метода штрафов необходимо построить функцию штрафа  $H(y)$  с указанными выше свойствами. Поскольку геометрическая структура области  $Q$  в общем случае неизвестна, принадлежность точек  $y$  к этой области определяется через значения функций ограничений в этих точках: если хотя бы одно ограничение–неравенство  $g_i(y) \leq g_i^+$  нарушено, точка не принадлежит  $Q$ . Можно использовать функции штрафа разного вида [6,10]. Одна из распространенных форм — степенная функция штрафа, имеющая вид

$$H(y) = \sum_{i=1}^m ( \max \{ c_i ( g_i(y) - g_i^+ ); 0 \} )^p. \quad (4.69)$$

Здесь  $c_i > 0$  — нормирующие коэффициенты, выравнивающие диапазоны значений функций ограничений и приводящие их к одной размерности,  $p$  — параметр функции штрафа, влияющий на порядок ее гладкости.

Образуюем вспомогательную задачу со штрафом

$$S_\gamma(y) = f(y) + \gamma H(y), \quad (4.70)$$

$$S_\gamma(y) \rightarrow \min, y \in D, \quad (4.71)$$

$$D = \{y: a_i \leq y_i \leq b_i, i=1, \dots, N\}.$$

Здесь  $\gamma > 0$  — коэффициент штрафа.

Почти очевидно, что решения конкретной задачи со штрафом в общем случае не будут являться решениями исходной задачи. Для их определения придется рассматривать не одну задачу вида (4.70), (4.71), а последовательность таких задач с возрастающими значениями коэффициента штрафа  $\gamma$ .

Такой подход к решению задач с ограничениями общего вида называют *методом внешнего штрафа*. Еще раз отметим, что он заключается в замене решения исходной задачи с функциональными ограничениями (4.1)–(4.3) на решение последовательности

задач вида (4.70), (4.71) без функциональных ограничений, полученных для возрастающей последовательности значений *коэффициента штрафа*  $\gamma$ .

**Замечание.** Если функция штрафа (4.69) является гладкой, то нельзя гарантировать, что решение задачи со штрафом (4.71) при каком-либо конечном  $\gamma$  будут совпадать с решением исходной задачи (4.1)–(4.3). Поэтому для гладкой функции штрафа приходится рассматривать бесконечно возрастающую последовательность значений коэффициента штрафа.

Для обоснования этого утверждения достаточно привести пример задач, в которых наблюдается описанная ситуация. Пусть функция штрафа достаточно гладкая, а целевая функция исходной задачи строго убывает в некоторой граничной точке  $y$  допустимой области  $Q$  в направлении  $d$ , выводящим из множества  $Q$  и не выводящим из  $D$ . Предположим также, что скорость убывания отделена от нуля. Пусть, кроме того, в этой точке достигается минимум исходной задачи. Поскольку в допустимых точках функция штрафа тождественно равна нулю, то в граничной для  $Q$  точке  $y$  градиент гладкой функции штрафа обратится в ноль. Следовательно производная штрафной добавки, вычисленная в точке  $y$  в направлении  $d$  будет равна нулю вне зависимости от значения коэффициента штрафа. Из этого следует, что во вспомогательных задачах со штрафом функции  $S_\gamma(y)$  будут локально строго убывать в точке  $y$  в направлении  $d$ , поэтому точка  $y$  не будет являться решением вспомогательных задач со штрафом ни при каких конечных значениях коэффициента  $\gamma$ .

Следует обратить внимание на то, что порядок гладкости функции степенного штрафа (4.69) легко регулируется за счет выбора соответствующего значения показателя степени  $p$ .

При  $p=1$  функция штрафа (4.69) не является дифференцируемой по переменным  $g_i$ , при  $p > 1$  она становится непрерывно дифференцируемой, а при  $p > 2$  — дважды непрерывно дифференцируемой.

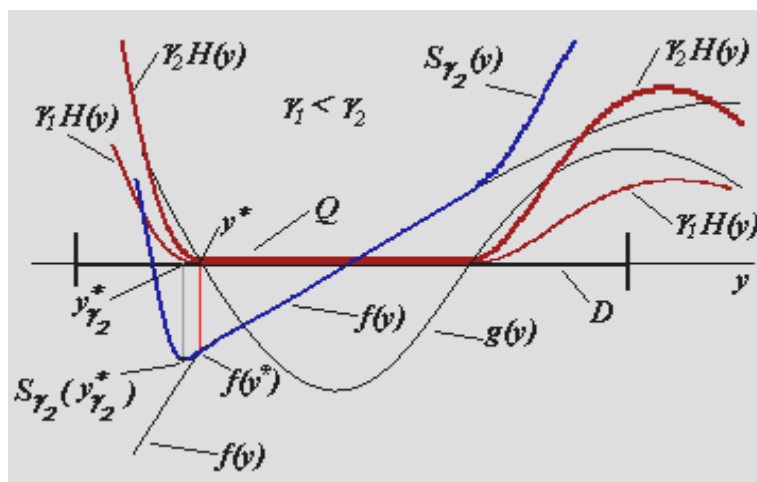


Рис. 4.18. Пример поведения функции штрафной задачи

На рис. 4.18 показано поведение функций задачи со штрафом в случае одного переменного и одного ограничения  $g(y) \leq 0$  при показателе степени в штрафе  $p=2$ . Можно видеть изменение функции штрафа при увеличении коэффициента  $\gamma$ , а также вид функции штрафной задачи  $S_\gamma(y)$  при одном из значений коэффициента штрафа.

Следует обратить внимание на то, что в задаче, представленной на рисунке, за счет дифференцируемости функции штрафа  $H(y)$ , ни при каком конечном значении  $\gamma$  точка минимума функции  $S_\gamma(y)$  не будет совпадать с решением исходной задачи.

При достаточно общих условиях можно обосновать сходимость процедуры метода штрафов при  $\gamma \rightarrow \infty$ .

**Теорема 4.7.** Пусть функции  $f(y)$  и  $H(y)$  непрерывны в компактной области  $D$  и существуют глобальные минимумы  $y_{\gamma_k}^*$  задач со штрафом (4.70), (4.71) при  $\gamma = \gamma_k$ ,  $k=1, 2, \dots$ . Тогда, если  $\gamma_k \rightarrow \infty$  при  $k \rightarrow \infty$ , то все предельные точки последовательности  $y_{\gamma_k}^*$  решений задач со штрафом будут являться глобальными минимумами исходной задачи. При этом

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f(y_{\gamma_k}^*(\varepsilon_k)) = f(y^*), \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \rho(y_{\gamma_k}^*(\varepsilon_k), Y^*) = 0,$$

где  $Y^*$  — множество решений исходной задачи.

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Пусть  $y^*$  — один из глобальных минимумов исходной задачи. Поскольку он принадлежит области  $D$ , по которой берется минимум в задаче со штрафом, то  $S_{\gamma_k}(y^*) \geq S_{\gamma_k}(y_{\gamma_k}^*) = f(y_{\gamma_k}^*) + \gamma_k H(y_{\gamma_k}^*)$ .

Точки  $y_{\gamma_k}^*$  принадлежат области  $D$ , которая в рассматриваемой постановке является компактом. Возьмем произвольную предельную точку  $y_\infty^*$  этой последовательности. Докажем, что эта точка допустима. Для этого разделим полученное выше неравенство на  $\gamma_k$  и перейдем к пределу на подпоследовательности  $k=k_t$ , для которой  $y_{\gamma_{k_t}}^* \rightarrow y_\infty^*$  при  $t \rightarrow \infty$ . Поскольку коэффициент штрафа стремится к бесконечности, а функции  $f$ ,  $S$  и  $H$  непрерывны на компакте  $D$ , а значит — ограничены, то в пределе получим, что  $0 \geq H(y_\infty^*)$ . В силу неотрицательности функции штрафа видим, что  $H(y_\infty^*) = 0$ , а следовательно  $y_\infty^* \in D$ , т. е. предельная точка допустима.

Докажем теперь, что эта предельная точка является глобальным минимумом исходной задачи. Используя еще раз записанное выше неравенство, усиливая его, получим:  $f(y^*) \geq S_{\gamma_k}(y^*) \geq S_{\gamma_k}(y_{\gamma_k}^*) = f(y_{\gamma_k}^*) + \gamma_k H(y_{\gamma_k}^*) \geq f(y_{\gamma_k}^*)$ .

Переходя к пределу на той же подпоследовательности получим, что  $f(y^*) \geq f(y_\infty^*)$ . С другой стороны, поскольку из только что доказанного вытекает допустимость предельной точки  $y_\infty^*$ , обязательно выполняется обратное неравенство. Следовательно,  $y_\infty^*$  является глобальным минимумом исходной задачи.

Осталось обосновать два предельных соотношения, приведенных в конце теоремы. Следует обратить внимание на отличие этих новых утверждений от уже доказанных, состоящее в том, что них рассматриваются пределы последовательностей в целом, а не их сходящихся подпоследовательностей. Докажем первое из указанных предельных соотношений, имея ввиду, что второе соотношение доказывается с использованием аналогичных рассуждений.

Предположим, что соотношение  $\lim_{k \rightarrow \infty} f(y_{\gamma_k}^*(\varepsilon_k)) = f(y^*)$  не верно. Тогда найдется подпоследовательность  $k=k_t$ , для которой при некотором  $\varepsilon > 0$  начиная с  $t > \bar{t}$  всегда будет выполняться  $|f(y_{\gamma_{k_t}}^*) - f(y^*)| > \varepsilon$ . Однако подпоследовательность  $y_{\gamma_{k_t}}^*$ ,  $k=k_t$  принадлежит компакту и, следовательно, имеет сходящуюся к  $y^*$  подпоследовательность, что противоречит последнему неравенству. Теорема доказана.

Доказанная теорема является теоретической основой метода штрафов, но не может служить в качестве его обоснования при вычислениях. Дело в том, что при численной оптимизации решения задач со штрафом никогда не являются точными. Это может привести к нарушению сходимости. Во всяком случае, необходимо дополнительное обоснование метода с учетом наличия ошибок в решениях штрафных задач.

**Теорема 4.8.** Пусть функции  $f(y)$  и  $H(y)$  непрерывны в компактной области  $D$  и существуют глобальные минимумы  $y^*_{\gamma_k}$  задач со штрафом (4.70), (4.71) при  $\gamma = \gamma_k$ ,  $k=1,2,\dots$ . Пусть также  $y^*_{\gamma_k}(\epsilon_k)$  — оценки этих глобальных минимумов с точностью  $\epsilon_k$  по значению функции штрафной задачи, т.е.  $S_{\gamma_k}(y^*_{\gamma_k}(\epsilon_k)) \leq S_{\gamma_k}(y^*_{\gamma_k}) + \epsilon_k$ . Тогда при  $\gamma_k \rightarrow \infty$ ,  $\epsilon_k \rightarrow 0$ ,  $k \rightarrow \infty$  все предельные точки последовательности  $y^*_{\gamma_k}(\epsilon_k)$  — приближенных решений задач со штрафом будут являться глобальными минимумами исходной задачи. При этом

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f(y^*_{\gamma_k}(\epsilon_k)) = f(y^*), \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \rho(y^*_{\gamma_k}(\epsilon_k), Y^*) = 0,$$

где  $Y^*$  — множество решений исходной задачи.

Доказательство легко проводится по той же схеме, что и доказательство предыдущей теоремы. Его также можно найти, например, в [6, 10].

Для вычислительной реализации метода штрафов необходимо выбрать алгоритм, определяющий закон изменения коэффициента штрафа и точности решения штрафных задач. Опишем один из возможных алгоритмов. Он основан на том, что контролируется убывание невязки по ограничениям на каждом шаге.

Невязкой в точке  $y$  назовем величину  $G(y)$ , показывающую степень нарушения ограничений в этой точке. Определим невязку с учетом нормировочных коэффициентов  $c_j > 0$ , использованных в функции штрафа

$$G(y) = \max \{ \max \{ c_j (g_j(y) - g_j^+); 0 \}; j=1, \dots, m \}, \quad (4.72)$$

ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМА настройки параметров метода штрафов.

ШАГ 0. Задаются:  $\epsilon_0 > 0$  — начальная точность решения штрафных задач,  $\epsilon > 0$  — требуемая точность решения штрафных задач,  $\delta > 0$  — требуемая точность по ограничениям,  $0 < \alpha < 1$  — ожидаемый коэффициент убывания невязки по ограничениям на шаге,  $\beta > 1$  — коэффициент увеличения штрафа,  $\beta_l > 0$  — дополнительный коэффициент увеличения штрафа,  $0 < \nu < 1$  — коэффициент повышения точности решения штрафной задачи,  $\gamma = \gamma_0$  — начальное значение коэффициента штрафа.

ШАГ 1. Решаем задачу со штрафом (4.70), (4.71) с точностью  $\epsilon_0$ , получаем оценку решения  $y^*_{\gamma_0}(\epsilon_0)$ . Вычисляем начальную невязку полученного решения по ограничениям  $G_0 = G(y^*_{\gamma_0}(\epsilon_0))$ . Полагаем  $k=0$  — номер выполненной итерации. Строим увеличенное значение коэффициента штрафа  $\gamma_{k+1} = \beta \gamma_k$  и изменяем значение точности  $\epsilon_{k+1} = \nu \epsilon_k$ .

ШАГ 2. Проверяем критерий останова: если  $G_k < \delta$  и точность решения задачи  $\epsilon_k \leq \epsilon$ , то выполняем останов процесса решения. Если  $G_k < \delta$ , но точность решения задачи  $\epsilon_k > \epsilon$ , то полагаем  $\epsilon_{k+1} = \epsilon$  и переходим на шаг 3, иначе — сразу переходим на шаг 3.

ШАГ 3. Решаем задачу со штрафом (4.70), (4.71) при  $\gamma_k = \gamma_{k+1}$  с точностью  $\epsilon_{k+1}$ , получаем оценку решения  $y^*_{\gamma_{k+1}}(\epsilon_{k+1})$ . Вычисляем невязку полученного решения по ограничениям  $G_{k+1} = G(y^*_{\gamma_{k+1}}(\epsilon_{k+1}))$ .

ШАГ 4. Если  $G_{k+1} < \beta G_k$ , то полагаем  $\gamma_{k+2} = \beta \gamma_{k+1}$ , иначе  $\gamma_{k+2} = \beta_l \beta \gamma_{k+1}$ . Повышаем точность  $\epsilon_{k+2} = \nu \epsilon_{k+1}$ , Полагаем  $k=k+1$ . Возвращаемся на шаг 2.

Описанный алгоритм формально обеспечивает выполнение требований теоремы 4.8, однако необходимо иметь в виду, что решение задачи с заданной точностью не гарантируется методами локального уточнения решений, которые обычно используются на шаге 3. Кроме того, при повышении требований к точности в малой окрестности решения начинают сказываться ошибки конечноразрядной арифметики.

Поэтому при практических расчетах не следует уменьшать  $\varepsilon_k$  более некоторого порогового значения.

При проведении практических расчетов необходимо также учитывать возможные грубые ошибки в работе вычислительных методов, в результате которых вместо определения глобального минимума задач со штрафом происходит определение их локального минимума не являющегося глобальным. В этом случае может оказаться, что при увеличении коэффициента штрафа  $\gamma_k$  невязка по ограничениям в новой штрафной задаче не будет уменьшена. В этом случае необходимо прервать вычисления и попытаться подобрать другой вычислительный метод для поиска решения штрафных задач.

#### 4.7.2. Структура возникающих задач со штрафом и характер приближения оценок к решению

Для того, чтобы можно было прогнозировать характер поведения вычислительных методов при решении вспомогательных задач со штрафом (4.71), необходимо изучить характерные особенности, имеющиеся в структуре  $S_{\gamma_k}(y)$  — функций штрафных задач. В начале данного раздела проведем неформальное обсуждение возникающих вычислительных особенностей. Эти особенности могут быть обусловлены тремя причинами.

Первая связана с использованием больших значений коэффициента штрафа. Это приводит к тому, что в задачах, имеющих решение на границе допустимой области  $Q$ , будут возникать функции  $S_{\gamma_k}(y)$  с сильно овражной структурой.

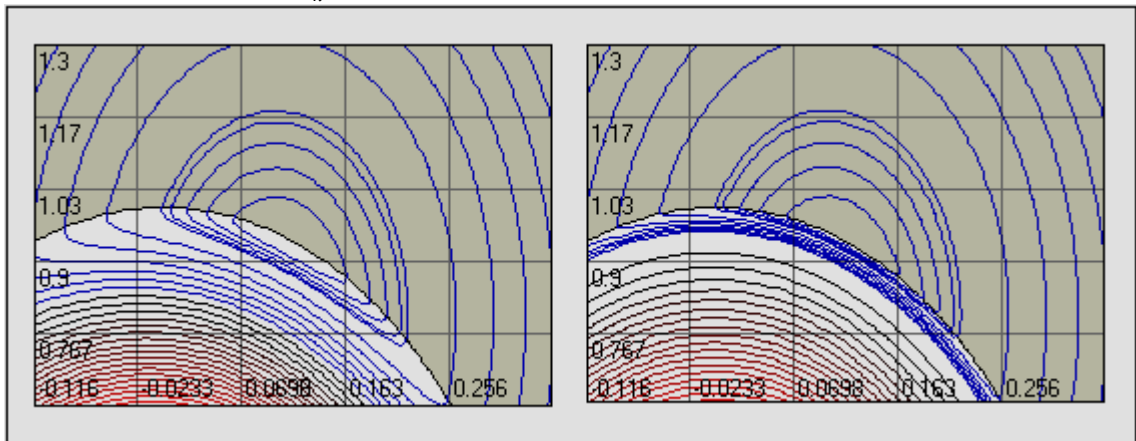


Рисунок 4. 19 Увеличение овражности функции задачи со штрафом  $S_{\gamma}(y)$  при возрастании коэффициента штрафа  $\gamma$  с 1 до 20

Причина заключается в том, что минимизируемая функция  $f(y)$  исходной задачи, в общем случае, изменяется вдоль границы области относительно медленно, а функция штрафа постоянна:  $H(y)=0$ . Если же точка начинает удаляться от границы допустимой области, то, за счет больших значений коэффициента штрафа, функция  $S_{\gamma_k}(y)$  будет быстро изменяться. Таким образом, у этой функции наблюдается «овраг».

На рис.4.19 приведен пример, показывающий изменение изолиний функции  $S_{\gamma}(y)$  штрафной задачи вида (4.69)–(4.71), возникающей при поиске минимума функции  $(y_1-0,1)^2+0,1(y_2-0,8)^2$  с ограничением  $-9y_1^2-y_2^2 \leq -1$  при увеличении коэффициента штрафа со значения  $\gamma=1$  до значения  $\gamma=20$ . В функции штрафа использован показатель степени  $p=2$ . Допустимая область выделена более темным цветом. На рис. 4.20 для этого же примера показана пространственная структура функции задачи со штрафом  $S_{\gamma}(y)$  при небольшом значении коэффициента штрафа  $\gamma=1$ . По отношению к

изображению изолиний на рис. 4.19, пространственное изображение развернуто примерно на  $80^\circ$ .

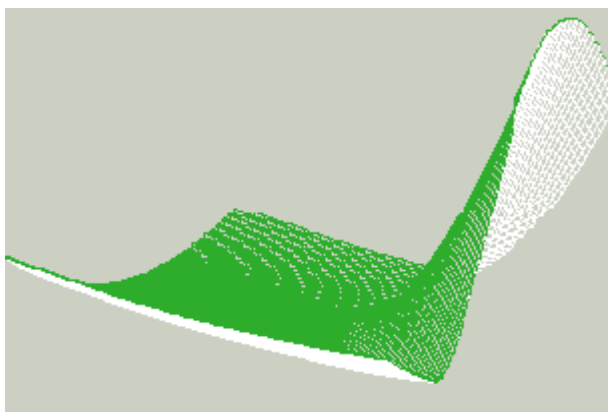


Рис. 4. 20. Пространственная структура функции  $S_\gamma(y)$  при  $\gamma=1$

Вторая особенность связана с тем, что функция штрафа  $H(y)$  из (4.68), (4.69), аддитивно входящая в функцию  $S_{\gamma_k}(y)$ , может иметь нарушение гладкости, начиная с некоторого порядка, даже при гладких функциях ограничений–неравенств. Например, у функции штрафа вида (4.69) при показателе степени  $p \leq 1$  на границе нарушения ограничений все частные производные, в общем случае, будут разрывны, а при  $1 < p \leq 2$  первые производные станут непрерывными, но производные более высокого порядка будут терпеть разрыв. Нарушение гладкости может отрицательно сказываться на работе методов локальной оптимизации при решении задач методом штрафных функций. В то же время, повышение гладкости штрафа ухудшает скорость сходимости метода штрафов за счет того, что вблизи границы области  $Q$  штрафная добавка становится бесконечно малой более высокого порядка, чем расстояние до границы допустимой области. Ситуация усложняется тем, что именно в окрестности этой границы (если решение исходной задачи (4.1)–(4.3) лежит на границе области  $Q$ ) функция  $S_{\gamma_k}(y)$  сильно «овражна» при больших значениях  $\gamma_k$ . Таким образом, при выборе вычислительного метода оптимизации, используемого в методе штрафов, необходимо учитывать возможное нарушение гладкости вблизи дна оврага, вдоль которого обычно выполняется поиск минимума. Заметим, что приведенные здесь рассуждения, носящие качественный характер, можно подкрепить точными оценками скорости сходимости метода штрафов, увязав их со значением показателя степени  $p$  в функции штрафа [6,10]. Эти оценки приведены ниже в теореме 4.9.

Третья особенность функции  $S_{\gamma_k}(y)$  связана с тем, что порядок ее роста при отклонениях от границы области  $Q$  может быть существенно различен, в зависимости от того, происходит отклонение внутрь области  $Q$  или вне ее. Эта особенность может оказаться существенной для большой группы методов, основанных на квадратичной модели минимизируемой функции (модифицированный метод Ньютона, квазиньютоновские методы, метод сопряженных градиентов).

☞ Таким образом, функции штрафных задач обладают характерными особенностями, ухудшающими поисковые возможности методов локальной оптимизации.

Приведем формулировку упомянутой ранее теоремы об оценке скорости сходимости метода штрафов при использовании функции степенного штрафа (4.69).

**Теорема 4.9** Пусть функция  $f(y)$  липшицева в метрике  $\rho(\cdot, \cdot)$  с константой  $L$  на компакте  $D$ , а функции ограничений–неравенств непрерывны на  $D$  и для них существуют такие  $\delta > 0$  и  $\alpha > 0$ , что для любого  $y$  из  $\delta$ -окрестности  $Q$ , т.е. для  $y \in (O_\delta(Q) \setminus Q) \cap D$ , гарантируется что функции ограничений будут возрастать не медленнее, чем линейные по  $\rho = \rho(y, Q)$  функции:  $\max\{c_j g_j(y) : j=1, \dots, m\} \geq \alpha \rho(y, Q)$ .

Пусть также задачи со штрафом (4.70), (4.71) решаются точно, и используется функция степенного штрафа (4.69). Тогда справедливы следующие оценки для ошибки  $\Delta(\gamma) = f(y^*) - S_\gamma(y^*_\gamma)$  решения штрафных задач:

1. при  $p \leq 1$  начиная с некоторого  $\gamma$  решения штрафных задач будет точно совпадать решениями исходной задачи ( $\Delta(\gamma) = 0$ );
2. при  $p > 1$  для достаточно больших  $\gamma$ :  $0 \leq \Delta(\gamma) \leq T / \gamma^{1/(p-1)}$ , где  $T = (L/\alpha)^{p/(p-1)} (1-1/p)/p^{1/(p-1)}$ .

Доказательство можно найти в [6, 10].

Приведенные в теореме оценки подтверждают сделанные выше качественные выводы о характере влияния показателя степени  $p$  на характер и скорость сходимости метода штрафов.

Дополнительно рассмотрим вопрос о характере приближения оценок  $y^*_\gamma$  к решению задачи при увеличении  $\gamma_k$ . Характер приближения изучим не в пространстве переменных, а по значениям функций  $f(y^*_\gamma)$  и  $H(y^*_\gamma)$ .

**Теорема 4.10.** Если в методе штрафов последовательность коэффициентов штрафа образует неубывающую последовательность  $\gamma_{k+1} \geq \gamma_k$ , то последовательность значений  $f_k = f(y^*_\gamma)$  будет неубывающей, а последовательность  $H_k = H(y^*_\gamma)$  — не возрастающей:  $f(y^*_{\gamma_{k+1}}) \geq f(y^*_{\gamma_k})$ ,  $H(y^*_{\gamma_{k+1}}) \leq H(y^*_{\gamma_k})$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим два значения коэффициента штрафа  $\gamma_{k+1} \geq \gamma_k$ . Тогда будут справедливы два неравенства

$$\begin{aligned} f(y^*_{\gamma_k}) + \gamma_k H(y^*_{\gamma_k}) &\leq f(y^*_{\gamma_{k+1}}) + \gamma_k H(y^*_{\gamma_{k+1}}), \\ f(y^*_{\gamma_{k+1}}) + \gamma_{k+1} H(y^*_{\gamma_{k+1}}) &\leq f(y^*_{\gamma_k}) + \gamma_{k+1} H(y^*_{\gamma_k}). \end{aligned}$$

После преобразования каждого из них получим, что

$$\begin{aligned} 0 &\leq (f(y^*_{\gamma_{k+1}}) - f(y^*_{\gamma_k})) + \gamma_k (H(y^*_{\gamma_{k+1}}) - H(y^*_{\gamma_k})), \\ (f(y^*_{\gamma_{k+1}}) - f(y^*_{\gamma_k})) + \gamma_{k+1} (H(y^*_{\gamma_{k+1}}) - H(y^*_{\gamma_k})) &\leq 0. \end{aligned}$$

Заметим, что полученные выражения совпадают с точностью до значения коэффициента штрафа.

Таким образом, мы видим, что при увеличении коэффициента штрафа со значения  $\gamma_k$  до  $\gamma_{k+1}$  приведенное выше выражение из неотрицательного становится неположительным. Это возможно только в том случае, когда  $(f(y^*_{\gamma_{k+1}}) - f(y^*_{\gamma_k})) \geq 0$  и  $(H(y^*_{\gamma_{k+1}}) - H(y^*_{\gamma_k})) \leq 0$ . Тем самым теорема доказана.

Заметим, что в том случае, когда решение исходной задачи размещается на границе допустимой области  $Q$  и не является точкой безусловного минимума целевой функции, из теоремы следует, что решения вспомогательных штрафных задач приближаются к точке решения извне этой области.

### 4.7.3. Недостаточность локальных методов при использовании метода штрафов

В теореме об условиях сходимости метода штрафов предполагается, что при решении каждой задачи со штрафом определяется оценка  $y_{\gamma_k}^*(\varepsilon_k)$  глобального минимума этой задачи. Поскольку методы многоэкстремальной оптимизации требуют значительно большего объема вычислений, чем методы локальной оптимизации, то при практических расчетах, обычно прибегают к следующему приему. На первой итерации метода штрафов для вычисления  $y_{\gamma_0}^*(\varepsilon_0)$  используют один из методов многоэкстремальной оптимизации, а на следующих итерациях для получения оценок  $y_{\gamma_{k+1}}^*(\varepsilon_{k+1})$  прибегают к методам локальной оптимизации, в которых в качестве начальных точек поиска используются точки  $y_{\gamma_k}^*(\varepsilon_k)$ , найденные на предыдущей итерации.

Таким образом, полностью отказываться от применения методов глобального поиска нельзя, они необходимы хотя бы на первой итерации метода штрафов. Можно указать две ситуации, в которых ошибка в определении начальной оценки  $y_{\gamma_0}^*(\varepsilon_0)$  может привести к последующей потере решения. Первая соответствует тому случаю, когда решение  $y^*$  задачи с ограничениями является внутренней точкой множества  $Q$ . При этом, если оценка  $y_{\gamma_0}^*(\varepsilon_0)$  не будет принадлежать области притяжения решения  $y^*$ , то при последующем использовании локальных методов оценка решения не будет приближаться к точному решению. Похожий эффект возможен и при расположении решения  $y^*$  на границе допустимой области, если начальная оценка  $y_{\gamma_0}^*(\varepsilon_0)$  окажется в окрестности локального минимума функции штрафа  $H(y)$ , расположенного вне допустимой области. Действительно, изменение значения коэффициента штрафа никак не повлияет на наличие этого локального минимума у функции штрафа. Следовательно, при достаточно большом коэффициенте  $\gamma$  у  $S_\gamma(y)$  — функции штрафной задачи, образуется локальный минимум, расположенный в малой окрестности локального минимума функции штрафа. Если такая ситуация возникла на первой же итерации метода штрафов, то при последующем использовании локальных методов оценка решения останется в окрестности локального минимума и не будет приближаться к точному решению. Характерным признаком, по которому вычислительный метод может распознать эту ситуацию, является неограниченный рост значений функции  $S_\gamma(y)$ , вычисляемых в точках получаемых оценок, при  $\gamma \rightarrow \infty$ .

На рис.4.21 приведен пример описанной выше ситуации. В этом примере решается задача поиска минимума линейной функции  $-y_1 + y_2$  в прямоугольной области  $-3 \leq y_1 \leq 3$ ,  $0 \leq y_2 \leq 5$  при дополнительном ограничении  $(y_1^2 + y_2^2 - 11)^2 + (y_1 + y_2^2 - 7)^2 + (y_1 - y_2) \leq 0.3$ . Функция штрафа в этом примере имеет локальный минимум, расположенный в окрестности точки  $y_1 = 2,45$ ,  $y_2 = 2,15$ . При сколь угодно большем увеличении коэффициента штрафа у функции штрафной задачи сохраняется локальный минимум в окрестности этой точки. На рисунке показано поведение метода Хука–Дживса, запущенного из начальной точки, расположенной в области притяжения этого минимума. Видно, что правильное решение оказалось потерянным.

Допустимая область выделена на рисунке более темным цветом, в ней показаны изолинии линейной минимизируемой функции. Левый рисунок соответствует выбору значения коэффициента штрафа  $\gamma = 10$ , а правый — значению  $\gamma = 1000$ .



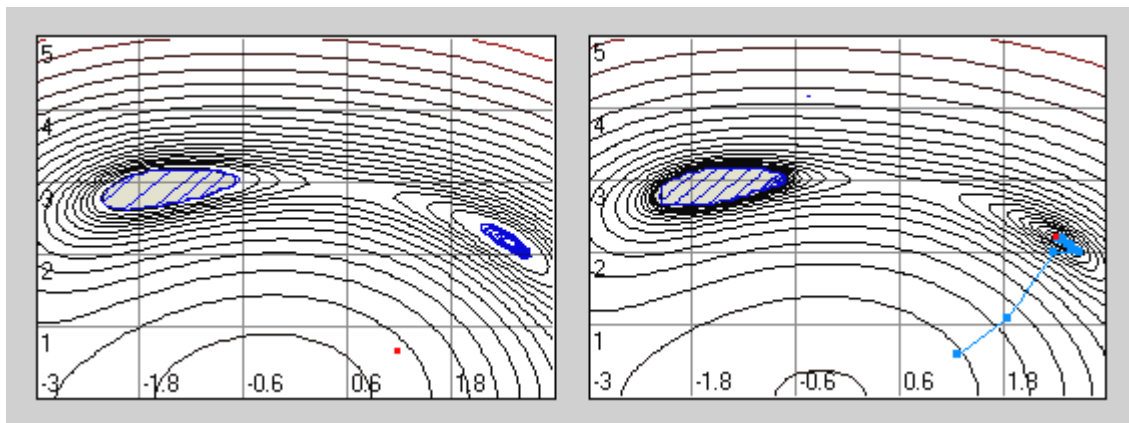


Рис. 4.21. Возможность потери решения при наличии локального минимума у функции штрафа

#### 4.7.4. Сочетание локальных методов с методами покрытий области

Большинство прикладных задач, связанных с поиском оптимальных решений, включают ограничения на переменные, заданные в виде неравенств достаточно общего вида. Одним из общих методов учета таких ограничений является метод внешнего штрафа, рассмотренный в разделе 4.7.1. Его применение, как это следует из теоремы 4.6 и обсуждения в разделе 4.7.3, требует применения методов многоэкстремальной оптимизации, осуществляющих, в общем случае, покрытие области поиска точками измерений для получения оценки глобального экстремума. В простейшем случае можно построить равномерное покрытие, применив метод Монте–Карло или регулярную сетку, например, ЛП<sub>τ</sub>–покрытие [18]. Однако для достижения необходимой точности при этом потребуется значительное количество измерений. Если функции задачи вычисляются достаточно быстро, то такой вариант организации решения будет возможен. Если же вычисление функций задачи дорогостояще, требуется применение других методов, которые способны строить адаптивные покрытия областей поиска точками, размещаемыми с различной плотностью в разных подобластях (более плотно в окрестности решений). Такие методы были рассмотрены в главе 3. При этом целесообразно получить лишь предварительную оценку решения, а для его уточнения использовать процедуры локальной оптимизации.

В том случае, когда размерность задачи будет слишком высока для использования методов, строящих адаптивные покрытия, единственным способом ее решения останутся методы локальной оптимизации, сочетаемые с простыми методами покрытия области для выбора начальных оценок решения.

#### **Краткий обзор главы**

В главе рассмотрен широкий круг вопросов по вычислительным методам поиска локально–оптимальных решений, а также математическим моделям, лежащим в основе их построения. Приведена классификация методов. Рассмотрены варианты всех основных групп методов для задач без ограничений (методы второго, первого порядка, методы прямого поиска), специальные версии этих методов с учетом двусторонних ограничений на переменные, общие методы учета функциональных ограничений–неравенств на примере метода штрафов. Приведен теоретический материал по рассмотренному кругу вопросов, включающий несколько теорем и лемм в которых анализируются основные свойства методов, приведены описания алгоритмов. В главе также содержится неформальное обсуждение свойств рассматриваемых методов, приведены примеры их использования, отмечены связанные с ними важные вычислительные эффекты. В тексте главы приведено большое количество

иллюстраций, облегчающих восприятие материала. Часть иллюстраций получена с использованием созданной программной лаборатории по методам локальной оптимизации «LocOpt». Необходимая практическая отработка обширного теоретического материала, приведенного в главе, может полностью выполняться с использованием этой программной лаборатории по разработанной программе лабораторного практикума.



### Контрольные вопросы и упражнения

1. В чем заключается проблема поиска локального минимума? Дайте определение локального минимума, многоэкстремальной и одноэкстремальной задач.
2. Приведите описание общей структуры методов локальной оптимизации. Поясните понятия основного и рабочего шага.
3. Какая локальная информация может измеряться в точках испытаний? Приведите классификацию методов локального поиска с точки зрения измеряемой информации. Какова роль априорной модели задачи в интерпретации измерений?
4. Опишите постановку задачи определения величины перемещения вдоль выбранного методом направления. Приведите основные этапы вычислительного алгоритма для определения величины одномерных перемещений.
5. Приведите основные расчетные формулы для классических алгоритмов локальной оптимизации в задачах без ограничений: метода наискорейшего градиентного поиска и метода Ньютона. Что Вы можете сказать о свойствах этих методов?
6. Как влияет регулировка величины шага на свойства метода Ньютона?
7. Почему возникает задача коррекции матриц вторых производных и их оценок в методах локальной оптимизации? Опишите основную идею модифицированного алгоритма Холесского для коррекции матриц.
8. Приведите один из алгоритмов построения оценок матриц вторых производных в квазиньютоновских методах локальной оптимизации. Что такое квазиньютоновское условие?
9. Дайте сравнительное описание методов переменной метрики (квазиньютоновских методов) и метода растяжения пространство Шора Н.З.
10. Какие направления называют сопряженными? Приведите их основные свойства.
11. В чем заключается метод сопряженных градиентов Флетчера–Ривса? Сравните его свойства со свойствами метода наискорейшего градиентного поиска.
12. Какие методы относятся к методам прямого поиска? Приведите примеры таких методов.
13. Объясните различия между общими и специальными методами учета ограничений.
14. В чем заключаются принципы и особенности специального учета двусторонних ограничений на переменные в методах гладкой оптимизации? Поясните это на примере метода сопряженных градиентов и квазиньютоновском методе.
15. Как можно решить задачу с дополнительными ограничениями–неравенствами, используя метод внешнего штрафа? Как управлять гладкостью штрафа, как она может влиять на работу численных методов и на скорость сходимости метода штрафов?
16. Какие факторы могут привести к потере решения при использовании метода внешнего штрафа в сочетании с локальной оптимизацией?
17. Какие методы локальной оптимизации кажутся Вам наиболее перспективными в задачах поиска локально–оптимальных решений?



### **Литература**

1. Пшеничный Б.Н., Данилин Ю.М. Численные методы в экстремальных задачах. –М.: Наука, 1975. –319 с.
2. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация. –М.: Мир, 1985. – 509 с.
3. Уайлд Д.Дж. Методы поиска экстремума. –М.: Наука, 1967. –267 с.
4. Габасов Р. Кириллова Ф. Методы оптимизации. –Минск: Изд-во БГУ, 1975.
5. Черноусько Ф.Л., Меликян А.А. Игровые задачи управления и поиска. –М.: Наука, 1978.
6. Сухарев А.Г., Тимофеев А.В., Федоров В.В. Курс методов оптимизации. –М.: Наука, 1986. –325с.
7. Моисеев Н.Н., Иванилов Ю.П., Столярова Е.М.. Методы оптимизации. –М.: Наука, 1978. –350 с.
8. Аоки М. Введение в оптимизацию. — М.: Наука, 1975. –343 с.
9. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. –М.: Наука, 1980. –518 с.
10. Карманов В.Г. Математическое программирование. –М.: Наука, 1986. –285 с.
11. Базара М., Шетти К. Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы. –М.: Мир, 1982. –583 с.
12. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. –М.: Мир, 1975.
13. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс. М.: Радио и связь. 1988. –128 с.
14. Фиакко А., Мак-Кормик Г. Нелинейное программирование. Методы последовательной безусловной оптимизации. –М.: Мир, 1972.
15. Бертсекас Д. Условная оптимизация и методы множителей Лагранжа. –М.: Радио и связь, 1987. –399 с.
16. Евтушенко Ю.Г. Методы решения экстремальных задач и их применение в системах оптимизации. –М.: Наука, 1982. –432 с.
17. Численные методы условной оптимизации. / Под ред. Ф.Гилла и У.Мюррея. –М.: Мир, 1977. –290 с.
18. Соболев И.М., Статников Р.Б. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. –М.: Наука, 1981. –110с.