

Следовательно, для моды $M_0(X) = k_0$ выполняется неравенство $np - q \leq k_0 \leq np + p$ или, когда k_0 принадлежит отрезку $[np - q, np + p]$, который имеет длину, равную $(np + p) - (np - q) = p + q = 1$.

Таким образом, если $(np + p) \notin N$, то распределение имеет моду $M_0(X) = [np + p]$, где $[np + p]$ – целая часть числа $(np + p)$, и распределение является **унимодальным**.

Если же $(np + p) \in N$, то распределение имеет две моды $M_0(X) = np + p - 1 = np - q$ и $M_0(X) = np + p$, и распределение является **бимодальным**.

Заметим, что распределение является бимодальным, если $np + p = m \in N$ или когда $p = \frac{m}{n+1}$, где $m \in N$ и $m < n + 1$.

Список цитированных источников

1. Вентцель, Е.С. Теория вероятностей / Е.С. Вентцель. – М.: Высшая школа, 1999. – 576 с.
2. Корн, Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г. Корн, Т. Корн – М.: Наука, 1977. – 831 с.

УДК 519.853.3

Мокин А.А., Бруцкий В.Р.

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Ракецкий В.М.

ЧИСЛЕННОЕ СРАВНЕНИЕ ПРЯМОГО ОПОРНОГО МЕТОДА С МЕТОДАМИ СОПРЯЖЕННЫХ НАПРАВЛЕНИЙ

1. Введение. Целью настоящей работы является экспериментальное исследование прямого опорного метода для минимизации выпуклых функций [1] и его сравнение с другими известными методами. В качестве объекта для проведения численного эксперимента рассматривается задача безусловной оптимизации

$$f(x) \rightarrow \min, x \in R^n, \quad (1)$$

где $f(x)$ – строго выпуклая функция, т.е. в задаче (1) всегда существует единственное решение x^* – точка минимума функции $f(x)$, которая удовлетворяет необходимым и достаточным условиям оптимальности

$$\Delta_j(x) = \frac{d}{dx_j} f(x) = 0, \quad j = \overline{1, n}. \quad (2)$$

Для выяснения эффективности прямого опорного метода и получения данных для анализа и сравнения в эксперименте использовались:

1) метод сопряженных градиентов Флетчера-Ривса [2]. Выбор этого известного метода в качестве одного из эталонов для сравнения обусловлен его алгоритмической простотой и низкой трудоемкостью итерации, что обеспечивает высокую эффективность метода на задачах невысокой размерности. Его недостатком является чувствительность к вычислительным погрешностям, что снижает его эффективность особенно для задач с большим числом переменных;

2) метод Давидона-Флетчера-Пауэлла [2]. Этот метод относится к группе квазиьютоновских методов, которые для организации итерационных вычислений используют специальную вспомогательную матрицу, в которой накапливается информация о структуре минимизируемой функции. Итерация квазиьютоновских методов отличается большей трудоемкостью в сравнении с методом сопряженных градиентов. Однако, благодаря ис-

пользованию информации о структуре функции и устойчивости к вычислительным погрешностям, квазиньютоновские методы показали высокую эффективность для задач вида (1). Метод Давидона-Флетчера-Пауэлла отличается наиболее высокими характеристиками.

2. Алгоритмы методов. Приведем краткое описание алгоритмов методов, которые были программно реализованы и приняли участие при проведении численного эксперимента.

2.1. Прямой опорный метод. Пусть $\{x, J_{оп}\}$ – опорный план [1] задачи (1), известный к началу итерации, ε – заданная точность выполнения условий оптимальности (2). Предположим, что опора целевой функции $J_{оп}$ состоит из индексов $\{i_1, i_2, \dots, i_m\}$, множество неопорных индексов J_n состоит из индексов $\{j_1, j_2, \dots, j_{n-m}\}$, j_k – неопорный индекс, для которого предстоит проверить условия оптимальности на текущей итерации, J_n^o – множество индексов из J_n , для которых на предыдущих итерациях был установлен факт выполнения условий оптимальности с заданной точностью, т.е.

$$|A_j(x)| \leq \varepsilon, \quad j \in J_n^o,$$

и опорный план $\{x, J_{оп}\}$ не менялся.

2.1.1. Проверим, выполняются ли условия оптимальности (2) на индексе j_k с заданной точностью:

$$|A_{j_k}(x)| \leq \varepsilon. \quad (3)$$

Если условие (3) не выполняется, то перейдем к п. 2.1.3. В противном случае положим $J_n^o = J_n^o \cup \{j_k\}$. Возможны 2 случая:

а) $J_n^o = J_n$, т.е. все неопорные индексы удовлетворяют с заданной точностью условиям оптимальности. В этом случае перейдем к проверке согласованности опорного плана.

б) $J_n^o \subset J_n$, $J_n^o \neq J_n$, т.е. возможно, что среди неопорных индексов есть такие, для которых условия оптимальности не выполняются с заданной точностью. В этом случае положим $k = (k+1) \bmod (n-m)$ и снова проверим условие (3) для нового индекса (повторим пункт 2.1.1).

2.1.2. Проверим условия согласования опорного плана

$$|A_j(x)| \leq \varepsilon, \quad j \in J_{оп} \quad (4)$$

Если условия согласования (4) выполняются, то решение задачи (1) окончено, план x принимаем в качестве оптимального плана. В противном случае полагаем $J_{оп} = \emptyset$ и переходим к п.2.1.1. В качестве индекса j_k используем первый из индексов опорного плана, для которого не выполнены условия согласования (4).

2.1.3. Построим направление для улучшения опорного плана $\{x, J_{оп}\}$

$$l_j = -\text{sign} A_{j_k}, \quad l_j = 0, \quad j \in J_n \setminus \{j_k\}, \quad l_{оп} = G_{оп} p_{оп} \text{sign} A_{j_k}, \quad (5)$$

где $p_{оп} = \{p_j, j \in J_{оп}\}$, $p_j = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_j \partial x_j}$.

2.1.4. Вычислим шаг θ вдоль направления l :

$$\theta = \begin{cases} |A_{j_k}| / \alpha, & \text{если } \alpha > 0, \\ \infty, & \text{если } \alpha \leq 0, \end{cases} \quad \alpha = l'_{оп} p_{оп} \text{sign} A_{j_k} + d_{j_k j_k}, \quad d_{j_k j_k} = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_{j_k} \partial x_{j_k}}$$

Если $\theta = \infty$, то перейдем к п.2.1.6.

2.1.5. Проверим условие

$$f(x + \theta l) < f(x) - \eta. \quad (6)$$

Возможны 2 варианта:

а) условие (6) выполняется. В этом случае построим новый опорный план $\{\bar{x}, \bar{J}_{\text{ог}}\}$, где $\bar{x} = x + \theta l$, $\bar{J}_{\text{ог}} = J_{\text{ог}} \cup \{j_k\}$, и пересчитаем матрицу $G_{\text{ог}}$:

$$\bar{G}_{\text{ог}} = \begin{pmatrix} G_{\text{ог}} + \frac{l_{\text{ог}} l'_{\text{ог}}}{\alpha} & -\frac{l_{\text{ог}}}{\alpha} \text{sign} \Delta_j \\ -\frac{l'_{\text{ог}}}{\alpha} \text{sign} \Delta_j & \frac{1}{\alpha} \end{pmatrix}$$

Если $|\bar{J}_{\text{ог}}| = n$, то $\bar{J}_n = \emptyset$. Поэтому следующую итерацию начнем сразу с п. 2.1.2 – проверки условий согласования опорного плана $\{\bar{x}, \bar{J}_{\text{ог}}\}$. Если же $|\bar{J}_{\text{ог}}| < n$, то перейдем к п. 2.1.1. При этом в проверку условий оптимальности начнем с индекса j_{k+1} (следующего по порядку после j_k в множестве J_n), приняв, что $\bar{J}_n = \emptyset$ (если j_k – последний из индексов множества J_n , т.е. $k = n - m$, то проверку условий оптимальности начнем с индекса j_1 – первого индекса в множестве \bar{J}_n);

б) условие (6) не выполняется. Продолжим итерацию, для чего перейдем к п. 2.1.6.

2.1.6. Найдем шаг θ вдоль направления l с помощью метода одномерной оптимизации (например, метода «золотого» сечения) и проверим условие

$$f(x + \theta l) < f(x) - \eta / 8 \quad (7)$$

Возможны 2 исхода:

а) условие (7) выполняется. В этом случае уточним значение параметра $\eta = (f(x) - f(x + \theta l)) / 2$ и перейдем к следующей итерации по правилам пункта 2.1.5 а), приняв в качестве значения α величину $\alpha = |\Delta_j| / \theta$.

б) условие (7) не выполняется. В этом случае прервем текущую итерацию и проверим условия согласования опорного плана $\{x, J_{\text{ог}}\}$, т.е. перейдем к п. 2.1.2.

2.2. Метод сопряженных градиентов.

1. Пусть x^0 – начальная точка, тогда в качестве направления выберем антиградиент $S^0 = -\Delta(x^0)$ и найдем минимум вдоль направления S^0 .

2. Допустим, что на шаге k мы находимся в точке x^k и $-\Delta(x^k)$ – направление антиградиента. Направление на данном шаге будем выбирать согласно формуле:

$$S^k = -\Delta(x^k) + \omega_k S^{k-1}, \text{ где } \omega_k = \frac{\|\Delta(x^k)\|^2}{\|\Delta(x^{k-1})\|^2} \text{ (стандартный алгоритм – Флетчера-Ривса).}$$

3. Новую точку x^{k+1} вычислим по формуле $x^{k+1} = x^k + \theta_k S^k$, где $\theta_k = \underset{\theta}{\text{arg min}} f(x^k + \theta S^k)$.

Если $\|\Delta(x^{k+1})\| < \varepsilon$, то останавливаем алгоритм.

Иначе, если $(k+1) < n$, то переходим к пункту 2. Иначе выполняем пункт 2 при $\omega_k = 0$.

2.3. Метод Давидона-Флетчера-Пауэлла.

1. Задаем начальную точку x^0 и погрешность ε .

2. Вычисляем $H^0 = \left[\frac{\partial^2 f(x^0)}{\partial x^2} \right]^{-1}$.

3. Допустим, что на шаге k мы находимся в точке x^k и в этой точке построена матрица H^k . Тогда новые координаты точки находятся следующим образом: $x^{k+1} = x^k + \theta_k S^k$, где

$$S^k = -H^k \Delta(x^k), \quad \theta_k = \underset{\theta}{\text{arg min}} f(x^k + \theta S^k).$$

4. Пересчет H^{k+1} производится по формуле:

$$H^{k+1} = H^k - \frac{H^k y^k (y^k)^T H^k}{(y^k)^T H^k y^k} + \theta_k \frac{S^k (S^k)^T}{(S^k)^T y^k},$$

где $y^k = \Delta(x^{k+1}) - \Delta(x^k)$.

5. Если $\|\Delta(x^{k+1})\| < \varepsilon$, то останавливаем алгоритм.

Если $(k+1) < n$, то переходим к пункту 3.

Иначе полагаем $x^0 = x^n$ и выполняем пункт 2.

При программной реализации описанных выше алгоритмов для реализации одномерного поиска использовался метод «золотого» сечения [2].

3. Эксперимент. В эксперименте целевая функция (1) имела вид

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T D x + c^T x + \sum_{i=1}^m e^{-x_i^{q_i}}, \quad (8)$$

где D – симметричная положительно определенная $(n \times n)$ - матрица, c – n -вектор, $a_{ij}, i = \overline{1, m}, j = \overline{1, n}$ – известные величины. Для автоматизации процесса тестирования был разработан генератор задач вида (8). В ходе эксперимента генерировались задачи одного размера сериями по 10 штук. Каждая задача из серии по очереди решалась тремя вышеописанными алгоритмами. Сравнение алгоритмов проводилось по двум параметрам: времени решения и количеству итераций. В качестве результатов эксперимента принимались средние результаты по серии, из которых отбрасывалось одно наибольшее и одно наименьшее значение (т.е. сумма оставшихся делилась на 8). В табл. 1 приведены результаты эксперимента по решению задач с размерами от 3 до 20 переменных.

Таблица 1 – Результаты эксперимента (ПМ – прямой метод, СГ – метод сопряженных градиентов, ДФП – метод Давидона-Флетчера-Пауэлла)

Количество переменных	Количество итераций			Время решения (мс)		
	ПМ	СГ	ДФП	ПМ	СГ	ДФП
3	10.0	7.8	5.5	2.4	3.4	12.6
4	12.0	11	5.9	4.8	9.4	25.0
5	14.1	17.3	5.5	3.8	15.1	31.6
10	34.8	131.9	10.8	48.5	436.3	238.4
15	70.4	-	15.8	343.8	-	784.6
20	96.0	-	22.5	1042.6	-	4515.3

Результаты эксперимента подтверждают известные выводы о численной неустойчивости метода сопряженных градиентов и высокой эффективности метода Давидона-Флетчера-Пауэлла. Метод сопряженных градиентов плохо решал или не решал вовсе с заданной точностью задачи с количеством переменных больше 10.

Проведенный численный эксперимент свидетельствует о высокой эффективности прямого опорного метода: хотя прямой опорный метод уступает методу Давидона-Флетчера-Пауэлла по количеству итераций, однако существенно превосходит его по скорости решения.

Список цитируемых источников

1. Ракецкий, В.М. К минимизации выпуклых функций с простыми ограничениями // Вестник Брестского государственного технического университета. – 2011. – № 5(71): Физика, математика, информатика. – С. 108–110
2. Банди, Б. Методы оптимизации. Вводный курс. – М.: Радио и связь, 1988. – 128 с.