

УДК: 519.85

Априорная поправка в ньютоновских методах оптимизации

А. Б. Свириденко

ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет» филиал в г. Новороссийске
Россия, 353922, г. Новороссийск, ул. Героев-Десантников, д. 87

E-mail: roshechka@gmail.com

*Получено 7 октября 2014 г.,
после доработки 23 марта 2015 г.*

Представлен подход к уменьшению значения нормы поправки в ньютоновских методах оптимизации, основанных на факторизации Холецкого, в основе которого лежит интеграция с техникой выбора ведущего элемента алгоритма линейного программирования как метода решения системы уравнений. Исследуются вопросы увеличения численной устойчивости разложения Холецкого и метода исключения Гаусса.

Ключевые слова: поправка, алгоритм, ньютоновский метод оптимизации, факторизация Холецкого, метод исключения Гаусса, линейное программирование, численная устойчивость, интеграция

The correction to Newton's methods of optimization

A. B. Sviridenko

FSEI of HPE «Kuban State University» branch in Novorossiysk, Geroev-Desantnikov street 87, Russia

Abstract. — An approach to the decrease of norm of the correction in Newton's methods of optimization, based on the Cholesky's factorization is presented, which is based on the integration with the technique of the choice of leading element of algorithm of linear programming as a method of solving the system of equations. We investigate the issues of increasing of the numerical stability of the Cholesky's decomposition and the Gauss' method of exception.

Keywords: correction, algorithm, Newton's methods of optimization, Cholesky's decomposition, Gauss' method of exception, linear programming, numerical stability, integration

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2015, vol. 7, no. 4, pp. 835–863 (Russian).

Ньютоновские методы

Рассматривается задача безусловной минимизации

$$\min_x F(x), x \in R^n, \quad (1)$$

где $F: R^n \rightarrow R^1$ — гладкая функция, а R^n обозначает n -мерное евклидово пространство.

Пусть h^k , H^k — градиент и гессиан, вычисленные на итерации k в точке x^k процесса решения задачи (1), тогда, в приведенных обозначениях, общий принцип построения большинства ньютоновских методов безусловной оптимизации с регулировкой шага состоит в следующем. На каждой итерации сначала строится некоторая «связанная» с H^k существенно положительно определенная матрица \overline{H}^k , а затем направление спуска p^k вычисляется как решение системы

$$\overline{H}^k p^k = -h^k \quad (2)$$

и определяется новая точка

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad (3)$$

где α_k — длина шага, для которого $F^{k+1} < F^k$. При этом процедуру построения \overline{H}^k организуют так, чтобы \overline{H}^k совпадала с исходной матрицей H^k , если последняя сама является положительно определенной, причем выяснение определенности H^k и построение \overline{H}^k осуществляется параллельно в рамках одной процедуры на основе некоторых матричных разложений, которые позволяют выявить знаки собственных чисел H^k и приспособиться для генерации \overline{H}^k .

Формула (2) не применима, когда x^k — седловая точка, так как в ней градиент равен нулю, и, соответственно, решение системы (2) тоже будет нулевым. Здесь в качестве p^k надо взять одно из направлений отрицательной кривизны — вектор, удовлетворяющий неравенству $(p^k)^T H^k p^k < 0$. В седловой точке, где матрица H^k не является знакоопределенной, такие векторы существуют, и при движении вдоль любого из них $F(x)$ будет убывать. Важно, чтобы алгоритм его построения по возможности использовал информацию, полученную в процессе построения матрицы \overline{H}^k . Фактически к нему надо обращаться, как только точка x^k попадает в малую окрестность седловой точки, например, когда норма $\|h^k\|_2$ станет меньше заданного допуска $\varepsilon_h > 0$.

Известно много процедур построения матрицы \overline{H}^k . Большинство из них численно неустойчивы, их подробный разбор можно найти в работе Мюррея [Murtagh, 1972]. Ниже рассмотрены наиболее известные на основе различных матричных разложений, позволяющих учитывать знаки собственных чисел H^k .

Методы доверительной окрестности. Ньютоновские методы распадаются на два обширных класса. Это «методы с регулировкой шага» и «методы доверительной окрестности». Основой для их построения служит суждение о том, что на точку минимума модельной квадратичной функции разумно ориентироваться только при условии, что она ищется в области, где эта функция хорошо описывает поведение $F(x)$. Размеры такой области предлагается характеризовать ограничением на величину нормы вычисляемого вектора направления поиска. Формали-

зованное правило выбора очередной точки x^{k+1} , воплощающее высказанные идеи, опишем следующим образом. В качестве x^{k+1} надо брать сумму $x^k + p^k$, где p^k есть решение при некотором значении порога Δ_k вспомогательной задачи

$$\min_p \left\{ p^T h^k + \frac{1}{2} p^T H^k p \right\}, \|p\|_2 \leq \Delta_k, p \in R^n. \quad (4)$$

В основе поиска p^k лежит следующее соображение. Если λ^k — число, при котором матрица $H^k + \lambda^k I$ положительно определена, то решение p^k системы уравнений

$$(H^k + \lambda^k I)p^k = -h^k \quad (5)$$

будет решением задачи (4) с порогом $\Delta_k \geq \|p^k\|_2$, когда $\lambda^k = 0$, и с порогом $\Delta_k = \|p^k\|_2$, когда $\lambda^k > 0$. Соответственно, p^k можно вычислить как решение системы (5). Из сказанного следует, что при положительно определенной матрице H^k и достаточно большом пороге Δ_k решение задачи (4) будет обычным ньютоновским направлением, а если оно окажется отличным от ньютоновского направления, то это является признаком существенности ограничения на норму направления поиска p^k и будет означать, что $\|p^k\|_2 = \Delta_k$.

Обычно направление поиска p^k определяется просмотром решений задачи (4) при нескольких значениях параметра Δ . В результате выбирается p^k , для которого величина $F(x^k + p^k)$ «существенно меньше», чем $F(x^k)$.

Идея построения направления поиска принадлежит Левенбергу [Levenberg, 1944] и Маркарту [Marquardt, 1963]. Применение данного подхода к функциям общего вида обсуждалось Гольдфельдом, Квандтом и Троттером [Goldfeld and th., 1966].

Отметим, что у методов с регулировкой шага и методов доверительной окрестности есть много общих черт.

Во-первых, они конструируются так, чтобы при приближении к точке минимума целевой функции $F(x)$ они становились эквивалентными классическому методу Ньютона.

Во-вторых, очередное приближение определяется некоторой скалярной величиной, значение которой подбирается из условия согласования истинного изменения $F(x)$ и его оценки, получающейся по квадратичной модели. В методах с регулировкой шага этим скаляром является длина шага α_k , а в методах доверительной окрестности — порог Δ_k . Правда, принципы выбора α_k и Δ_k различны. Величина α_k ищется как приближение шага в точку минимума вдоль направления p^k , как и в предлагаемых алгоритмах, что автоматически относит их и к классу методов с регулировкой шага, а Δ_k подбирается в соответствии с «качеством» предыдущих значений $F(x)$ без ориентации на какой-то «идеал».

В-третьих, если матрица H^k не является знакоопределенной и норма $\|h^k\|_2$ мала или равна нулю, то методы обоих типов должны сделать шаг вдоль направления отрицательной кривизны, вычисляемого по разложению самой H^k или ее модифицированной версии.

В-четвертых, когда матрица H^k становится знаконеопределенной, что существенно усложняет задачу оценки нормы $\|x^{k+1} - x^k\|$, в методах обоих типов расчет x^{k+1} ориентируется на ее положительную составляющую. В методах с регулировкой шага это проявляется явно в соответствующей модификации H^k . В методах доверительной окрестности это проявляется

неявно, через связь $\|x^{k+1} - x^k\|$ с размерами предыдущих шагов, выполненных при положительно определенных матрицах H^k .

Реализация метода доверительной окрестности всегда включает элементы, присущие методу с регулировкой шага, и наоборот. Например, в алгоритме с регулировкой шага должно быть ограничение на длину шага вида $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \Delta_k$. В свою очередь, метод доверительной окрестности будет использовать для настройки Δ_k какую-нибудь регуляризованную процедуру с полиномиальной интерполяцией.

Замечание. В основе построения таких процедур лежит комбинирование надежных, но не слишком быстрых вычислительных схем с быстродействующими схемами, но не слишком надежными. В результате получаются методы, которые в хороших случаях сходятся очень быстро, а в плохих случаях работают немногим хуже обычных гарантированных процедур [Гилл и др., 1985; Хакимова, Дикусар и др., 2010].

Сходство между методами обоих типов наиболее отчетливо проявляется в следующей ситуации. Предположим, что они стартуют в точке x^k , где матрица H^k положительно определена. Пусть далее ньютоновское направление p^k в точке x^k таково, что

$$\|p^k\|_2 \leq \Delta_k, F(x^k + p^k) > F(x^k), \quad (6)$$

тогда алгоритм с регулировкой шага будет искать длину шага α_k вдоль p^k , обеспечивающую существенное убывание функции $F(x)$ с помощью полиномиальной интерполяции. Величина, аналогичная α_k , будет вычислена и в методе доверительной окрестности, только здесь она сыграет роль множителя при пересчете порога Δ_k . После этого пути алгоритмов разойдутся. В методе с регулировкой шага очередным приближением станет точка $x^k + \alpha_k p^k$, лежащая в прежнем направлении, а в методе доверительной окрестности шаг будет сделан в новом направлении, найденном из решения нелинейного уравнения

$$\varphi(\lambda^k) = \|(H^k + \lambda^k I)^{-1} h^k\|_2 = \Delta_k \quad (7)$$

с меньшим значением Δ_k .

Наряду со сходными чертами между методами с регулировкой шага и методами доверительной окрестности имеются и значительные различия, связанные с характером использования информации о вторых производных. В методах с регулировкой шага матрицу H^k модифицируют так, чтобы изменения не затрагивали подпространства, натянутого на ее собственные векторы с положительными собственными значениями, что гарантирует сохранность существенно определенных H^k . Если же замена H^k осуществляется в методе доверительной окрестности, то она отражается на всех векторах, так как результатом замены H^k на матрицу

$$\overline{H}^k = H^k + \lambda^k I \quad (8)$$

будет сдвиг на λ^k всех собственных значений матрицы H^k .

Основной недостаток всех методов доверительной окрестности состоит в необходимости решения на каждом шаге итерационного процесса нелинейных алгебраических уравнений типа (7), что требует привлечения различных процедур регуляризации [Черноруцкий, 2011; Черноруцкий, 2013].

Методы, основанные на спектральном разложении. Для построения \overline{H}^k можно использовать собственные числа и векторы матрицы H^k . Основой служит спектральное разложе-

ние H^k вида

$$H^k = U \Lambda U^T = \sum_{i=1}^n \lambda_i u_i u_i^T, \quad (9)$$

где Λ — диагональная матрица, а U — ортонормированная матрица, составленные из собственных чисел и собственных векторов соответственно. Из этого разложения следует, что преобразование H^k «делит» пространство своих аргументов на два взаимно ортогональных подпространства. Одно из них, Ω_+ , натянуто на собственные векторы $\{u_i\}$, которым отвечают «существенно положительные» собственные значения. Набранную из этих векторов матрицу обозначим через U_+ . Второе, Ω_- , натянуто на остальные собственные векторы, образующие матрицу U_- . Следует отметить, что любая положительная комбинация тех столбцов матрицы U_- , которым отвечают отрицательные собственные значения, будет направлением отрицательной кривизны.

При переходе от H^k к \bar{H}^k желательно не затрагивать структуры преобразования H^k в отношении векторов из Ω_+ , тогда для существенно положительно определенных H^k будет гарантировано равенство $\bar{H}^k = H^k$, то есть модификация будет осуществляться только тогда, когда она действительно необходима. Данное условие обеспечено, если строить матрицу \bar{H}^k в виде

$$\bar{H}^k = U \bar{\Lambda} U^T, \quad (10)$$

где $\bar{\Lambda}$ есть положительно определенная матрица с $\bar{\lambda}_i = \lambda_i$, для которых λ_i существенно положительны. Диагональные элементы матрицы $\bar{\Lambda}$, отвечающие столбцам U_- , можно выбирать разными способами в зависимости от того, какие свойства требуются от матрицы \bar{H}^k .

В основу первого способа положено стремление использовать в качестве \bar{H}^k «ближайшую» к H^k положительно определенную матрицу. При таком выборе \bar{H}^k решением системы $\bar{H}^k p^k = -h^k$ будет вектор p^k , тяготеющий к подпространству Ω_- и имеющий большую норму. И то и другое — характерные особенности рассматриваемого подхода. По существу, это отображение того, что квадратичная модельная функция не ограничена снизу, и для ее минимизации надо сделать бесконечный шаг вдоль направления отрицательной кривизны. Отметим, что большое значение нормы вектора p^k вычислительных трудностей не порождает. Во-первых, p^k всегда можно перенормировать. Во-вторых, можно выставить подходящую верхнюю границу на длину шага в процедуре одномерного поиска.

Следующий способ определения \bar{H}^k заключается в том, чтобы заменить собственные числа матрицы H^k их абсолютными значениями, при этом составляющей направления p^k в подпространстве Ω_- будет вектор, равный по длине и противоположный по знаку к вектору, указывающему в точку минимума модельной функции в том же подпространстве.

Различие между закононеопределенной матрицей H^k и отвечающей ей \bar{H}^k при любом из двух рассмотренных способов выбора $\bar{\lambda}_i$ характеризуется неравенством $\|H^k - \bar{H}^k\| \leq 2|\lambda_{\min}|$,

где λ_{\min} — минимальное собственное число H^k . Кривизна минимизируемой функции вдоль направления p^k , вычисленного по формулам (2) и (10), может быть и отрицательной и положительной.

Расчет полной собственной системы H^k обычно требует от $2n^3$ до $4n^3$ арифметических операций. Таким образом, модификация H^k на основе спектрального разложения — довольно трудоемкая процедура. Подход с вычислением собственных векторов и собственных значений был предложен Гринштадтом [Greenstadt, 1967].

Методы, основанные на факторизации Холесского. Методы, основанные на спектральном разложении, представляют основу для дальнейших исследований, результаты которых могут быть использованы для построения более эффективных способов вычисления. Они основаны на факторизации (разложении) Холесского. В них подпространства Ω_- и Ω_+ описываются приближенно, что позволяет существенно сократить объем вычислений.

Известно, что любая положительно определенная матрица H^k представима в виде

$$H^k = L^k D^k (L^k)^T = (U^k)^T D^k U^k, \quad (11)$$

где $U^k = (L^k)^T$ — верхняя треугольная матрица с диагональными элементами, равными единице, а D^k — диагональная матрица с положительными ведущими элементами по диагонали. Когда скоро столбцы матрицы L^k с номерами от 1-го по $(j-1)$ -й известны, ее j -й столбец определяется по формулам

$$d_{jj}^k = h_{jj}^k - \sum_{s=1}^{j-1} d_{ss}^k (l_{js}^k)^2, \quad l_{ij}^k = \frac{1}{d_{jj}^k} \left(h_{ij}^k - \sum_{s=1}^{j-1} d_{ss}^k l_{js}^k l_{is}^k \right). \quad (12)$$

Аналогичные формулы существуют и для построчной организации вычислений. В отличие от гауссовых исключений алгоритм Холесского численно устойчив без каких-либо перестановок. Это свойство определяется соотношением

$$\sum_{i=1}^n (l_{ij}^k)^2 d_{jj}^k = h_{jj}^k, \quad j = 1, \dots, n \quad (13)$$

между элементами H^k и L^k . В силу него существует априорное ограничение сверху на элементы $r_{ij}^k = l_{ij}^k \sqrt{d_{jj}^k}$: каждый из них не превосходит максимальной величины h_{jj}^k . Соответственно, «лавинобразный рост» элементов r_{ij}^k невозможен независимо от того, будут ведущие элементы малыми или нет.

Предположение, что любую симметричную матрицу можно представить в виде (10), если не оговаривать знаки диагональных элементов D^k , ошибочно по двум причинам. Во-первых, для знаконеопределенной матрицы H^k факторизация Холесского может не существовать. Во-вторых, даже если она и существует, то гарантировать численную устойчивость алгоритма уже нельзя, поскольку никаких априорных ограничений на субдиагональные элементы U^k в рассматриваемом случае не будет.

Итак, на основе обычной факторизации Холесского построения \bar{H}^k не получить. Для этого нужно воспользоваться модифицированной факторизацией. Наиболее эффективная вычислительная схема предложена Гиллом и Мюрреем [Gill and th., 1974; Гилл и др., 1985].

Данный подход состоит в том, чтобы строить факторы Холесского D^k и L^k , подчиняющиеся двум требованиям: все диагональные элементы D^k должны быть существенно положи-

тельными, модули всех элементов треугольного фактора L^k должны быть равномерно ограничены сверху. Точнее говоря, требуется, чтобы для всех $j=1,2,\dots,n$ и некоторых заданных положительных δ и β выполнялись неравенства

$$d_{jj}^k \geq \delta, |r_{ij}^k| \leq \beta, i > j, \tag{14}$$

где r_{ij}^k — введенные для удобства изложения вспомогательные величины, по определению равные $u_{ij}^k \sqrt{d_{jj}^k}$. Выбор β обсуждается позже. Гринштадт [Гилл и др., 1977] предложил при реализации алгоритма на конкретной ЭВМ, в которой под запись мантииссы отводится t битов, величину δ вычислять по формуле

$$\delta = \max \{2^{-t} \|H^k\|_{\infty}, 2^{-t}\}. \tag{15}$$

При этом процедура расчета модифицированных факторов L^k, D^k фактически представляет собой обычный алгоритм факторизации Холецкого с попутным увеличением (по мере необходимости) диагонали исходной матрицы с целью добиться выполнения неравенств (14).

Рассмотрим j -й шаг предлагаемой процедуры. Пусть первые $j-1$ столбцов модифицированных факторов Холецкого известны и для $\mu=1,\dots,j-1$ условия (1.3.2.5) выполнены. Вычислим величину

$$\gamma_j = \left| \xi_j - \sum_{s=1}^{j-1} d_{ss}^k (l_{js}^k)^2 \right|, \tag{16}$$

где через ξ_j обозначен диагональный элемент h_{jj}^k матрицы H^k . В качестве значения \bar{d}_{jj}^k для j -го диагонального элемента D^k возьмем $\bar{d}_{jj}^k = \max\{\gamma_j, \delta\}$, где δ — малое положительное число из (14). Если же неравенства (14) при $d_{jj}^k = \bar{d}_{jj}^k$ нарушаются, иными словами, какие-то из r_{ij}^k оказываются больше, чем β , окончательное значение d_{jj}^k определим по формуле, получающейся из (16) заменой ξ_j на $h_{jj}^k + e_{jj}^k$, где число e_{jj}^k подбирается так, чтобы максимальная из величин r_{ij}^k совпала с β .

Матрицы L^k и D^k , полученные по окончании описанной процедуры, будут факторами Холецкого для положительно определенной матрицы \bar{H}^k , связанной с H^k следующим образом:

$$L^k D^k (L^k)^T = H^k + E^k = \bar{H}^k, \tag{17}$$

где E^k — неотрицательная диагональная матрица, j -й элемент которой равен e_{jj}^k . Таким образом, положительно определенная матрица \bar{H}^k может отличаться от исходной матрицы H^k только диагональными элементами.

Направление спуска p^k вычисляется как решение системы $\bar{H}^k p^k = -h^k$, причем $p^k = -(\bar{H}^k)^{-1} h^k$ определяют последовательным решением двух систем линейных уравнений с треугольными матрицами:

$$L^k y^k = -h^k, D^k (L^k)^T p^k = y^k. \tag{18}$$

При заданной матрице H^k диагональная поправка E^k с очевидностью зависит от величины β . Желательно, чтобы эта величина была достаточно большой, так как заниженное значение β приведет к неоправданной модификации. Для положительно определенной матрицы H^k из (14) следует, что при любом $i = 1, \dots, n$ и каждом $j (j < i)$ справедливо неравенство $(l_{ij}^k)^2 d_{ii}^k \leq h_{ii}^k$. Значит, чтобы обеспечить равенство нулю поправки E^k , если матрица H^k существенно положительно определена, в качестве β надо взять величину, удовлетворяющую неравенству $\beta^2 \geq \gamma$, где γ — значение максимального из диагональных элементов H^k .

Когда у матрицы H^k есть отрицательные собственные значения, поправка E^k будет ненулевой независимо от выбора β . При этом для $n > 1$ справедлива оценка

$$\|E^k(\beta)\|_{\infty} \leq \left(\frac{\xi}{\beta} + (n-1)\beta \right)^2 + 2(\gamma + (n-1)\beta^2) + \delta. \quad (19)$$

Здесь ξ — максимальный модуль не диагонального элемента H^k . Правая часть неравенства достигает минимума при $\beta^2 = \xi \sqrt{n^2 - 1}$ и неограниченно возрастает с увеличением β . Это говорит о том, что в общем случае слишком большие значения β столь же нежелательны, как и слишком малые. Помимо того, что завышенное значение β чревато потерей численной устойчивости процедуры построения \overline{H}^k , оно может еще и привести к неоправданно большому отклонению \overline{H}^k от H^k . Выбор бесконечного β , грубо говоря, означает, что диагональными элементами модифицированного фактора D^k будут модули диагональных элементов обычного (если обычное разложение возможно). Учитывая приведенные соображения, величину β вычисляют по формуле

$$\beta^2 = \max \left\{ \gamma, \xi / \sqrt{n^2 - 1}, \varepsilon_M \right\}. \quad (20)$$

Здесь ε_M — машинная точность. Она вводится в формулу расчета β , чтобы обеспечить устойчивость вычислений, когда норма H^k очень мала.

Модифицированная факторизация Холесского помимо прочего позволяет определить и направление отрицательной кривизны, решая уравнение $(L^k)^T p^k = e_s$, где индекс s выбирается из условия $d_{ss}^k - e_{ss}^k \leq d_{jj}^k - e_{jj}^k, j = 1, \dots, n$.

Для построения модифицированного разложения Холесского требуется выполнить около $\frac{1}{6}n^3$ арифметических операций, примерно столько же, сколько требуется для обычного разложения для положительно определенной матрицы.

Как отмечено в [Gill and th., 1974], «представленная процедура модифицированной факторизации Холесского — численно устойчивый алгоритм, генерирующий положительно определенную матрицу, которая может отличаться от исходной матрицы только диагональными элементами. Это оптимизированный алгоритм в том смысле, что параметр β подбирается в нем путем минимизации априорной поправки E^k при условии сохранения существенно положительно определенной матрицы неизменной. Следует также отметить, что реальная величина нормы E^k почти всегда оказывается меньше априорной оценки».

В [Гилл и др., 1977] авторы утверждают: «Мы не ожидаем значительного увеличения эффективности существующих алгоритмов, но верим в то, что их усовершенствование приведет

к уменьшению числа задач, не поддающихся решению. Большинство из ожидаемых изменений мало что изменит на практике, поскольку эти усовершенствования повлекут за собой лишь незначительные изменения в существующих программах».

Методы, основанные на других матричных разложениях. В основу модификации метода Ньютона можно положить законоопределенное симметричное разложение Банча и Парлета [Bunch and th., 1971]. Они показали, что для любой симметричной матрицы H^k существует представление

$$P^T H^k P = LBL^T, \quad (21)$$

где P — перестановочная, L — нижняя треугольная, а B — блочно-диагональная матрицы, причем блоки B имеют размерности, не превышающие двух. Возможность отражена в этой формуле потому, что такие перестановки необходимы для численной устойчивости процедуры расчета рассматриваемого разложения. Законоопределенная симметричная факторизация обладает одним существенным достоинством — она позволяет выяснить инерцию матрицы H^k . Инерция — это тройка чисел, задающих количество положительных, отрицательных и нулевых собственных значений. Дело в том, что инерции H^k и фактора B ее разложения совпадают, хотя сами наборы собственных значений у этих матриц, вообще говоря, различны. При этом двумерные блоки фактора B строятся так, что у каждого из них всегда есть одно отрицательное и одно положительное собственные значения. Следовательно, число положительных собственных значений H^k равно сумме числа положительных одномерных блоков матрицы B и числа ее двумерных блоков.

Идея использования законоопределенной симметричной факторизации для построения \bar{H}^k принадлежит Море и Соренсену [More and th., 1979] и состоит в том, чтобы, получив спектральное разложение для B ($B = U\Lambda U^T$) и положив $\bar{B} = U\bar{\Lambda}U^T$, где $\bar{\lambda}_i = \max\{|\lambda_i|, \delta\}$, вычислить \bar{H}^k по формуле

$$P^T \bar{H}^k P = LU\bar{\Lambda}U^T L^T. \quad (22)$$

Очевидно, что существенно положительно определенная матрица H^k останется неизменной. Расчет факторов законоопределенного симметричного разложения можно организовать так, что он потребует около n^3 арифметических операций и $O(n^3)$ операций сравнения. Схожая факторизация, требующая $O(n^2)$ сравнений, предложена Флетчером [Fletcher, 1976], а также Банчем и Кауфманом [Bunch and th., 1977]. Тем не менее, модификация H^k на основе законоопределенного симметричного разложения остается довольно трудоемкой процедурой.

Гольдфельд, Квандт и Троттер предложили способ расчета λ^k в формуле $(H^k + \lambda^k I)p^k = -h^k$ вычислительной схемы Левенберга [Goldfeld and th., 1966], требующий определения всех собственных векторов матрицы H^k . Их метод предполагает очень громоздкие вычисления, к тому же может сходиться медленнее в смысле числа итераций, чем методы Гринштадта и Левенберга.

Мюррей [Murrey, 1972] и Хебден [Hebden, 1973] разработали иную версию вычислительной схемы Левенберга [Levenberg, 1944], свободную от недостатков подхода Гольдфельда. В ней используется разложение Холесского матрицы $H^k + \lambda^k I$, причем, если возможно, значение λ^k полагается равным нулю. К сожалению, трудно сказать что-нибудь убедительное по поводу экспериментального сравнения их качеств, поскольку Хебден опубликовал результаты применения метода только для одной задачи. Все же целесообразность обращения к формуле $(H^k + \lambda^k I)p^k = -h^k$ представляется сомнительной. Во-первых, избавившись с ее помощью от

выбора длины шага α_k , приходим к столь же безрадостной обязанности определения параметров λ^k и Δ_k . Во-вторых, ограничение $\Delta_k \geq \|p^k\|_2$ способно сыграть положительную роль вдали от решения. Вблизи экстремума оно может лишь ухудшить сходимость метода. С другой стороны, когда от точки x^k до решения далеко, не так уж и важно, чтобы следующая точка x^{k+1} лежала в области, где модельная квадратичная функция хорошо аппроксимирует $F(x)$, поэтому ограничение $\Delta_k \geq \|p^k\|_2$ можно было бы снять. И, наконец, последнее. Не получив существенного выигрыша по функции $F(x)$ при переходе из x^k в x^{k+1} , придется по крайней мере еще один раз применить разложение Холесского и вычислить значение $F(x)$. В то же время для одной коррекции в алгоритме Гилла и Мюррея требуется только дополнительное вычисление функции.

И, наконец, последнее. Когда матрица H^k не является знакоопределенной и, соответственно, существуют направления отрицательной кривизны, учитывать их при выборе p^k можно по-разному. Ранее была сформулирована одна из простейших стратегий: брать в качестве p^k решение уравнения $\bar{H}^k p^k = -h^k$ во всех случаях, когда норма градиента достаточно велика по отношению к модулю значения целевой функции, а иначе — использовать в роли p^k какое-нибудь из направлений отрицательной кривизны. При этом направления отрицательной кривизны будут вычисляться только вблизи седловой точки.

Сформулированное правило можно расценивать как конкретную реализацию более общего правила, заключающегося в том, чтобы определять p^k по формуле $p^k = \varphi_1 p_1 + \varphi_2 p_2$, где p_1 — решение уравнения $\bar{H}^k p^k = -h^k$, p_2 — направление отрицательной кривизны, а φ_1 и φ_2 — неотрицательные числа. Подразумевается, что в случае положительной определенности матрицы H^k вес φ_2 равен нулю, φ_1 — единице (тем самым из формулы убирается несуществующий вектор p_2). Если в упомянутой выше стратегии нулевой вес φ_1 является исключением, то Флетчер и Фриман [Fletcher and th., 1977], например, считают, что брать φ_1 нулевым надо как можно чаще. Грэхем [Graham, 1976] предлагает определять веса по норме поправки для матрицы Гесса H^k при переходе от H^k к \bar{H}^k . Более общей схемы, в которых φ_1 и φ_2 вычисляются как функции длины шага α_k , можно найти в работах Мак-Кормика [McCormick, 1977], Море и Соренсена [Sorensen, 1980] и Гольдфарба [Goldfarb, 1980].

1. Основные направления развития подхода Гилла и Мюррея

Способ задания направления спуска p^k определяет «лицо» алгоритма [Гилл и др., 1977], а его изменение определяет основные направления развития подхода Гилла и Мюррея. В [Зеленков и др., 2013] доказано, что предложенный подход к развитию способа Гилла и Мюррея к построению p^k определяет решение проблемы масштабирования шагов при спуске, а следовательно, и аппроксимацию не квадратичными функциями, и интеграцию с методом доверительной окрестности. Краткое описание подхода, предложенного в [Зеленков и др., 2013], обобщается ниже.

Предложенный подход к вычислению длины шага α_k можно найти в работах [Хакимова и др., 2010; Хакимова, Дикусар и др., 2010]. В основе лежит интеграция подходов Пшеничного [Пшеничный и др., 1975], Полака [Полак, 1974], Карманова [Карманов, 1975], Гилла, Мюррея и Райт [Гилл и др., 1985].

Предложенный подход к оцениванию конечно-разностных интервалов и подход к конечно-разностной аппроксимации первых и вторых производных можно найти в [Зеленков и др., 2013]. В основе лежит интеграция подходов Полака [Полак, 1974], Гилла, Мюррея и Райт [Гилл и др., 1985]. Что же касается способов выбора конечно-разностных интервалов, то они практически ограничены работами Полака [Полак, 1974], Гилла, Мюррея и Райт [Гилл и др., 1985].

Предлагаемый в данной работе подход к модификации критериев останова, предложенных Гиллом, Мюрреем и Райт в [Гилл и др., 1985], обсуждается ниже.

В [Gill and th., 1974] авторы утверждают, что фактическое значение нормы E^k можно дополнительно уменьшить, если использовать симметричные перестановки столбцов и строк H^k . На очередном, j -м шаге факторизации в качестве j -й строки и j -го столбца надо брать ту из нетронутых пар, для которой величина γ_j в (16) максимальна. Такая стратегия приведет к разложению вида

$$P^T H^k P + E^k = L^k D^k (L^k)^T, \quad (1.1)$$

где P есть некоторая перестановочная матрица. В методе с перестановками поправка E^k инвариантна относительно нумерации переменных. Отсюда следует, что появление новых стратегий перестановок столбцов и строк матрицы H^k дает возможность дальнейшего уменьшения значения нормы поправки E^k .

В данной работе построением алгоритма доказывається, что решение проблемы масштабирования шагов при спуске определяет и подходы к уменьшению значения нормы поправки E^k , в основе которых лежит интеграция с техникой выбора ведущего элемента алгоритма линейного программирования (ЛП) как метода решения системы $H^k p^k = -h^k$.

В данной работе доказывається, что предлагаемый алгоритм ЛП позволяет по кубическому закону уменьшить число арифметических операций по сравнению с известными методами и, как следствие, уменьшить влияние погрешностей, в том числе и погрешностей округления.

В [Стренг, 1980] автор подчеркивает: «Линейная алгебра, в отличие от анализа, связана с решением только уравнений и не имеет дела с неравенствами. Это всегда казалось очевидным, но в конце концов я понял, что линейное программирование представляет собой контр-пример: они связаны с неравенствами, но, безусловно, являются частью линейной алгебры».

То же самое справедливо и в отношении ньютоновских методов. Это означает, что появление новых стратегий выбора ведущей строки и ведущего столбца в процедуре задания направления спуска приведет и к увеличению эффективности основного алгоритма численной линейной алгебры — исключению с частичным или полным выбором ведущего элемента, и наоборот, поэтому в данной работе стратегии выбора ведущего элемента исследуются средствами линейной алгебры, как и должно быть, а применение полученных результатов на данном этапе развития подхода Гилла и Мюррея ограничено только степенью усложнения вычислительной схемы расчета элементов D^k , U^k , u^k , обсуждаемой в [Зеленков и др., 2013].

Масштабирование шагов при спуске. Очередное приближение в алгоритме с регуляризацией шага определяется некоторой скалярной величиной α_k , называемой длиной шага, по формуле (3), при этом к вычислению длины шага α_k принято относиться как к некоторой отдельной процедуре.

Говоря о принципах выбора α_k , неизменно употребляют термин «масштабирование». Отметим, что четкого определения этого термина нет, поэтому с масштабированием связано немало путаницы и в публикациях его стараются не касаться. Выбор масштаба при спуске аналогичен по смыслу требованию подчинения длины шага α_k вдоль выбранного направления спуска p^k неравенствам $0 < \delta \leq \|\alpha_k p^k\| \leq \Delta$, где δ есть минимальное расстояние между x^k

и x^{k+1} , а Δ — оценка сверху расстояния от x^k до точки минимума $F(x)$ вдоль p^k . Корректные значения параметров δ и Δ , вообще говоря, зависят от x^k и $F(x)$.

По смыслу δ отражает точность, с которой удастся вычислять значения $F(x)$. Что же касается параметра Δ , то о его величине в общем случае ничего конкретного сказать нельзя. Библиотечные программы безусловной минимизации обычно предполагают, что он будет задан пользователем [Гилл и др., 1985].

Причины, по которым выбор Δ следует предоставить пользователю, как правило, обосновывают следующим образом. Во-первых, хорошо понимая свою задачу, он может назначением правильного Δ устранить угрозу переполнения при вычислении функций задачи в процедуре выбора длины шага α_k (например, из-за того что целевая функция не ограничена снизу вдоль выбранного направления). Во-вторых, повысить эффективность поиска, обеспечив вычисление функций только в «разумных точках». В-третьих, исключить бессмысленно большие шаги, провоцируемые несоблюдением критерия «существенного убывания» при меньших шагах. В-четвертых, стимулировать сходимость к решению, лежащему вблизи начальной точки.

Появление у матрицы H^k отрицательных собственных значений неизбежно усложняет проблему выбора масштабов при спуске, поскольку использование расстояния до точки минимума модельной функции здесь невозможно, так как это расстояние становится бесконечным. И независимо от того, смотреть ли на эту проблему как на проблему нормировки направления спуска или как на проблему выбора начальной оценки шага, универсального решения не видно. В то же время отсутствие «разумной» стратегии масштабирования приводит к тому, что поиск точки x^{k+1} , удовлетворяющей условию существенного убывания $F(x)$ вдоль p^k , превращается в трудоемкий процесс [Гилл и др., 1977; Гилл и др., 1985; Полак, 1974; Пшеничный и др., 1975]. Поэтому каждая модификация метода Ньютона должна включать какой-то свой явный и неявный способ масштабирования шагов.

В алгоритме Гилла и Мюррея [Гилл и др., 1985] направление спуска p^k , в конечном счете, вычисляется как решение системы

$$(L^k)^T p^k = U^k p^k = u^k, \quad (1.2)$$

где $u^k = (D^k)^{-1} y^k$, а y^k есть решение системы $L^k y^k = -h^k$. Величина элементов $|u_j^k|$ зависит от способа задания направления спуска. Следуя подходу Гилла и Мюррея, для численной устойчивости расчета элементов D^k , L^k , u^k достаточно потребовать изменения способа задания p^k так, чтобы для всех $j = 1, 2, \dots, n$ и некоторых заданных положительных δ , β и ω выполнялись неравенства

$$d_{jj}^k \geq \delta, |r_{ij}^k| \leq \beta, i > j, |u_j^k| \leq \omega. \quad (1.3)$$

Это может стать ключом к решению проблемы масштабирования шагов при спуске, но такое предположение ошибочно — подход линейной алгебры к вычислению направления спуска p^k исключает расчет элементов вектора u^k по ходу построения модифицированного разложения Холесского.

Замечание. В [Парлетт, 1983] автор утверждает: «Стандартный метод исключения Гаусса для решения системы линейных уравнений лучше всего представлять себе как процесс вычисления треугольного разложения матрицы коэффициентов. Множители, необходимые при исключении, суть элементы матрицы L , а результат есть матрица DU . С помощью этого разложения непосредственное решение полной системы $Bx = b$ сводится к решению двух треугольных систем.

Алгоритм решения системы $Bx = b$.

1. $B = LDU$ (треугольное разложение).
2. Найти c из системы $Lc = b$ (прямая подстановка).
3. Найти x из системы $(DU)x = c$ (обратная подстановка).

Это все, что нужно для случая малых матриц».

Нужен альтернативный подход, который опишем следующим образом. Равенства

$$H^k = (U^k)^T D^k U^k \tag{1.4}$$

достаточно для определения элементов матриц D^k, U^k . В скалярной форме это равенство выглядит следующим образом:

$$h_{ij}^k = \sum_{\mu=1}^i u_{\mu i}^k u_{\mu j}^k d_{\mu\mu}^k, \tag{1.5}$$

отсюда, полагая $u_{ii}^k = 1$, построим соотношения

$$d_{ii}^k = h_{ii}^k - \sum_{s=1}^{i-1} (u_{si}^k)^2 d_{ss}^k, \quad u_{ij}^k = \left(h_{ij}^k - \sum_{s=1}^{i-1} u_{si}^k u_{sj}^k d_{ss}^k \right) / d_{ii}^k, \quad j > i \tag{1.6}$$

для расчета элементов D^k, U^k . Построение факторов Холецкого математически эквивалентно применению метода исключения Гаусса к системе уравнений $H^k p^k = -h^k$ в прямом порядке, при этом техника исключения Гаусса позволяет получить соотношение

$$u_i^k = - \left(h_i^k - \sum_{s=1}^{i-1} u_s^k u_{si}^k d_{ss}^k \right) / d_{ii}^k \tag{1.7}$$

для расчета элементов вектора u^k и систему уравнений (1.2) для вычисления направления спуска p^k . Интеграция техники исключения Гаусса и факторизации Холецкого приводит к соотношениям (1.6), (1.7), которые с помощью элементарных арифметических операций позволяют вычислить элементы u^k по ходу построения факторов Холецкого.

Интеграция техники исключения Гаусса и факторизации Холецкого порождает множество численно устойчивых способов задания направления спуска p^k , в основе которых лежит требование, чтобы на очередном шаге вычислений коэффициентов факторов Холецкого соответствующий диагональный элемент матрицы D^k и соответствующий элемент вектора u^k сначала рассчитывались по вычисленным ранее значениям этих коэффициентов. Затем диагональный элемент D^k увеличивается настолько, насколько необходимо, чтобы все диагональные элементы D^k были существенно положительными, модули всех элементов U^k, u^k были равномерно ограничены сверху. Например, достаточно потребовать, чтобы для всех $j = 1, 2, \dots, n$ выполнялись неравенства

$$d_{ii}^k \geq \delta, \quad |u_{ij}^k| \leq 1, \quad j > i, \quad |u_i^k| \leq 1, \tag{1.8}$$

положив $d_{ii}^k = \max \left\{ \delta, |c_{ii}^k|, \theta_i^2 / \beta^2, |c_i^k|, \theta_i \right\}$, поскольку элементы $d_{ii}^k, c_{ij}^k / d_{ii}^k$ и c_i^k / d_{ii}^k определяют i -е строки матриц D^k, U^k, u^k и удовлетворяют неравенствам (1.8). Здесь $c_{ii}^k, c_{ij}^k, c_i^k$ — вспомогательные величины, определяемые следующим образом:

$$c_{ii}^k = h_{ii}^k - \sum_{s=1}^{i-1} (u_{si}^k)^2 d_{ss}^k, \quad c_{ij}^k = h_{ij}^k - \sum_{s=1}^{i-1} u_{si}^k u_{sj}^k d_{ss}^k, \quad j > i, \quad c_i^k = - \left(h_i^k - \sum_{s=1}^{i-1} u_s^k u_{si}^k d_{ss}^k \right). \tag{1.9}$$

Интеграция с методом доверительной окрестности. Ньютоновские методы распадаются на два обширных класса, это «методы с регулировкой шага» и «методы доверительной окрестности». Поэтому, как отмечено в [Гилл и др., 1985], «в настоящее время нет общепринятого определения “метода Ньютона” для расчета направления спуска при знаконеопределенной матрице вторых производных, поскольку среди специалистов нет согласия относительно того, как использовать локальную квадратичную аппроксимацию гладкой функции в этом случае». В [Черноруцкий, 2013] автор утверждает: «такая ситуация сохраняется и поныне».

Интеграция техники исключения Гаусса и факторизации Холецкого порождает множество способов интеграции с методом доверительной окрестности, например, следующим образом. В процессе построения D^k , U^k , u^k вычислить элементы $g_i^k = d_{ii}^k / l_i^k$ (если $d_{ii}^k > l_i^k \gamma$, взять $g_i^k = l_i^k / \gamma$), где $l_i^k = \max\{\delta, |d_{ii}^k|\}$, вычислить $\gamma^k = \max_{1 \leq i \leq n} g_i^k$ и определить направление спуска p^k из системы

$$\frac{1}{\gamma^k} \bar{H}^k p^k = -h^k. \quad (1.10)$$

Здесь параметр γ задается пользователем, число γ^k ($\gamma^k \geq 1$ по построению) характеризует степень однородности, при этом (1.10) есть простейшая форма аппроксимации, отличная от квадратичной. Пусть

$$\bar{H}^k p^k = -\gamma^k h^k = -h^k - (\gamma^k - 1)h^k = -h^k - G^k p^k, \quad (1.11)$$

где G^k есть диагональная матрица с элементами:

$$g_{ii}^k = \frac{(\gamma^k - 1)h_i^k}{p_i^k} \quad (1.12)$$

на диагонали, или

$$(\bar{H}^k + G^k) p^k = -h^k, \quad (1.13)$$

что означает сдвиг на g_{ii}^k всех i -х собственных значений матрицы \bar{H}^k . В методах с регулировкой шага матрицу H^k модифицируют так, чтобы изменения не затрагивали подпространства, натянутого на ее собственные векторы с положительными собственными значениями [Гилл и др., 1985]. Если же замена осуществляется в методе доверительной окрестности, то она отражается на всех векторах, так как результатом замены H^k на матрицу $\bar{H}^k = H^k + \lambda^k I$ будет сдвиг на λ^k всех собственных значений матрицы H^k [Гилл и др., 1985]. Из вышесказанного следует, что стратегия выбора направления спуска определяет и интеграцию с методом доверительной окрестности.

Критерии останова. Рассмотрим критерии останова так, чтобы условия окончания счета, ориентированные на задачи без ограничений, включали только один свободный параметр, который имеет смысл желаемой точности решения.

Существуют две естественные формы запроса точности: первая — когда указывается желаемая близость к оптимуму по точке, вторая — по значению функции $F(x)$. В определенных случаях между соответствующими уклонениями есть хорошая связь, и тогда неважно, какую форму принять. Но, если задача плохо обусловлена, постоянное значение $F(x)$ реализуется для точек x^k , которые очень по-разному удалены от x^* , и здесь ожидать хорошей близости x^k к x^* нельзя, рассчитывать можно только на близость $F(x^k)$ к $F(x^*)$. Поэтому предлагается

регулировать точность параметром τ_F — числом правильных разрядов $F(x^k)$, которые хотелось бы получить [Зеленков и др., 2013; Гилл и др., 1985; Хакимова, Дикусар и др., 2010].

При решении задач минимизации гладких функций неплохим индикатором удовлетворения в точке x^k сформулированного выше запроса на точность служат неравенства

$$|F(x^{k-1}) - F(x^k)| < 2^{-\tau_F} (1 + |F(x^k)|), \quad (1.14)$$

$$\|x^{k-1} - x^k\| < 2^{-\frac{\tau_F}{2}} (1 + \|x^k\|), \quad (1.15)$$

$$\|h^k\| \leq 2^{-\frac{\tau_F}{3}} (1 + |F(x^k)|). \quad (1.16)$$

Первые два неравенства суть признаки близости последовательностей $\{F(x^k)\}$ и $\{x^k\}$ к своим пределам. Третье представляет собой огрубление известного условия оптимальности $\|h^*\| = 0$.

Отметим, что хотя речь шла о близости $F(x^k)$ к $F(x^*)$, а об уклонении x^k от x^* ничего не говорилось, в список включено условие (1.15), относящееся непосредственно к x^k . Для правильно отмасштабированных задач его можно не вводить — оно будет следствием (1.14), а для других задач заставит алгоритм отыскивать более подходящие точки.

Нарушение (1.15) при выполненном условии (1.14) означает следующее. Либо направление спуска, выбранное в точке x^{k-1} , почти ортогонально градиенту, либо $F(x)$ имеет пологий минимум. В том и другом случае есть смысл продолжить поиск.

Конкретная формулировка условий (1.14)–(1.16) требует некоторых пояснений. Прежде всего, казалось бы, естественнее взять $2^{-\tau_F} (1 + |F(x^k)|)$ равным $2^{-\tau_F} |F(x^k)|$. Однако тогда при малых значениях $|F(x^k)|$ условие (5.1) было бы слишком жестким.

Как правило, такие значения $F(x^k)$ получаются сложением существенно отличных от нуля величин противоположных знаков и, следовательно, вычисляются с низкой относительной точностью.

Замечание. Для оценки близости $F(x^k)$ к $F(x^*)$ и при нулевом значении $F(x^k)$ и при $F(x^k)$ порядка единицы разумно использовать один эталон.

Именно это соображение и определило выбор величины $2^{-\tau_F} (1 + |F(x^k)|)$ в условиях (1.14) и (1.16). Присутствие $\|x^k\|$ справа в условии (1.15) оправдано желанием ослабить зависимость оценки близости x^{k-1} к x^k от масштаба переменных, а единичная добавка к величине $\|x^k\|$ полезна по тем же соображениям, что и в (1.14).

Условия (1.14)–(1.16) выполняются, когда, попав в точку x^{k-1} , алгоритм делает еще один шаг. На случай, если x^{k-1} окажется настолько близкой к x^* , что выйти из нее с уменьшением $F(x)$ не удастся, предусматривают альтернативный останов по признаку:

$$\|h^k\| < \varepsilon_n. \quad (1.17)$$

В методах ньютоновского типа наряду с (1.14)–(1.17) полезно использовать условие существенной положительной определенности матрицы H^k , причем следует отметить, что в методах с конечно-разностной аппроксимацией вместо аналитических значений первых и вторых производных можно подставить их численные оценки.

В процессе решения задач, возникающих на практике, с сохранением условия замечания 2.5 предлагается перейти от (1.14) и (1.16) к следующим условиям:

$$\left| F(x^{k-1}) - F(x^k) \right| < 2^{-\tau_F} \left(1 + \left| F(x^{k-1}) - F(x^k) \right| \right), \quad (1.18)$$

$$\|h^k\| \leq 2^{-\frac{\tau_F}{3}} \left(1 + \left| F(x^{k-1}) - F(x^k) \right| \right), \quad (1.19)$$

что является ужесточением условий останова, позволяющим повысить точность решения, и хорошо согласуется с численными экспериментами [Зеленков и др., 2013].

2. Стратегии уменьшения значения нормы поправки

Ниже приведена вычислительная схема организации расчетов элементов D^k , U^k , u^k , предложенная авторами в работе [Зеленков и др., 2013]. Все фигурирующие в ней величины при реализации на ЭВМ могут размещаться в памяти, первоначально выделяемой для записи матриц H^k , h^k . При этом коэффициенты рассчитываемых факторов занимают места ее использованных элементов [Свириденко, 2015; Свириденко и др., 2015]. В процессе вычисления i -й строки фактора U^k участвуют вспомогательные величины (1.9). В процессе построения системы уравнений $U^k p^k = u^k$ на каждой итерации k выявляются знаки собственных чисел, вычисляется количество отрицательных n_o и нулевых n_0 собственных значений, число переходов к направлению отрицательной кривизны n_s .

Вычислительная схема 2.1 расчета элементов D^k , U^k , u^k .

Шаг 0. Вычислить $\beta^2 = \max\{\gamma^0, \xi / \nu, \varepsilon_M\}$, где $\nu = \max\{1, \sqrt{n^2 - 1}\}$, а числа γ^0 и ξ суть максимальные значения модулей диагонального и недиагонального элементов H^k . Положить $\varepsilon_0 = 2^{-\frac{\tau_F}{2}}$, $\varepsilon_s = 2^{-\frac{\tau_F}{3}} (1 + \|F(x^{k-1}) - F(x^k)\|)$. Здесь τ_F — число правильных разрядов $F(x^k)$, которые хотелось бы получить.

Шаг 1. Положить $i = 1$, положить $c_{jj}^k = h_{jj}^k, j = 1, \dots, n$, $c_j^k = -h_j^k, j = 1, \dots, n$.

Шаг 2. Найти индекс q , такой, что $|c_{qq}^k| = \max_{i \leq j \leq n} |c_{jj}^k|$, и поменять местами все данные, отвечающие строкам матрицы H^k с номерами q и i , а затем проделать то же самое с данными, отвечающими ее q -му и i -му столбцам.

Шаг 3. Если $c_{ii}^k < \varepsilon_0$, то положить $l_i^k = \delta$; иначе положить $l_i^k = c_{ii}^k$.

Шаг 4. Если $|c_{ii}^k| \leq \varepsilon_0$, то положить $n_0 = n_0 + 1$ и перейти к шагу 8; иначе перейти к шагу 5.

Шаг 5. Если $c_{ii}^k > 0$, то перейти к шагу 8; иначе перейти к шагу 6.

Шаг 6. Положить $n_o = n_o + 1$. Если $\|h^k\| > \varepsilon_s$, то перейти к шагу 8; иначе перейти к шагу 7.

Шаг 7. Построить систему уравнений $U^k p^k = e_i$ для поиска направления отрицательной кривизны по формулам $u_j^k = 0, j = 1, \dots, n$, $u_i^k = 1$, положить $n_s = n_s + 1$ и остановиться.

Шаг 8. если $i = n$, то положить $\theta_i = 0$; иначе вычислить вспомогательные величины $c_{ij}^k, j = i + 1, \dots, n$, по формуле $c_{ij}^k = h_{ij}^k - \sum_{s=1}^{i-1} u_{si}^k u_{sj}^k d_{ss}^k$ и найти $\theta_i = \max_{i+1 \leq j \leq n} |c_{ij}^k|$.

Шаг 9. Вычислить диагональный элемент фактора D^k и элемент вектора u^k по формулам $d_{ii}^k = \max\{\delta, |c_{ii}^k|, \theta_i^2 / \beta^2, |c_i^k|, \theta_i\}$, $u_i^k = c_i^k / d_{ii}^k$. Вычислить $g_i^k = d_{ii}^k / l_i^k$ (если $d_{ii}^k > l_i^k \gamma$, взять $g_i^k = l_i^k / \gamma$). Если $i = n$, то перейти к шагу 11.

Шаг 10. Вычислить строку $u_{ij}^k = c_{ij}^k / d_{ii}^k, j = i + 1, \dots, n$, фактора U^k , пересчитать вспомогательные величины по формулам $c_{jj}^k = c_{jj}^k - u_{ij}^k c_{ij}^k, j = i + 1, \dots, n, c_j^k = c_j^k - u_{ij}^k c_i^k, j = i + 1, \dots, n$, положить $i = i + 1$ и перейти к шагу 2.

Шаг 11. Найти $\gamma^k = \max_{1 \leq i \leq n} g_i^k$, положить $u^k = \gamma^k u^k$ и остановиться.

При заданной матрице H^k норма поправки E^k зависит от величины β , которая вычисляется на шаге 0 вычислительной схемы по формуле $\beta^2 = \max\{\gamma^0, \xi / \nu, \varepsilon_M\}$, где $\nu = \max\{1, \sqrt{n^2 - 1}\}$, а числа γ^0 и ξ суть максимальные значения модулей диагонального и недиагонального элементов H^k [Гилл и др., 1985].

Замечание. Величина β с очевидностью зависит от способа задания направления спуска и, как следствие, от величин c_j^k, g_i^k . Рассмотрение предлагаемой формулы вычисления величины β , учитывающей такую зависимость, не является целью данной работы и находится в стадии экспериментального сравнения эффективности.

Фактически значение нормы поправки E^k можно дополнительно уменьшить, если использовать симметричные перестановки строк и столбцов H^k на шаге 2 вычислительной схемы 2.1 следующим образом. Найти индекс q , такой, что $|c_{qq}^k| = \max_{i \leq j \leq n} |c_{jj}^k|$, и поменять местами все данные, отвечающие строкам матрицы H^k с номерами q и i , а затем проделать то же самое с данными, отвечающими ее q -му и i -му столбцам.

Построение новых стратегий дополнительного уменьшения значения нормы поправки E^k состоит в использовании элементов c_{jj}^k, c_j^k для определения индекса q на шаге 2 вычислительной схемы 2.1. В основе построения лежит интеграция с техникой выбора ведущей строки и ведущего столбца алгоритма ЛП как метода решения системы $H^k p^k = -h^k$. Такой подход генерирует множество конкретных реализаций, поэтому, следуя Гиллу и Мюррею [Гилл и др., 1985], опишем феноменологию построения основных стратегий на следующем примере.

Пример 2.1. Решить систему

$$l_j(p) = h_j^k + h_{j1}^k p_1 + h_{j2}^k p_2 + h_{j3}^k p_3 = 0 \quad (j = 1, 2, 3) \tag{2.1}$$

с $h^k = (-1, -2, -3)^T$ и матрицей Гильберта: $H^k = \begin{pmatrix} 1 & 0,5 & 0,333 \\ 0,5 & 0,333 & 0,25 \\ 0,333 & 0,25 & 0,2 \end{pmatrix}$.

Решим систему (2.1) методом исключения Гаусса с точностью до трех значащих цифр после запятой, используя стратегию полного выбора ведущего элемента (nb):

$$p^{nb} = (21,442 \quad -176,421 \quad 194,500)^T.$$

Для полученного решения нормированная сумма модулей невязок:

$$\rho^{nb} = \frac{|l_1(p^{nb})| + |l_2(p^{nb})| + |l_3(p^{nb})|}{3} = 1,822.$$

В данном случае выбор ведущего элемента не помогает, поскольку матрица H^k является плохо обусловленной, поэтому системы с матрицей Гильберта могут использоваться для срав-

нительной оценки численной устойчивости алгоритмов [Стренг, 1980]. Данный результат подтверждают и выводы Вержбицкого [Вержбицкий, 2005] о необходимости разработки алгоритмов, возможно более сложных, чем метод Гаусса или Холесского, но не допускающих большого роста элементов в процессе преобразований и, как следствие, численно более устойчивых. Это связано с тем, что ряд практических задач подвержены сильному влиянию погрешностей округления, причем стратегия полного выбора ведущего элемента не дает должного эффекта. Подобные утверждения делали Гилл, Мюррей и Райт [Гилл и др., 1985].

2.1. Частичный выбор ведущего элемента

В основе предлагаемой модификации метода исключения Гаусса лежит интеграция техники алгоритма ЛП для выбора ведущей строки [Хакимова и др., 2010]. Проиллюстрируем работу полученного алгоритма, используя стратегию частичного выбора ведущего элемента (*счв*) на следующем примере.

Пример 2.1.1. Решить систему (2.1) с точностью до трех значащих цифр после запятой.

Шаг 0. (Инициализация.) Положить $p^0 = (0 \ 0 \ 0)^T$.

Шаг 1. (Исключение.) Вычислить номер r ведущей строки по формуле

$$\theta_r = \max_j |l_j(p^0)| \quad (j=1,2,3) = |l_3(p^0)| = 3,$$

вычислить номер q ведущего столбца по формуле

$$\Theta_q = \max_i |h_{3i}^k| \quad (i=1,2,3) = |h_{31}^k| = 0,333,$$

пересчетом величин h_j^k , h_{ji}^k перейти к эквивалентной системе

$$p_1 = 9,009 - 0,750p_2 - 0,600p_3, \quad l_j(p) = 0 \quad (j=1,2), \quad (2.1.1)$$

положить $p^1 = (9,009 \ 0 \ 0)^T$.

Шаг 2. (Исключение.) Вычислить номер r ведущей строки по формуле

$$\theta_r = \max_j |l_j(p^1)| \quad (j=1,2) = |l_1(p^1)| = 8,009,$$

построить (подстановкой $p_1 = 9,009 - 0,750p_2 - 0,600p_3$) уравнение связи $l_1(p) = 0$:

$$8,009 - 0,250p_2 - 0,267p_3 = 0,$$

вычислить номер q ведущего столбца по формуле

$$\Theta_q = \max_i |h_{1i}^k| \quad (i=2,3) = |h_{13}^k| = 0,267,$$

обратной подстановкой $p_3 = 29,996 - 0,936p_2$ в (2.1.1) пересчитать величины h_j^k , h_{ji}^k и перейти к эквивалентной системе

$$p_1 = -8,988 - 0,189p_2, \quad p_3 = 29,996 - 0,936p_2, \quad l_2(p) = 0, \quad (2.1.2)$$

положить $p^2 = (-8,988 \ 0 \ 29,996)^T$.

Шаг 3. (Решение.) Построить (подстановкой $p_1 = -8,988 - 0,189p_2$, $p_3 = 29,996 - 0,936p_2$) уравнение связи $l_2(p) = 0$:

$$p_2 + 201 = 0$$

и обратной подстановкой $p_2 = -201$ в (2.1.2) вычислить решение системы

$$p^{счв} = (29,001 \quad -201 \quad 218,132)^T, \quad \rho^{счв} = 0,090, \quad \rho^{счв} \ll \rho^{нв}.$$

Использование данной стратегии для модификации вычислительной схемы 2.1 повлечет изменение порядка пересчета вспомогательных величин и потерю фактора U^k , поэтому на примере 2.1.2 опишем следующую модификацию стратегии частичного выбора ведущего элемента (*мсчв*), позволяющую сохранить фактор U^k и порядок пересчета вспомогательных величин.

Пример 2.1.2. Решить систему (2.1) с точностью до трех значащих цифр после запятой.

Шаг 1. (Исключение.) Вычислить номер r ведущей строки по формуле

$$\theta_r = \max_j |h_j^k| \quad (j = 1, 2, 3) = |h_3^k| = 3,$$

вычислить номер q ведущего столбца по формуле

$$\Theta_q = \max_i |h_{3i}^k| \quad (i = 1, 2, 3) = |h_{31}^k| = 0,333,$$

подстановкой $p_1 = 9,009 - 0,750p_2 - 0,600p_3$ в уравнения $l_j(p) = 0 \quad (j = 1, 2)$ пересчитать величины h_j^k , h_{ji}^k и перейти к эквивалентной системе

$$\begin{aligned} l_3(p) &= 9,009 - p_1 - 0,750p_2 - 0,600p_3 = 0, \\ l_1(p) &= 8,009 - 0,250p_2 - 0,267p_3 = 0, \\ l_2(p) &= 2,504 - 0,042p_2 - 0,050p_3 = 0. \end{aligned} \quad (2.1.1)$$

Шаг 2. (Исключение.) Вычислить номер r ведущей строки по формуле

$$\theta_r = \max_j |h_j^k| \quad (j = 1, 2) = |h_1^k| = 8,009,$$

вычислить номер q ведущего столбца по формуле:

$$\Theta_q = \max_i |h_{1i}^k| \quad (i = 2, 3) = |h_{13}^k| = 0,267,$$

подстановкой $p_3 = 29,996 - 0,936p_2$ в уравнение $l_2(p) = 0$ пересчитать величины h_j^k , h_{ji}^k и перейти к эквивалентной системе

$$\begin{aligned} l_3(p) &= 9,009 - p_1 - 0,600p_3 - 0,750p_2 = 0, \\ l_1(p) &= 29,996 - p_3 - 0,936p_2 = 0, \\ l_2(p) &= 251 + p_2 = 0. \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

Шаг 3. (Решение.) Обратной подстановкой вычислить решение системы

$$p^{мсчв} = (38,299 \quad -251 \quad 264,932)^T, \quad \rho^{мсчв} = 0,077, \quad \rho^{мсчв} \approx \rho^{счв} = 0,090.$$

Формула выбора ведущей строки примера 2.1.2 не применима, когда $\|h^k\|$ не равна нулю, но очень мала, поэтому использование данной стратегии для модификации вычислительной

схемы 2.1 опишем следующим образом. Фактическое значение нормы поправки E^k можно уменьшить, если использовать симметричные перестановки строк и столбцов H^k . На очередном i -м шаге факторизации в качестве i -й строки и i -го столбца надо брать ту из нетронутых пар, для которой величина $|c_{ii}^k| + |c_i^k|$ максимальна. Такая стратегия дает возможность увеличить численную устойчивость расчета элементов D^k , U^k , u^k и остается работоспособной и в том случае, когда $\|h^k\|$ не равна нулю, но очень мала.

Вычислительная схема 2.1.1 расчета элементов D^k , U^k , u^k .

Шаг 0. Вычислить $\beta^2 = \max\{\gamma^0, \xi / \nu, \varepsilon_M\}$, где $\nu = \max\{1, \sqrt{n^2 - 1}\}$, а числа γ^0 и ξ суть максимальные значения модулей диагонального и недиагонального элементов H^k . Положить $\varepsilon_0 = 2^{-\frac{\tau_F}{2}}$, $\varepsilon_s = 2^{-\frac{\tau_F}{3}}(1 + \|F(x^{k-1}) - F(x^k)\|)$. Здесь τ_F — число правильных разрядов $F(x^k)$, которые хотелось бы получить.

Шаг 1. Положить $i = 1$, положить $c_{jj}^k = h_{jj}^k, j = 1, \dots, n$, $c_j^k = -h_j^k, j = 1, \dots, n$.

Шаг 2. Найти индекс q , такой, что $|c_{qq}^k| = \max_{i \leq j \leq n} (|c_{ij}^k| + |c_j^k|)$, и поменять местами все данные, отвечающие строкам матрицы H^k с номерами q и i , а затем проделать то же самое с данными, отвечающими ее q -му и i -му столбцам.

Шаг 3. Если $c_{ii}^k < \varepsilon_0$, то положить $l_i^k = \delta$; иначе положить $l_i^k = c_{ii}^k$.

Шаг 4. Если $|c_{ii}^k| \leq \varepsilon_0$, то положить $n_0 = n_0 + 1$ и перейти к шагу 8; иначе перейти к шагу 5.

Шаг 5. Если $c_{ii}^k > 0$, то перейти к шагу 8; иначе перейти к шагу 6.

Шаг 6. Положить $n_o = n_o + 1$. Если $\|h^k\| > \varepsilon_s$, то перейти к шагу 8; иначе перейти к шагу 7.

Шаг 7. Построить систему уравнений $U^k p^k = e_i$ для поиска направления отрицательной кривизны по формулам $u_j^k = 0, j = 1, \dots, n$, $u_i^k = 1$, положить $n_s = n_s + 1$ и остановиться.

Шаг 8. если $i = n$, то положить $\theta_i = 0$; иначе вычислить вспомогательные величины $c_{ij}^k, j = i + 1, \dots, n$, по формуле $c_{ij}^k = h_{ij}^k - \sum_{s=1}^{i-1} u_{si}^k u_{sj}^k d_{ss}^k$ и найти $\theta_i = \max_{i+1 \leq j \leq n} |c_{ij}^k|$.

Шаг 9. Вычислить диагональный элемент фактора D^k и элемент вектора u^k по формулам $d_{ii}^k = \max\{\delta, |c_{ii}^k|, \theta_i^2 / \beta^2, |c_i^k|, \theta_i\}$, $u_i^k = c_i^k / d_{ii}^k$. Вычислить $g_i^k = d_{ii}^k / l_i^k$ (если $d_{ii}^k > l_i^k \gamma$, взять $g_i^k = l_i^k / \gamma$). Если $i = n$, то перейти к шагу 11.

Шаг 10. Вычислить строку $u_{ij}^k = c_{ij}^k / d_{ii}^k, j = i + 1, \dots, n$, фактора U^k , пересчитать вспомогательные величины по формулам $c_{jj}^k = c_{jj}^k - u_{ij}^k c_{ij}^k, j = i + 1, \dots, n$, $c_j^k = c_j^k - u_{ij}^k c_i^k, j = i + 1, \dots, n$, положить $i = i + 1$ и перейти к шагу 2.

Шаг 11. Найти $\gamma^k = \max_{1 \leq i \leq n} g_i^k$, положить $u^k = \gamma^k u^k$ и остановиться.

В примере 2.1.1 и 2.1.2 рассмотрены две схемы реализации метода Гаусса. Полученные результаты являются основой для дальнейших исследований и могут быть использованы как для уменьшения нормы поправки, так и для модификаций основного алгоритма численной линейной алгебры — исключению с частичным выбором ведущего элемента (факторизация Холецкого — это просто другая схема реализации метода Гаусса [Вержицкий, 2005]).

2.2. Полный выбор ведущего элемента

Решение системы в предлагаемой модификации частичного выбора ведущего элемента определяется решением задачи оптимизации, причем в рамках одной процедуры производится и выбор ведущего элемента, и исключение переменных по правилам алгоритма ЛП [Хакимова и др., 2010]. Проиллюстрируем работу полученного алгоритма, используя стратегию полного выбора ведущего элемента (*снв*), на следующем примере.

Пример 2.2.1. Решить систему (2.1) с точностью до трех значащих цифр после запятой.
Шаг 0. (Инициализация). Построить задачу

$$\min p_0 = \sum_{i=1}^3 c_i p_i \mid l_j(p) = 0 \quad (j=1,2,3), \quad (2.2.1)$$

положить $c_i = 1$, $p^0 = (0 \ 0 \ 0)^T$ и перейти к шагу 1.

Шаг 1. (Исключение.) Вычислить номер r ведущей строки по формуле:

$$\theta_r = \max_j |l_j(p^0)| \quad (j=1,2,3) = |l_3(p^0)| = 3,$$

вычислить номер q ведущего столбца по формуле

$$\Theta_q = \min_i \left| \frac{c_i}{h_{3i}^k} \right| \quad (i=1,2,3) = \left| \frac{c_1}{h_{31}^k} \right| = \frac{1}{0,333},$$

обратной подстановкой $p_1 = 9,009 - 0,750p_2 - 0,600p_3$ в (2.2.1) пересчитать величины c_i , h_j^k , h_{ji}^k и перейти к эквивалентной задаче

$$\min p_0 = 0,25p_2 + 0,4p_3 \mid p_1 = 9,009 - 0,750p_2 - 0,600p_3, \quad l_j(p) = 0 \quad (j=1,2), \quad (2.2.2)$$

положить $p^1 = (9,009 \ 0 \ 0)^T$.

Шаг 2. (Исключение.) Вычислить номер r ведущей строки по формуле

$$\theta_r = \max_j |l_j(p^1)| \quad (j=1,2) = |l_1(p^1)| = 8,009,$$

построить (подстановкой $p_1 = 9,009 - 0,750p_2 - 0,600p_3$) уравнение связи $l_1(p) = 0$:

$$-1 + (9,009 - 0,750p_2 - 0,600p_3) + 0,5p_2 + 0,333p_3 = 8,009 - 0,250p_2 - 0,267p_3 = 0,$$

вычислить номер q ведущего столбца по формуле

$$\Theta_q = \min_i \left| \frac{c_i}{h_{1i}^k} \right| \quad (i=2,3) = \left| \frac{c_2}{h_{12}^k} \right| = \frac{0,25}{0,5},$$

обратной подстановкой $p_2 = 32,036 - 1,068p_3$ в (2.2.2) пересчитать величины c_i , h_j^k , h_{ji}^k и перейти к эквивалентной задаче

$$\min p_0 = p_3 \mid p_1 = -15,018 + 0,201p_3, \quad p_2 = 32,036 - 1,068p_3, \quad l_2(p) = 0, \quad (2.2.3)$$

положить $p^2 = (-15,018 \ 32,036 \ 0)^T$.

Шаг 3. (Решение.) Построить (подстановкой $p_1 = -15,018 + 0,201p_3$, $p_2 = 32,036 - 1,068p_3$) уравнение связи $l_2(p) = 0$:

$$-2 + 0,5(-15,018 + 0,201p_3) + 0,333(32,036 - 1,068p_3) + 0,25p_3 = 1,158 - 0,005p_3 = 0.$$

Обратной подстановкой $p_3 = 231,600$ в (2.2.3) вычислить решение системы

$$p^{cнв} = (31,533 \quad -215,312 \quad 231,600)^T, \quad \rho^{cнв} = 0,04, \quad \rho^{нв} \ll \rho^{cнв} \ll \rho^{счв}.$$

Замечание. Использование данной стратегии повлечет изменение не только порядка пересчета вспомогательных величин, но и потерю фактора U^k , поэтому ее применение для уменьшения поправки приведет в излишнему усложнению вычислительной схемы алгоритма, однако полученные результаты могут быть использованы для модификаций основного алгоритма численной линейной алгебры — исключению с полным выбором ведущего элемента.

Предлагаемый алгоритм ЛП, как метод решения системы $H^k p^k = -h^k$, представляет собой модификацию вычислительной схемы метода исключения Гаусса, рассмотренной в примере 2.1.1 (однако в основу модификации можно положить и вычислительную схему примера 2.1.2). Причем для вычисления направления спуска p^k требуется выполнить около $\frac{1}{6}n^3$ арифметических операций, примерно столько же, сколько требуется для построения модифицированного разложения Холесского. Вычислительная схема примера 2.1.2 лежит в основе численно устойчивой модификации для построения ньютоновских методов безусловной оптимизации и описана в [Хакимова и др., 2003].

Замечание. Вычислительная схема предлагаемого алгоритма ЛП допускает модификацию, которая позволяет выявить знаки собственных чисел H^k и приспособиться для генерации \bar{H}^k , при этом процедуру построения \bar{H}^k можно организовать так, чтобы \bar{H}^k совпадала с исходной матрицей H^k , если последняя сама является положительно определенной, причем выяснение определенности H^k и вычисление направление спуска p^k осуществляется параллельно в рамках одной процедуры. Рассмотрение нового подхода к построению ньютоновских методов безусловной оптимизации не является целью данной работы и находится в стадии экспериментального сравнения эффективности.

Докажем, что предложенный в работе [Хакимова и др., 2010] алгоритм ЛП позволяет уменьшить по кубическому закону число арифметических операций, необходимых для решения задачи линейного программирования по сравнению с известными методами на примере мультипликативного алгоритма симплекс-метода, поскольку системы уравнений могут иметь большую размерность.

Вычислительная схема мультипликативного алгоритма симплекс-метода

Как правило, описание вычислительной схемы мультипликативного алгоритма симплекс-метода для решения задачи линейного программирования (здесь и далее ЛП)

$$\max \sum_{i \in N} c_i x_i \quad \left| \quad \sum_{i \in N} a_{ji} x_i \leq b_j \quad (j \in M), \quad x_i \geq 0 \quad (i \in N) \right. \quad (2.2.4)$$

связывают с выделением базисной системы ограничений следующим образом [Хакимова и др., 2010]. Пусть имеется базис $(x_{n_1}, \dots, x_{n_m})$ и базисная матрица $B_v = (a_{\bullet n_1}, \dots, a_{\bullet n_m})$, а также мультип-

Шаги с 1-го по 5-й повторяются до тех пор, пока не будет достигнут оптимум или пока на шаге 4 не выяснится, что $x_{jk} \leq \varepsilon_{piv}$, $j=1, \dots, m$, иными словами, решение задачи не ограничено.

Вычислительная схема предлагаемого мультипликативного алгоритма

Для обеспечения возможности теоретического сравнения эффективности алгоритмов искусственно выделим этап построения допустимой базисной системы ограничений так. Рассмотрим задачу, двойственную (2.2.4):

$$\min \sum_{j \in M} b_j u_j \quad l_i(u) = \sum_{j \in M} a_{ji} u_j - c_i \geq 0 \quad (i \in N), \quad u_j \geq 0 \quad (j \in M), \quad (2.2.13)$$

выберем сколь угодно большую скалярную величину c , $-c < \sum_{j \in M} b_j u_j^*$, где u^* — решение задачи (2.2.13), тогда очередная итерация первого этапа в терминах мультипликативного алгоритма симплекс-метода состоит из следующих шагов.

Шаг 0. Определить номер ведущей строки из соотношения $\theta = x_{\bar{r}0} = \min_j x_{j0} = \min_j b_j$.

Если $\theta < 0$, то вычислить начальное двойственное решение вектора оценок строк по формуле

$$u_j^0 = 0, j \neq \bar{r}, \quad u_{\bar{r}}^0 = -c / x_{\bar{r}0},$$

вычислить обратную базисную матрицу по формуле

$$B_v^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & -x_{10} / x_{\bar{r}0} & & \\ & \ddots & \vdots & & \\ & & 1 / x_{\bar{r}0} & & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & -x_{m0} / x_{\bar{r}0} & & 1 \end{pmatrix},$$

положить $\nu = 1$ и перейти к шагу 1 первого этапа. Если $\theta \geq 0$, то вычислить двойственное решение вектора оценок строк по формуле $u_j^0 = 0$, вычислить обратную базисную матрицу по формуле $B_0^{-1} = E$, где E — единичная матрица, вычислить базисное решение по формуле $\bar{x}_j = x_{j0}$, положить $\nu = 1$ и перейти к шагу 1 второго этапа.

Этап 1.

Шаг 1. Определить ведущий столбец, столбец для ввода в базис:

$$d_k = \min \{d_k^1, d_k^2\},$$

где

$$d_k^1 = \min_i d_i^1 = \min_i (u^v a_{\bullet i} - c_i), \quad (2.2.14)$$

$$d_k^2 = \min_j d_j^2 = \min_j u_j^v. \quad (2.2.15)$$

Если $d_k \geq \varepsilon_{opt}$, то решение задачи неограниченно.

Шаг 2. Разложить ведущий столбец по формуле

$$X_k = B_v^{-1} a_{\bullet k}, \quad (2.2.16)$$

если номер k определяется из (2.2.14), и по формуле

$$X_k = B_v^{-1} E_k, \quad (2.2.17)$$

если номер k определяется из (2.2.15).

Шаг 3. Вычислить номер ведущей строки из соотношения $\theta = x_{rk} = \max_{j, j \neq \bar{r}} x_{jk}$.

Если $\theta \leq \varepsilon_{piv}$, $x_{rk} \leq \varepsilon_{piv}$, то условия задачи несовместны; если $\theta \leq \varepsilon_{piv}$, $x_{rk} > \varepsilon_{piv}$, то положить $r = \bar{r}$ и перейти к шагу 4; если $\theta > \varepsilon_{piv}$, то перейти к шагу 4.

Шаг 4. Пересчитать текущее двойственное решение вектора оценок строк по формуле

$$u^{v+1} = u^v - d_k / x_{rk} (E_r)^T B_v^{-1}, \tag{2.2.18}$$

где E_r — r -й столбец единичной матрицы.

Шаг 5. Пересчитать обратную базисную матрицу по формуле

$$B_{v+1}^{-1} = E_{r_{v+1}}^{v+1} B_v^{-1}, \tag{2.2.19}$$

где $E_{r_{v+1}}^{v+1}$ — элементарная матрица, мультипликатор

$$E_{r_{v+1}}^{v+1} = \begin{pmatrix} 1 & & -x_{1k} / x_{rk} & & & \\ & \ddots & \vdots & & & \\ & & 1 / x_{rk} & & & \\ & & \vdots & \ddots & & \\ & & -x_{mk} / x_{rk} & & 1 & \end{pmatrix}.$$

Шаг 6. Если $r \neq \bar{r}$, то положить $\nu = \nu + 1$ и перейти к шагу 1 первого этапа. Если $r = \bar{r}$, то вычислить базисное решение по формуле

$$\bar{x}_j = -x_{jk} / x_{rk}, j \neq r, \bar{x}_r = 1 / x_{rk},$$

положить $\nu = \nu + 1$ и перейти к шагу 1 второго этапа.

Этап 2.

Шаг 1. Определить ведущий столбец, столбец для ввода в базис:

$$d_k = \min \{d_k^1, d_k^2\},$$

$$d_k^1 = \min_i d_i^1 = \min_i (u^v a_{\bullet i} - c_i), \tag{2.2.20}$$

$$d_k^2 = \min_j d_j^2 = \min_j u_j^v. \tag{2.2.21}$$

Если $d_k \geq \varepsilon_{opt}$, то оптимум достигнут.

Шаг 2. Разложить ведущий столбец по формуле

$$X_k = B_v^{-1} a_{\bullet k}, \tag{2.2.22}$$

если номер k определялся из (2.2.20), и по формуле

$$X_k = B_v^{-1} E_k, \tag{2.2.23}$$

если номер k определялся из (2.2.21).

Шаг 3. Вычислить номер ведущей строки из соотношения

$$\theta = \bar{x}_r / x_{rk} = \min_j \{ \bar{x}_j / x_{jk} \mid x_{jk} > \varepsilon_{piv} \}. \tag{2.2.24}$$

Если $x_{jk} \leq \varepsilon_{piv} (j = 1, \dots, m)$, то условия задачи несовместны.

Шаг 4. Пересчитать текущее двойственное решение вектора оценок строк по формуле

$$u^{v+1} = u^v - d_k / x_{rk} (E_r)^T B_v^{-1}, \tag{2.2.25}$$

где E_r — r -й столбец единичной матрицы.

Шаг 5. Пересчитать базисное решение по формуле

$$\bar{x}'_j = \bar{x}_j - \theta x_{jk}, \quad j \neq r, \quad \bar{x}'_r = \theta, \quad (2.2.26)$$

пересчитать обратную базисную матрицу по формуле

$$B_{v+1}^{-1} = E_{r_{v+1}}^{v+1} B_v^{-1}, \quad (2.2.27)$$

где $E_{r_{v+1}}^{v+1}$ — элементарная матрица, мультипликатор

$$E_{r_{v+1}}^{v+1} = \begin{pmatrix} 1 & & -x_{1k}/x_{rk} & & \\ & \ddots & \vdots & & \\ & & 1/x_{rk} & & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & -x_{mk}/x_{rk} & & 1 \end{pmatrix}.$$

Шаги с 1-го по 5-й повторяются до тех пор, пока не будет достигнут оптимум или пока на шаге 4 не выяснится, что $x_{jk} \leq \varepsilon_{piv}$, $j=1, \dots, m$, то есть условия задачи несовместны.

Замечание. Представленная вычислительная схема является полной, так как учитывает этап построения допустимой базисной системы ограничений, в отличие от [Хакимова и др., 2010].

Теоретическое сравнение эффективности алгоритмов линейного программирования

Докажем, что вычислительные схемы алгоритмов генерируют одинаковую последовательность точек, иными словами, координат текущих вершин многогранного множества, а, следовательно, и конечность, и сходимость предлагаемого алгоритма, затем проведем сравнение чисел арифметических операций, необходимых на очередной итерации, отсюда последует вывод, что на очередной итерации предлагаемого подхода потребуется меньшее число арифметических операций.

Теорема. Пусть на очередной итерации v базис и базисная матрица на шаге 1 мультипликативного алгоритма симплекс-метода совпадают с базисом и базисной матрицей на шаге 1 этапа 2 предлагаемого алгоритма, тогда вычислительные схемы алгоритмов генерируют одинаковую последовательность точек.

Доказательство. Утверждение верно тогда и только тогда, когда $c^{v+1} E_{r_{v+1}}^{v+1} B_v^{-1} = u^v - d_k / x_{rk} E_r^T B_v^{-1}$. Полагая $u^v = c^v B_v^{-1}$, получим $c^{v+1} E_{r_{v+1}}^{v+1} = c^v - d_k / x_{rk} E_r^T$. Так как $c_j^{v+1} = c_j^v$, $j \neq r$, то остается доказать, что $-\sum_{j \in M \setminus r} c_j^{v+1} x_{jk} / x_{rk} + c_r^{v+1} / x_{rk} = c_r^v - d_k / x_{rk}$. Возможны два случая.

В первом номер k определялся из (2.2.17), а из (2.2.18) во втором.

$$\begin{aligned} \text{Случай 1. } c_r^v - d_k / x_{rk} &= c_r^v - (u^v a_{\bullet k} - c_k^v) / x_{rk} = c_r^v - (c^v B_v^{-1} a_{\bullet k} - c_k^v) / x_{rk} = \\ &= c_r^v - (c^v (x_{1k}, \dots, x_{mk})^T - c_k^v) / x_{rk} = -\sum_{j \in M \setminus r} c_j^{v+1} x_{jk} / x_{rk} + c_r^{v+1} / x_{rk}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Случай 2. } c_r^v - d_k / x_{rk} &= c_r^v - u_k^v / x_{rk} = c_r^v - u^v E_k / x_{rk} = \\ &= c_r^v - c^v B_v^{-1} E_k / x_{rk} = c_r^v - c^v (x_{1k}, \dots, x_{mk})^T / x_{rk} = -\sum_{j \in M \setminus r} c_j^v x_{jk} / x_{rk} = -\sum_{j \in M \setminus r} c_j^{v+1} x_{jk} / x_{rk} + c_r^{v+1} / x_{rk}. \end{aligned}$$

Теорема доказана.

При сравнении эффективности алгоритмов предположим, что матрица исходной задачи имеет плотность ненулевых элементов P , но обратная матрица B_v^{-1} заполнена целиком. Оче-

видно, что различие в числе арифметических операций возникает на шаге 1 мультипликативного алгоритма симплекс-метода и шаге 4 предлагаемого алгоритма. Пусть задача (2.2.4) не вырождена (иначе неверна вычислительная схема мультипликативного алгоритма), $c_i \neq 0 (i = 1, \dots, n), v \geq m$, тогда $c_j^v \neq 0 (j = 1, \dots, m)$. Отсюда следует, что выигрыш в числе арифметических операций умножений и сложений на очередной итерации равен $m^2 - m - 1$. Пусть для решения задачи (2.2.4) требуется m итераций, тогда общий выигрыш в числе арифметических операций равен $m^3 - m^2 - m(v = m, \dots, 2m)$.

Замечание. В [Черноруцкий, 2011] автор отметил, что для задач большой размерности возникают дополнительные специфические трудности, обусловленные необходимостью решения больших систем линейных уравнений с разреженной матрицей вторых производных. Дело заключается в том, что решение систем обычно проводится на основе некоторой процедуры факторизации положительно определенной матрицы вторых производных. Наиболее часто применяется симметричный вариант гауссова исключения, основанный на факторизации Холесского. При этом нижний треугольный фактор в разложении Холесского может оказаться заполненным, несмотря на разреженность исходной матрицы. Развитые в [Джордж и др., 1984] методы оптимального упорядочения строк и столбцов матрицы линейной системы позволяют достичь определенной экономии памяти и сократить число вновь появляющихся ненулевых элементов. Однако проблема в целом не решается. Кроме того, становятся, по существу, неприемлемыми методы, основанные на модифицированном разложении Холесского, т. к. в данном случае непосредственно не удается воспользоваться результатами упомянутой работы [Джордж и др., 1984].

Из вышесказанного следует: если бы удалось построить такой ньютоновский метод решения задач большой размерности с разреженной матрицей вторых производных, то это, по-видимому, могло бы привести к существенной переоценке ценностей.

Предлагаемый мультипликативный алгоритм ЛП, как метод решения большой системы $H^k p^k = -h^k$ с разреженными матрицами вторых производных, допускает модификацию, которая позволяет выявить знаки собственных чисел H^k и приспособиться для генерации \bar{H}^k , причем выяснение определенности H^k и вычисление направление спуска p^k осуществляется параллельно в рамках одной процедуры. Однако рассмотрение нового подхода к построению ньютоновских методов решения задач большой размерности не является целью данной работы и находится в стадии экспериментального сравнения эффективности.

Заключение

В [Зеленков и др., 2013] авторами доказано, что интеграция техники исключения Гаусса и факторизации Холесского определяет решение проблемы масштабирования шагов при спуске, а следовательно, и аппроксимацию не квадратичными функциями, и интеграцию с методом доверительной окрестности. А в данной работе построением вычислительных схем алгоритмов доказано, что интеграция техники исключения Гаусса и факторизации Холесского определяет и подходы к уменьшению значения нормы поправки E^k , в основе которых лежит интеграция с техникой выбора ведущего элемента алгоритма линейного программирования (ЛП) как метода решения системы $H^k p^k = -h^k$.

Доказано, что предлагаемый алгоритм ЛП позволяет по кубическому закону уменьшить число арифметических операций по сравнению с известными методами и, как следствие, уменьшить влияние погрешностей, в том числе и погрешностей округления.

Предлагаемый алгоритм ЛП как метод решения системы $H^k p^k = -h^k$ представляет собой модификацию метода исключения Гаусса, причем для вычисления направления спуска p^k

требуется выполнить около $\frac{1}{6}n^3$ арифметических операций, примерно столько же, сколько требуется для построения модифицированного разложения Холецкого.

Приведены результаты следующих стратегий уменьшения значения нормы поправки:

1. Частичный выбор ведущего элемента. В основе предлагаемой модификации метода исключения Гаусса лежит интеграция техники предлагаемого алгоритма ЛП для выбора ведущей строки. Фактическое значение нормы поправки E^k можно уменьшить, если использовать симметричные перестановки строк и столбцов H^k : на очередном, i -м шаге факторизации в качестве i -й строки и i -го столбца надо брать ту из нетронутых пар, для которой величина $|c_{ii}^k| + |c_i^k|$ максимальна. Такая стратегия дает возможность увеличить численную устойчивость расчета элементов D^k , U^k , u^k и остается работоспособной и в том случае, когда $\|h^k\|$ не равна нулю, но очень мала. Полученные результаты могут быть использованы и для модификаций основного алгоритма численной линейной алгебры — исключению с частичным выбором ведущего элемента (алгоритма исключения Гаусса и его другой схемы реализации — декомпозиции Холецкого).

2. Полный выбор ведущего элемента. Использование данной стратегии повлечет изменение не только порядка пересчета вспомогательных величин, но и потерю фактора U^k , поэтому ее применение для уменьшения поправки приведет в излишнему усложнению вычислительной схемы расчета элементов D^k , U^k , u^k , обсуждаемой в [Зеленков и др., 2013], однако полученные результаты могут быть использованы для модификаций основного алгоритма численной линейной алгебры — исключению с полным выбором ведущего элемента.

Список литературы

- Вержбицкий В. М.* Численные методы. Линейная алгебра и нелинейные уравнения. — М.: Издательский дом «ОНИКС 21 век», 2005.
- Гилл Ф., Мюррей У.* Численные методы условной оптимизации. — М.: Мир, 1977.
- Гилл Ф., Мюррей У., Райт М.* Практическая оптимизация. — М.: Мир, 1985.
- Джордж А., Лю Дж.* Численное решение больших разреженных систем уравнений. — М.: Мир, 1984.
- Зеленков Г. А., Хакимова А. Б.* Подход к разработке алгоритмов ньютоновских методов оптимизации, программная реализация и сравнение эффективности // Компьютерные исследования и моделирование. — 2013. — Т. 5, № 3. — С. 367–377.
- Карманов В. Г.* Математическое программирование. — М.: Мир, 1975.
- Парлетт Б.* Симметричная проблема собственных значений. Численные методы. — М.: Мир, 1983.
- Полак Э.* Численные методы оптимизации. Единый подход. — М.: Мир, 1974.
- Пшеничный Б. Н., Данилин Ю. М.* Численные методы в экстремальных задачах. — М.: Наука, 1975.
- Свириденко А. Б.* Программа для ЭВМ «MNB (Ньютоновский метод безусловной оптимизации)» Свидетельство № 2015610399 от 12.01.2015. Официальный бюллетень Федеральной службы по интеллектуальной собственности (РОСПАТЕНТ) «Программы для ЭВМ, Базы данных, Топологии интегральных микросхем» № 2 (100) 2015, 20.02.2015.
- Свириденко А. Б., Зеленков Г. А.* Программа для ЭВМ "MNBApp (Ньютоновский метод безусловной оптимизации с численным вычислением первых и вторых производных)" Свидетельство № 2015610347 от 12.01.2015. Официальный бюллетень Федеральной службы по интеллектуальной собственности (РОСПАТЕНТ) «Программы для ЭВМ, Базы данных, Топологии интегральных микросхем» № 2 (100) 2015, 20.02.2015.
- Стренг Г.* Линейная алгебра и ее применения. — М.: Мир, 1980.

- Хакимова А. Б., Дикусар В. В., Зеленков Г. А. Увеличение эффективности ньютоновских методов оптимизации. Информационно-динамический подход // Труды ИСА РАН «Динамика неоднородных систем». — Выпуск 14-А, Том 53. — М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010. — С. 97–114.
- Хакимова А. Б., Зеленков Г. А. Увеличение эффективности ньютоновских методов минимизации. Вычисление длины шага // Труды ИСА РАН «Динамика неоднородных систем». Выпуск 14-А, Том 53. — М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010. — С. 115–120.
- Хакимова А. Б., Зеленков Г. А., Рзун И. Г. Подход к увеличению эффективности мультипликативного алгоритма симплекс-метода // Труды ИСА РАН «Динамика неоднородных систем». Выпуск 14, Том 53 (2). — М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010. — С. 245–251.
- Хакимова А. Б., Хакимов Б. Б. Единый подход к решению задач математического программирования гуманитарной компьютерной клиники // Сборник статей I международной конференции «Системные, информационные и технические средства и технологии в профессиональной деятельности, образовании, оздоровлении и профилактике». — СПб., 2003. — С. 88–92.
- Черноруцкий И. Г. Методы оптимизации. Компьютерные технологии. — СПб.: БХВ-Петербург, 2011. — 384 с.
- Черноруцкий И. Г. Практическая оптимизация и невыпуклые задачи // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Информатика. Телекоммуникации. Управление. СПб: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» Номер 4 (176), 2013. С. 79–86.
- Bunch J. R., Kaufman L. C. Some stable methods for calculating inertia and solving symmetric linear equations // Mathematics of Computation. — 1977. — 31.
- Bunch J. R., Parlett B. N. Direct methods for solving symmetric indefinite systems of linear equations // SIAM, J. Numer. Anal., 1971.
- Fletcher R., Freeman T. L. A modified Newton method for minimization // J. Opt. Th. Applics., 1977.
- Fletcher R. Factorizing symmetric indefinite matrices // Linear Algebra and its Applics. 14, 1976.
- Gill P. E., Murray W. Newton-type methods for unconstrained and linearly constrained optimization // Math. Prog. — 1974. — 28. — P. 311–350.
- Goldfarb D. Curvilinear path step length algorithm for minimization which use directions of negative curvature // Math. Prog. — 1980. — 18.
- Goldfeld S. M., Quandt R. E., Trotter H. F. Maximization by quadratic hill climbing // Econometrica. — 1966. — 34. — P. 541–551.
- Graham S. R. A matrix factorization and its application to unconstrained minimization, Project thesis for BSc. (Hons) in Mathematics for Business, Middlesex Polytechnic, Enfield, England, 1976.
- Greenstadt J. L. On the relative efficiencies of gradient methods // Mathematics of Computation. — 1967. — 21.
- Hebden M. D. An algorithm for minimization using exact second derivatives // AERE Rept TR., 1973.
- Levenberg K. A method for the solution of certain problems in least squares // Quart. Appl. Math. — 1944. — 2. — P. 164–168.
- Marquardt D. An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters // SIAM J. Appl. Math. — 1963. — 11. — P. 731–741.
- McCormick G. P. A modification of Armijo's step-size rule for negative curvature // Math. Prog. — 1977. — 13.
- More J. J., Sorensen D. C. On the use of directions of negative curvature in a modified Newton method // Math. Prog. — 1979.
- Murray W. Second derivative methods. In «Numerical Methods for Unconstrained Optimization» (W. Murray, ed.). — London–New York: Academic Press, 1972. — P. 57–71.
- Sorensen D. Newton's method with a model trust region modification. Report ANL-80-106, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, 1980.