

ОЦЕНКИ ХАРАКТЕРИСТИК ТОЧНОСТИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СЛОЖНОСТИ ПРИБЛИЖЕННЫХ МЕТОДОВ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ НЕЛИНЕЙНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ

Аннотация. Рассмотрены вопросы оценок характеристик точности и вычислительной сложности комбинированного ε -алгоритма отделения всех решений в заданной ограниченной области и их итерационного уточнения до требуемой точности при приближенном численном решении многоэкстремальных задач глобальной оптимизации дважды непрерывно дифференцируемых функционалов.

Ключевые слова: оценка, погрешность, оптимизация, экстремум, функционал, сложность.

ВВЕДЕНИЕ

Практика разработки и создания новых материалов и высокоэффективных технологических процессов и технических систем с использованием современных научных идей, химических материалов, физических эффектов, определяющих общую структуру и свойства создаваемого объекта, предусматривает выбор наилучшего сочетания значений параметров этого объекта по различным критериям (например, по размерам, геометрии, физическим, функциональным характеристикам и т.д.), которые реализуются соответствующими математическими моделями.

Известно, что математическими моделями различных сложных явлений и технологических процессов часто являются нелинейные задачи глобальной оптимизации, которые характеризуются нелинейными целевыми функциями и ограничениями, определяющими допустимые замкнутые ограниченные области изменений аргументов и соотношений между ними. Ставится задача глобальной оптимизации (минимизации, максимизации или одновременно обеих) таких функций или функционалов при заданных ограничениях. Очевидно, что выбор точного или приближенного метода глобальной оптимизации этих функционалов существенно будет зависеть от постановки задачи, структуры и дифференциальных свойств функционала и имеющихся ограничений.

Различным аспектам изучения и исследования таких задач и численных методов их решения посвящено много работ [1–6]. Отметим, что степень полноты исследования и численного решения описываемых задач зависит от их сложности и требований к качеству их решения. Наиболее сложными в этом плане являются многоэкстремальные нелинейные задачи глобальной оптимизации, в которых глобальные решения (вместе с локальными) могут находиться как в середине допустимой области, так и на ее границе. В этом случае задача глобальной оптимизации состоит в нахождении на заданной области всех локальных точек экстремума со значениями в них целевой функции и последующим выбором оптимальных глобальных значений, которые по критерию величин невязки целевой функции могут характеризовать состояние (в данный момент) смоделированного исследуемого явления или процесса, а по критерию качества — его стоимость и оптимальные или приемлемые размеры составляющих. Такие задачи глобальной оптимизации в силу своей сложности изучены недостаточно и требуют дополнительного исследования, предусматривающего выявления и отделения всех возможных точек экстремума, а на практике — реализации приближенного метода поиска всех таких точек и нахождения в них значений экстремума с последующим выбором глобальных значений.

Если о целевой функции и ограничениях ничего, кроме их непрерывности, неизвестно, то наиболее распространенным в глобальной оптимизации является

направление, основанное на неравномерном покрытии допустимого множества с последующей реализацией на элементах покрытия целенаправленного метода перебора.

Если нелинейный функционал (целевая функция) непрерывно дифференцируемый, то, реализуя необходимые условия экстремума, исходную задачу можно свести к задаче глобального решения нелинейного функционального уравнения или эквивалентной ему соответствующей системе нелинейных скалярных уравнений (СНСУ).

В данной работе на базе элементов общей теории приближенных методов исследуются определяющие характеристики вычислительного процесса численного решения задач глобальной оптимизации, а именно точность полученного приближенного решения, представленную суммой оценок различных видов погрешностей (включая полную погрешность), и вычислительную сложность, представленную суммой используемых арифметических операций, основанных на приведенной в работах [7, 8] методике.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ЭЛЕМЕНТЫ ОБЩЕЙ ТЕОРИИ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ НЕЛИНЕЙНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ

Рассмотрим дважды непрерывно дифференцируемый по Фреше нелинейный функционал $\varphi(u)$, заданный на гильбертовом пространстве H . Задача состоит в глобальной оптимизации функционала $\varphi(u)$ на некотором ограниченном замкнутом множестве $\bar{R} \subset H$, т. е. необходимо найти такие элементы $u_* \in \bar{R}$, $u^* \in \bar{R}$, чтобы для функционалов $\varphi(u_*)$ и $\varphi(u^*)$ выполнялись условия

$$\varphi(u_*) = \min_{u \in \bar{R}} \varphi(u), \quad \varphi(u^*) = \max_{u \in \bar{R}} \varphi(u). \quad (1)$$

Как правило, методика непосредственного исследования и точного или приближенного решения задачи (1) определяется структурой функционала $\varphi(u)$ и его дифференциальными свойствами, в частности градиента $\varphi'(u)$ и второй производной $\varphi''(u)$. Приведем два подхода к решению задачи (1) для простого функционала $\varphi(u)$ с одним экстремумом:

— задача нахождения глобального экстремума $\varphi(u)$ рассматривается как основная, а уравнение $\varphi'(u) = 0$ характеризует необходимое условие экстремума, при этом условия или ограничения накладываются на функционал $\varphi(u)$ и на его градиент $\varphi'(u)$;

— задача нахождения глобального экстремума рассматривается как вспомогательная, связанная с реализацией необходимого условия экстремума, т.е. глобального решения уравнения $\varphi'(u) = 0$, при этом условия сходимости по аргументу и функционалу выражаются в виде ограничений на $\varphi(u)$, $\varphi'(u)$, $\varphi''(u)$.

В дальнейшем при нахождении оценок характеристик качества алгоритма решения задачи (1) будут использоваться оба подхода.

В общем случае сложных задач глобальной оптимизации, возникающих на практике, процесс их решения носит приближенный характер и состоит в следующем. Согласно положений общей теории приближенных методов [6] функционал $\varphi(u)$ аппроксимируется последовательностью приближенных функционалов $\varphi_n(u)$, заданных в H или подпространствах $H_n \subset H$. В этом случае задача (1) ставится для функционалов $\varphi_n(u)$, т.е. необходимо отыскать в $\bar{R} \subset H_n \subset H$ элементы u_*^n и u_n^* такие, чтобы имели место условия

$$\varphi_n(u_*^n) = \min_{u \in \bar{R}} \varphi_n(u), \quad \varphi(u_n^*) = \max_{u \in \bar{R}} \varphi_n(u). \quad (2)$$

Таким образом, решение задачи (1) сводится к решению задачи (2).

Предположим, что функционал $\varphi(u)$ в области \bar{R} имеет конечное множество $\Omega = \{u^i\}$ ($i = \overline{1, m}$) стационарных точек u^i , т.е. точек, в которых $\varphi'(u^i) = 0$, а $\varphi(u^i)$ — соответствующее множество значений функционала $\varphi(u)$ в точках u^i .

Пусть построена последовательность приближенных для $\varphi(u)$ функционалов $\varphi_n(u)$. Имеет место следующее утверждение о сходимости метода перехода от задачи (1) к (2).

Утверждение. Если при произвольном или достаточно большом n задача (2) $\varphi_n(u) \rightarrow \text{extr}(u \in \bar{R})$ имеет решение u_n^i и при каждом фиксированном i для последовательности $\{u_n^i\}$ справедливо равенство $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho(u_n^i, \Omega) = 0$, то считают, что метод перехода от задачи (1) к последовательности задач (2) сходится. Выражение $\rho(u_n^i, \Omega)$ определяет расстояние от элементов последовательности u_n^i до множества стационарных точек Ω .

Последовательность решений u_n^i задачи (2) называется соответствующей решению u^i задачи (1), если выполняются следующие условия: $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho(u_n^i, u^i) = 0$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \rho(\varphi(u_n^i), \varphi(u^i)) = 0.$$

Установление сходимости аппроксимационного метода перехода от задачи (1) к задаче (2) является достаточным условием для практического решения последней (при каждом допустимом, фиксированном значении n) и проведения апостериорного анализа полученных приближенных решений как по аргументу, так и по функционалу.

На практике более полным и целесообразным является анализ метода перехода к задачам (2) и соответствия решений задач (1) и (2) при условии наличия оценок

$$\rho(u_n^i, \Omega) \leq \delta_n^{(1)}, \quad \rho(u_n^i, u^i) \leq \delta_n^{(2)}, \quad \rho(\varphi(u_n^i), \varphi(u^i)) \leq \delta_n^{(3)},$$

где $\delta_n^{(j)} \rightarrow 0$ ($j=1,2,3$) при $n \rightarrow \infty$ характеризуют скорость сходимости метода перехода к задачам (2), а также сходимости и точности соответствующих решений задач (1) и (2).

В этом случае естественно возникают вопросы относительно условий, при которых будут справедливы следующие утверждения:

1) из существования точек экстремума u^i функционала $\varphi(u)$ (при произвольном или достаточно большом n) будет следовать существование соответствующих последовательностей точек экстремумов u_n^i функционалов $\varphi_n(u)$ и их сходимость при $n \rightarrow \infty$ по функционалу и аргументу, т.е. $|\varphi_n(u_n^i) - \varphi(u^i)| \rightarrow 0$, $\|u_n^i - u^i\|_H \rightarrow 0$;

2) из существования точек экстремумов функционала $\varphi_n(u)$ будет следовать (при каждом допустимом фиксированном значении параметра аппроксимации n) существование соответствующих точек экстремумов функционала $\varphi(u)$ и апостериорные оценки погрешностей по аргументу и функционалу.

В случае единственности точки экстремума, в частности минимума, в заданной области \bar{R} утверждения 1 и 2 при различных условиях рассматривались в [7]. Что касается глобальной оптимизации многоэкстремальных задач в \bar{R} , то утверждения 1 и 2 можно исследовать только после отделения всех экстремальных точек, т.е. построения таких подобластей \bar{R} , которые будут содержать одну точку экстремума. В качестве таких подобластей целесообразно использовать замкнутые шары $\bar{S}(v_i, r_i) = \{u \in \bar{R} : \|u - v_i\| \leq r_i\}$ ($i=1, m$), где v_i — центр шара, определяющий точную или приближенную стационарную точку функционала $\varphi(u)$ или $\varphi_n(u)$, а r_i — соответствующий ему радиус, числовые значения которого находятся из достаточных условий теоремы существования единственного (в шаре) решения и сходимости данного итерационного метода.

Доказательство сформулированных утверждений в задачах глобальной оптимизации многоэкстремальных функционалов и нахождении оценок точности по аргументу и функционалу рассмотрим при различных условиях гладкости

функционалов $\varphi(u)$ и $\varphi_n(u)$. В дальнейшем будем считать функционал $\varphi_n(u)$ также дважды дифференцируемым по Фреше. Условия близости функционалов $\varphi(u)$ и $\varphi_n(u)$ и их производных $\varphi'(u)$, $\varphi'_n(u)$, $\varphi''(u)$, $\varphi''_n(u)$ определим следующим образом. Будем полагать, что на элементе $u \in \bar{R} = \bar{S}(v, r)$ выполнены условия аппроксимации функционалов $\varphi(u)$, $\varphi_n(u)$ и их производных $\varphi'(u)$, $\varphi'_n(u)$, $\varphi''(u)$, $\varphi''_n(u)$, если существуют такие функционалы $\eta_j(n, u) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$ ($j=1, 2, 3$), что выполняются неравенства

$$|\varphi(u) - \varphi_n(u)| \leq \eta_1(n, u), \quad (3)$$

$$\|\varphi'(u) - \varphi'_n(u)\| \leq \eta_2(n, u), \quad (4)$$

$$\|\varphi''(u) - \varphi''_n(u)\| \leq \eta_3(n, u). \quad (5)$$

Правомерность приведенного определения близости в шаре $\bar{S}(v, r)$ функционалов $\varphi(u)$ и $\varphi_n(u)$, а также их двух производных подтверждена тем, что эти нелинейные функционалы могут иметь много экстремальных точек, достаточные условия существования которых и сходимость итерационных методов их уточнения выполняются в разных, довольно малых окрестностях этих точек. Условия (3)–(5) в дальнейшем также будут использованы при нахождении оценок близости соответствующих решений функционалов $\varphi(u)$ и $\varphi_n(u)$.

Все последующие теоремы, теоретические и практические результаты отображают задачу глобальной минимизации нелинейного функционала $\varphi(u)$, поскольку задача глобальной максимизации решается аналогично. В связи с этим экстремальную точку минимума в дальнейшем будем обозначать u^* .

Итак, рассмотрим задачу минимизации дифференцируемого функционала $\varphi(u)$ на ограниченном замкнутом множестве \bar{R} гильбертова пространства H . Предположим, что в \bar{R} содержится единственная точка минимума u^* . Задача заключается в приведении условий существования единственного решения $u^* \in \bar{R}$ и уточнении его итерационными методами. Такая задача при различных условиях относительно $\varphi(u)$, $\varphi'(u)$, $\varphi''(u)$ рассматривалась в [7] с применением метода проекции градиента, состоящего в построении с помощью оператора проектирования $P_{\bar{R}}$ на \bar{R} последовательности

$$u^{k+1} = P_{\bar{R}}(u^k - \alpha_k \varphi'(u^k)), \quad (6)$$

где $(w = P_{\bar{R}}(u))$ определяется условием $w \in \bar{R}$, $\|w - u\| = \inf_{z \in \bar{R}} \|u - z\|$.

Рассмотрим случай, когда функционал $\varphi(u) \in C^1(\bar{R})$, т.е. непрерывно дифференцируемый на множестве \bar{R} , а его градиент $\varphi'(u)$ для любого $u \in \bar{R}$ удовлетворяет условиям

$$\|\varphi'(u_1) - \varphi'(u_2)\| \leq M \|u_1 - u_2\|, \quad (7)$$

$$(\varphi'(u_1) - \varphi'(u_2), u_1 - u_2) \geq m \|u_1 - u_2\|, \quad m > 0. \quad (8)$$

Имеют место три теоремы, аналоги которых приведены и доказаны в [7].

Теорема 1. Пусть $\bar{R} \subset H$ — ограниченное, выпуклое, замкнутое множество, $\varphi'(u)$ удовлетворяет условиям (7), (8). Тогда при $\alpha = \alpha_k$, где $0 < \alpha < 2mM^{-2}$, справедливы следующие утверждения:

— уравнение $u = P_{\bar{R}}(u - \alpha \varphi'(u)) = Du$ имеет единственное решение $u^* \in \bar{R} = \bar{S}(v, r)$;

— последовательность u^k , построенная согласно (6), сходится к решению u^* , а скорость сходимости и оценка погрешности характеризуются неравенством

$$\|u^* - u^k\| \leq \|u^1 - u^0\| (1 - q)^{-1} [q]^k, \quad k = 0, 1, \dots,$$

где $q = (1 - 2\alpha m + \alpha^2 M^2)^{1/2} < 1$ в силу $0 < \alpha < 2mM^{-2}$.

В следующей теореме утверждается, что из существования минимума функционала $\varphi(u)$ в области \bar{R} (начиная с некоторого n) вытекает существование соответствующей точки минимума u_n^* функционала $\varphi_n(u)$ и сходимость метода перехода к $\varphi_n(u)$.

Теорема 2. Пусть $\bar{R} \subset H$ — ограниченное, выпуклое, замкнутое множество, $\varphi_n(u)$ — непрерывно дифференцируемый функционал, удовлетворяющий условию (4). Тогда в условиях теоремы 1 будут справедливы следующие утверждения:

— функционал $\varphi_n(u)$ удовлетворяет условиям

$$\|\varphi'_n(u_1) - \varphi'_n(u_2)\| \leq M_n \|u_1 - u_2\|, \quad (9)$$

$$(\varphi'_n(u_1) - \varphi'_n(u_2), u_1 - u_2) \geq m_n \|u_1 - u_2\|^2, \quad m_n > 0, \quad (10)$$

для всех $u \in \bar{R}$, т.е. имеет единственную точку минимума $u_n^* \in \bar{R}$;

— найдется такое n_1 , что при $n \geq n_1$ будет выполняться неравенство $q_n < 1$;

— последовательность u_n^k , построенная согласно (6) для функционала $\varphi_n(u)$ при $n \rightarrow \infty, k \rightarrow \infty$, сходится к u^* — соответствующей точке минимума функционала $\varphi(u)$. Скорость сходимости и оценка погрешности характеризуются неравенством

$$\|u^* - u_n^k\| \leq \frac{\alpha \eta_2(n, u_n^k)}{1 - q_n} + \frac{\|u_n^{(0)}\|}{1 - q_n} q_n^{k+1},$$

где $q_n = \sqrt{1 - 2\alpha m_n + \alpha^2 M_n^2}$, $u_n^{(0)} = P_{\bar{R}}(0 - \alpha \varphi'_n(0))$, $\varphi'_n(0) \neq 0$.

Следующая теорема дает обратное утверждение о существовании минимума задачи (1) по данным существования минимума задачи (2).

Теорема 3. Пусть $\bar{R} \subset H$ — ограниченное, выпуклое, замкнутое множество, $\varphi_n(u)$ — дважды непрерывно дифференцируемый функционал, удовлетворяющий условиям (4), (5), (9), (10), и при фиксированном допустимом значении n выполняется условие

$$q_n + 2\alpha \eta_3(n, c) + 2\alpha^2 M_n \eta_3(n, c) + \alpha^2 \eta_3(n, c) < 1.$$

Тогда справедливы следующие утверждения:

— функционал $\varphi(u)$ удовлетворяет условиям (7), (8) для всех $u \in \bar{R}$, т.е. имеет единственную точку минимума $u^* \in \bar{R}$;

— последовательность u_n^k , построенная согласно (6) для функционала $\varphi_n(u)$ при $0 < \alpha < 2m_n M_n^{-2}$, $n \rightarrow \infty, k \rightarrow \infty$, сходится к u^* , причем имеет место оценка погрешности

$$\|u^* - u_n^k\| \leq \frac{\alpha \eta_2(n, u_n^k)}{1 - q} + \frac{\|u_n^0\|}{1 - q_n} q_n^{k+1}.$$

Отсюда при $k=0$ вытекает неравенство

$$\|u^* - u_n^0\| \leq \frac{\alpha \eta_2(n, u_n^*)}{1 - q} + \frac{\|u_n^0\|}{1 - q_n} \leq r,$$

которое характеризует оценку близости точек минимума функционалов $\varphi(u)$ и $\varphi_n(u)$.

Таким образом, для полного решения проблемы глобальной оптимизации многоэкстремальных нелинейных задач необходимо решать при данных условиях гладкости функционалов $\varphi(u)$ и $\varphi_n(u)$ проблему отделения всех точек v_i экстремумов $\varphi_n(u)$, которые считаются центрами шаров $\bar{S}(v_i, r_i)$ единственности соответствующих точек экстремумов u_i^* функционала $\varphi(u)$. Значения $\varphi(v_i)$ будут приближенными экстремальными значениями функционала $\varphi(u)$, из которых выбираются минимальное и максимальное значения для последующего уточнения (в случае необходимости) итерационными методами.

Построение функционалов $\varphi_n(u)$ существенно зависит от сложности функционала $\varphi(u)$. Наиболее эффективными являются аппроксимационные методы вырожденных ядер и механических квадратур. В обоих случаях задачу поиска точек экстремума функционалов $\varphi(u)$ и $\varphi_n(u)$ можно свести к задаче глобального решения соответствующей СНСУ, полученной из условия

$$\varphi'(u) = 0 \text{ или } \varphi'_n(u) = 0. \quad (11)$$

Пусть уравнения (11) представляют нормальную систему нелинейных алгебраических уравнений (СНАУ) n -го порядка вида

$$\begin{cases} u_1 = f_1(u_1, u_2, \dots, u_n), \\ u_2 = f_2(u_1, u_2, \dots, u_n), \\ \dots \\ u_n = f_n(u_1, u_2, \dots, u_n), \end{cases} \quad (12)$$

где функции f_1, f_2, \dots, f_n определены и дважды непрерывно дифференцируемы на некоторой ограниченной области G действительного арифметического n -мерного пространства E_n , метризованного элементами множества Q , т.е. каждой паре точек $v, w \in E_n$, соответствует элемент $\rho(v, w) \in Q$, определяющий расстояние между v и w .

Систему (12) представим в эквивалентном операторном виде

$$\bar{F}(\bar{u}) = \bar{u} - F(\bar{u}) = 0, \quad (13)$$

где $\bar{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n) \in E_n$ — вектор, $F(\bar{u}) = (f_1(\bar{u}), f_2(\bar{u}), \dots, f_n(\bar{u}))$ — вектор-функция. Пусть все решения $\{\bar{u}_j\}$ ($j=1, l$) системы (16), (17) принадлежат n -мерному замкнутому кубу $\bar{R} = \{\bar{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n) : a_i \leq u_i \leq b_i \text{ (} i=1, n), -\infty < a < b < +\infty, d = (b-a)\} \in E_n$.

Определение. Сходящаяся последовательность $\bar{u}^1, \bar{u}^2, \dots, \bar{u}^k, \dots$ точек E_n называется разрешающей для непрерывного оператора $F(\bar{u})$, если $\rho(\bar{u}^k, F(\bar{u}^k)) \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$.

Для глобального решения системы (12), (13) применим εs -алгоритм, составляющие которого и порядок отделения всех изолированных в \bar{R} решений приведены в [8]. Суть εs -алгоритма заключается в следующем. Предполагается, что $F(\bar{u})$ отображает \bar{R} в себя. Проводится равномерное многоэтапное деление куба \bar{R} на равные кубики, центры которых образуют в \bar{R} последовательность ε_k -сетей, элементы \bar{u}_j которых оператором $F(\bar{u})$ отображаются в $F(\bar{u}_j)$ -элементы γ_k -сетей. Из соответствующих элементов $\bar{u}_j \in \varepsilon_k$ и $F(\bar{u}_j) \in \gamma_k$, удовлетворяющих условиям близости по невязке и аргументам, а также соседних ε_k -сетей строятся разрешающие последовательности, группирующиеся вокруг решений системы. Процесс заканчивается, когда в последовательности каждого решения найдется элемент, на котором достигается заданная точность по функционалу или будут выполняться достаточные условия теоремы существования решения системы (13) и сходимости используемого итерационного метода. Таким образом, реализуется процесс отделения всех решений системы (13) в области \bar{R} . Уточнение отделенных решений до требуемой точности осуществляется итерационными методами, общий вид которых представим формулой

$$\bar{u}^{k+1} = \bar{u}^k - \alpha_k g_k \quad (k=0, 1, \dots), \quad (14)$$

где g_k — оператор, определяющий направление движения итерационного метода, а α_k — последовательность действительных чисел, характеризующая его шаг. Критерий выбора g_k и α_k определяет итерационный метод. Существование единственного решения уравнения (13) и сходимости метода (14) доказано в следующей теореме [9].

Теорема 4. Пусть в шаре $\bar{S}(v, r)$, где v — одно из решений v_i системы (13), а r — соответствующее ему значение r_i , выполняются условия

$$\|\bar{F}(v)\| \leq \delta_0, \quad \|\bar{F}'(\bar{u})\| \leq M(v, r), \quad \|\bar{F}''(\bar{u})\| \leq N(v, r),$$

$$\|(\bar{F}'(\bar{u})h, h) \geq m(v, r)\| h\|^2 \quad \text{или} \quad \|\bar{F}'(\bar{u})h\| \geq m(v, r)\|h\|,$$

где $\delta_0, M(v, r), N(v, r), m(v, r)$ — константы, обеспечивающие выполнение условий

$$q(r) = q(\delta_0, M(v, r), N(v, r), m(v, r)) < 1,$$

$$\theta(r) = \theta(\delta_0, M(v, r), N(v, r), m(v, r)) \leq r.$$

Тогда уравнение (13) имеет в шаре $\bar{S}(v, r)$ единственное решение \bar{u}_k^* , к которому сходится последовательность $\{\bar{u}^k\}$, построенная согласно (14) при соответствующем выборе g_k и α_k , причем скорость сходимости и оценка погрешности характеризуются неравенством

$$\Delta(\bar{u}_k) := \|\bar{u}^* - \bar{u}^k\| \leq \theta(\delta_0, M(v, r), N(v, r), m(v, r))[q(r)]^k,$$

представляющим погрешность метода. При $k=0$ имеем

$$\|\bar{u}^* - \bar{u}^0\| \leq \theta(\delta_0, M(u^0, r), N(u^0, r), m(u^0, r)),$$

что характеризует близость точного и соответствующего ему приближенного решения, которое может служить начальным приближением для итерационного метода. Если принять, что

$$g_k = \bar{F}\bar{u}^k, \quad \alpha_k = \frac{(\bar{F}'(\bar{u}^k)\bar{F}(\bar{u}^k), \bar{F}(\bar{u}^k))}{\|\bar{F}'(\bar{u}^k)\bar{F}(\bar{u}^k)\|^2}, \quad (15)$$

то согласно формуле (14) получится метод минимальных невязок со значениями $q(r) = (1 - \frac{m^2}{M^2})^{1/2} + \frac{\delta_0 N}{2m^2}$, $\theta(r) = \frac{\delta_0}{m(1-q(r))}$, $\Delta\bar{u}_k = \frac{\delta_0}{m(1-q(r))}[q(r)]^k$.

ОЦЕНКИ ТОЧНОСТИ

В зависимости от классов решаемых задач и имеющейся информации рассматриваются следующие оценки погрешностей: априорные и апостериорные, мажорантные и асимптотические, детерминированные и стохастические. Методы получения оценок погрешностей можно разделить на такие группы: аналитические, алгоритмические или программные, статистического моделирования и комбинированные.

В данной работе приведены способы получения детерминированных априорных и апостериорных оценок погрешности приближенного решения задач глобальной оптимизации путем применения комбинированного метода отделения всех решений в заданной области и их итерационного компьютерного уточнения. В общем случае приближенное решение задач сопровождается следующими видами погрешностей: неустранимой, метода, округления и полной. Сочетание погрешностей аппроксимации, метода и округления называется вычислительной. При реализации ε -алгоритма погрешность по невязке каждого приближенного решения уравнения (13) можно отнести к неустранимой погрешности, а остальные — к вычислительной. В этом случае оценка полной погрешности глобального решения задачи (1) будет иметь вид

$$\|u^* - u_{\pi\pi}^k\| \leq \|u^* - u_n^*\| + \|u_n^* - u_n^k\| + \|u_n^k - u_{\pi\pi}^k\|, \quad (16)$$

где первое слагаемое правой части $\|u^* - u_n^*\|$ определяет неустранимую погрешность, второе — погрешность метода, а третье — погрешность округле-

ния, вычисленную по методике, приведенной в [10]. Первое слагаемое, характеризующее точность при отделении всех решений, соответствует погрешности невязки каждого приближенного решения, обеспечивающей возможность его уточнения итерационными методами, второе слагаемое — погрешности такого уточнения.

Известно, что одной из основных составляющих погрешности метода является погрешность аппроксимации (дискретизации), т.е. погрешность, возникающая в результате аппроксимации (замены) исходной (точной) задачи последовательностью приближенных задач. Эта погрешность характеризуется функционалом, структуру и свойства которого определяют элементы исходной задачи и численного метода. В связи с этим естественно требовать, чтобы функционал, характеризующий сходимость метода перехода к приближенным задачам, отражал близость соответствующих элементов таких задач в некоторых областях (шарах), содержащих единственные решения исходной и приближенных задач. Конкретный пример рассмотрен в [9] при отделении всех решений одного класса нелинейных операторных уравнений.

Погрешность округления, определяющая точность компьютерной реализации вычислительного алгоритма, характеризуется оценкой $\|u_n^k - u_{n\tau}^k\|$, где u_n^k — приближенное решение, полученное теоретически без учета операции округления, а $u_{n\tau}^k$ — приближенное компьютерное решение, полученное с округлением всех его составляющих, арифметических операций и конечного результата до τ - двоичных разрядов в мантиссе. В основу методики [10] заложено представление любого действительного числа a в виде $a = \bar{a}(1 + \varepsilon)$, где \bar{a} — округленное значение a согласно длине мантиссы компьютера τ , а ε — относительная погрешность a . Разность $|a - \bar{a}| \leq \Delta a$ выражает абсолютную погрешность числа a . В этом случае $\Delta a = a - \bar{a} = a\varepsilon$ или $\frac{\Delta a}{a} = \varepsilon$, а погрешность округления (16) можно

представить в виде

$$\|u_n^k - u_{n\tau}^k\| \leq \|u_{n\tau}^k\| \varphi(n, k, c) 1,06(2^{-\tau}). \quad (17)$$

Функция $\varphi(n, k, c)$, где c — некоторая константа, а n и k характеризуют соответственно размерность системы (12) и количество используемых итераций в методе минимальных невязок (14) при значениях α_k, g_k вида (15), определяет оценку количества округлений арифметических операций при вычислении $\|u_{n\tau}^k\|$, т.е. вычислительную сложность.

ОЦЕНКА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СЛОЖНОСТИ

При глобальном приближенном решении задач оптимизации нелинейных функционалов актуальным является вопрос оценки $N(\varepsilon)$ вычислительной сложности этого процесса. В данном случае эта оценка состоит из суммы трех составляющих:

- оценки $N_1(\varepsilon)$, характеризующей сложность вычисления $F(\bar{u})$ из (13) в одной точке, а также ε -алгоритма или общего числа элементов ε_k -сеток, на которых вычисляется $F(u)$ до момента отделения всех решений или получения ε -решений по невязке для всех точных решений;
- оценки $N_2(\varepsilon)$ сложности итерационного метода уточнения всех отделенных решений до получения ε -решений по аргументу;
- оценки $N_3(\varepsilon)$ сложности вычисления значений $\varphi(u)$ или $\varphi_n(u)$ в найденных экстремальных точках.

Сложность вычисления оценок $N_1(\varepsilon)$, $N_2(\varepsilon)$ и $N_3(u)$ заключается в том, что различные решения могут отделяться на разных сетках, как и достигать заданной точности по аргументу на разных итерациях. Отметим, что оценки $N_1(\varepsilon)$, $N_2(\varepsilon)$, $N_3(\varepsilon)$ являются составными частями погрешности округления

из (17), т.е. функции $\varphi(n, k, c)$. Элементы методики получения таких оценок, а также важные вопросы оптимизации за счет распараллеливания вычислений рассмотрены в [11].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведенная в настоящей статье методика получения оценок полной погрешности и вычислительной сложности комбинированного алгоритма глобального решения СНСУ позволяет не только определять его возможности по точности и быстродействию решения задач глобальной оптимизации, но и ставить и решать задачу оптимизации вычислительного процесса по данным характеристикам при решении других сложных задач, которые появляются в результате научно-технического прогресса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. К вопросу оптимизации вычислений / В.С. Михалевич, И.В. Сергиенко, В.К. Задирака, М.Д. Бабич // Кибернетика и системный анализ. — 1994. — № 2. — С. 65–94.
2. Бабич М. Д., Задирака В. К., Сергиенко И. В. Вычислительный эксперимент в проблеме оптимизации вычислений // Там же. — 1999. — № 1, ч. I. — С. 51–62; № 2, ч. II. — С. 58–79.
3. Васильев Ф. П. Методы решения экстремальных задач. — М.: Наука, 1981. — 400 с.
4. Евтушенко Ю. Г. Методы решения экстремальных задач и их применение в системах оптимизации. — М.: Наука, 1982. — 381 с.
5. Стронгин Р. Г. Численные методы в многоэкстремальных задачах. — М.: Наука, 1978. — 240 с.
6. Приближенное решение операторных уравнений / М. А. Красносельский, Г. М. Вайникко, П. М. Забрейко и др. — М.: Наука, 1969. — 456 с.
7. Бабич М. Д., Иванов В. В. Исследование полной погрешности в задачах минимизации функционалов при наличии ограничений // Укр. мат. жур. — 1969. — 21, № 1. — С. 3–15.
8. Бабич М. Д., Шевчук Л. Б. Об одном алгоритме приближенного решения систем нелинейных уравнений // Кибернетика. — 1982. — № 2. — С. 74–79.
9. Бабич М. Д. Об одном аппроксимационно-итерационном методе решения нелинейных операторных уравнений // Там же. — 1991. — № 1. — С. 21–28.
10. Уилкинсон Дж. Х. Алгебраическая проблема собственных значений. — М.: Наука, 1970. — 504 с.
11. Бабич М. Д., Гецко О. М. О точности и вычислительной сложности алгоритмов численного решения некоторых классов задач глобальной оптимизации // УСнМ. — 2007. — № 5. — С. 29–37.

Поступила 27.03.2013