



ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ТЕХНИЧЕСКОЙ КИБЕРНЕТИКИ

**ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
МОСКВА 1967**

Д. ДЖ. УАЙЛД

МЕТОДЫ ПОИСКА ЭКСТРЕМУМА

Перевод с английского

А. Н. КАБАЛЕВСКОГО, Е. П. МАСЛОВА,

В. Д. СПИРИДОНОВА

Под редакцией

А. А. ФЕЛЬДБАУМА

ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»

ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

МОСКВА 1967

6H2. 15
Y 13
~~YDK~~ 62-50

OPTIMUM SEEKING METHODS

DOUGLASS J. WILDE

Department of
Chemical Engineering
Stanford University

PRENTICE-HALL, INC.
ENGLEWOOD CLIFFS, N. J.
[1964]

ОГЛАВЛЕНИЕ

От редактора перевода	9
Предисловие	11
Глава 1. Проблемы поиска	15
1.01. Классификация задач, решаемых методом поиска	17
1.02. Корни и экстремумы	18
1.03. Детерминированные задачи	19
1.04. Стохастические задачи	20
1.05. Пассивный и последовательный поиск	20
1.06. Использование неполных данных	22
1.07. Многоэкстремальность, ограничения, время	22
1.08. Выбор представления и масштабов	23
1.09. Правдоподобные рассуждения	25
Избранная литература к главе 1	26
Упражнения	27
Глава 2. Одномерный поиск	28
2.01. Унимодальность	28
Измерение эффективности поиска	33
2.02. Интервал неопределенности	34
2.03. Принцип минимакса	35
Пассивный поиск	39
2.04. Два эксперимента	40
2.05. Три эксперимента	41
2.06. Однородные пары	42
2.07. Ошибки эксперимента	44
Последовательный поиск	45
2.08. Метод дихотомии	46
2.09. Метод Фибоначчи	47
2.10. Проведение первого эксперимента	54
2.11. Кролики	55
2.12. Золотое сечение	58
2.13. Уравнение Люкаса	61
2.14. Максимальное число экспериментов	63
2.15. Поиск по дискретным точкам	64

2.16. Рандомизация	69
2.17. Смешанная стратегия	74
2.18. Доминирование	76
Упражнения	82
Глава 3. Геометрия многомерных поверхностей отклика . . .	85
3.01. Изометрическая проекция	86
3.02. Поверхности отклика	88
3.03. Гиперпространство	91
3.04. Трудности поиска по многим переменным	93
3.05. Случайный поиск	96
3.06. Стратегия поиска по многим переменным	98
Дебют	100
3.07. Линейные исследования	100
3.08. Касательная плоскость	104
3.09. Касательная к линии уровня	107
3.10. Нелинейная аппроксимация	109
3.11. Обобщение на многомерный случай	110
Эндшпиль	111
3.12. Нелинейные исследования	112
3.13. Аппроксимация без учета взаимосвязи	113
3.14. Взаимосвязь	116
3.15. Вершины и седла	117
3.16. Дополнение до квадрата	120
3.17. Эволюционные операции	123
Глобальные свойства	124
3.18. Траектории и параметрическое представление	124
3.19. Унимодальность	127
3.20. Строгая унимодальность	130
Упражнения	131
Глава 4. Касательные и градиент	134
Метод исключения касательными к линиям уровня	135
4.01. Исключение	137
4.02. Размещение новой группы экспериментов	139
4.03. Средняя точка	143
4.04. Минимакс	144
4.05. Медиана	146
4.06. Центроид	147
4.07. Контрольные эксперименты	148
4.08. Выводы	152
Градиент и подъем	153
4.09. Градиент	155
4.10. Многомерные обобщения	160
4.11. Неевклидов парадокс	162
4.12. Расстояние, масштаб и неопределенность размерности	166

4.13. Выбор масштабов	168
4.14. Седла	169
4.15. Заключение	170
Упражнения	171
Глава 5. Ускоренный поиск вдоль гребня	173
5.01. Метод сечений	175
5.02. Разрешаемые гребни	177
Метод параллельных касательных	180
5.03. Метод ускоренного подъема	181
5.04. Двумерный вариант обобщенного метода параллельных касательных	183
5.05. Многомерный вариант метода параллельных касательных	186
5.06. Преимущества метода УПК	190
5.07. Два примера на применение метода УПК	191
5.08. Поиск методом ПК в гиперпространстве	195
5.09. Метод ПК, инвариантный относительно выбора масштабов	196
5.10. Контуры неэллиптического типа	200
5.11. Выводы	202
Метод конфигураций	202
5.12. Основы метода	204
5.13. Результирующие шаги	205
5.14. Тактика слежения за гребнем	207
5.15. Окончание поиска	208
5.16. Дискретные переменные	209
5.17. Метод вращающихся координат	210
5.18. Метод поиска с осторожной тактикой	215
5.19. Недостатки рассмотренных методов	216
5.20. Заключение	218
Упражнения	218
Глава 6. Ошибки эксперимента	220
6.01. Направление поиска и длина шага	222
6.02. Новые измерения и старые средние значения	222
6.03. Гармоническая последовательность	224
Поиск корня	225
6.04. Процедура Роббинса—Монро	225
6.05. Случайные помехи	227
6.06. Сходимость	229
6.07. Сравнение стохастического и детерминистского методов	230
Общие принципы	231
6.08. Выделение случайной составляющей	232
6.09. Подавление помех	233

6.10. Регулярная составляющая	236
6.11. Сходимость регулярной составляющей процедуры Роббинса — Монро	238
6.12. Условия Дворецкого	240
Поиск максимума	241
6.13. Метод Кифера—Вольфовица	242
6.14. Нормализация длины шага	244
6.15. Ускорение	247
6.16. Многомерный поиск	249
Скорость сходимости	252
6.17. Оптимальный метод поиска корня	253
6.18. Сокращение длины шага	257
6.19. Асимптотика	260
6.20. Оптимальный метод поиска максимума	261
Упражнения	263
Предметный указатель	265

ОТ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

Выходящая на русском языке монография Уайлда за короткий период (с 1964 г.) уже дважды издана в США. Автору удалось в остроумной и непринужденной манере изложить основные результаты по оптимальным методам поиска. Своеобразна манера изложения автора: останавливаясь подолгу на некоторых доказательствах, он не просто сообщает их читателю, но и стремится подчеркнуть идею логики каждого доказательства, и мы надеемся, что при чтении книги у многих читателей возникнет своеобразный «эффект присутствия» и многие станут «соавторами» излагаемых доказательств.

Первая глава книги является вводной, в ней автор знакомит с основными проблемами поиска. Во второй главе излагаются методы поиска экстремума функции одной переменной. С некоторыми из них многие советские читатели познакомятся, по-видимому, впервые.

В третьей главе приводятся сведения из геометрии многомерных поверхностей и вводятся основные понятия и характеристики функций многих переменных.

Четвертая глава посвящена стратегиям поиска экстремума функций многих переменных. На конкретных примерах иллюстрируется применение этих стратегий.

В пятой главе книги рассматриваются вопросы теории поиска при наличии гребней на поверхностях отклика. Предлагаемые здесь методы относятся к классу градиентных; их умелое применение позволяет, в принципе, значительно сократить время поиска.

Шестая глава посвящена анализу различных процедур стохастической аппроксимации. Следует заметить, что в отечественной литературе метод стохастической аппроксимации освещен крайне слабо. Поэтому систематическое изложение

основ этого метода может оказать значительную помощь специалистам, интересующимся вопросами оптимизации.

Книга содержит много новинок. К каждой главе приложено большое число задач; при этом наряду с легкими имеются также задачи повышенной трудности.

Следует отметить, что книга Уайлда не охватывает всей проблемы поиска — предметом ее служит то, что в отечественной литературе называется «статической оптимизацией». Кроме того, в ряде мест автор весьма свободно оперирует специальными терминами. Однако, стремясь сохранить стиль изложения, присущий оригиналу, мы не стали вносить изменений там, где это не вызывалось необходимостью.

Книга является введением в теорию поиска и несомненно будет полезной инженерам и научным работникам, специализирующимся в области автоматического управления.

А. А. Фельдбаум

ПРЕДИСЛОВИЕ

Хотя предлагаемая читателю книга основана главным образом на работах статистиков, автор ее — инженер-химик. Поэтому книга не имеет узкоспециального характера, и хочется верить, что она будет интересна не только инженерам и статистикам, но в равной степени и специалистам по прикладной математике и исследованию операций, научным работникам, занимающимся моделями поведения, и экономистам.

Совершенно очевидно, что оптимизация, т. е. нахождение способов делать все наилучшим образом, должна интересовать практичных представителей промышленности, торговли и политики. Ведь в любом предприятии, большом или малом, подчас незначительная разница в результатах может привести от процветания к краху.

Сегодня, так же как и всегда, для принятия многих важных решений просто описывают исследуемую систему, насколько удастся точно, выбирают некоторый критерий для оценки ее эффективности и затем ищут, при каком состоянии системы выбранный критерий принимает наилучшее значение. Поскольку описание и доскональное исследование систем являются традиционной задачей инженеров, экономистов и других научных работников, связанных с практикой, для которых и написана эта книга, я не отважился касаться здесь этой обширной темы. Мы также обойдем деликатный вопрос выбора критерия качества, так как в большинстве случаев он либо совершенно очевиден, либо исключительно сложен из-за окутывающих его и не поддающихся количественному описанию суждений о ценности вещей. Вместо этого мы все внимание сосредоточим на технических проблемах, связанных непосредственно с самой оптимизацией.

На протяжении почти двухсот лет единственными математическими методами решения оптимальных задач

оставались дифференциальное и вариационное исчисление. После второй мировой войны с развитием теории операций появился интерес к методам оптимизации как средству решения задач, которые не поддаются классическим методам. Многие из новых методов, например линейное и динамическое программирование, уже достаточно подробно описаны в технической литературе.

Однако если оптимизируемая функция известна нам не полностью, то процесс нахождения ее оптимума обязательно связан с экспериментом, ибо лишь с помощью измерений можно расширить наши знания об этой функции. Поэтому методы нахождения оптимума произвольных функций, относительно которых мы не располагаем полными знаниями, мы называем методами поиска. Такого рода функции встречаются не только в тех случаях, когда наблюдение производится над самой физической или экономической системой, но и при теоретических исследованиях, когда математическое выражение критерия оказывается настолько сложным, что вычислить его можно лишь с помощью быстродействующих вычислительных машин.

В основу книги положен материал, который прорабатывался со студентами старших курсов инженерных специальностей, математическая подготовка которых ограничивается обычным курсом математического анализа, и поэтому нашему изложению может следовать каждый, кто имеет представление о частных производных. Впрочем, знание анализа понадобится лишь в малой степени, поскольку математические соотношения будут довольно простыми, хотя, вероятно, немного непривычными для инженеров и экономистов. Предполагается, что книга будет не только учебником для студентов, но и справочником для экономистов, инженеров и статистиков, которые, возможно, не смогли уследить за бурным развитием экспериментальных методов оптимизации.

Проблемы, возникающие при экспериментальной оптимизации, позволяют познакомиться с логикой, геометрией многомерного пространства и элементарной теорией вероятностей. В результате такого конкретного подхода выводятся довольно общие принципы, которые могут оказаться полезными даже в том случае, когда на детальный и строгий анализ нет времени. Например, исследование задач оптимизации с одной независимой переменной позволяет разо-

браться в весьма важном принципе минимакса, а также в непривычном для читателя методе рандомизации. При близком ознакомлении с многомерными задачами мы наталкиваемся на довольно неожиданные факты, касающиеся графических доказательств, и парадоксы, которые могут возникнуть, если не учитывать, что даже инженерам и экономистам приходится часто иметь дело с неевклидовыми пространствами. Анализ взаимного влияния переменных показывает, как по ошибке можно попасть в ложный оптимум, т. е. принять за оптимум то, что в действительности им не является. Теория стохастической аппроксимации демонстрирует, как из-за ошибок эксперимента замедляется поиск; тут же показывается, как для улучшения результатов нужно согласовывать новые и старые наблюдения. Как и можно было ожидать, по мере накопления опытных данных вносимые изменения должны становиться все меньше и меньше, причем оказывается, что гармонический ряд $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \dots$ играет особую роль для подавления случайных ошибок при согласовании последовательных наблюдений.

На стиль изложения материала большое влияние оказали идеи Пойа, изложенные им в книгах «Как решать задачу» и «Математика и правдоподобные рассуждения»¹⁾. Я хотел показать, каким путем авторы рассматриваемых нами методов пришли (или могли прийти) к их открытию. Хотя этот метод более многословен, чем формальное доказательство, он, по мнению Пойа, способствует развитию творческих способностей студента. Я убедился, что при таком изложении материала у студентов действительно возникают оригинальные, значительные идеи. Мне приятно выразить здесь свою благодарность за помощь, оказанную мне студентами Роджером Бен Хаимом из Высшей национальной школы технической химии (Нанси, Франция) и Литоном Т. Оливером и Рафаэлем Б. Крус Диасом из Техасского университета. Поскольку уж речь зашла о моей признательности за помощь, следует поблагодарить профессоров Кифера из Корнельского университета, Томаса

¹⁾ Д. П о й а, Как решать задачу, пособие для учителей, изд 2-е, Учпедгиз, М., 1961; Д. П о й а, Математика и правдоподобные рассуждения, ИЛ, М., 1957.

Корригана из Огайо, Ирвинга Миллера из Бруклинского политехнического института и Вильяма Грейвза из Колорадо, которые заметили в книге ряд ошибок и подсказали мне более удачные формы изложения материала. В особом долгу я перед профессорами Университета Айова Робертом Бюлером, Б. В. Шахом и Оскаром Кемпторном, познакомившими меня со своими неопубликованными работами по методу параллельных касательных. Важный вклад сделали мои коллеги, работающие в промышленности: С. М. Джонсон (Рэнд Корпорэйшн), Роберт Хук, Т. А. Дживс и Сай Вуд (Вестингауз), Эд Блюм (Пьюэ Ойл), Шейен Ованесян и группа сотрудников фирмы TRB-Компьюторз и наш старый друг Джин Мотт из Юнион Ойл.

Я признателен моим коллегам, обратившим мое внимание на очень важные материалы, которые в противном случае не попали бы в книгу: Лерою Фолксу из Оклахомского университета, Джиму Керли из Аризонского университета, Дэвиду Химмелблау из Техасского университета, Дейлу Радду из Висконсинского университета и Элвину Харкинсу (Монсанто Кемикал Компани). Хочу отметить также смелость профессоров Роберта Адлера и Эрла Гууза, которые первыми использовали эту книгу как часть курса по теории оптимизации. Автор обязан ряду организаций, которые поддерживали его морально и материально во время подготовки и написания этой книги. Это (в хронологическом порядке) Американская комиссия по просвещению во Франции, которая одобрила фулбрайтовский курс лекций в Высшей национальной школе технической химии (Нанси, Франция), Израильский технологический институт в Хайфе (Израиль), Техасский университет в Остине, Государственный научный фонд, предложивший автору включить в 1962 г. материал книги в летний курс «Динамика процессов и оптимизация», который был организован Колорадским университетом в Боулдере для преподавателей, работающих в области инженерных наук, и, наконец, Иельский университет. Автор выражает свое глубокое уважение памяти поэта Генри Уэдсворта Лонгфелло, который в своей поэме «Excelsior» (*превыше всего*) также искал пути к вершинам.

Дуглас Уайлд

ГЛАВА 1

ПРОБЛЕМЫ ПОИСКА

Уж солнце в сумерках зашло...
Через альпийское село
Нес юноша в снега и мрак
С девизом непонятным флаг:
Excelsior! ¹⁾).

ЛОНГФЕЛЛО

Ученый, который сталкивается с системой, в той или иной степени ему неизвестной, расширяет свои знания о ней с помощью экспериментов. Он фиксирует на некотором уровне значения параметров, которыми можно распоряжаться, измеряет значения тех параметров, управлять которыми он не в состоянии, и после этого наблюдает результат. В общем случае на этот результат могут влиять некоторые нерегулируемые и ненаблюдаемые факторы, что приводит к так называемым ошибкам эксперимента. Из табл. 1.1 видно, что с исследованием неизвестных систем имеют дело не только ученые.

Хотя экспериментальный подход всегда был характерен для естественных наук, начиная с исторического опыта Евы в садах эдема, в последнее время внимание ученых привлекла сама сущность таких исследований, часто называемых задачами «черного ящика». Происхождение этого названия поясняет последняя строка табл. 1.1. При обсуждении этой задачи в дальнейшем мы будем пользоваться терминологией и обозначениями, приведенными в предпоследней строке таблицы и относящимися к математическому исследованию функций.

В данной книге для нас не представляет особого интереса всестороннее изучение какой-то системы. Мы хотим только определить, при каких значениях независимых переменных произвольная зависимая переменная, которая рассматривается как критерий эффективности, принимает оптимальное (максимальное или минимальное, в зависимости

¹⁾ Перевод Б. Томашевского.

Т а б л и ц а 1.1

Изучение неизвестных систем

Исследователь	Система	Регулируемые факторы	Не регулируемые, но измеряемые факторы	Неизвестные факторы	Результат
Фермер	Ферма	Удобрения	Погода	Состояние почвы	Урожай
Врач	Пациент	Лекарства	Пульс	Инфекция	Состав крови
Инженер	Химический реактор	Температура	Состав сырья	Активность катализатора	Полезный выход
Агент сыскной полиции	Подозреваемая личность	Содержание допроса	Улики	Склад характера подозреваемого	Доказательства
Сенатор	Сенат	Речь	Политическая обстановка	Индивидуальные особенности депутатов	Итоги голосования по проекту закона
Продавец	Рынок	Цена продукта	Цены конкурентов	Вкусы покупателей	Объем продажи
Математик	Функция	Независимые переменные	Параметры	Случайные переменные	Зависимая переменная
Представитель любой профессии	«Черный ящик»	Входные кнопки	Внешний вид «ящика»	Устройство «ящика»	Выходные данные

от смысла задачи) значение. Затем мы исследуем задачу оптимизации, в которой нам неизвестна функциональная зависимость между критерием эффективности и управляемыми переменными. Предположим далее, что общее число экспериментов, которые мы можем произвести, ограничено. Всякий набор правил, по которым производятся эти n экспериментов x_1, x_2, \dots, x_n , будет называться *стратегией поиска*, а всякое исследование, направленное на отыскание оптимального значения неизвестной функции, — *задачей поиска*. Среди всех возможных стратегий поиска мы, понятно, хотим выбрать ту, которая приводит нас к цели оптимальным способом. Таким образом, мы не только стремимся найти оптимум функции, но также оптимизируем сам *способ оптимизации*.

Постановка таких задач вызывается следующим. Лишь в редких случаях можно дать достаточно совершенное теоретическое описание реальной системы, и поэтому в процессе разработки и конструирования системы принимается множество аппроксимаций. Кроме того, некоторые существенные параметры системы могут изменяться со временем. Но даже если теория совершенна и параметры постоянны, истинные связи между входными и выходными величинами часто искажаются из-за погрешностей измерения. И если теоретические методы позволяют найти почти оптимальное решение, это предварительное решение часто можно улучшить с помощью непосредственного эксперимента на самой системе, будь то металлургический завод, система уравнений или огородное хозяйство.

1.01. Классификация задач, решаемых методом поиска

Задачи, решаемые методом поиска, можно классифицировать либо по числу независимых переменных, либо в зависимости от наличия или отсутствия ошибок эксперимента. За исключением последней главы, посвященной стохастической аппроксимации, мы в дальнейшем будем иметь дело только с задачами, в которых ошибки эксперимента отсутствуют, т. е. с детерминированными задачами. Во второй главе описываются изящные и эффективные методы поиска оптимума, которые, к сожалению, разработаны лишь для

случая одной независимой переменной и при отсутствии случайных ошибок. Эти методы нельзя обобщить на случай большего числа переменных. Для многомерных задач предложено много различных частных способов решения. Эти способы будут описаны главным образом в четвертой и пятой главах после введения в третьей главе некоторых понятий геометрии многомерного пространства. Ошибки эксперимента значительно увеличивают время поиска и сводят на нет те преимущества, которые в детерминированном случае имеет одномерная задача по сравнению с многомерной. Поэтому в шестой главе всевозможные ситуации, возникающие из-за ошибок эксперимента, рассматриваются с единой точки зрения независимо от числа переменных.

1.02. Корни и экстремумы

Проблема отыскания экстремумов имеет очень много общего с проблемой нахождения корней, и во многих случаях, если это удобно с точки зрения вычислений, задача нахождения корней формулируется как задача минимизации. Рассмотрим, например, m совместных уравнений

$$\varphi_j(x_1, \dots, x_k) = 0, \quad (j = 1, 2, \dots, m) \quad (1.1)$$

с неизвестными x_1, \dots, x_k . Решение этой системы можно найти, минимизируя функцию Φ , которая представляет собою сумму квадратов функций φ_j .

В общем случае, так как решения могут быть комплексными, функцию Φ следовало бы записать в виде

$$\Phi = \sum_{j=1}^m \varphi_j \bar{\varphi}_j, \quad (1.2)$$

где $\bar{\varphi}_j$ — величины, комплексно-сопряженные φ_j . Если $k = m$, то при нахождении решения функция Φ принимает свое минимальное значение — нуль. Если же число уравнений превышает число неизвестных, как обычно бывает в задачах аппроксимации, то минимальное значение Φ может отличаться от нуля. Такое «решение» будет представлять собою аппроксимацию по методу наименьших квадратов ¹⁾.

¹⁾ A. D. Booth, An application of the method of steepest descents to the solution of systems of nonlinear simultaneous equations, Quart. J. Mech. Appl. Math. 2, 4 (1949), p. 460.

Подобно тому, как отыскание корней можно превратить в упражнение на минимизацию, так и при решении задач оптимизации можно воспользоваться приемами нахождения корней. Дело в том, что первая производная непрерывной функции обращается в точке экстремума в нуль ¹⁾. Поэтому если вместо самой функции, экстремум которой ищется, оперировать с ее производной, то иногда для нахождения экстремума можно применить известные методы отыскания корней. Читателю следует обратить внимание на то, что хотя методы, развиваемые в данной книге, специально приспособлены к задачам оптимизации, они, возможно, применимы и для нахождения корней.

1.03. Детерминированные задачи

Задачи поиска, в которых отсутствуют неизвестные или случайные факторы, мы будем называть *детерминированными*. Предположим, что экспериментатор может так или иначе учитывать любое неуправляемое, но известное ему воздействие. В этом случае общность наших рассуждений не пострадает, если мы будем рассматривать упрощенную систему, в которой оптимизируемый критерий качества зависит только от управляемых переменных.

Хотя во многих случаях ошибками эксперимента нельзя пренебречь, есть много интересных с точки зрения практики задач оптимизации, которые полностью детерминированы. Такие задачи возникают, в частности, при невозможности применить стандартные методы поиска, скажем дифференциальное исчисление, для очень сложных критериев качества. Например, из-за сложности используемых математических моделей — уравнений, таблиц, графиков и вычислительных алгоритмов — к задачам детерминированного поиска приводят экономические и конструкторские расчеты систем. Часто оказывается, что расчетная модель не содержит случайных элементов. В этом случае задача поиска также полностью детерминирована, если даже сама

¹⁾ Строго говоря, производная непрерывной функции не обязательно обращается в нуль в точке экстремума. Автор имеет в виду гладкую (дифференцируемую) функцию и экстремум во внутренней точке области допустимых значений независимой переменной. (Прим. ред)

модель приближенна и основана на шатких гипотезах, неточных данных или эмпирических правилах. Конечно, было бы неразумно проводить на такой сомнительной модели слишком точный поиск, однако для нашей задачи, заключающейся в нахождении эффективных методов поиска, это не имеет никакого значения.

1.04. Стохастические задачи

Задачи, в которых нельзя пренебречь ошибками эксперимента, будем называть *стохастическими*. Это слово означает, что такая задача включает случайные факторы. Естественно, что стохастические задачи труднее детерминированных, однако не в той степени, как это может показаться с первого взгляда. Мы увидим, что стохастические задачи можно рассматривать как детерминированные, в которых добавляется шум или ошибки эксперимента. Поэтому вопросы сходимости детерминированной части процесса удастся отделить от задач подавления шума.

Влияние случайных ошибок главным образом заключается в уменьшении скорости поиска, при которой еще остается уверенность в том, что оптимум когда-нибудь будет найден. Стохастические методы, будучи весьма «обстоятельными», при отсутствии ошибок эксперимента оказываются много медленнее детерминированных. Этот факт раньше не был достаточно хорошо осознан, что приводило иногда к безуспешному применению стохастических методов в детерминированных задачах. Чтобы избежать ошибочного применения стохастических процедур, следует помнить, что для них существует проблема сходимости, которая в детерминированных случаях попросту отсутствует. Таким образом, скорость сходимости, которая представляет собой основной вопрос в детерминированных задачах, имеет при наличии шума лишь второстепенное значение.

1.05. Пассивный и последовательный поиск

Стратегии поиска естественным образом разделяются на две взаимно исключающие друг друга группы, которые мы будем называть пассивным и последовательным поиском. Стратегии, в которых заранее, до получения каких-

либо результатов, определяются все дальнейшие эксперименты, назовем *пассивными*. Стратегии, в которых будущие эксперименты зависят от получаемых результатов, назовем *последовательными*¹⁾.

Рассмотрим для примера группу из десяти экономистов, которым предстоит разработать программу размещения некоторого капитала. Предположим, что каждый экономист, если ему задан какой-то вариант распределения капитала, после недельных расчетов может определить прибыль, которая соответствует этому распределению. Если на выработку рекомендации у группы имеется всего одна неделя, план поиска наилучшего размещения капитала по пассивной программе заключается в одновременном расчете десяти вариантов, так как из-за недостатка времени ни один из экономистов не может при выборе условий для своего расчета воспользоваться чьим-либо готовым результатом.

В тех случаях, когда это возможно, гораздо эффективнее использовать последовательный план поиска. Если бы те же десять экономистов могли все вместе производить расчет одного варианта размещения капитала за половину рабочего дня (считая неделю для экономистов пятидневной), они уже после расчета четырех вариантов получили бы оптимальное размещение с той же точностью, как при параллельном расчете десяти вариантов. Если, кроме того, во вторник они не прекратили бы работу, а продолжали анализ вариантов до конца недели, то их работа по определению оптимума была бы почти в восемнадцать раз эффективнее, чем при пассивном поиске (при условии, что последовательная стратегия поиска была оптимальной).

Мы увидим, что превосходство последовательных стратегий по сравнению с пассивными экспоненциально возрастает с ростом числа экспериментов. Поскольку в одном из разделов статистики, посвященном планированию

¹⁾ Для обозначения этих двух групп автор использует термины «simultaneous» и «sequential», что означает буквально *одновременный* и *последовательный*. Хотя в нашем переводе эти термины теряют свое антитезное звучание, мы, однако, не будем нарушать терминологию, установившейся в русской литературе по математической статистике. (Прим. ред)

экспериментов, пассивные стратегии используются чаще, чем последовательные, и этим методам посвящена обширная литература, мы рассмотрим пассивные методы лишь вкратце.

1.06. Использование неполных данных

Когда о поведении системы абсолютно ничего нельзя предположить заранее, экспериментатору остается только попытаться наугад, с помощью случайного перебора, получить наилучший результат. Однако, к счастью, реальные системы редко бывают столь таинственными, и обычно о системе еще до эксперимента можно кое-что сказать. Часто, например, показатель эффективности является непрерывной функцией своих аргументов; во многих случаях в интересующей нас области можно предположить наличие единственного экстремума. В этой книге показывается, как, исходя из таких частных сведений, можно разработать эффективные методы поиска. Но сначала нам придется дать некоторое представление о том, что математики называют теорией функций. Под этим понимается точное, количественное определение таких интуитивных понятий, как унимодальность (существование единственного экстремума), гладкость, выпуклость и вогнутость, подобие. Нам также потребуется описать и обобщить для многомерного пространства такие геометрические или, скорее, даже географические понятия, как пик, долина, гребень, перевал или седло, кривизна и крутизна. Подобно любому настоящему исследователю мы достигнем цели быстрее, если сначала приобретем некоторые фундаментальные знания.

1.07. Многоэкстремальность, ограничения, время

Ознакомившись с оглавлением, читатель, вероятно, обратит внимание на то, что в книге не рассматривается ряд интересных проблем, встречающихся в реальных задачах оптимизации. В частности, мы оставили в стороне мультимодальные или многоэкстремальные задачи, так как их исследование пока не дало существенных результатов. Тот, кто решает такие задачи сегодня, должен попытаться изолировать различные пики, чтобы исследовать каждый

из них в отдельности. Будем надеяться, что вскоре появятся специальные методы решения этих задач.

В настоящей книге не рассматриваются также задачи оптимизации с ограничениями, т. е. с запрещением некоторых комбинаций переменных, которые без этих ограничений были бы оптимальными. Несмотря на важность этого вопроса, мы не останавливаемся на нем, так как задачам с ограничениями посвящена обширная литература. Читателю, желающему ознакомиться с этими задачами, следует обратиться к литературе по линейному программированию, нелинейному или математическому программированию и динамическому программированию. Некоторые из таких работ приведены в списке литературы в конце настоящей главы.

Мы ограничимся также рассмотрением лишь стационарных задач, в которых система остается неизменной независимо от времени. Сейчас ведутся многочисленные исследования, посвященные нестационарным системам, в которых такие изменения имеют место, и некоторые из таких работ также упоминаются в списке литературы. Мы не будем рассматривать здесь нестационарных задач, часто переплетающихся с адаптивным управлением, по той причине, что хотя в этой области и достигнуты уже значительные результаты, еще больше там предстоит сделать. И потом для этого потребовался бы математический аппарат, который пока еще слишком сложен для выпускников высших технических учебных заведений, а это противоречило бы характеру нашей книги.

1.08. Выбор представления и масштабов

Прежде чем приступить к поиску, следует некоторое время затратить на выбор удобного представления критерия и на выбор масштабных коэффициентов. Мы поясним сейчас на примере весьма глубокое замечание Бюлера, Шаха и Кемпторна ¹⁾ о разнице между соотношением, связывающим переменные, и различными *представлениями*

¹⁾ R. J. Buehler, B. V. Shah and O. Kempthorne, Some properties of steepest ascent and related procedures for finding optimum conditions, Iowa State University Statistical Laboratory (April 1961), pp. 8—10, 18.

этого соотношения. Пусть, например, исследуется зависимость полезного выхода химического процесса от регулируемых переменных — давления и температуры. Если y — выход продукта в граммах, p — давление в атмосферах, π — натуральный логарифм p , а t — абсолютная температура в градусах Кельвина, то одно и то же соотношение можно представить двумя различными выражениями:

$$y = \varphi(p, t) = y_0 [1 - a(p - p_0)^2 - b(t - t_0)^2] \quad (1.3a)$$

или

$$y = \varphi(\pi, t) = y_0 [1 - a(e^\pi - p_0)^2 - b(t - t_0)^2]. \quad (1.3б)$$

Рекомендуется всегда выбирать для представления такие функции, которые хотя бы в некоторой окрестности оптимума можно представить малым числом членов их тейлоровского разложения. Дело в том, что большинство алгоритмов поиска основано на аппроксимациях функции с использованием оценок первой и второй производных. С этой точки зрения из-за наличия в уравнении (1.3б) трансцендентного члена e^π квадратичное представление уравнением (1.3a) предпочтительнее.

Другое полезное правило состоит в том, чтобы избегать представлений, в которых независимые переменные взаимно связаны. Этому условию удовлетворяют оба уравнения (1.3), так как в них отсутствуют произведения независимых переменных. Однако если представить y в виде функции переменных

$$x_1 = \frac{1}{2}(p - p_0) + \frac{1}{2}(t - t_0), \quad x_2 = \frac{1}{2}(p - p_0) - \frac{1}{2}(t - t_0),$$

то в представлении будет присутствовать член $x_1 x_2$, и величины x_1 и x_2 окажутся связанными:

$$y = \theta(x_1, x_2) = y_0 [1 - (a + b)(x_1^2 + x_2^2) - 2(a - b)x_1 x_2]. \quad (1.4)$$

В разделах 3.16 и 5.16 описываются методы, с помощью которых можно освободиться от такой зависимости.

Наконец, масштабные коэффициенты для независимых переменных удобно выбирать таким образом, чтобы в точке оптимума влияние единичного приращения любой из переменных было одинаковым. В частности, для уравнения (1.3a) желательно выбрать масштабы для p и t так, чтобы

выполнялось соотношение

$$a(p - p_0)^2 = b(t - t_0)^2. \quad (1.5)$$

Это правило выбора масштабных коэффициентов, разработанное для одного из алгоритмов поиска и описанное в разделе 4.13, подходит, как оказывается, и для других алгоритмов поиска.

Пользуясь геометрической терминологией, можно сказать, что выполнение всех перечисленных правил должно придать поверхностям уровней функции сферическую форму — симметричную в направлении любой независимой

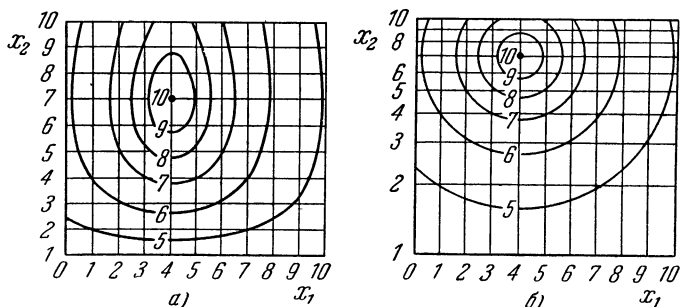


Рис. 1.1. Преобразование координат: а) исходные прямоугольные координаты; б) более удобные полулогарифмические координаты.

переменной. Выполнение всех этих правил редко оказывается возможным, так как функция обычно бывает недостаточно известна. Эти рекомендации просто следует иметь в виду, чтобы развить в себе интуицию, которая позволяет ускорить всю процедуру поиска.

На рис. 1.1 видна разница между удачным и неудачным выборами представления и масштабных коэффициентов.

1.09. Правдоподобные рассуждения

Прежде чем двинуться дальше, мы позволим себе сказать несколько слов о принятом в книге характере изложения. Поскольку нам хотелось, чтобы теория оптимизации была доступна студентам технических или экономических

специальностей, которым не всегда преподается формальная логика, мы стремились к точности определений и строгости рассуждений. Однако, следуя методу правдоподобных рассуждений Пойа¹⁾, мы отказались от принятого в математике метода изложения с лаконичностью формальных теорем и строгих доказательств. Так как мы стремились к развитию творческого воображения студентов, все изложение в книге в большей или меньшей степени интуитивно и напоминает рассуждения исследователя, который ощупью продвигается к новым идеям и фактам. Читатель, которого больше интересуют приводимые результаты, сможет без ущерба опустить некоторые подробности. Однако те, кто намеревается заниматься исследовательской работой в области теории оптимизации, — а там есть что делать — должны «почувствовать» этот предмет, внимательно следуя нашим, быть может, не всегда изящным эвристическим рассуждениям и изобретая свои формальные доказательства.

ИЗБРАННАЯ ЛИТЕРАТУРА К ГЛАВЕ 1

Статическая оптимизация при наличии ограничений

Р. А р и с, Оптимальное проектирование химических реакторов, ИЛ, М., 1963.

G. H a d l e y, Linear programming. Reading, Mass., Addison-Wesley Publishing Co., Inc., 1962.

S. V a j d a, Mathematical programming. Reading, Mass., Addison-Wesley Publishing Co., Inc., 1961.

См. также (*прим. ред.*):

Д. Б. Ю д и н, Е. Г. Г о л ь ш т е й н, Задачи и методы линейного программирования, изд-во «Сов. радио», 1961

Динамическая оптимизация при наличии ограничений

Р. Б е л л м а н и С. Д р е й ф у с, Прикладные задачи динамического программирования, изд-во «Наука», М., 1965.

¹⁾ Д. П о й а, Как решать задачу. Пособие для учителей, изд. 2-е, Учпедгиз, М., 1961; G. P o l y a, Induction and analogy in Mathematics, Princeton University Press, 1954.

Оптимальное управление

Р. Беллман, Процессы регулирования с адаптацией, изд-во «Наука», М., 1964.

Ш. С. Л. Чанг, Синтез оптимальных систем автоматического управления, изд-во «Машиностроение», М., 1964.

Планирование эксперимента

O. L. Davies (ed), The design and analysis of industrial experiments, New York, Hafner Publishing Co., Inc., 1956.

См. также (прим. ред.):

В. В. Налимов и Н. А. Чернова, Статистические методы планирования экстремальных экспериментов, изд-во «Наука», М., 1965.

Упражнения

1. Назвать физические или экономические задачи оптимизации, которые являются:

- а) детерминированными, одномерный случай;
- б) детерминированными, многомерный случай;
- в) стохастическими, одномерный случай;
- г) стохастическими, многомерный случай.

2. Представить решение системы уравнений

$$x_1 + 5x_2 = 13,$$

$$x_1^2 + x_2^2 = 13$$

как задачу оптимизации.

3. Для предыдущей задачи найти удобное представление и выбрать масштабные коэффициенты, производя, если потребуется, замену переменных.

4. Найти для следующих функций преобразования, позволяющие избавиться от зависимости переменных:

а) $3x_1^2 + 5x_1x_2 - 2x_2^2$;

б) $x_1^4 e^{-3x_2^2}$;

в) $(e^{-x_1^2} + 2x_2)(3e^{-2x_2} + x_1)$;

г) $\exp(-x_1^2 + 5x_1x_2 - 4x_2^2)$.

5. Выбрать масштабные коэффициенты для x_1 и x_2 :

а) $\ln(x_1^2 + 3x_2^2)$;

б) $\cos(x_1^2 + x_1x_2 + 3x_2^2)$.

ГЛАВА 2

ОДНОМЕРНЫЙ ПОИСК

В домах он видел яркий свет.
Он был теплом села согрет,
Но в вышине мерцал ледник,
И с губ сорвался гордый крик:
Excelsior!

ЛОНГФЕЛЛО

Мы начнем с рассмотрения простейшего случая, когда регулируемая переменная x всего одна и ошибки эксперимента отсутствуют. Оптимальные стратегии будут выведены и для пассивного и для последовательного поиска. Изложение не столь законченных результатов, относящихся к задачам с многими независимыми переменными, откладывается до следующих двух глав, посвященных многомерному поиску.

После введения понятия унимодальности мы обнаружим, как это весьма общее свойство позволяет нам выбрать объективный минимаксный критерий для оценки эффективности поиска, и приступим к оптимизации этого критерия как для пассивного, так и для последовательного поиска. Это приведет нас к интересному и очень эффективному методу Фибоначчи. Хотя этот метод был предложен Кифером совсем недавно, теоретически он имеет много общего с задачами, которыми занимаются со времен Евклида.

В заключение мы рассмотрим несколько эксцентричный метод «рандомизации», в котором при определении направления поиска прибегают к подбрасыванию монеты.

2.01. Унимодальность

Сейчас нам нужно дать в точных математических терминах определение функции одной переменной, которая, говоря образно, имеет в интервале определения всего один горб. Таким свойством, которое мы будем называть унимодальностью, обладают все функции, представленные на рис. 2.1. Заметим, что унимодальная функция вовсе не

должна быть гладкой, как на рис. 2.1, а, и даже непрерывной, как на рис. 2.1, б, — она может быть изломанной (не дифференцируемой), разрывной и даже может в некоторых интервалах не быть определенной, как на рис. 2.1, в.

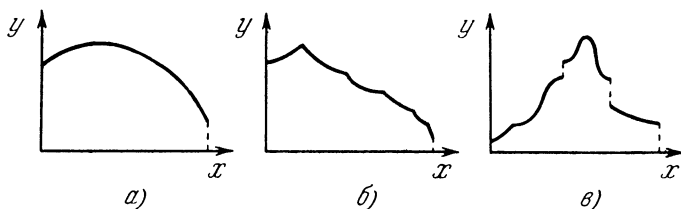


Рис. 2.1. Унимодальные функции: а) выпуклая; б) непрерывная; в) произвольная.

Поэтому предположение унимодальности не связано с жесткими ограничениями и выполняется во многих практических задачах поиска.

Пусть y является функцией независимой переменной x' , принадлежащей замкнутому интервалу, ограниченному точками $x' = a$ и $x' = b$; $a \leq x' \leq b$. Без потери общности можно для простоты рассматривать преобразованную переменную x , которая равна нулю при $x' = a$ и равна единице при $x' = b$. Новая безразмерная переменная определяется соотношением $x = (x' - a) / (b - a)$; очевидно, $0 \leq x \leq 1$.

Предположим для определенности, что мы хотим максимизировать y . К такой форме при необходимости всегда можно привести и задачу минимизации, отыскивая вместо наименьшего значения функции y наибольшее значение функции ($-y$). Пусть y^* — искомое, но неизвестное максимальное значение y , и пусть x^* — то значение x , при котором получается этот максимум. Тогда

$$y^* = \max_x y(x) \quad \text{и} \quad y(x^*) = y^*.$$

Если функция y унимодальная, то при удалении x от x^* y всегда убывает. Инженеру, который обычно имеет дело с непрерывными функциями и со скоростью их изменения, может показаться соблазнительным определить унимодальность с помощью производных: y унимодальна, если $\frac{dy}{dx} > 0$ при $x < x^*$ и $\frac{dy}{dx} < 0$ при $x > x^*$. Хотя такое

определение было бы удовлетворительным для гладких непрерывных функций (рис. 2.1, а), его нельзя применить к функциям с изломами (рис. 2.1, б) и к разрывным функциям (рис. 2.1, в). Чтобы охватить и эти случаи, мы должны определить унимодальность, не пользуясь понятием производной. Это вынуждает нас рассматривать пары экспериментов, так как отдельное испытание не дает достаточной информации о поведении функции.

Рассмотрим два эксперимента x_1 и x_2 , причем $x_1 < x_2$, и пусть значения y будут соответственно y_1 и y_2 . Тогда функция y унимодальна, если из условия $x_1 > x^*$ следует, что $y_1 > y_2$, а из условия $x_2 < x^*$ следует, что $y_1 < y_2$. Другими словами, если оба отсчета взяты по одну сторону от оптимума, то более близкому к оптимуму соответствует большее значение y . С помощью этого достаточно сильного определения можно получить критерий для оценки эффективности поиска, который не исключает из рассмотрения часто встречающиеся на практике разрывные функции.

Однако по ходу изложения целесообразно упомянуть о некоторых специальных типах унимодальных функций, определение которых связано с большим числом ограничений.

Нам уже встречались непрерывные унимодальные функции (рис. 2.1, а и б). Функция, изображенная на рис. 2.1, а, принадлежит к еще более узкому классу выпуклых функций. Такие функции в литературе по оптимизации рассматриваются достаточно часто, так что их рассмотрение здесь оправдано. Возьмем три значения y_1 , y_2 и y_3 функции y , соответствующие произвольным значениям x_1 , x_2 и x_3 аргумента x , причем $x_1 < x_2 < x_3$. Значение y при x_2 можно оценить с помощью линейной интерполяции между y_1 и y_3 . Такая линейная оценка имеет вид

$$y_1 \frac{x_3 - x_2}{x_3 - x_1} + y_3 \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1}. \quad (2.1)$$

Если истинное значение y всегда больше этой оценки, мы называем такую функцию выпуклой. Однозначная выпуклая функция всегда унимодальна, однако она не обязательно должна быть непрерывной, как кривая рис. 2.1, а. Добавим, что выпуклая функция не может иметь точек перегиба и по этой причине функция рис. 2.1, б не является выпуклой.

Если можно предположить унимодальность функции, тогда по результатам любой пары экспериментов можно указать интервал, в котором заключен оптимум x^* , причем этот интервал меньше, чем первоначальный. Возьмем, например, два эксперимента x_1 и x_2 , где $x_1 < x_2$. При этом возможны три различных исхода: $y_1 > y_2$, $y_1 < y_2$ и $y_1 = y_2$. Все они представлены на рис. 2.2.

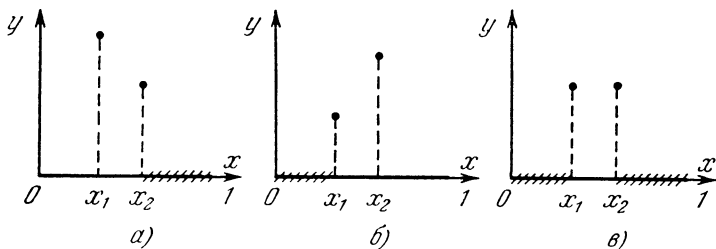


Рис. 2.2. Возможные результаты при двух экспериментах: а) $y_1 > y_2$, $0 \leq x^* < x_2$; б) $y_1 < y_2$, $x_1 < x^* \leq 1$; в) $y_1 = y_2$, $x_1 < x^* < x_2$.

Если теперь $y_1 > y_2$ (рис. 2.2, а), то оптимум не может лежать правее x_2 , иначе нарушается предположение об унимодальности функции y . Доказательство этого положения, по существу, весьма несложное, мы проведем подробно для тех читателей, которые не привыкли к подобным рассуждениям от противного. Доказательства в такой форме должны стать для специалиста-прикладника такими же привычными, какими они всегда были для их коллег-теоретиков. Те, кто уже владеет этим методом *reductio ad absurdum* (приведение к абсурду), могут свободно пропустить два следующих абзаца.

Мы хотим показать, что если функция y унимодальна и $y_1 > y_2$, то оптимум x^* не может находиться правее x_2 . Чтобы доказать эту теорему от противного, предположим на время, что это не так, т. е. $x^* > x_2$. Развивая это предположение, мы придем к какому-нибудь заведомо неправильному утверждению, которое и показывает, что наше временное предположение было ложным. Однако так как это предположение отрицало теорему, то его ложность доказывает ее истинность. Ниже приводится такое доказательство.

Пусть теорема неверна и $x^* > x_2$. Тогда и x_1 и x_2 находились бы с одной стороны от оптимума: $x_1 < x_2 < x^*$. По определению унимодальности это означало бы, что $y_1 < y_2$. Однако очевидно, что это противоречит условию теоремы, где утверждается, что $y_1 > y_2$. Таким образом, предположение $x^* > x_2$ ложно, и мы приходим к заключению, что $0 \leq x^* < x_2$.

Подобным образом можно доказать, что если $y_1 < y_2$, то $x_1 < x^* \leq 1$ (рис. 2.2, б). Рассмотренные два случая вместе уже дают ответ и для третьего случая (рис. 2.2, в): если результаты двух экспериментов совпадают, оптимум должен находиться посередине.

Однако, прежде чем использовать полученные результаты для выведения объективной оценки эффективности поиска, следует еще немного поговорить о самой гипотезе унимодальности, так как с ней связано все дальнейшее изложение. Сейчас нам не известно ни одной систематической работы, которая была бы посвящена построению общих математических моделей для исследования вопроса об унимодальности того или иного критерия. Однако можно указать несколько важных задач оптимизации, в которых критерий качества является унимодальным. В частности, из принципов термодинамики следует, что равновесие состава смеси в химическом реакторе наступает при достижении минимума так называемой свободной энергии. С. Джонсон ¹⁾ показал, что эта функция *вогнута*, что, как уже отмечалось, означает ее унимодальность. Подобно этому хорошо известный в экономике «закон сокращения прибылей» имеет относительно помещаемого капитала выпуклую функцию дохода. В своей практике мы никогда не встречали задач оптимизации, в которых в интересующей исследователя области критерий качества не оказывался бы унимодальной функцией.

Оставляя сейчас этот вопрос в стороне, мы можем только посоветовать производить в любой задаче предварительное исследование — теоретическое или экспериментальное, чтобы быть уверенным, что в выбранном интервале поиск приводит именно к точке оптимума, а не к какой-либо другой.

¹⁾ S. M. Johnson, Management Science 5 (1959), p. 229.

ИЗМЕРЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОИСКА

Чтобы говорить об *оптимальной* стратегии поиска, необходимо иметь *априорный* критерий оценки эффективности поиска. Под этим мы понимаем некоторую меру, принимающую определенное значение при анализе самой стратегии поиска до начала каких бы то ни было экспериментов. Хотя можно было бы попытаться измерять эффективность поиска по максимальному значению функции, которое достигается при экспериментах, такой критерий зависел бы в равной степени от удачи и от качества алгоритма и вряд ли был бы объективным критерием. К счастью, для унимодальных функций можно определить и затем оптимизировать априорный критерий, зависящий только от размещения экспериментов, но не от их результатов.

Начнем с исследования одной частной стратегии поиска и найдем для нее априорный критерий эффективности, который затем обобщим. Пусть для определенности надо провести три эксперимента. Эти эксперименты отстоят от левой

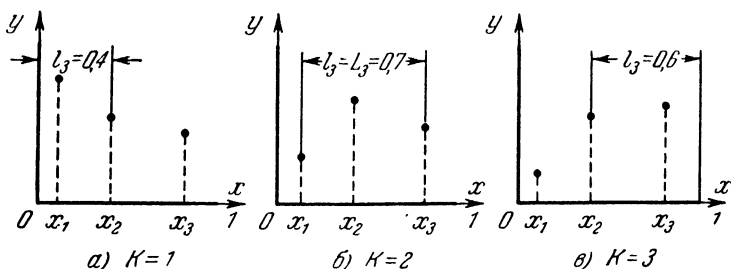


Рис. 2.3. Произвольная неоптимальная стратегия; $x_1 = 0,1$, $x_2 = 0,4$, $x_3 = 0,8$; а) наиболее удачный результат, $K = 1$; б) наименее удачный результат, $K = 2$; в) промежуточный случай, $K = 3$.

границы исходного интервала неопределенности соответственно на 10, 40 и 80 процентов длины интервала. Занумеровав эксперименты слева направо, получим $x_1 = 0,1$, $x_2 = 0,4$ и $x_3 = 0,8$, как показано на рис. 2.3. Пусть K — индекс эксперимента x_K , при котором получено наибольшее значение

$$y_K = \max_{1 \leq k \leq n} \{y_k\} \quad \text{и} \quad y(x_K) = y_K. \quad (2.2)$$

Заметим, что значение y_K , максимальное в данной серии экспериментов, не обязательно равно y^* , т. е. максимальному возможному y .

В зависимости от того, при каком эксперименте (первом, втором или третьем) получено наибольшее значение y , возможные результаты, как показано на рис. 2.3, делятся на три группы. Используя результаты предыдущего параграфа, мы можем для каждого случая указать новый более узкий интервал, в котором должна находиться точка оптимума x^* . Действительно, если $K = 1$, то $0 \leq x^* < x_2$; если $K = 2$, то $x_1 < x^* < x_3$, и если $K = 3$, то $x_2 < x^* \leq 1$.

2.02. Интервал неопределенности

Чтобы выразить полученные факты в более компактной форме, позволяющей обобщить ее на случай поиска по n экспериментам, обозначим правую и левую границы исходного интервала соответственно x_0 и x_{n+1} , т. е. $x_0 = 0$ и $x_{n+1} = 1$. Тогда для серии из n экспериментов мы сможем в общем случае сказать, что $x_{K-1} < x^* < x_{K+1}$. Эту область мы будем называть *интервалом неопределенности после n экспериментов* и обозначать ее длину через

$$l_n = x_{K+1} - x_{K-1}. \quad (2.3)$$

Таким образом, новый интервал неопределенности заключен между экспериментами, расположенными по обе стороны от эксперимента, давшего наибольшее значение y . На рис. 2.3 l_3 принимает значение 0,4; 0,7 или 0,6 в зависимости от того, при каком из трех экспериментов получен максимум — при первом, втором или третьем. Величина всех возможных интервалов $x_{k+1} - x_{k-1}$ ($k = 1, 2, \dots, n$) определяется стратегией поиска, а от эксперимента зависит, при каком k будет получен наилучший результат y_K и каким окажется в действительности новый интервал неопределенности l_n . Чтобы подчеркнуть зависимость l_n от распределения x_k и от результатов испытаний, определяющих K , мы будем длину нового интервала записывать в виде функции $l_n(x_k, K)$.

Величина l_n будет, однако, хорошей мерой эффективности поиска лишь после завершения всей серии экспериментов и как априорный критерий не удовлетворяет нашим

требованиям, так как до проведения экспериментов величину l_n предсказать нельзя.

Будем поэтому интересоваться не всеми возможными интервалами, а лишь самым большим из них, который обозначим L_n . Если же нам повезет, то результат поиска будет только лучше.

Из самого определения максимальной длины L_n видно, что она зависит только от стратегии поиска и безразлично, в каком из интервалов окажется точка оптимума x^* :

$$L_n(x_k) = \max_{1 \leq K \leq n} \{l_n(x_k, K)\}. \quad (2.4)$$

В нашем примере с тремя опытами максимальная длина равна

$$\begin{aligned} L_3(0, 1; 0, 4; 0, 8) &= \max_{1 \leq K \leq 3} \{l_3(x_k, 1), l_3(x_k, 2), l_3(x_k, 3)\} = \\ &= \max \{(x_2 - x_0), (x_3 - x_1), (x_4 - x_2)\} = \\ &= \max \{0, 4; 0, 7; 0, 6\} = 0, 7. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Величина L_n единственна, так как среди многих возможных значений l только одно будет наибольшим. Поскольку величина L_n умышленно берется для самого худшего случая, нежелательная зависимость от исхода испытаний отсутствует. Вместо того, чтобы пытаться отгадать, какой из интервалов неопределенности будет получен, мы просто рассчитываем на самый большой из них, который может получиться в худшем случае. Ограничиваясь, таким образом, лишь крайним случаем, мы фактически упрощаем задачу и получаем априорный (хотя и пессимистический) критерий для оценки эффективности.

2.03. Принцип минимакса

Теперь выберем среди всех возможных стратегий поиска такую стратегию, при которой только что определенный нами критерий эффективности L_n окажется минимальным. Обозначая для оптимальной стратегии эксперименты через x_k^* , а интервал неопределенности через L_n^* , получаем

$$L_n^* = \min_{x_k} \{L_n(x_k)\}, \quad L_n(x_k^*) = L_n^*. \quad (2.6)$$

Несмотря на то, что L_n переменная, зависящая от выбранной стратегии, величина L_n^* является постоянной. Мы вновь убеждаемся, что при оптимизации наша задача упростилась, так как от самых разнообразных начальных интервалов мы с помощью минимизации приходим к единственному, самому малому интервалу. Хотя сам интервал L_n^* единственен, может найтись несколько стратегий x_k^* , приводящих к этому интервалу. Подобные примеры встретятся нам при изучении пассивного поиска.

Стратегия x_k^* часто называется *минимаксной*, так как, комбинируя уравнения (2.4) и (2.6), можно выразить L_n^* в виде

$$L_n^* = \min_{x_k} \max_{1 \leq K \leq n} \{l_n(x_k, K)\}. \quad (2.7)$$

С помощью этих операций фактически из всех возможных интервалов l_n , которые могут получиться при различных стратегиях поиска и различных исходах экспериментов, выбирается единственный интервал L_n^* . Заметим, что очень важен порядок этих операций. При любой другой их комбинации получаются совершенно бессодержательные результаты. В частности, если дважды найти максимум l , то полученная стратегия была бы наихудшей:

$$\max_{x_k} \max_{1 \leq K \leq n} \{l_n(x_k, K)\} = 1, \quad (2.8)$$

а оперирование с возможно короткими интервалами привело бы к рассмотрению одних только неудачнейших исходов, и минимизация дала бы нам вырожденный результат

$$\min_{1 \leq K \leq n} \{l_n(x_k, K)\} = 0. \quad (2.9)$$

Лишь минимаксный подход дает нам содержательную и нетривиальную стратегию поиска.

Минимаксная стратегия в высшей степени осторожна, причем случай может повлиять лишь на положение интервала неопределенности, но не на его длину. Но несмотря на довольно пессимистическую и осторожную сущность, принцип минимакса неожиданно приводит к весьма эффективным методам поиска. Принцип минимакса находит

широкое применение в теории решений, в частности, в задачах с конкуренцией. Применение принципа минимакса в теории игр иллюстрируется приводимым ниже примером, который почти дословно взят из книги Дж. Д. Вильямса «Совершенный стратег» — забавного и содержательного «букваря по теории стратегических игр» ¹⁾.

На связи оптимальной стратегии с теорией игр мы более подробно остановимся в конце главы.

Предположим, что муж и жена — конкретность всегда помогает, поэтому назовем их Рэй и Дотти — задумали совершить туристический поход, но Рэя привлекает высокогорье, а Дотти предпочитает низменности. Район, который их интересует, пересечен сетью просек или дорог, по четыре в каждом направлении. Туристы договорились разбить лагерь на перекрестке дорог. Они договорились также, что Рэй выбирает дорогу с востока на запад, а Дотти — дорогу с севера на юг, что совместно определяет перекресток. Если теория игр им не поможет, то они умрут от разочарования.

Точки пересечения на дорогах, доступных Рэю, имеют следующие высоты (в тысячах футов):

	Дорога	Высота			
Рэй	1	7	2	5	1
	2	2	2	3	4
	3	5	3	4	4
	4	3	2	1	6

Как всякого человека, желающего получить как можно больше из этого предприятия, его, естественно, привлекает дорога Рэй-1, имеющая пересечения на высотах 7, 2, 5 и 1, так как только по ней он сможет добраться до семитысячного пика. Но он сразу соображает, что это — неосуществимая мечта. Он не решается принять этот план, который сулит ему многое, но который может привести его к неудаче, если Дотти проявит должное искусство при

¹⁾ Дж. Д. Вильямс, Совершенный стратег, или букварь по теории стратегических игр, изд-во «Сов. радио», М., 1960.

своем выборе. Отбрасывая предположение, что она может действовать не подумав, он вынужден в своих собственных интересах забыть о головокружительных вершинах и обратить все внимание на низины и спуски, которые, по его мнению, лишь портят местность. Это изучение приводит его в конце концов к выбору дороги Рэй-3. Расположенная на этой дороге низина на высоте 3 тысячи футов наиболее привлекательна в данном районе. Выбирая дорогу Рэй-3, он может гарантировать, что лагерь будет разбит на высоте по крайней мере 3 тысяч футов, а если Дотти проявит некоторую беззаботность, лагерь окажется еще выше.

Однако его жена, чего он и боялся, в подобных вещах разбирается не хуже его. Критические высоты, встречающиеся на ее дорогах, перечислены в следующей таблице:

Дорога	Дотти			
	1	2	3	4
Высота	7	2	5	1
	2	2	3	4
	5	3	4	4
	3	2	1	6

После изучения этой таблицы она поняла, что не стоит терять времени на мечты о дорогах Дотти-3 и Дотти-4, хотя там и имеются глубокие долины, где ей хотелось бы разбить лагерь. Будучи реалистом, она изучает вершины, которые встречаются на ее дорогах, решив выбрать такую дорогу, которая проходит по самым низким вершинам, и в конце концов она останавливается на дороге Дотти-2, где ночевка на высоте 3 тысяч футов — самое худшее, что с ней может случиться.

Теперь мы замечаем, что произошло что-то вроде совпадения. Рэй выбрал стратегию (Рэй-3), которая гарантирует ему, что лагерь будет на высоте не ниже 3 тысяч футов, а Дотти выбрала такую стратегию (Дотти-2), которая обеспечивает ей отдых на высоте не выше 3 тысяч футов. Иными словами, каждый игрок может получить стоянку на высоте 3 тысяч футов, имея дело с достаточно искушен-

ным противником. Он может добиться лучшего результата, если его противник окажется неосторожным.

Обратим внимание на то, что в данном случае меры по соблюдению секретности необязательны. Как Рэй, так и Дотти могут объявить о своем выборе (если он именно такой, как определен выше), и противник не сможет использовать эту информацию для того, чтобы принудить второго игрока выбрать место для лагеря хуже, чем на высоте 3 тысяч футов.

Обе стороны в этом примере использовали минимаксную стратегию. Дотти минимизировала максимальную высоту лагеря, в то время как Рэй минимизировал максимальный перепад высот между лагерем и самой высокой вершиной. Эти две простые минимаксные стратегии в данном случае совпали, и Дотти и Рэй остановились на перевале или в седловой точке, что случается далеко не всегда. Мы увидим в конце главы, что принцип минимакса можно распространить и на более общие случаи, а сейчас нам достаточно того, что минимаксный подход позволяет получить определенный ответ в наших задачах поиска.

ПАССИВНЫЙ ПОИСК

В тех случаях, когда все эксперименты производятся одновременно, приходится пользоваться пассивными стратегиями поиска. Естественно, что пассивные методы гораздо менее эффективны, чем последовательные, в которых при проведении экспериментов можно учитывать результаты уже проведенных ранее испытаний. Однако, несмотря на это, в некоторых ситуациях все-таки приходится использовать пассивные стратегии.

Часто не хватает времени на то, чтобы провести друг за другом ряд последовательных испытаний, так как приходится избегать нарушения каких-то ограничений. В подобном затруднительном положении оказываются, например, десять экономистов (см. разд. 1.05), если они могут заниматься расчетом любого варианта распределения капитала только в одиночку. Иногда правила учреждения вынуждают исследователя заранее представлять подробный план проведения эксперимента, так как от этого зависит финансирование или разрешение на проведение опытов.

И, наконец, часто приходится искать экстремум, пользуясь измерительными приборами, уже встроенными в некоторый агрегат: например, при наблюдении за максимальной температурой в трубчатом химическом реакторе с помощью серии термпар или за областью максимальных напряжений вращающегося вала с помощью тензометрических датчиков.

2.04. Два эксперимента

Чтобы уменьшить интервал неопределенности, требуется произвести по меньшей мере два эксперимента. Так как информация, полученная при первом эксперименте, бесполезна для определения условий второго, пассивная стратегия в случае двух экспериментов совершенно не отличается от последовательной. Начнем наше исследование стратегий поиска с этого самого простого случая: $n = 2$.

Рассмотрим два эксперимента: x_1 и x_2 , причем $0 \leq x_1 < x_2 \leq 1$. Используя уравнения (2.4) и (2.6), можно выразить максимальный интервал неопределенности L_2 как функцию x_1 и x_2 :

$$L_2 = \max \{ (x_2 - x_0), (x_3 - x_1) \} = \max \{ x_2, 1 - x_1 \}. \quad (2.10)$$

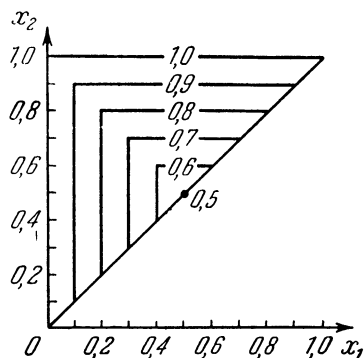


Рис. 2.4. L_2 как функция x_1 и x_2 .

Линии уровня этой функции, вероятно привычной не для всех читателей, показаны на рис. 2.4. Так как, по условию, $x_1 < x_2$, рассматриваются лишь те точки x_1, x_2 , которые

принадлежат треугольнику, ограниченному прямыми $x_1 = 0$, $x_2 = 1$ и $x_1 = x_2$. На первый взгляд может показаться, что в этой области минимальное значение L_2 равно 0,5 и оно достигается при $x_1 = x_2 = \frac{1}{2}$. Однако из-за условия, по которому x_2 больше чем x_1 , получить этот минимум не удается.

Пусть ε (эпсилон) — тот наименьший сдвиг экспериментов, при котором становится возможным обнаружить отличие между y_1 и y_2 . Тогда, производя эксперименты $x_1 = 1/2 - \varepsilon/2$ и $x_2 = 1/2 + \varepsilon/2$, мы не только обеспечим требуемое разделение, но и получим L_2^* — минимально возможное значение L_2 . Все это можно записать следующим образом:

$$L_2^* = L_2 \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{2} \right), \left(\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{2} \right) \right] = \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{2}. \quad (2.11)$$

Так как необходимо учитывать величину ε , т. е. минимально допустимое разнесение экспериментов, эта схема поиска называется « ε -минимаксной».

2.05. Три эксперимента

Определив наилучшее распределение для двух экспериментов, займемся теперь случаем трех опытов. Постараемся улучшить тот, довольно плохой план ($x_1 = 0,1$, $x_2 = 0,4$, $x_3 = 0,8$), который рассматривался на рис. 2.3. В этом примере L_3 , наибольший интервал неопределенности, равнялся 0,7.

Из рис. 2.3, б видно, что L_3 можно уменьшить, сближая x_1 и x_3 . Увеличим поэтому x_1 до 0,2, а x_3 уменьшим до 0,7, как это сделано на рис. 2.5. Теперь $x_3 - x_1 = 0,5$, а наибольшим оказывается уже интервал между x_2 и правым концом всего интервала. При этом L_3 все-таки уменьшается до $x_4 - x_2 = 1 - 0,4 = 0,6$.

Перемещая x_2 вправо, можно уменьшать L_3 дальше, так как уменьшается $x_4 - x_2$. Однако одновременно увеличивается $x_2 - x_0$ и для выбора x_2 надо рассмотреть функцию

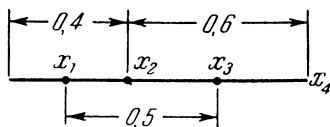


Рис. 2.5. Улучшенный вариант пассивной стратегии:
 $x_1 = 0,2$, $x_2 = 0,4$, $x_3 = 0,7$
 $L_3 = x_4 - x_2 = 0,6$.

$$\max \{x_2, (1 - x_2)\} \quad (2.12)$$

в следующих пределах: $0,2 = x_1 < x_2 < x_3 = 0,7$ (рис. 2.6). Так как эта функция имеет минимум при $x_2 = 0,5$, это значение мы и принимаем для второго эксперимента.

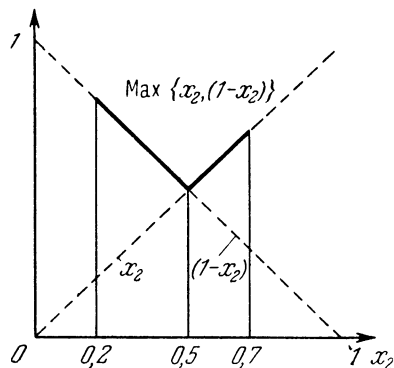


Рис. 2.6. Определение места для проведения второго эксперимента.

Теперь, как показано на рис. 2.7, а независимо от положения оптимальной точки x^* наибольший интервал неопределенности всегда будет равен 0,5. Точку x_2 нельзя переместить, не увеличив при этом $x_4 - x_2$ или $x_2 - x_0$. И хотя $x_1 - x_3$ можно было бы сделать и меньше, чем 0,5, ни на $x_2 - x_0$, ни на $x_4 - x_2$ это уже не повлияло бы. Они все равно оставались бы наибольшими и поэтому

определяющими интервал неопределенности. Таким образом, 0,5 — минимально возможное значение L_3 . Это означает,

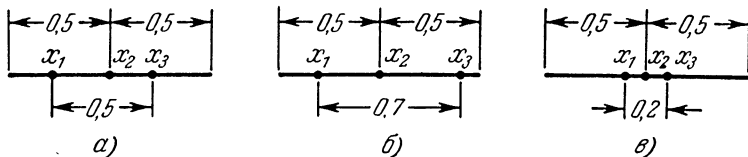


Рис. 2.7. Минимаксные последовательные стратегии.

что стратегия $x_1 = 0,2$; $x_2 = 0,5$ и $x_3 = 0,7$ — минимаксная.

2.06. Однородные пары

Нетрудно заметить — подобное встретится и в дальнейшем — что минимаксной будет всякая пассивная стратегия, в которой $x_2 = 0,5$ и $x_3 - x_1 \leq 0,5$. Две другие минимаксные стратегии¹⁾ приведены на рис. 2.7, б и в. До-

¹⁾ Стратегия на рис. 2.7, б не является минимаксной, т. к. для нее $x_3 - x_1 > 0,5$. (Прим. перев.)

бавление третьего эксперимента вряд ли себя оправдывает, так как разность $L_2^* - L_3^*$ составляет всего $\varepsilon/2$. Фактически использование нечетного числа опытов при пассивной стратегии целесообразно лишь в том случае, когда сдвиг ε относительно велик. Для четного числа опытов наилучшее размещение получается при разделении экспериментов на равноотстоящие пары. Будем называть такое распределение (оно показано на рис. 2.8) *поиском однородными парами*.

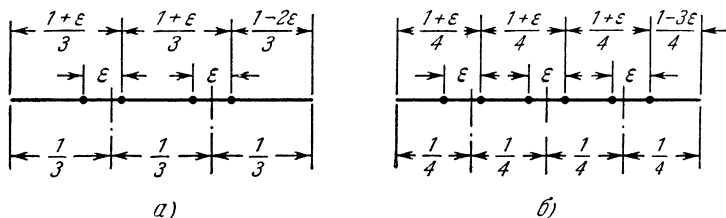


Рис. 2.8. Поиск однородными парами: а) $n = 4$ (2 пары); б) $n = 6$ (3 пары).

Чтобы выписать формулу для размещения опытов при поиске однородными парами, введем одно обозначение, которое позволит выделить пару, содержащую данный эксперимент x_k . Пусть заключение некоторой величины в квадратные скобки обозначает наибольшее целое число, меньшее или равное этой величине. Например $[2] = 2$, $[\pi] = 3$. Тогда для $k = 1, 2, \dots, n$ при n четном получаем

$$x_k = \frac{(1 + \varepsilon) [(k + 1)/2]}{(n/2) + 1} - \left\{ \left[\frac{k + 1}{2} \right] - \left[\frac{k}{2} \right] \right\} \varepsilon. \quad (2.13)$$

Чтобы убедиться в том, что такая схема представляет собою для четного числа опытов ε -минимакс, достаточно заметить, что, смещая любой из экспериментов, мы можем лишь увеличить длину наибольшего интервала L_n . При этом величина L_n^* определяется выражением

$$L_n^* = \frac{1 + \varepsilon}{(n/2) + 1}. \quad (2.14)$$

Чтобы завершить рассмотрение пассивного поиска, остановимся немного на оптимальном планировании нечетного числа экспериментов. Пусть n — четное число. Для $n + 1$ опытов рассмотрим следующее размещение. Эксперименты

с четными номерами, включая фиктивные точки $x_0 = 0$ и $x_{n+2} = 1$, распределим через равные интервалы длиной $2/(n+2)$. Эксперименты с нечетными номерами могут размещаться как угодно, с одним условием, чтобы расстояния между соседними опытами не превышали $2/(n+2)$. Таким образом, при нечетном числе опытов существует бесконечное число минимаксных стратегий, дающих интервал неопределенности $L^* = 2/(n+2)$.

На рис. 2.9 для пяти экспериментов показаны две минимаксные схемы. Все опыты в первой схеме распределены

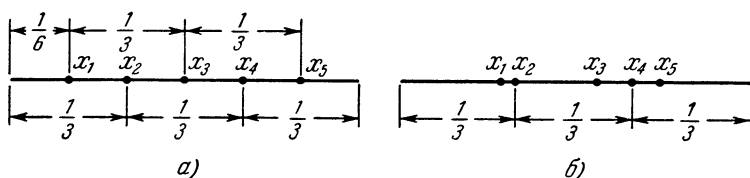


Рис. 2.9. Минимаксные последовательные стратегии поиска для пяти экспериментов: а) равномерное распределение; б) асимметричное распределение.

равномерно. Во второй схеме нечетные испытания распределены асимметрично. Как и в случае двух и трех опытов, интервал неопределенности сокращается при переходе к нечетному числу опытов лишь на некоторую часть сдвига ε . При n четном

$$L_{n+1}^* - L_n^* = \frac{\varepsilon}{(n/2) + 1}. \quad (2.15)$$

2.07. Ошибки эксперимента

В своих рассуждениях выше мы были вынуждены считаться с тем, что расстояние между любыми двумя опытами должно быть не меньше некоторого положительного ε . Математик величиною этого расстояния обычно не интересуется и почти всегда им пренебрегает. Однако исследователь, имеющий дело с некоторой физической или экономической задачей, редко может поступать так же. Это заставляет нас заняться минимальным сдвигом ε , тем более, что в следующем параграфе будет показано, как можно свести его влияние к минимуму.

Однако сразу возникает затруднение. Ведь для того, чтобы оценить ϵ , надо что-то знать о том, насколько быстро изменяется неизвестная функция. К несчастью, все это происходит вблизи оптимума, где функция часто становится весьма пологой, так как первая производная гладкой и непрерывной функции в экстремуме стремится к нулю, если только экстремум находится не на конце интервала. Поэтому минимальным сдвигом ϵ иногда пренебречь невозможно.

До сих пор, ради простоты и рассчитывая на читателя, не знакомого со статистикой, мы игнорировали ошибки эксперимента. Но читателю даже и без всякой статистики ясно, что из-за ошибок эксперимента величина ϵ увеличится. Можно уменьшить влияние этих ошибок, повторяя каждый эксперимент и пользуясь средними по нескольким замерам, хотя при этом, конечно, потребуется большее число опытов. Однако фактически все сводится к нахождению способа, позволяющего определить, чем вызвана наблюдаемая нами разница между двумя опытами — случайными флуктуациями из-за ошибок эксперимента или действительным отличием. Такие способы, основанные на *критериях значимости*, достаточно просты, однако они выходят за рамки нашей книги. Их можно найти в любом курсе статистики, в котором рассматривается проверка гипотез ¹⁾.

Здесь же мы хотим только предостеречь читателя от применения изложенных методов без надлежащих статистических проверок в случае значительных ошибок экспериментов. Методы поиска, в которых специально предусмотрено подавление ошибок эксперимента, описываются в гл. 6.

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЙ ПОИСК

При последовательном поиске экспериментатор, проводящий один за другим свои опыты, имеет возможность использовать полученную из первых опытов информацию, чтобы решить, где ему взять очередную пробу. Такая гиб-

¹⁾ A. M o o d, Introduction to the theory of statistics (New York, McGraw Hill Book Co., Inc., 1950), p. 263. [См. также Л е м а н, Проверка статистических гипотез, изд-во «Наука», М., 1964. (Прим. ред.)]

кость дает эффект, который многие себе даже не представляют, а ведь часто, чтобы отказаться от неэффективного пассивного поиска, достаточно лишь убедить кого-то изменить свою точку зрения.

Как мы уже говорили (см. разд. 1.05), если бы десять разных экономистов для более быстрого получения результата могли бы объединиться и сообща разработать один вариант, они смогли бы последовательно исследовать все десять вариантов и, затратив то же время, определить интервал, содержащий оптимум, в 18 раз точнее, чем при поиске однородными парами. Общепринятые правила, ограничивающие применение к задачам поиска принципа «поживем — увидим», в некоторых случаях можно пересмотреть. И заботясь о завтрашнем дне, можно иногда подумать о построении специального устройства, позволяющего производить последовательные измерения, подобно тому как за высокотемпературной зоной химического реактора можно следить, имея одну подвижную термопару вместо нескольких термопар, неподвижно установленных на своих местах.

2.08. Метод дихотомии

В предыдущем параграфе мы показали, что если проводится только два эксперимента, то лучшее, что можно сделать, — это произвести оба опыта в середине интервала возможно ближе друг к другу. Длина интервала неопределенности при этом получается равной $[1/2 + \varepsilon/2]$. Предположим, что третий и четвертый эксперименты мы производим в середине получившегося интервала, как показано на рис. 2.10, б. Это дало бы новый интервал неопределенности, равный

$$\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{2} \right) + \frac{\varepsilon}{2} = \frac{1}{4} + \frac{3}{4} \varepsilon. \quad (2.16)$$

После пятого и шестого эксперимента, произведенных подобным же образом, интервал сократился бы до $1/8 + (7/8) \varepsilon$ (рис. 2.10, в). И вообще после n экспериментов (n , конечно, должно быть четным) оптимум окажется заключен в интервал длиной $2^{-\frac{n}{2}} + (1 - 2^{-\frac{n}{2}}) \varepsilon$.

Таким образом, эффективность этого поиска *методом дихотомии* (половинным делением) подобно *методу Больцано* для отыскивания корней ¹⁾ возрастает с ростом n экспоненциально, тогда как эффективность поиска однородными парами растет лишь прямо пропорционально

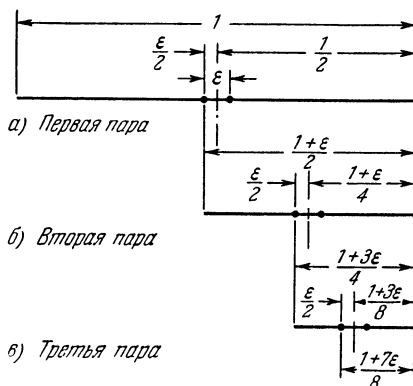


Рис. 2.10. Поиск методом дихотомии для случая шести экспериментов.

числу экспериментов. Во что обходится негибкость пассивной стратегии, становится ясным, если учесть, что для уменьшения интервала неопределенности до одного процента его исходной длины потребовалось бы, пренебрегая ϵ , 198 пассивных экспериментов, — и тот же результат был бы достигнут дихотомией уже после 14 экспериментов (см. табл. 2.1 и рис. 2.12).

2.09. Метод Фибоначчи

Как ни эффективен метод дихотомии, существует, однако, метод еще более совершенный. Такая ϵ -минимаксная последовательная схема была предложена в 1953 г. Кифером ²⁾.

¹⁾ R. G. S t a n t o n, Numerical methods for science and engineering (Englewood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall, Inc., 1961), pp. 83—84. [См. также Б. П. Д е м и д о в и ч, И. А. М а р о н, Основы вычислительной математики, изд. 2, Физматгиз, М., 1963. (Прим. ред.)]

²⁾ J. Kiefer, Sequential minimax search for a maximum, Proc. Am. Math. Soc 4 (1953), p. 502.

Хотя это открытие произошло сравнительно недавно, интересны его теоретические связи, и не только с работой самого Фибоначчи, математика XIII века, именем которого называется этот метод, но и с построениями древнего геометра Евклида. Мы остановимся потом на исторических корнях метода Фибоначчи, но прежде выведем этот метод и посмотрим, как он работает.

Следуя установившейся математической традиции, Кифер сначала формулирует свой метод, а затем приступает к доказательству его ε -минимаксности. Однако мы предпочтем здесь пожертвовать изящностью ради наглядности, и покажем сначала, каким путем можно двигаться при построении этого метода. При нашей демонстрации мы используем в качестве модели доказательство Джонсона¹⁾, напоминающее схему динамического программирования. Кроме того, мы воспользуемся здесь предложением, выдвинутым одним из наших студентов, Оливером, — учитывать величину минимального сдвига ε на протяжении всего поиска. Это приводит к окончательному интервалу неопределенности несколько меньшему, чем у Кифера, который не беспокоится об ε до самого последнего опыта. Хотя выигрыш при этом составляет всего около двух третей величины ε , в практических задачах это может иногда иметь значение.

Пусть для исследования исходного интервала неопределенности единичной длины мы располагаем n экспериментами. Рассмотрим ситуацию, которая возникла после того, как все эксперименты, кроме одного, уже проведены. Остается исследовать интервал неопределенности, длину которого обозначим L_{n-1}^* . Как показано на рис. 2.11, в, где-то внутри этого интервала будет заключен эксперимент E_{n-1}^+ , при котором было получено самое большое значение y среди первых $n - 1$ испытаний. Так как относительное расположение E_{n-1}^+ внутри интервала L_{n-1}^* полностью зависит от применяемой стратегии поиска, положение E_{n-1}^+ , в принципе, целиком зависит от нас. И мы, конечно, имеем возможность провести последний эксперимент E_n где угодно, с единственным условием, чтобы это было не ближе

¹⁾ S. M. Johnson, Optimal search for a maximum is fibonacciian, RAND Corp. report P-856 (1956).

минимального сдвига ε от E_{n-1}^+ . Следовательно, независимо от того, какой длины оказался L_{n-1}^* , мы можем так разместить E_{n-1}^+ и E_n , что при этом длина последнего интервала L_n^* окажется сколь возможно малой. Так как эта ситуация полностью эквивалентна обычному поиску с единственной парой экспериментов, оптимальным будет проведение экспериментов в точках, симметричных относительно середины интервала и удаленных от нее на $\varepsilon/2$. Таким образом (см. рис. 2.11, б), L_{n-1}^* и L_n^* связаны соотношением

$$L_{n-1}^* = 2L_n^* - \varepsilon. \quad (2.17)$$

Теперь рассмотрим интервал, который получается после того, как выполнены все испытания, кроме двух последних. Длину его обозначим L_{n-2}^* . Где-то внутри этого интервала находится эксперимент E_{n-2}^+ , при котором был получен наибольший из всех первых $n-2$ испытаний результат.

В этом же интервале надо провести следующий эксперимент, который мы пока обозначим E_{n-1} . После него мы узнаем, какой из этих двух экспериментов оказался удачнее, и назовем E_{n-1}^+ лучшей из двух точек. Вторая точка, которую будем называть E_{n-1}^- , является пограничной точкой между частью интервала L_{n-2}^* , которая отбрасывается, и сегментом L_{n-1}^* , остающимся для дальнейшего исследования. Следовательно, точка E_{n-1}^- должна отстоять ровно на L_{n-1}^* от одного из концов интервала L_{n-2}^* . Но ведь когда планировались эти эксперименты, мы еще не знали, которая из двух точек, E_{n-2}^+ или E_{n-1} , в действительности окажется E_{n-1}^- . Отсюда следует, что обе точки, и E_{n-1}^+ и

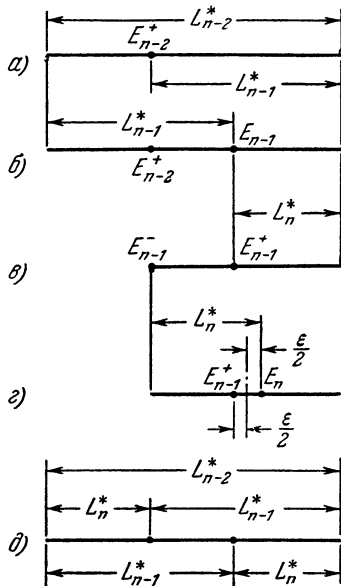


Рис. 2.11. Оптимальное размещение двух последних экспериментов.

E_{n-1}^* , должны отстоять на L_{n-1}^* от концов интервала L_{n-2}^* , хотя, конечно, не от одного и того же конца.

Таким образом, при оптимальной стратегии поиска эксперимент E_{n-2}^* оказывается на расстоянии ровно L_{n-1}^* от одного конца интервала L_{n-2}^* (рис. 2.11, а). Затем проводится следующий эксперимент E_{n-1}^* , отстоящий на L_{n-1}^* от другого конца интервала L_{n-2}^* (рис. 2.11, б). Этими двумя точками интервал L_{n-2}^* делится на три сегмента, и от исхода этих испытаний зависит, какой из крайних сегментов будет выкинут из дальнейшего рассмотрения.

В оставшийся интервал длиной L_{n-1}^* попадает либо E_{n-2}^+ , либо E_{n-1}^- . Уцелевший эксперимент и будет в действительности тем, что мы называем E_{n-1}^+ , потому что он оказался самым удачным из всех первых $n-1$ испытаний. Но мы уже доказали, что E_{n-1}^+ должен находиться от конца интервала L_{n-1}^* на расстоянии, в точности равном L_n^* (рис. 2.11, в). Поскольку E_{n-2}^+ и E_{n-2}^- в интервале L_{n-2}^* располагались симметрично и одна из этих точек оказалась E_{n-1}^+ , отсюда следует, что каждая из этих точек должна отстоять на L_n^* единиц от одного из концов интервала L_{n-2}^* и на L_{n-1}^* единиц от другого, как показано на рис. 2.11, д. Отсюда можно заключить, что

$$L_{n-2}^* = L_{n-1}^* + L_n^*. \quad (2.18)$$

Из уравнений (2.17) и (2.18) получаем

$$L_{n-2}^* = (2L_n^* - \varepsilon) + L_n^* = 3L_n^* - \varepsilon. \quad (2.19)$$

Можно обобщить эти рассуждения и найти зависимость, связывающую длины любых трех последовательных интервалов неопределенности. Рассмотрим для этого интервал длиной L_j^* , который получился после того, как завершились j экспериментов. Один конец этого интервала совпадает с только что отброшенным экспериментом E_j^- , а на расстоянии L_{j+1}^* от другого конца находится эксперимент E_j^+ , при котором был получен наилучший результат среди всех первых j испытаний. Поскольку при планировании экспериментов приходилось допускать, что вместо E_j^+ может сохраниться E_j^- , эти два испытания должны были располагаться симметрично в предыдущем интервале длиной L_{j-1}^* . Эта симметрия означает, что E_j^- от ближайшего

конца L_{j-1}^* отстоит на расстояние L_{j+1}^* . Отсюда следует, что

$$L_{j-1}^* = L_j^* + L_{j+1}^* \quad (2.20)$$

для всех $1 < j < n$. Уравнение (2.18) является частным случаем, который получается при $j = n - 1$.

Выпишем длины L_j^* для нескольких j , последовательно убывающих от $n - 1$. При $j = n - 2$ имеем

$$L_{n-3}^* = L_{n-2}^* + L_{n-1}^* = (3L_n^* - \varepsilon) + (2L_n^* - \varepsilon) = 5L_n^* - 2\varepsilon.$$

Аналогично $L_{n-4}^* = 8L_n^* - 3\varepsilon$ и $L_{n-5}^* = 13L_n^* - 5\varepsilon$. Для получения компактной формулы, выражающей эти величины, введем последовательность чисел F_k , определяемую следующим образом:

$$F_0 = F_1 = 1, \quad (2.21)$$

$$F_k = F_{k-1} + F_{k-2}, \quad k = 2, 3, \dots \quad (2.22)$$

В третьем столбце табл. 2.1 выписаны первые 25 членов этой числовой последовательности. На рис. 2.12 эти числа приведены в виде графика. F_k называется k -м числом Фибоначчи. Это название имеет историческое происхождение, и мы вернемся к нему немного позже.

С помощью чисел Фибоначчи мы можем записать:

$$L_{n-k}^* = F_{k+1}L_n^* - F_{k-1}\varepsilon. \quad (2.23)$$

Принимая длину первого интервала за единицу, получаем

$$L_1^* = 1 = F_n L_n^* - F_{n-2}\varepsilon,$$

откуда мы находим L_n^* , т. е. ту часть исходного интервала, которая остается после n последовательных экспериментов, проведенных согласно оптимальной стратегии:

$$L_n^* = \frac{1}{F_n} + \frac{F_{n-2}}{F_n}\varepsilon. \quad (2.24)$$

Этот интервал меньше, чем интервал $(1/F_n) + \varepsilon$, который был получен Кифером и Джонсоном.

Эта небольшая, но иногда существенная поправка получена Оливером ¹⁾.

¹⁾ L. T. Oliver and D. J. Wilde, Symmetric sequential minimax search for a maximum, The Fibonacci Quarterly 2, 3 (Oct. 1964).

Т а б л и ц а 2.1

**Сокращение исходного интервала при различных
методах последовательного поиска**

Число опытов	Метод дихотомии L_0/L_n	Метод Фибоначчи L_0/L_n^*	Золотое сечение $(1,62)^{n-1}$	Поиск по дискретам k_n
0	1	1	—	0
1	1	1	1	1
2	2	2	1,62	2
3	2	3	2,62	4
4	4	5	4,24	7
5	4	8	6,85	12
6	8	13	11,09	20
7	8	21	17,94	33
8	16	34	29,0	54
9	16	55	47,0	88
10	32	89	76,0	143
11	32	144	123	232
12	64	233	199	376
13	64	377	322	609
14	128	610	521	986
15	128	987	843	1 596
16	256	1 597	1 364	2 583
17	256	2 584	2 207	4 180
18	512	4 181	3 570	6 764
19	512	6 765	5 778	10 945
20	1 024	10 946	9 349	17 710
21	1 024	17 711	15 127	28 656
22	2 048	28 657	24 476	46 367
23	2 048	46 368	39 602	75 024
24	4 096	75 025	64 078	121 392
25	4 096	121 393	103 680	
26	8 192			
27	8 192			
28	16 384			
29	16 384			
30	32 768			

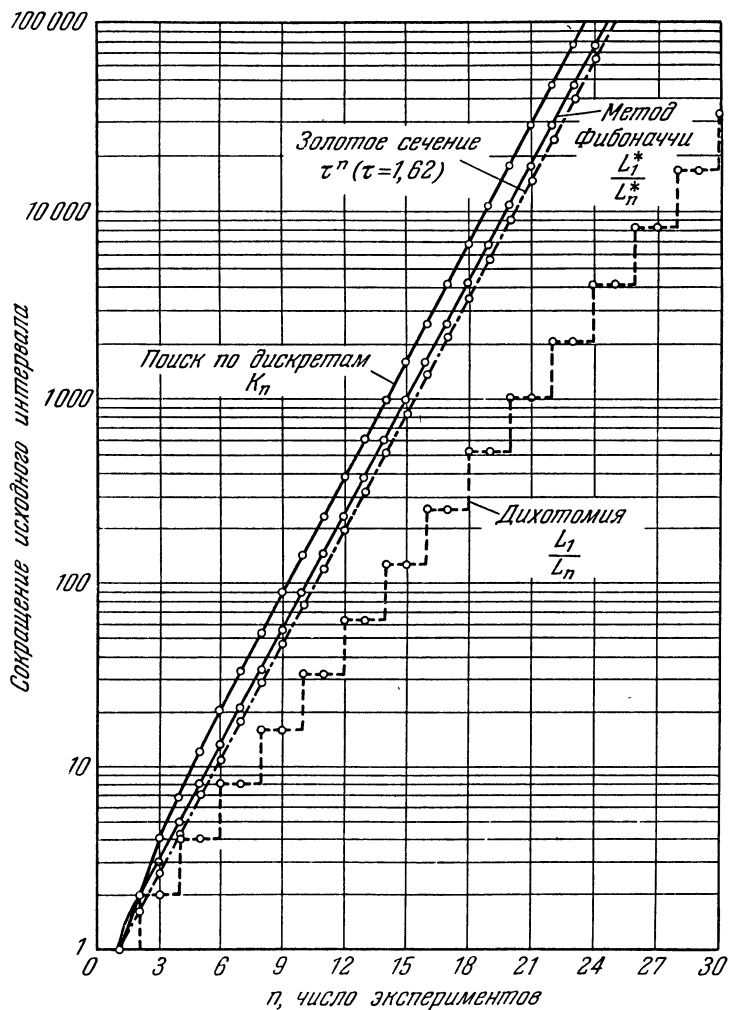


Рис. 2.12. Сравнение различных методов последовательного поиска.

С помощью метода Фибоначчи для уменьшения интервала неопределенности менее чем до одного процента исходной длины требуется всего 11 последовательных экспериментов (табл. 2.1). Выше указывалось, что для получения того же самого результата при поиске методом дихотомии потребовалось бы 14 экспериментов, а при пассивном поиске — 198 экспериментов.

2.10. Проведение первого эксперимента

Если поиск методом Фибоначчи уже начат, действия на любом шаге определить нетрудно. Действительно, в каждый остающийся интервал попадает предыдущий эксперимент, и для продолжения поиска достаточно лишь производить следующее испытание симметрично этому, уже имеющемуся в интервале эксперименту. Поэтому, точно указав место первого эксперимента последовательности, мы полностью определим поиск методом Фибоначчи.

Первый эксперимент должен находиться на расстоянии L_2^* от одного из концов начального единичного интервала неопределенности, в силу симметрии безразлично от какого конца. Для нахождения L_2^* напомним уравнение (2.23) для случая $n - k = 2$:

$$L_2^* = F_{n-1}L_n^* - F_{n-3}\varepsilon.$$

Теперь исключим L_n^* , используя уравнение (2.24):

$$L_2^* = \frac{F_{n-1}}{F_n} + \frac{F_{n-1}F_{n-2} - F_nF_{n-3}}{F_n} \varepsilon. \quad (2.25)$$

Коэффициент при ε можно упростить, если в числитель подставить тождества $F_{n-1} \equiv F_{n-2} + F_{n-3}$ и $F_n \equiv F_{n-1} + F_{n-2}$:

$$\begin{aligned} F_{n-1}F_{n-2} - F_nF_{n-3} &= (F_{n-2} + F_{n-3})F_{n-2} - (F_{n-1} + F_{n-2})F_{n-3} = \\ &= F_{n-2}^2 - F_{n-1}F_{n-3}. \end{aligned}$$

Два столетия назад в статье с примечательным названием «Толкование неясных мест в комментариях Альберта Жирара к работам Симона Стевина» ¹⁾ Р. Симсон доказал, что правая часть последнего соотношения равняется $(-1)^n$.

¹⁾ Phil. Trans. Roy. Soc. London 48. 1 (1753), pp. 368—376.

В этом можно убедиться, обратившись к табл. 2.1. Этот результат будет выведен в разд. 2.13. Таким образом, уравнение (2.25) приводит после упрощения к следующему соотношению:

$$L_2^* = \frac{F_{n-2}}{F_n} + \frac{(-1)^n \varepsilon}{F_n}. \quad (2.26)$$

Этого достаточно, чтобы начать поиск по методу Фибоначчи.

2.11. Кролики

Несмотря на то, что описанный выше оптимальный метод последовательного поиска был открыт совсем недавно, замечательная числовая последовательность, связанная с ним, была известна еще в средние века. У Коксетера читаем ¹⁾: «В 1202 году уроженец города Пиза Леонардо, прозванный Фибоначчи (однако не «сын простака», как некоторым нравилось толковать это прозвище, а вернее «сын добряка» или «сын удачника») ²⁾, натолкнулся при решении задачи о размножении кроликов на прославившую его последовательность целых чисел». Хотя проф. Коксетер своим интригующим замечанием и намекает на то, что иные грамотеи в старой Италии могли позлословить об общественном положении Фибоначчи, сегодня математики почитают Фибоначчи как подлинного пионера в исследовании бесконечных рядов.

Предметом размышлений Фибоначчи были кролики, которые за один месяц достигали зрелости и после второго месяца начинали приносить потомство. Ради простоты, Фибоначчи предполагал, что из каждого помета вместе с родителями для дальнейшего размножения оставляется одна пара. Он также требовал замены кроликов, переставших приносить потомство из-за смерти, бесплодия или несовместимости. Фибоначчи вряд ли был первым, кого посетило математическое вдохновение в связи с плодovито-

¹⁾ The golden section, phyllotaxis and wythoff's game, Scripta Mathematica (1954), pp. 135—43. Этой ссылкой автор обязан проф. Гринвуду (Техасский университет).

²⁾ Фибоначчо по-итальянски означает «сын Боначчо» (Вопассио (итал.) — добродушный, простодушный). (Прим. перев.)

стью домашних животных; басня о молочнице, которая подсчитывает невылупившихся цыплят, существовала еще до христианской эры ¹⁾. Однако в то время, как его предшественники просто удваивали число кроликов каждые два месяца, Фибоначчи проницательно учел способность кроликов, однажды достигнув зрелости, приносить затем приплод ежемесячно.

Пусть F_n , согласно модели Фибоначчи, представляет число пар кроликов к концу n месяцев. Нетрудно заметить, что, начав с одной пары новорожденных кроликов, мы в первые два месяца никакого прироста не получаем:

$$F_0 = F_1 = 1. \quad (2.27)$$

В n -м месяце к уже имеющимся F_{n-1} парам кроликов прибавится F_{n-2} пары крольчат, которые родятся у всех кроличьих пар, имевшихся два месяца назад. Так как общее число кроликов обозначается через F_n , мы получили рекуррентное соотношение $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$, которое вместе с начальными условиями задает последовательность Фибоначчи 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, ... (табл. 2.1).

Пусть для сравнения R_n есть число пар кроликов, имеющих после n месяцев, предсказанное с помощью упрощенной модели, учитывающей для каждой пары один помет в два месяца. В этом случае рекуррентное соотношение имеет вид $R_n = 2R_{n-2}$, причем, как и в модели Фибоначчи, $R_0 = R_1 = 1$. Это дает $R_n = 2^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor}$, где $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ есть просто наибольшее целое число, не превосходящее $n/2$. Таким образом, удваивающаяся последовательность имеет вид 1, 1, 2, 2, 4, 4, 8, 8, 16, ... Как и следовало ожидать, оценки Фибоначчи для числа кроликов после второго месяца превосходят оценки, получаемые с помощью этой простейшей модели: $F_n > R_n$ при $n > 2$.

Чтобы теперь разобраться, почему метод Фибоначчи при поиске оказывается лучше, чем метод дихотомии, мы проведем аналогию между эффективностью последовательной

¹⁾ Joseph Jacobs, The fables of Aesop (New York: The Macmillan Company, 1894), pp. 183, 219. [Басни Эзопа неоднократно переводились на русский язык, начиная еще с XVIII века. (Прим. ред.)]

стратегии поиска и ростом кроличьих колоний. Легко увидеть, что число экспериментов в первой задаче соответствует числу поколений кроликов во второй (n используется для обозначения того и другого). При поиске первоначальный интервал неопределенности сокращается, составляя лишь часть L_n исходной длины, и мы используем L_n , чтобы изменить эффективность стратегии поиска. Тогда обратная величина $1/L_n$ представляет длину такого начального интервала, который после n экспериментов можно уменьшить до единичной длины. Этот окончательный интервал длиной единица соответствует исходной паре кроликов, а $1/L_n$ — общему числу пар кроликов n месяцев спустя. Если пренебречь сдвигом ε , мы получим для поиска способом дихотомии

$$\frac{1}{L_n} = 2^{\left[\frac{n}{2}\right]} = R_n, \quad (2.28)$$

и, таким образом, поиск методом дихотомии подобен по форме простой модели с удвоением. Аналогично для поиска методом Фибоначчи имеем

$$\frac{1}{L_n^*} = F_n. \quad (2.29)$$

Оптимальная стратегия поиска соответствует предложенной Фибоначчи более совершенной модели размножения кроликов.

Теперь мы видим, за счет чего метод Фибоначчи оказывается лучше, чем метод дихотомии. В схеме Фибоначчи каждый новый эксперимент позволяет сократить интервал неопределенности, подобно тому, как каждый месяц среди кроликов Фибоначчи появляются новорожденные.

Метод же дихотомии требует для сокращения интервала два новых эксперимента, так же как упрощенная модель допускает рождение кроликов лишь в четные месяцы.

Таким образом, мы убедились, хотя на первый взгляд это и могло показаться сомнительным, что действительно существует связь между современной проблемой поиска и размышлениями юного Леонардо из Пизы. Благодаря Фибоначчи его родной город будут помнить не только в связи с предательской почвой под знаменитой башней. В самых различных разделах математики обнаруживаются

числа Фибоначчи, даже в таком ботаническом явлении, как расположение чешуек ананаса! Любители игр, головоломок, парадоксов испытают при чтении статьи профессора Коксетера подлинное наслаждение.

2.12. Золотое сечение

Начиная поиск оптимума, экспериментатор часто не знает точно, сколько опытов ему понадобится. Его не волнует сама по себе величина интервала неопределенности, и свои эксперименты он собирается проводить до тех пор, пока какой-то интересующий его критерий не будет удовлетворяться. Однако ему бы хотелось пользоваться методом поиска, который быстро сходится к оптимуму, ибо можно ожидать, что такой метод скорее приведет к хорошим значениям критерия.

К сожалению, воспользоваться методом Фибоначчи, не зная заранее числа предполагаемых экспериментов, нельзя. Ведь прежде чем провести первый эксперимент, необходимо вычислить L_2^* , которое полностью определяется числом испытаний n (см. уравнение (2.26)). Возникает искушение возвратиться к свободному от этого недостатка методу дихотомии. Однако существует еще один метод, который совершенно не зависит от числа готовящихся испытаний и почти столь же эффективен, как метод Фибоначчи.

Пусть, как и прежде, j представляет число уже проведенных экспериментов. С помощью тех же, что и ранее, рассуждений можно вывести, что последовательные эксперименты следует размещать так, чтобы (см. уравнение (2.20))

$$L_{j-1} = L_j + L_{j+1}, \quad (2.30)$$

т. е. так же, как и в методе Фибоначчи. Однако на этот раз мы не сможем обратиться к начальному условию

$$L_{n-1} = 2L_n - \varepsilon, \quad (2.31)$$

поскольку число n нам неизвестно. Вместо этого давайте выдерживать постоянным отношение длин последовательных интервалов. Обозначая это отношение через τ , имеем

$$\frac{L_{j-1}}{L_j} = \frac{L_j}{L_{j+1}} \equiv \tau. \quad (2.32)$$

Разделив уравнение (2.20) на L_{j+1} и учитывая

$$\frac{L_{j-1}}{L_{j+1}} = \tau^2, \quad (2.33)$$

получаем $\tau^2 = \tau + 1$ (рис. 2.13). Это квадратное уравнение имеет только один положительный корень

$$\tau = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = 1,618033989 \dots \quad (2.34)$$

Заметим, что отрицательный корень равен $-\frac{1}{\tau}$.

По результатам двух экспериментов устанавливается, какой сегмент оставить для дальнейших исследований. Как и обычно, в этом оставшемся сегменте будет находиться один из предыдущих экспериментов, и чтобы продолжить поиск, нужно в этом интервале произвести симметрично ему следующий эксперимент.

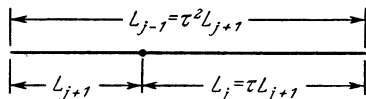


Рис. 2.13. Золотое сечение.

Этот процесс можно продолжать сколь угодно долго. После n испытаний мы приходим к интервалу неопределенности

$$L_n = \frac{1}{\tau^{n-1}}. \quad (2.35)$$

Будем называть эту процедуру *методом золотого сечения*.

Такое название требуется пояснить. Как известно, к золотому сечению приводит деление сегмента на две неравные части так, чтобы отношение всего отрезка к большей части равнялось отношению большей части к меньшей. Хотя описанный метод поиска был предложен Кифером и Джонсоном, первым человеком, который делил линейный сегмент подобным образом, был сам Евклид, который делал это, как нетрудно догадаться, с помощью циркуля и линейки. Коксетер описывает, какое почти мистическое значение приписывали этому соотношению благодаря его многочисленным удивительным свойствам ученые Возрождения; Кеплер, например, ставил его рядом с теоремой

Пифагора. Сейчас освященное веками прославленное «золотое сечение» нашло новое применение, и нам кажется, что будет правильно использовать в названии «поиск золотым сечением» вместе с новой и старую терминологию.

Чтобы сравнить метод золотого сечения с методом Фибоначчи, мы воспользуемся следующим соотношением ¹⁾ между числами Фибоначчи и величиной τ :

$$F_n = \frac{\tau^{n+1} - (-\tau)^{-(n+1)}}{\sqrt{5}}. \quad (2.36)$$

С помощью этого уравнения, которое будет выведено в следующем разделе, можно получить результат Симсона

$$F_{n-2}^2 - F_{n-1}F_{n-3} = (-1)^n, \quad (2.37)$$

который мы использовали для вывода уравнения (2.26) при определении начала поиска Фибоначчи. При больших n второй член становится пренебрежимо малым, и мы приближенно получаем

$$F_n \approx \tau^{n+1} / \sqrt{5}. \quad (2.38)$$

Если L_n — интервал, оставшийся после n испытаний при методе золотого сечения, а L_n^* — аналогичный интервал после n экспериментов при поиске Фибоначчи, то для больших n имеем

$$\frac{L_n}{L_n^*} = \frac{\tau^{n+1}}{\sqrt{5} \tau^{n-1}} = \frac{\tau^2}{\sqrt{5}} = 1,1708. \quad (2.39)$$

Таким образом, окончательный интервал при методе золотого сечения всего лишь на 17% больше, чем при методе Фибоначчи (табл. 2.1 и рис. 2.12).

Из формулы Люкаса также следует, что при большом n

$$\frac{F_{n-1}}{F_n} \approx \frac{1}{\tau}. \quad (2.40)$$

Из (2.26) и (2.40) находим, что для больших n величина $L_2^* \approx 1/\tau$. Для метода золотого сечения, как следует из уравнения (2.35), также $L_2 = 1/\tau$, и поэтому когда n велико,

¹⁾ E. Lucas, Note sur l'application des séries récurrents à la recherche de la loi de distribution des nombres premiers, Compt. rend. Acad. Sci. Paris 82 (1876), pp. 165—67.

метод Фибоначчи и метод золотого сечения начинаются практически в одной и той же точке. Из табл. 2.1 видно, что отношение двух последовательных чисел Фибоначчи весьма быстро приближается к 0,618. Уже при $n = 4$ это отношение составляет 0,600, т. е. всего на три процента меньше. Поэтому мы можем начинать поиск, используя метод золотого сечения, и переходить к методу Фибоначчи, когда оптимум уже достаточно близок и можно зафиксировать число остающихся экспериментов.

Допустим, что мы начинаем поиск, не задаваясь определенным числом экспериментов и проводя первые испытания по методу золотого сечения. На какой-то стадии поиска мы, наконец, принимаем решение, что достаточно будет провести еще четыре эксперимента. Теперь очередное испытание мы проведем уже по методу Фибоначчи для случая пяти испытаний (считая, что один эксперимент в данном интервале уже имеется). Таким приемом эффективность метода Фибоначчи можно сохранить даже в тех случаях, когда в начале поиска мы не имеем ни малейшего представления о том, сколько экспериментов нам потребуется.

2.13. Уравнение Люкаса ¹⁾

Некоторые из приведенных выше результатов были получены из уравнения Люкаса, связывающего числа Фибоначчи с отношением τ для золотого сечения:

$$F_n = \frac{\tau^{n+1} - (-\tau)^{-(n+1)}}{\sqrt{5}}. \quad (2.41)$$

Выведем сейчас это уравнение, пользуясь методами, пригодными для любого рекуррентного соотношения. Примером рекуррентного соотношения может, в частности, служить уравнение, определяющее ряд Фибоначчи

$$F_{n+2} = F_{n+1} + F_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.42)$$

Рекуррентные соотношения возникают при исследовании самых разнообразных задач — в теории управления

¹⁾ Этот параграф включен в книгу по совету проф. О. Кемп-торна (Университет штата Айова).

запасами и в теории импульсных автоматических систем регулирования, в генетике, в процессах многошагового отбора и в последовательном анализе.

Число Фибоначчи с номером n можно рассматривать как функцию F_n неотрицательного целочисленного аргумента $n = 0, 1, 2, \dots$. Построим степенной ряд, члены которого суть убывающие отрицательные степени нового параметра z , а коэффициентом i -го члена служит i -е число Фибоначчи. Таким образом, новая функция имеет вид

$$F_n(z) = F_0 + F_1 z^{-1} + F_2 z^{-2} + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} F_i z^{-i}. \quad (2.43)$$

Эта функция $F_n(z)$, зависящая только от параметра z , называется « z -преобразованием» исходной функции F_n , т. е. n -го числа Фибоначчи.

Напишем z -преобразование для $(n+1)$ -го числа Фибоначчи F_{n+1} . По определению, коэффициентом при члене ряда с номером i будет число F_{i+1} и

$$\begin{aligned} F_{n+1}(z) &= F_1 + F_2 z^{-1} + F_3 z^{-2} + F_4 z^{-3} + \dots = \\ &= z[F_0 + F_1 z^{-1} + F_2 z^{-2} + \dots] - zF_0 = z[F_n(z) - F_0]. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Добавив единицу к индексам в этом уравнении, мы получим соотношение между $F_{n+2}(z)$ и $F_{n+1}(z)$:

$$F_{n+2}(z) = z[F_{n+1}(z) - F_1]. \quad (2.45)$$

Подставляя сюда $F_{n+1}(z)$ из (2.44) и используя соотношение $F_0 = F_1 = 1$, получаем

$$F_{n+2}(z) = z^2 F_n(z) - z^2 - z. \quad (2.46)$$

Применяя z -преобразование к обеим частям уравнения (2.42), находим

$$F_{n+2}(z) = F_{n+1}(z) + F_n(z). \quad (2.47)$$

Это уравнение совместно с (2.44) и (2.46) позволяет поновому выразить $F_n(z)$:

$$F_n(z) = \frac{z^2}{z^2 - z - 1}. \quad (2.48)$$

Производя формальное деление, можно проверить, что, как и требуется,

$$\frac{z^2}{z^2 - z - 1} = 1 + z^{-1} + 2z^{-2} + 3z^{-3} + 5z^{-4} + 8z^{-5} + \dots \quad (2.49)$$

Знаменатель $F_n(z)$ совпадает с уравнением, определяющим золотое сечение, и, следовательно, имеет корни τ и $-\tau^{-1}$. Знаменатель можно разложить на простые дроби:

$$F_n(z) = \frac{z^2}{(z - \tau)(z + \tau^{-1})} = \frac{z^2}{\sqrt{5}} \left[\frac{1}{z - \tau} - \frac{1}{z + \tau^{-1}} \right]. \quad (2.50)$$

Множитель $1/\sqrt{5}$ появляется, так как $\tau + \tau^{-1} = \sqrt{5}$. Оба члена в квадратных скобках можно разложить в геометрический ряд по степеням z^{-1} :

$$\frac{1}{z - \tau} = \frac{z^{-1}}{1 - \tau z^{-1}} = z^{-1} [1 + \tau z^{-1} + \tau^2 z^{-2} + \tau^3 z^{-3} + \dots],$$

$$\frac{1}{z + \tau^{-1}} = \frac{z^{-1}}{1 + \tau^{-1} z^{-1}} = z^{-1} [1 - \tau^{-1} z^{-1} + \tau^{-2} z^{-2} - \tau^{-3} z^{-3} + \dots].$$

Отсюда следует, что

$$F_n(z) = \frac{1}{\sqrt{5}} \sum_{i=0}^{\infty} [\tau^{i+1} - (-\tau)^{-(i+1)}] z^{-i} = \sum_{i=0}^{\infty} F_i z^{-i}. \quad (2.51)$$

Почленное сравнение коэффициентов этих двух разложений для $F_n(z)$ приводит нас к уравнению Люкаса.

2.14. Максимальное число экспериментов

В различных задачах, даже если известно, что функция унимодальная, может оказаться невозможным обнаружить разницу в результатах слишком близких экспериментов. В этом случае экспериментатор уже не в состоянии уменьшить интервал неопределенности, и одно из наблюдений бесполезно. Поэтому при планировании последовательного поиска следует брать в расчет минимальный сдвиг ϵ , при котором результаты двух экспериментов еще можно разделить. Наименьший интервал неопределенности, которого таким образом удастся достигнуть, составляет практически 2ϵ :

$$L_n = x_{j+1} - x_{j-1} = (x_{j+1} - x_j) + (x_j - x_{j-1}) = 2\epsilon. \quad (2.52)$$

Хотя обычно разрешение ε пренебрежимо мало по сравнению с начальным интервалом, в окончательном интервале неопределенности, если метод поиска достаточно эффективен, оно часто составляет значительную часть.

Условие разрешимости определяет предельное число испытаний, превышение которого уже бесполезно. Пусть для метода Фибоначчи максимальное число равняется m .

Уравнения (2.52) и (2.24) дают совместно

$$L_m^* = \frac{1}{F_m} + \frac{F_{m-2}}{F_m} \varepsilon \geq 2\varepsilon, \quad (2.53)$$

откуда можно получить

$$F_{m+1} \leq \frac{1}{\varepsilon} < F_{m+2}. \quad (2.54)$$

Например, если ε составляет один процент, бессмысленно проведение более девяти экспериментов, потому что

$$89 = F_{10} < 100 < F_{11} = 144.$$

При больших n уравнение Люкаса (2.38) дает приближенно

$$F_{m+1} \approx \frac{(1,618)^{m+2}}{\sqrt{5}}. \quad (2.55)$$

Подставляя это соотношение в (2.54), получаем

$$m \leq 4,785 \log \frac{1}{\varepsilon} - 0,328. \quad (2.56)$$

2.15. Поиск по дискретным точкам ¹⁾

Довольно часто в задачах поиска независимая переменная в данном интервале неопределенности не может изменяться непрерывно, а ограничена конечным числом точек. Такая ситуация, когда x может быть лишь целыми числами (1, 2, 3 и т. д.), возникает, например, при определении оптимального штата продавцов или наиболее выгодного числа такси в большом городе. Выбор допустимых значений x не обязательно ограничен целыми числами. Например, при наборе продавцов часть работников можно нанимать

¹⁾ Термин автора «lattice search» (решетчатый). (Прим. ред.)

не на полную пятидневную неделю, а поденно. Хотя в данном случае и можно говорить о дробном среднем числе работающих продавцов (например 5,4), число различных комбинаций будет тем не менее конечным.

Для таких *дискретных задач поиска* ¹⁾ существенными являются лишь конечное число значений аргумента и их размещение в таком порядке, чтобы критерий качества был унимодальной функцией. Допустимые точки не обязательно расположены равномерно, и, если есть рациональный способ упорядочить их, не требуется даже, чтобы они были занумерованы.

Представим, что нужно построить новый завод, и техническая группа, созданная для предварительного экономического исследования, занята выбором заводского оборудования. Семь различных типов оборудования можно расположить в порядке возрастающей сложности. Если можно предположить, исходя либо из свойств математической модели, описывающей всю ситуацию, либо из опыта эксплуатации подобных систем, что чистый доход представляет собою унимодальную функцию сложности оборудования, то это исследование можно рассматривать как дискретную задачу поиска.

Хотя описанные до сих пор методы поиска непригодны для дискретных задач, нетрудно их модифицировать и приспособить к этому случаю. Мы найдем, что последовательные методы в некотором смысле оказываются в дискретных задачах даже более эффективными, чем в уже рассмотренных нами ранее непрерывных задачах. Напротив, пассивные методы поиска в дискретном случае совершенно непригодны, так как уверенность в том, что мы обнаружили наилучший вариант, при пассивном эксперименте может быть лишь в случае проведения испытаний в каждой точке. Мы вновь убеждаемся в преимуществе последовательной стратегии перед пассивной.

Прежде чем говорить о том, как следует производить поиск по дискретным точкам, выясним сначала, почему иногда может оказаться выгодным искусственно превратить

¹⁾ J. Kiefer, Optimum sequential search and approximation methods and minimum regularity assumptions, J. Soc. Ind. Appl. Math. 5, 3 (Sept. 1957), p. 125.

обычный непрерывный поиск в поиск по дискретам. Если на основании результатов поиска надо принять какое-нибудь решение, то наличие интервала неопределенности вызывает у исследователя разочарование. Было бы гораздо приятнее узнать определенную точку — ведь требуется принять точное решение. Конечно, выбор в последнем интервале можно произвести и случайно, однако большинство людей предпочтет этому проверенную точку, в которой измерение уже было выполнено. После того, как мы разберемся в схеме оптимального поиска по дискретам, станет понятным, что подобных затруднений можно избежать, превратив исходную задачу в дискретную и получая окончательный результат в виде конкретной точки, что уже не оставляет места никаким сомнениям.

Предложенную Кифером последовательную минимаксную схему поиска в дискретных задачах можно вывести почти так же, как и для непрерывной независимой переменной. Однако здесь мы предпочли воспользоваться остроумным приемом, который был предложен одним из наших студентов, Крус-Диасом.

Всем дискретным точкам, общее число которых обозначено k , мы сопоставим целые числа от 1 до k . Если, например, среднее число продавцов у прилавка может равняться 3,0; 3,2; 3,4; 4,0; 4,2; 4,4 или 5,0, то мы занумеруем эти варианты, как показано в табл. 2.2. Десятичные дроби отражают возможность поденного найма продавцов. Обращаем внимание читателя на то, что исходные дискреты распределены неравномерно.

Т а б л и ц а 2.2

Нумерация вариантов							
Число продавцов	3,0	3,2	3,4	4,0	4,2	4,4	5,0
Номер варианта	1	2	3	4	5	6	7

Теперь в интервале от 0 до $k + 1$ расположим равномерно k точек, как показано на рис. 2.14, б. Допустим, что $k + 1$, т. е. длина этого сопряженного интервала оказалась в точности равной одному из чисел Фибоначчи, например F_n . Хотя такой случай является конечно чем-то

исключительным, мы все-таки рассмотрим сначала эту частную ситуацию, а позже найдем, как поступать и в общем случае. На рис. 2.14, где $k = 7$, длина сопряженного интервала неопределенности равняется 8, т. е. является числом Фибоначчи F_5 .

Давайте теперь сокращать длину сопряженного интервала, пользуясь наиболее эффективным методом, т. е. методом Фибоначчи. Уравнение (2.26), которое еще раз приведено ниже, позволяет найти расстояние L_2^* от одного из концов исходного единичного интервала до места первого эксперимента:

$$L_2^* = \frac{F_{n-1}}{F_n} + \frac{(-1)^n \varepsilon}{F_n}. \quad (2.57)$$

Так как мы рассматриваем не единичный исходный интервал, а интервал длины F_n , первые два эксперимента отстоят от концов интервала на $F_n L_2^*$ единиц. Если принять ε равным нулю, мы получим

$$F_n L_2^* = F_{n-1}. \quad (2.58)$$

Таким образом, первые два эксперимента, проводимые по методу Фибоначчи, совпадут с исходными дискретными точками. На рис. 2.14, например, первые эксперименты отстояли бы на F_4 , т. е. на 5 единиц от концов интервала — как раз в точках 5 и 3.

Поскольку длина интервала тоже является числом Фибоначчи, ясно, что третий эксперимент снова попадает в одну из дискретных точек. Этот процесс может продолжаться до тех пор, пока не будет произведено n экспериментов и длина интервала неопределенности не достигнет $F_n L_n^*$, что согласно (2.24) при $\varepsilon = 0$ равно единице:

$$F_n L_n^* = 1. \quad (2.59)$$

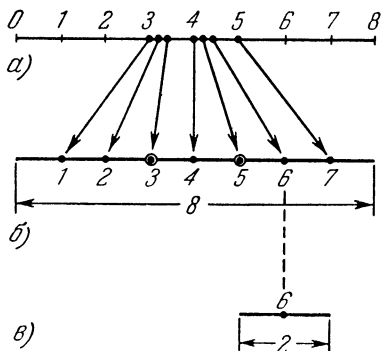


Рис. 2.14 Дискретный поиск для семи точек: а) исходное распределение; б) равномерное распределение (выделенные точки представляют первую пару экспериментов по методу Фибоначчи); в) интервал, остающийся после четырех $(n - 1)$ экспериментов по методу Фибоначчи.

Последний эксперимент и определяет, очевидно, оптимальную точку.

В приведенных рассуждениях, однако, имеется некоторая натяжка, связанная с предположением $\varepsilon = 0$. Внимательный читатель заметит, что именно благодаря этому предположению последний эксперимент должен обязательно совпасть с одним из уже проведенных опытов и поэтому его не надо производить совсем. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим интервал неопределенности, остающийся после проведения $n - 1$ экспериментов. Его длина $F_n L_{n-1}^*$ согласно (2.17) будет составлять две единицы, причем один из предыдущих экспериментов, как показано на рис. 2.14, в, будет находиться точно в его середине. Пусть j — номер этой дискретной точки. Интервал неопределенности заключен между соседними дискретами $j - 1$ и $j + 1$, которые однако сами к интервалу не относятся, так как они ранее уже отвергнуты и оптимум в них находиться не может.

Таким образом, $(j - 1) < x^* < (j + 1)$, но j — единственная дискретная точка, оставшаяся в этом интервале. Отсюда следует, что из всех исходных точек j должна быть наилучшей.

Обозначим через k_{n-1} максимальное число точек, которое после $n - 1$ экспериментов можно свести к единственному оптимуму. Из проведенных выше рассуждений следует, что в интервале длиной F_n , содержащем F_{n-1} дискретных точек, можно с помощью метода Фибоначчи найти наилучшую точку после $n - 1$ экспериментов. Следовательно,

$$k_{n-1} = F_n - 1 \quad (2.60)$$

или, что то же самое,

$$k_n = F_{n+1} - 1. \quad (2.61)$$

Максимальные числа точек, которые можно обследовать за n последовательных экспериментов, приводятся в пятом столбце табл. 2.1 и на рис. 2.12.

Теперь мы уже можем решить, как следует поступить, если число k дискретных точек таково, что $k + 1$ не равняется никакому из чисел Фибоначчи. В этом случае надо лишь к первоначальному множеству добавить нужное число

фиктивных точек, чтобы получить в результате число Фибоначчи, а затем действовать как обычно. Заметим, хотя это и не существенно, что удобно помещать фиктивные точки не между точками исходного множества, а в концах интервала.

Итак, чтобы произвести поиск в множестве дискретных точек, надо просто разместить их в непрерывном интервале таким образом, чтобы опыты по методу Фибоначчи совпадали с этими дискретными точками.

Как уже говорилось раньше, если по результатам поиска предстоит принять определенное решение, то может оказаться целесообразным преобразовать непрерывный поиск в поиск по дискретам. Для этого надо задаться числом экспериментов n и затем начать поиск Фибоначчи как для случая $n + 1$ экспериментов без учета сдвига ($\varepsilon = 0$). Эта процедура после завершения n испытаний прекращается, и за оптимум принимается точка, в которой был получен наилучший результат. Решение в этом случае будет опираться на вполне определенный эксперимент.

2.16. Рандомизация

В предыдущем параграфе мы показали, как поиск по методу Фибоначчи применяется в случае критериев качества, определенных на дискретном множестве точек. Если количество точек оказывалось ровно на единицу меньше какого-нибудь числа Фибоначчи, схема поиска была совершенно очевидна. В противном случае предлагалось дополнять первоначальное множество фиктивными точками, пока сумма не станет на единицу меньше числа Фибоначчи, после чего уже можно было приступить к поиску по методу Фибоначчи. Такой план надежен, прост и весьма эффективен. Однако существует другой способ, столь же надежный, как метод фиктивных точек, но еще более эффективный. Этот новый метод, который называется *рандомизацией*, для большинства впервые встретившихся с ним специалистов, — и практиков, и теоретиков, — может показаться странным. Тем, кого он будет слишком смущать, всегда можно посоветовать возвратиться к методу фиктивных точек. Цель настоящего параграфа лишь отчасти состоит в том, чтобы показать, как улучшить

и так уже достаточно эффективный метод фиктивных точек. Скорее, цель его — дать представление о непривычной, до некоторой степени, идее рандомизации, которая может быть с успехом применена при выборе решения во многих практических задачах.

Рандомизация заключается в принятии определенного решения на основании случайности — бросания монеты или игральной кости или извлечения из шляпы бумажки с цифрами. Несведущим в теории вероятностей и статистике это может показаться чуть ли не мистификацией, во всяком случае чем-то кустарным. Тем не менее рандомизация является вполне проверенным методом и безусловно достойна обсуждения в книге по теории оптимизации, особенно в сочетании с понятием смешанной стратегии из теории игр. Для того чтобы понять этот простой метод, от читателя не потребуется никаких предварительных знаний теории вероятностей.

Однако, прежде чем приступить к самой рандомизации, посмотрим сначала, как можно улучшить метод фиктивных точек исключительно за счет использования любых случайностей, позволяющих сэкономить в числе опытов. Пусть, в частности, ищется максимум функции, определенной в восьми дискретных точках ($k = 8$). Так как следующее большее число Фибоначчи равно 13, мы должны для получения в сумме 12 добавить к исходному множеству еще четыре фиктивные точки. Так как 13 является пятым числом Фибоначчи F_5 , мы ожидаем, что нашим методом максимум будет найден за пять экспериментов. Сейчас мы увидим, что при некоторых обстоятельствах мы сможем сделать это за четыре опыта, а если нам очень повезет, то и за три.

Давайте занумеруем исходные точки от 1 до 8, а фиктивные точки разместим в оставшейся части интервала с номерами от 9 до 12 (рис. 2.15). Согласно методу Фибоначчи первая пара экспериментов производится в точках 5 и 8. Если окажется, что в точке 5 критерий принимает большее значение, фиктивные точки вместе с точкой 8 надо отбросить (рис. 2.15, б), сохранив для дальнейшего поиска Фибоначчи лишь семь основных точек. Эти точки расположены таким образом, что для завершения поиска требуется еще три эксперимента, всего будет затрачено пять экспериментов. Если, однако, критерий окажется больше

в точке 8, останется всего три основные точки (рис. 2.15, в), и для окончания поиска потребуется, очевидно, не более двух опытов. В этом случае мы затрачиваем для отыскания минимума самое большее четыре эксперимента. Не упуская



Рис. 2.15. Дискретная задача поиска для восьми точек.

такие удачные случаи, экспериментатор сумеет сократить общее число опытов против потолка, гарантированного методом Фибоначчи.

Возможность получения выигрыша по сравнению с методом фиктивных точек наводит на мысль о существовании приемов, которые, не требуя от нас неоправданного риска, автоматически смогут использовать удачный ход событий. Кифер ¹⁾ показал, что именно это и происходит при рандомизации и что в тех случаях, когда число дискрет плюс единица не равняется точно числу Фибоначчи, рандомизация является самым лучшим методом поиска. Теперь мы рассмотрим реализацию этого метода и найдем причину его эффективности.

Ограничимся пока унимодальной функцией, которая определена лишь на трех дискретах 1, 2 и 3, занумерованных слева направо. Где же нам произвести первые два эксперимента? Всего имеется три возможности: (1, 2), (1, 3) и (2, 3), причем (1, 2) означает, что принято решение проводить первые испытания в точках 1 и 2. Если окажется, что оптимум находится в точке 1, тогда при выборе стратегии (1, 2) третий эксперимент не потребуется. Точно так же третий эксперимент не нужен, если оптимум находится в точке 3 и решено провести первые эксперименты в (2, 3).

¹⁾ См. ссылку на стр. 65.

Для всех остальных случаев потребуется провести все три испытания. В табл. 2.3 приводятся все девять возможных случаев.

Т а б л и ц а 2.3
**Число опытов, необходимых
для отыскания оптимума**

Место проведения первых двух опытов	Положение оптимума		
	1	2	3
(1,2)	2	3	3
(1,3)	3	3	3
(2,3)	3	3	2

Посмотрим, поможет ли нам найти решение принцип минимакса. Согласно минимаксному подходу, представим себе, будто бы положение оптимума устанавливается нашим искусным и недоброжелательным противником, стремящимся максимизировать число экспериментов, которое требуется нам для отыскания оптимума. Он не знает нашего выбора, а мы ничего не знаем об его планах. Для нас было бы довольно глупо остановиться на (1, 3), так как это независимо от положения оптимума всегда приводит к трем экспериментам. Однако принцип минимакса, хотя и позволяет нам отбросить один вариант, все же не дает возможности сделать выбор между двумя остающимися. К сожалению, в данном случае наш воображаемый противник может добиться успеха, поместив оптимум в точку 2, что заставило бы нас все время использовать три эксперимента.

Конечно, в действительности никакого разумного противника не существует и наше желание отыскать оптимум, затратив на это как можно меньше экспериментов, абсолютно никак не влияет на положение этого оптимума. Следовательно, рассчитывать лишь на самое неудачное его положение, т. е. на точку 2, неразумно. Попробуем вместо этого выбрать наилучший образ действия, учитывая и два других положения оптимума, когда у нас есть надежда обойтись при поиске менее чем тремя испытаниями. Предположим теперь, что мы пренебрегаем возможностью нахождения оптимума в точке 2. Это, конечно, было бы нерас-

четливым, окажись во втором столбце хотя бы одно число, большее чем 3, так как при этом мы бы закрыли глаза на самый худший из возможных исходов. Однако в данном случае наибольшее число во втором столбце не больше, чем в других столбцах, и, отбрасывая весь второй столбец, мы продолжаем рассматривать ситуацию, в которой процесс поиска может состоять как из двух, так и из трех экспериментов.

Удалив из дальнейшего рассмотрения столбец 2 и вариант (1, 3), оставляем лишь четыре возможных результата (табл. 2.4). Выбрать между (1, 2) и (2, 3) попросту невозможно: в обоих случаях максимальное число экспериментов, которое может потребоваться, равно трем, а минимальное равно двум. Оказавшись перед такой альтернативой, которую, как в данном случае, разрешить не удастся, наиболее здравомыслящие люди почувствовали бы искушение подбросить монету, чтобы покончить с этим неразрешимым вопросом. Именно так мы и предлагаем поступить.

Свяжем с выпадением «орла» принятие, например, первого варианта (1, 2), а с выпадением «решки» принятие второго варианта. Результат бросания монеты указывает нам, какую альтернативу выбрать. Поскольку для правильной монеты вероятность «орла» такая же, как и «решки», то в действительности мы определили стратегию, которая в длинных последовательностях примерно в половине случаев избирает (1, 2) и в половине случаев — (2, 3).

Если через p обозначить вероятность того, что будет выбрано (1, 2), и если случайным элементом служит монета, то $p = 1/2$. Вероятность выбора (2, 3), вообще говоря, равна $1 - p$, а в данном случае также равняется $1/2$. Такое использование случайного устройства для принятия решения мы и понимаем под рандомизацией. Хотя может показаться, что все это больше похоже на уклонение от принятия решения, существует теоретическое обоснование рандомизации, которое мы сейчас и изложим.

Таблица 2.4

**Число опытов,
необходимое для отыскания
оптима**

Место проведения первых двух опытов	Положение оптима	
	1	3
(1,2)	2	3
(2,3)	3	2

2.17. Смешанная стратегия

Идея воспользоваться именно монетой, чтобы выбрать между двумя равнозначными альтернативами, хорошо согласуется с нашей интуицией, потому что монета имеет две стороны, что равно числу вариантов. Однако мы могли бы в действительности использовать любое случайное устройство, не обязательно с двумя равновероятными исходами, в частности игральную кость. Допустим, что мы связываем выбор стратегии (1, 2) с выпадением, например, одного очка, а выбор стратегии (2, 3) — с выпадением 2, 3, 4, 5 или 6 очков. В этом случае вместо $1/2$ вероятность p выбора (1, 2) равнялась бы $1/6$, а вероятность $(1 - p)$ выбора (2, 3) была бы $5/6$. Иметь равные вероятности p и $(1 - p)$, пожалуй, естественнее, однако эту догадку еще надо проверить.

Найдем сейчас наилучшую, в некотором смысле, величину p , считая ее переменной, изменяющейся в пределах от 0 до 1. Положим, что поиск производится многократно, и обозначим через n_1 число случаев, когда экстремум находится в точке 1. С помощью нашего случайного устройства мы бы $n_1 p$ раз выбирали (1, 2), каждый раз затрачивая при этом на поиск только два эксперимента. Остальные $n_1 (1 - p)$ раз мы бы выбирали (2, 3), и каждый раз при этом нам бы требовалось три эксперимента. Таким образом, общее число экспериментов составило бы $2n_1 p + 3n_1 (1 - p)$. Деля это число на n_1 , мы можем найти e_2 , т. е. среднее (или ожидаемое) число экспериментов, которое требуется при нашем рандомизированном поиске, если оптимум действительно находится в точке 1:

$$e_1 = 2p + 3(1 - p) = 3 - p. \quad (2.62)$$

Пусть теперь n_3 — число случаев, когда оптимум находится в точке 3. При этом число экспериментов составляет $3n_3 p + 2n_3 (1 - p)$ и ожидаемое число экспериментов для случая, когда оптимум находится в точке 3, равняется

$$e_3 = 3p + 2(1 - p) = 2 + p. \quad (2.63)$$

Применим теперь к ожидаемым значениям e_1 и e_3 минимаксный подход и найдем значение p , при котором минимизируется функция

$$\max \{(3 - p), (2 + p)\}. \quad (2.64)$$

Своего минимального значения, равного 2,5, эта функция достигает при $p = 1/2$.

Итак,

$$p^* = 1 - p^*, \quad (2.65)$$

и, следовательно, наша догадка была правильной: монета и есть то, что нам нужно.

Число 2,5 есть ожидаемое число экспериментов, которое потребуется, если оптимум находится в точке 1 или 3. Чтобы учесть возможность нахождения оптимума в точке 2, обозначим через n_2 число раз, когда это действительно произошло. Назовем для краткости

$$f_i = \frac{n_i}{n_1 + n_2 + n_3}, \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.66)$$

частотой, с которой оптимум оказывается в точке i . Тогда среднее число экспериментов e^* при рандомизированной минимаксной стратегии выражается следующим образом:

$$e^* = 2,5(1 - f_2) + 3f_2 = 2,5 + 0,5f_2. \quad (2.67)$$

В предыдущих выводах частоты f_i были неизвестны и минимаксный подход приводил к рандомизированной стратегии, позволяющей при неизменной частоте f_2 получать наименьшее среднее число испытаний. Как оказалось, это среднее значение совершенно не зависит от соотношения между f_1 и f_3 . Поэтому даже если f_i выбирается искусственным противником, стремящимся вынудить нас затрачивать на поиск как можно больше опытов, наше среднее число экспериментов независимо от его действий останется равным e^* , при условии, конечно, неизменного f_2 .

Допустим, однако, что можно заранее оценивать частоты f_i . В этом случае за счет новой информации удастся, как мы увидим, сократить среднее число экспериментов. Замечая, что

$$f_2 = 1 - f_1 - f_3, \quad (2.68)$$

мы можем представить среднее число необходимых экспериментов как функцию p , f_1 и f_3 :

$$\begin{aligned} e &= (3 - p)f_1 + 3(1 - f_1 - f_3) + (2 + p)f_3 = \\ &= 3 - f_3 + p(f_3 - f_1). \end{aligned} \quad (2.69)$$

Если f_1 превышает f_3 , минимум величины e получается при $p = 1$. Если $f_1 = f_3$, выбор p является несущественным.

Таким образом,

$$p = \begin{cases} 0 & \text{при } f_1 < f_3, \\ 1 & \text{при } f_1 > f_3 \end{cases} \quad (2.70)$$

и

$$e = \begin{cases} 3 - f_3 & \text{при } f_1 < f_3, \\ 3 - f_1 & \text{при } f_1 > f_3. \end{cases} \quad (2.71)$$

Из (2.69) и (2.71) находим разность

$$e^* - e = \frac{1}{2} |f_1 - f_3| \geq 0, \quad (2.72)$$

которая представляет выигрыш по сравнению с рандомизированной стратегией. Итак, в тех случаях, когда можно предсказать частоты f_i , выбор между (1, 2) и (2, 3) производится уже не случайно.

Если воспользоваться терминологией теории игр ¹⁾, то каждый из вариантов (1, 2), (1, 3) и (2, 3) следовало бы называть чистыми стратегиями.

Рандомизированная процедура выбора между чистыми стратегиями, который производится с вероятностями $\frac{1}{2}$, 0 и $\frac{1}{2}$, является примером *смешанной стратегии*.

2.18. Доминирование

Предыдущий пример был слишком простым, чтобы на нем можно было проиллюстрировать все многочисленные обстоятельства, которые учитываются при отыскании хорошей рандомизированной стратегии поиска. Обратимся поэтому к задаче поиска оптимума среди пяти точек. В табл. 2.5 для всех возможных десяти вариантов размещения первых двух экспериментов и для пяти возможных положений оптимума указываются максимальные числа эксперимен-

¹⁾ Дж. Д. Вильямс (см. ссылку на стр. 37). См. также J. Von Neuman and O. Morgenstern, *Theory of games and economic behavior*, Princeton University Press, 1944.

тов, необходимых для отыскания оптимума. При составлении этой таблицы предполагалось, что после первых двух опытов весь остальной поиск проводится самым эффективным способом. Однако, если какая-то стратегия могла привести к нескольким результатам, мы всегда брали наихудший.

Таблица 2.5

**Максимальное число опытов
при отыскании оптимума**

Место проведения первых двух экспериментов	Положение оптимума				
	1	2	3	4	5
(1,2)	2	3	4	5	5
(1,3)	3	4	4	4	4
(1,4)	3	4	4	4	4
(1,5)	3	4	5	4	3
(2,3)	3	3	3	4	4
(2,4)	3,5	4	3,5	4	3,5
(2,5)	4	4	4	4	3
(3,4)	4	4	3	3	3
(3,5)	4	4	4	4	3
(4,5)	5	5	4	3	2

Рассмотрим, например, стратегию (1, 3). Когда в действительности оптимум находится в точке 2, невозможно сказать заранее, будет ли $y_1 > y_3$ или $y_1 < y_3$. Однако в случае поиска максимума мы ограничиваемся только случаем $y_1 < y_3$, так как при этом для окончания поиска потребуется еще два испытания, тогда как в противном случае достаточно одного.

Требуют пояснения дробные результаты для чистой стратегии (2, 4). Возьмем для примера случай, когда оптимум находится в точке 1. После первых двух экспериментов останется рассмотреть лишь точки 1, 2 и 3, причем в точке 2 эксперимент уже произведен. Только что мы показали, что в этом случае следует с помощью случайного устройства с равной вероятностью выбрать для проведения следующего испытания точку 1 или точку 3. В половине случаев мы проводили бы третий эксперимент в точке 1,

и на этом бы поиск заканчивался. В остальных случаях мы выбирали бы точку 3, но тогда, прежде чем закончить поиск, пришлось бы исследовать и точку 1. Поэтому в среднем потребовалось бы 3,5 эксперимента. Точно так же обстоит дело и в случае нахождения оптимума в точке 3 или в точке 5.

Теперь для упрощения задачи надо оставить для рассмотрения как можно меньше вариантов. Было бы, очевидно, неразумно использовать стратегии (1, 2), (1, 5) или (4, 5), поскольку при этом не исключено, что придется исследовать все пять точек, тогда как даже метод фиктивных точек позволяет избежать исследования более чем четырех точек. Так как стратегия (2, 3) независимо от положения оптимума оказывается всегда лучше или такой же, как стратегии (1, 3) и (1, 4), то эти стратегии далее не стоит рассматривать. Пользуясь терминологией теории игр, скажем, что стратегия (2, 3) *доминирует* над (1, 3) и (1, 4). Из табл. 2.5 видно также, что над стратегиями (2, 5) и (3, 5) доминирует (3, 4). Три чистые стратегии, которые остаются после отбрасывания «неразумных» стратегий или стратегий, для которых нашлись доминирующие, приведены в табл. 2.6. У нашего «противника» пять стратегий, и табл. 2.5 представляет собой так называемую игру 3×5 .

Таблица 2.6

Игра 3×5

Места проведения первых двух экспериментов	Положение оптимума				
	1	2	3	4	5
(2,3)	3	3	3	4	4
(2,4)	3,5	4	3,5	4	3,5
(3,4)	4	4	3	3	3

Отметим, что хотя у нас осталось всего три стратегии, видно, что у нашего гипотетического соперника нет чистой стратегии, которая заставила бы нас каждый раз исследовать все пять или хотя бы четыре точки. С точки зрения нашего оппонента его стратегия 2 доминирует над страте-

гией 1, а 4 доминирует над 5. Таким образом, мы можем еще более упростить задачу, отбросив слабые стратегии противника. Получившаяся игра 3×3 приведена в табл. 2.7.

Т а б л и ц а 2.7
Сокращенная игра 3×3

Место проведения первых двух экспериментов	Положение оптимума		
	2	3	4
(2,3)	3	3	4
(2,4)	4	3,5	4
(3,4)	4	3	3

Поскольку в игре отсутствует седловая точка, как это было в разд. 2.03, стратегии противников не совпадают, и нужно прибегнуть к рандомизации. Пусть p_{23} , p_{24} и p_{34} представляют вероятности, с которыми мы выбираем стратегии (2, 3), (2, 4) и (3, 4). Соответственно для каждого положения оптимума ожидаемое значение числа экспериментов e_i будет равно

$$\begin{aligned} e_2 &= 3p_{23} + 4p_{24} + 4p_{34}, \\ e_3 &= 3p_{23} + 3,5p_{24} + 3p_{34}, \\ e_4 &= 4p_{23} + 4p_{24} + 3p_{34}. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Сумма вероятностей должна равняться 1, поэтому с помощью подстановки

$$p_{24} = 1 - p_{23} - p_{34} \quad (2.74)$$

можно упростить эти выражения:

$$e_2 = 4 - p_{23}, \quad (2.75)$$

$$e_3 = 3,5 - 0,5p_{23} - 0,5p_{34}, \quad (2.76)$$

$$e_4 = 4 - p_{34}. \quad (2.77)$$

Величины e_2 , e_3 и e_4 уменьшаются, пока есть возможность увеличивать p_{23} и p_{34} . В соответствии с (2.74) это означает, что

$$p_{24} = 0 \quad (2.78)$$

и

$$p_{34} = 1 - p_{23}. \quad (2.79)$$

Из (2.76), (2.77) и (2.79) находим

$$e_3 = 3, \quad (2.80)$$

$$e_4 = 3 + p_{23}. \quad (2.81)$$

Из уравнений (2.75), (2.80) и (2.81) видно, что функция $\max \{e_2, e_3, e_4\}$ достигает минимума при

$$p_{23} = p_{34} = \frac{1}{2}. \quad (2.82)$$

Таким образом, смешанная стратегия заключается в том, чтобы один эксперимент проводить в центре (в точке 3), а положение второго разыгрывать с помощью монеты, определяя, проводить ли его слева или справа от первого. Ожидаемое количество экспериментов для всех пяти возможных положений оптимума приведены в табл. 2.8. Минимум в данном случае равен 3,5. Можно показать, что если удастся заранее оценить частоты f_i нахождения оптимума в положении i , то следует выбирать чистую стратегию (2, 3) всякий раз, когда $(f_1 + f_2) > (f_4 + f_5)$. Естественно, что при обратном знаке неравенства, когда оптимум находится в правой части интервала с большей вероятностью, чем в левой, следует пользоваться чистой стратегией (3, 4).

Т а б л и ц а 2.8

Количество экспериментов при минимаксной смешанной стратегии

	Положение оптимума i				
	1	2	3	4	5
Среднее число экспериментов e_i	3,5	3,5	3,25	3,5	3,5

Для случая шести точек оптимальная стратегия оказывается не смешанной, а чистой. Первая пара экспериментов производится в двух средних точках 3 и 4. После этого всегда остаются три точки, причем в одной из крайних точек эксперимент уже проведен. Третий эксперимент поэтому производится в средней из оставшихся точек. Если случится, что оптимум совпадает со старым экспериментом, четвертое испытание уже не потребуется (рис. 2.16).

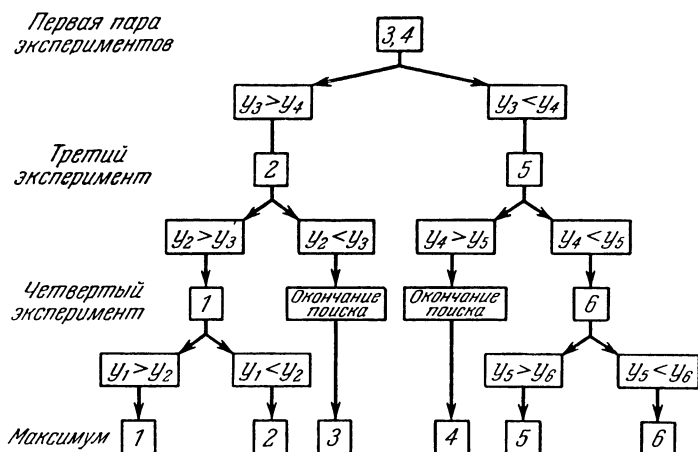


Рис. 2.16. Стратегия поиска для шести точек.

При семи точках применяется, конечно, поиск Фибоначчи, при восьми — рандомизируется только третий эксперимент, а первые два проводятся в точках 3 и 6, после чего для дальнейшего поиска остается пять точек. Так как уже проведенное испытание всегда приходится на среднюю из остающихся точек, мы в точности приходим к уже изученному случаю пяти точек. Поэтому при проведении третьего эксперимента с помощью монеты определяется выбор правого или левого варианта.

При девяти точках поиск целиком детерминирован. Первые два эксперимента проводятся в точках 3 и 7, и остается шесть точек, которые исследуются способом, уже представленным на рис. 2.16.

Первые эксперименты для десяти точек всегда следует проводить в точках 4 и 7, что снова приведет нас к поиску среди шести точек.

Рандомизация первых двух экспериментов требуется в случае одиннадцати точек. Здесь с равными весами смешиваются стратегии (4, 7) и (5, 8). В худшем случае остается семь точек, причем уже проведенный эксперимент оказывается именно в точке, предусмотренной методом Фибоначчи. В лучшем случае останется всего шесть точек, причем старый эксперимент как раз попадает на место, нужное для поиска в случае шести точек (рис. 2.16). Для двенадцати точек используется метод Фибоначчи.

В заключение мы еще раз подчеркнем, что ознакомление с эффективными стратегиями поиска не было нашей главной целью, так как получаемая таким образом экономия довольно незначительна. На деле почти с тем же успехом можно применять метод фиктивных точек, пользуясь в ходе поиска любым благоприятным случаем, чтобы сократить число испытаний. Гораздо важнее была идея рандомизации или смешивания стратегий. Мы продемонстрировали ее на примерах и показали, как анализируются ситуации, в которых возможна рандомизация. В более сложных случаях смешанные стратегии можно найти с помощью линейного программирования.

Упражнения

1. Доказать, что все выпуклые функции унимодальны.
2. Найти кубическую функцию x , которая унимодальна, но не выпукла при $0 \leq x \leq 1$.
3. Ниже в таблице приведены результаты восьми экспериментов при пассивной стратегии поиска. Поиск производится в интервале $2 \leq x \leq 12$.

x , независимая переменная: 3,1 4,2 5,0 6,5 7,1 8,8 9,5 10,5.

y , зависимая переменная: 1,0, 1,5 3,2 3,0, 2,6 2,3 1,9 1,4.

- а) Каким мог бы оказаться интервал неопределенности?
 - б) Какой могла бы быть максимальная длина интервала неопределенности?
 - в) Какова длина интервала неопределенности в данном случае?
4. Полагая неразличимыми результаты экспериментов, отстоящих друг от друга менее чем на 0,3 построить для предыдущего примера минимаксную пассивную стратегию поиска при восьми

экспериментах. Какой может быть длина максимального интервала неопределенности?

5. Студент убежден, что профессор намерен провалить его на итоговом экзамене по задачам оптимизации, и пытается решить, стоит ли готовиться к очередному занятию. Если он подготовится, а профессор устроит на занятии контрольную работу, студент может считать, что его итоговая оценка улучшится на 10 пунктов. Если контрольной не будет, знания, полученные при работе над заданием, позволяют рассчитывать на то, что оценка на экзамене улучшится на 5 пунктов. Вместо занятий студент может отправиться в кино и, если контрольной не будет, получить удовольствия на 3 пункта. Однако, если контрольная состоится, а студент не занимался, его результат при этом равен нулю и даже кино не послужит ему утешением. Какой должна быть его минимаксная стратегия? Что будет делать профессор, если он и вправду намерен провалить студента на экзамене?

6. Найти максимум функции $y = 3 + 6x - 4x^2$ в интервале $0 \leq x \leq 1$ при четырех последовательных экспериментах. Эксперименты должны отстоять друг от друга по меньшей мере на 0,05. Какова длина последнего интервала неопределенности? Какое наибольшее значение y при этом достигается?

7. При четырех дискретных экспериментах найти максимум функции из примера 6. Какое наибольшее значение y при этом достигается?

8. Можно ли в предыдущем примере эффективно провести поиск с помощью пяти экспериментов? Почему?

9. Проверить равенство Люкаса (2.36) при $n = 0$, $n = 1$ и $n = 2$.

10. Доказать возможность аппроксимации (2.38).

11. При возможно меньшем числе экспериментов исследовать в интервале $0 \leq x \leq 1$ функцию $y = 4 - 3x + 5x^2$, пока значение y не станет менее 3,56. Эксперименты можно проводить сколь угодно близко, так как вычисление y с нужным числом десятичных знаков всегда позволяет определить разницу между двумя значениями y .

12. Медицинская исследовательская группа занята поисками американца, имеющего самую высокую концентрацию «вещества x » в крови. Известно, что концентрация «вещества x » есть унимодальная функция, зависящая только от даты рождения человека. Через справочное бюро можно узнать день рождения любого американца. Чему равно наименьшее число людей, которых должна обследовать группа, чтобы найти обладателя наивысшей концентрации «вещества x »? Сравните этот результат с числом, которое получается при поиске методом дихотомии ¹⁾.

13. К концу поиска по дискретным значениям экспериментатор нашел, что искомым минимум находится в одной из четырех точек: $x_1 = -0,5$, $x_2 = 1,3$, $x_3 = 2,0$, $x_4 = 2,9$. Известно, что значение y при $x = x_4$ равно 8,95. Где следует провести следующее испытание?

¹⁾ По переписи 1962 г. население США составляет 186,6 млн человек. (Прим. перев.)

14. Проверить, что предложенная для случая шести экспериментов стратегия является наилучшей в смысле минимакса.

15. Пусть в примере 5 студент имеет третью возможность: готовиться к экзамену по другому предмету. Если теперь контрольной по оптимизации не будет, студент получит 8 пунктов от улучшения оценки по другому предмету. Если же профессор по оптимизации устроит контрольную, провал по оптимизации уменьшит этот выигрыш до 4 пунктов. Какой должна быть минимаксная стратегия?

16. Предположим, что профессор устраивает контрольные работы по оптимизации примерно на трети своих лекций, но, как кажется, делает это совершенно случайно. Какой должна быть минимаксная стратегия студента?

17. Доказать с помощью равенства Люкаса (2.36), что

$$F_{n-2}^2 - F_{n-1}F_{n-3} = (-1)^n.$$

Этот результат требуется при выводе соотношения (2.26).

18. Показать, что отрицательный корень уравнения (2.34) равен $-\frac{1}{\tau}$.

ГЛАВА 3

ГЕОМЕТРИЯ МНОГОМЕРНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ОТКЛИКА

«Дороги нет на перевал:
Близка метель! — старик сказал, —
Поток ревет, и брода нет!»
Но твердо раздалось в ответ:
Excelsior!

ЛОНГФЕЛЛО

Теперь мы обратимся к изучению задач поиска, в которых критерий эффективности зависит от двух или более независимых переменных. Есть два пути изучения таких функций. Более распространенный метод состоит в том, что зависимая переменная с помощью алгебраических уравнений выражается в виде функции независимых переменных. При таком подходе анализ функции сводится к изучению уравнений. Другой метод состоит в графическом представлении функции в декартовой системе координат. Последний метод часто дает возможность более глубоко проникнуть в природу функции, так как он опирается на геометрическую интуицию, которая более или менее развита в каждом из нас. К сожалению, графические методы практически не применимы, когда число независимых переменных больше двух. Таким образом, мы оказываемся перед трудным выбором между геометрическими методами, которые интуитивно более привлекательны, но бессильны при работе с большим числом переменных, и алгебраическими методами, которые применяются более широко, но труднее для понимания.

Итак, нужно найти компромиссное решение. Мы будем излагать более общий алгебраический аппарат, причем каждое алгебраическое понятие будем иллюстрировать геометрическими построениями для случая двух независимых переменных. В трехмерном представлении такие геометрические понятия, как касательная, линия уровня, градиент, кривизна и перпендикулярность, легче представить себе, чем их алгебраические аналоги. Если рассмотреть алгебраические уравнения для случая двух переменных, то все понятия легко распространить на более общий

случай, используя для наглядности геометрические представления, или, с другой точки зрения, геометрические понятия, рассматриваемые в трех измерениях, легко обобщить через их алгебраические аналоги.

Глава 4, посвященная стратегиям поиска для функций многих переменных, в значительной степени опирается на излагаемые в этой главе геометрические представления и алгебраические методы. Но это не означает, что настоящая глава не связана с экспериментальной оптимизацией. Методы, используемые в начале и конце поиска в случае функции многих переменных, настолько связаны с геометрическими представлениями, что они обсуждаются в этой главе, а не в главе 4, где дается лишь описание процессов, относящихся к середине поиска.

Знание теории функций многих переменных полезно не только для экспериментальной оптимизации, но и для многих других прикладных задач. Действительно, трудно найти в современном сложном мире хоть сколько-нибудь реальную задачу, описываемую функцией одной переменной. Большинство простых задач, решаемых графическими методами, столь характерных для обычного инженерного и экономического анализа, уже решены. Поэтому нам приходится изучать свойства систем, зависящих от многих переменных, особенно ввиду того, что в настоящее время расчеты можно производить с помощью быстродействующих вычислительных устройств. Поскольку геометрия многомерного пространства редко рассматривается в курсах аналитической геометрии и вычислительной математики в колледжах, по крайней мере в Соединенных Штатах, поэтому мы здесь должны посвятить некоторое время этой довольно элементарной, но исключительно важной в практическом отношении теме. К счастью, те немногие простые понятия, которые нам потребуются, можно изложить быстро и без особых усилий.

3.01. Изометрическая проекция

Довольно трудно с помощью одних лишь рисунков на плоскости страниц этой книги описать твердые предметы, но именно это мы и должны сделать, прежде чем перейти к рассмотрению геометрических свойств кривых и поверх-

ностей в пространстве. Мы будем использовать метод изометрической проекции, с которым большинство инженеров уже знакомы благодаря его простоте и хорошей наглядности. Изометрическая проекция состоит в представлении трех взаимно перпендикулярных в пространстве осей вертикальной прямой и двумя наклонными прямыми, как показано на рис. 3.1. Наклонные прямые соответствуют осям, которые лежат на горизонтальной плоскости, а вертикальная прямая соответствует вертикальной оси в пространстве. Независимые переменные, обозначенные через x_1 и x_2 , откладываются по горизонтальным осям, а величины зависимой переменной y (критерий качества) откладываются вертикально над плоскостью x_1x_2 .

На рис. 3.1 точка p (жирными буквами обозначаются точки или векторы) имеет координаты $x_1 = 3$, $x_2 = 2$ и $y = 5,9$. Таким образом, всякую упорядоченную тройку чисел $(x_1, x_2; y)$ можно представить графически точкой в изометрической проекции. Множество точек, соответствующих всем возможным упорядоченным тройкам, образуют пространство трех измерений. Три измерения, по одному на каждую координату, как известно, определяют положение точки.

Предположим, что y соответствует критерию, который является функцией двух независимых переменных x_1 и x_2 :

$$y = y(x_1, x_2). \quad (3.1)$$

В этом случае не все точки трехмерного пространства удовлетворяют данному уравнению. Ему удовлетворяют лишь те точки, которые лежат на некоторой поверхности в пространстве, как это, например, показано на рис. 3.2,

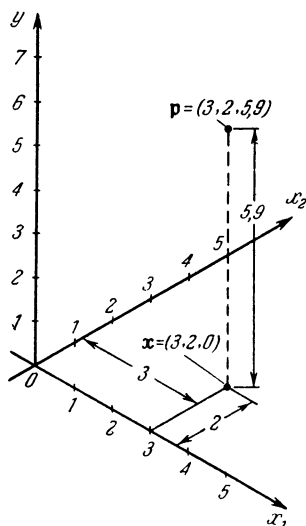


Рис. 3.1. Изометрическое представление точки в пространстве.

где конкретная функция описывается уравнением

$$y = 5 - 0,2(x_1 - 3)^2 + 0,1(x_2 + 1)^2. \quad (3.2)$$

Прямые $x_1 = 0, 1, 2, 3, 4$ и $x_2 = 0, 1, 2, 3, 4$ изображены на плоскости x_1x_2 ($y = 0$) и спроектированы на поверхность (3.2). Отметим, что точка p , показанная на рис. 3.1,

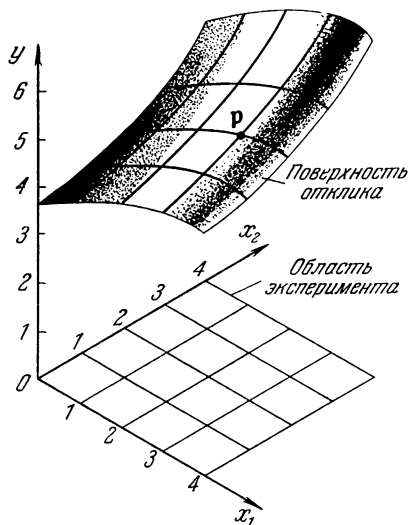


Рис. 3.2. Изометрическое представление поверхности отклика.

удовлетворяет уравнению (3.2) и поэтому лежит на нашей поверхности. Ее проекция на плоскость x_1x_2 имеет координаты $x_1 = 3$ и $x_2 = 2$.

3.02. Поверхности отклика

Биологи и статистики, для которых критерий y зачастую является реакцией (*откликом*) живого организма на внешние факторы x_1 и x_2 , называют поверхности критерия поверхностями отклика. Это название недавно получило распространение в инженерной терминологии благодаря

промышленному применению работ Бокса ¹⁾. Поверхность отклика, представленная на рис. 3.2, является двумерной, так как для определения положения точки на поверхности необходимо знание только двух координат. Например, мы можем определить положение точки p , указав, что она лежит на поверхности отклика и $x_1 = 3$, $x_2 = 2$. Это соответствует алгебраической операции нахождения величины y в точке p подстановкой значений x_1 и x_2 в уравнение (3.2).

В алгебраической терминологии разница между числом переменных и числом связывающих их независимых уравнений называется *числом степеней свободы*. Для поверхности отклика имеются три переменные (x_1 , x_2 и y), связанные уравнением (3.2), поэтому в данном случае имеются две степени свободы. Так как число степеней свободы равно числу координат, которые надо зафиксировать, чтобы определить положение некоторой точки, то число степеней свободы то же самое, что и число измерений. Поэтому пространство всех возможных точек (x_1 , x_2 , y), не обязательно удовлетворяющих уравнению (3.2), имеет три степени свободы, или измерения, а поверхность отклика — только две. Поэтому можно сказать, что поверхность есть двумерный объект в трехмерном пространстве. Таковы, например, плоскость x_1x_2 , на которой $y = 0$, или вертикальная плоскость, на которой $x_1 = 0$.

Пересечение двух поверхностей есть одномерная кривая. Действительно, каждая поверхность представляется уравнением, связывающим три переменные. Точки пересечения принадлежат обоим поверхностям и поэтому должны удовлетворять обоим уравнениям. При этом остается только одна степень свободы. Пространственные кривые на рис. 3.2 являются пересечениями поверхности отклика с вертикальными плоскостями $x_1 = 0, 1, 2, 3, 4$ и $x_2 = 0, 1, 2, 3, 4$. Рассуждая аналогично, можно прийти к заключению, что точка, которая образуется одновременным пересечением трех поверхностей, представляет объект с нулевым измерением, поэтому она не имеет степеней свободы. Точка p на рис. 3.2 лежит на пересечении поверхности отклика с двумя плоскостями $x_1 = 3$ и $x_2 = 2$.

¹⁾ G. E. P. Box, The exploration and exploitation of response surfaces, *Biometrics* 10 (1954).

На рис. 3.3 показан другой способ графического представления поверхности отклика. На рис. 3.3, а изображен вид спереди на поверхность так, как она видна со стороны отрицательной полуоси x_1 . На ней показано пять кривых,

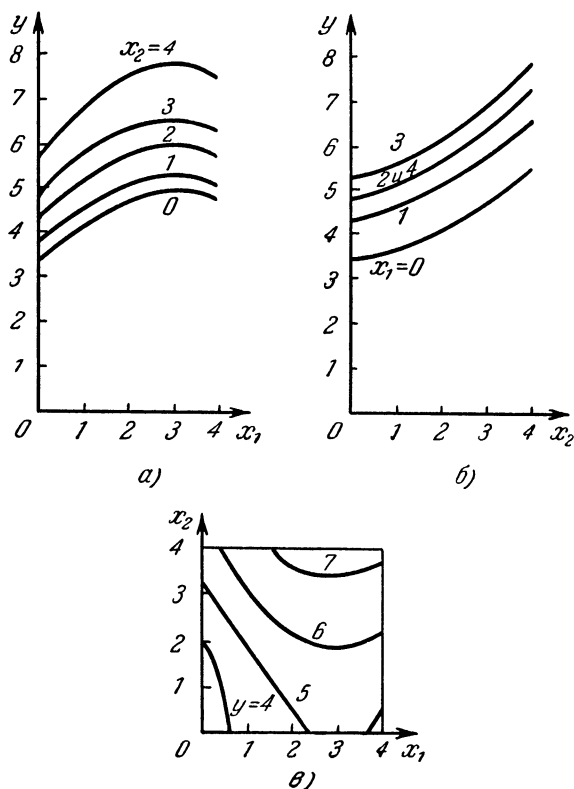


Рис. 3.3. Проекция поверхности отклика: а) вид спереди; б) вид сбоку; в) вид сверху (линии уровня).

принадлежащих поверхности при $x_2 = 0, 1, 2, 3, 4$. Аналогично вид справа на поверхность так, как она видна со стороны положительной полуоси x_2 , изображен на рис. 3.3, б. Он представляет собой проекции пространственных кривых при $x_1 = 0, 1, 2, 3, 4$ на плоскость yx_2 . Кривые, показанные на этих двух рисунках, те же, что и кривые на

рис. 3.2. На рис. 3.3, *в* показан вид сверху. Кривые на этом рисунке являются проекциями пересечения поверхности отклика с горизонтальными плоскостями при $y = 3, 4, 5, 6, 7$. Эти кривые называются *линиями уровня*. Они показаны

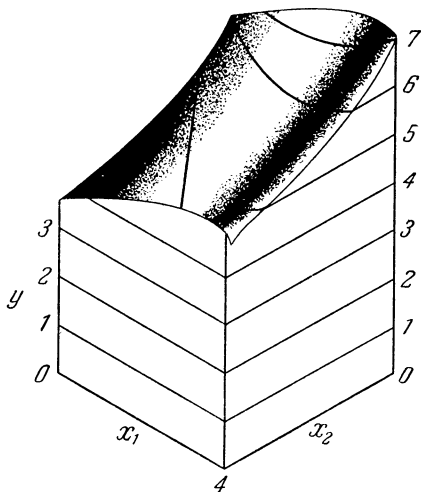


Рис. 3.4. Линии уровня в изометрическом представлении.

также на изометрической проекции (рис. 3.4). На рис. 3.3, *в* эти линии уровня видны сверху. Читатели, которые знакомы с машиностроительным черчением, знают этот способ изображения твердых тел как метод *ортогональной проекции*.

3.03. Гиперпространство

Теперь обобщим некоторые из этих геометрических понятий на случай, когда имеется более двух независимых переменных. Предположим, что критерий y есть функция n переменных x_1, x_2, \dots, x_n :

$$y = y(x_1, \dots, x_n). \quad (3.3)$$

Чтобы представить это соотношение графически, необходимо иметь $n + 1$ взаимно перпендикулярных осей, что

в нашем трехмерном мире физически невозможно. Но если мы не можем построить такую систему координат физически, то пространство более чем трех измерений можно представить мысленно, если мы хотим распространить геометрическое понятие размерности с помощью алгебраического понятия степени свободы. Обычно приставку *гипер* употребляют для обозначения пространств, имеющих более чем три измерения. Так, термин « $(n + 1)$ -мерное гиперпространство» обозначает множество всех возможных точек (x_1, \dots, x_n, y) . В этой терминологии множество точек, удовлетворяющих уравнению (3.3), должно быть n -мерной *гиперповерхностью* в $(n + 1)$ -мерном гиперпространстве. Аналогично мы можем представить пересечение гиперповерхности отклика с любой гиперплоскостью при постоянном y как гиперлинию уровня $(n - 1)$ -мерного объекта. Далее мы будем касаться многомерных аналогов таких понятий, как касательная и площадь, но не будем развивать эти представления, пока в этом не возникнет потребность. Пока нам достаточно основных понятий пространства, размерности или степеней свободы и поверхности отклика.

Теперь можно поставить геометрическую задачу поиска по многим переменным. Нужно найти оптимум (в частности, максимум) величины некоторого критерия y , который зависит от n независимых переменных x_1, x_2, \dots, x_n . Эта функция нам неизвестна, но значение y для ряда значений x_1, x_2, \dots, x_n можно определить экспериментально, как это показано на рис. 3.1, где эксперимент, проведенный при $x_1 = 3$ и $x_2 = 2$, дает значение y , равное 5,9. Таким образом, каждая точка на гиперплоскости $x_1 x_2 \dots x_n$ (т. е. гиперплоскости, на которой $y = 0$) соответствует возможному эксперименту, а точка на гиперповерхности отклика соответствует результату эксперимента. Обычно возможные экспериментальные точки ограничиваются некоторой замкнутой частью гиперплоскости $x_1 \dots x_n$, которую мы будем называть *областью эксперимента*. Каждый эксперимент дает нам возможность определить расстояние до поверхности отклика над новой точкой в этой области. По поверхности отклика надо подняться как можно выше, используя накапливаемую информацию для определения направления поиска.

3.04. Трудности поиска по многим переменным

С первого взгляда можно подумать, что разница между задачами поиска по многим переменным и уже решенными задачами поиска по одной переменной состоит только в том, что потребуется немного дополнительных вычислений для того, чтобы методы поиска для одной переменной распространить на многомерные задачи. К сожалению, это не так. Задачи поиска по многим переменным кардинальным образом отличаются по структуре от задач поиска по одной переменной. Беллман ¹⁾ называл трудности, порождаемые этими различиями, «проклятием размерности». Это «проклятие» порождает три проблемы, представляющих для нас интерес.

Во-первых, многомерность делает унимодальность менее вероятной. Несомненно, определение унимодальности можно легко распространить на многомерный случай, но иногда трудно предположить унимодальность поверхности отклика при возрастании числа измерений. Однако, как мы увидим далее, имеется достаточно примеров унимодальных функций нескольких переменных, которые оправдывают их изучение.

Второе, более важное следствие состоит в том, что нельзя найти меру эффективности поиска, которая не зависела бы некоторым образом от удачи экспериментатора. Напомним, что минимаксные способы, развитые для унимодальных функций, зависящих от одной переменной, дают одну и ту же длину конечного интервала неопределенности независимо от расположения экстремума. Чтобы убедиться, почему мера эффективности, использованная выше, не применяется в многомерных задачах, рассмотрим два эксперимента $\mathbf{a} = (3, 2)$ и $\mathbf{b} = (1, 1)$, проведенных для нахождения максимума функций, заданной уравнением (3.2) в области эксперимента $0 \leq x_1 \leq 4$, $0 \leq x_2 \leq 4$. Значения y , равные соответственно 5,9 и 4,6, показаны на рис. 3.5. Функция унимодальна над прямой, проходящей через точки \mathbf{a} и \mathbf{b} , что подтверждается рис. 3.6, на котором показана кривая, образованная пересечением поверхности отклика с верти-

¹⁾ Р. Беллман, Динамическое программирование, ИЛ, М., 1960.

кальной плоскостью, проходящей через **a** и **b**. Поэтому мы можем заключить, что искомый максимум не может лежать над отрезком между точками **b** и **c**. Последняя точка лежит на пересечении линии с границей области эксперимента. К сожалению, отброшенный отрезок прямой является несущественным по сравнению с оставшейся двух-

мерной областью эксперимента. Таким образом, многомерность ослабляет те методы поиска, которые были столь эффективны, когда мы имели дело только с линиями.

Проводя это рассмотрение, показавшее недостаток одномерных способов поиска для случая многомерных областей эксперимента, мы предполагали, что вместо отрезков линии можно отбрасывать целые области. Как мы вскоре увидим, это можно и должно сделать. Таким образом, действительно для любой частной задачи поиска площадь неопределенности можно использовать в качестве меры эффективности

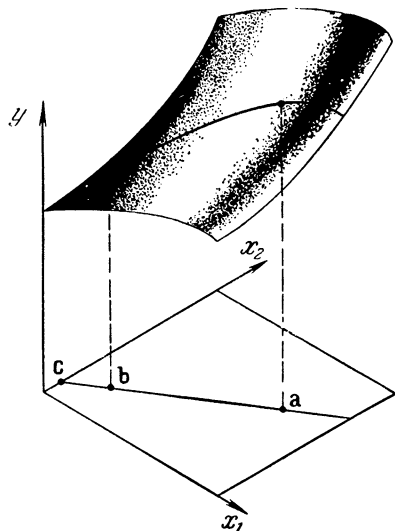


Рис. 3.5. Два эксперимента.

поиска. Но мы не сможем заранее предсказать, какой величины или формы будет окончательная область. Следовательно, объективного способа сравнивать заранее различные методы не существует, и нельзя выявить метод многомерного поиска, оптимальный в каком-то смысле.

Третья трудность — само восприятие размера в многомерных пространствах. Это тонкое место, трудное для осмысливания. Чтобы преодолеть наш недостаток опыта с многомерными пространствами, попытаемся вообразить, что произойдет с размером, когда мы переходим от прямой к двумерному квадрату и затем к трехмерному кубу.

Рассмотрим прямую единичной длины — верхнюю грань куба на рис. 3.7. Предположим, что мы применили метод поиска, который привел нас к интервалу неопределенности, имеющему одну десятую первоначальной длины. Такой метод обеспечивает эффективную выборку, так как среди десяти равных отрезков прямой выделен интервал, содержащий оптимум. Этот интервал выглядит сравнительно малым по сравнению с первоначальным отрезком единичной длины.

Далее представим себе единичный квадрат, поделенный на квадратики, каждый со стороной 0,1, как на одной из сторон куба рис. 3.7. Показанная зачерненная область включает десять квадратов из ста, т. е. ровно десятую часть первоначальной области. Как бы то ни было, но каким-то образом эта десятая часть квадрата выглядит больше, чем десятая часть отрезка.

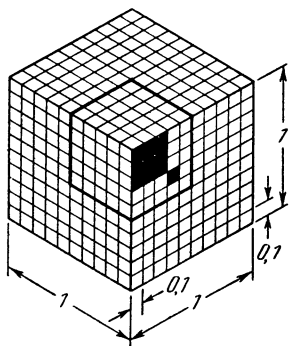


Рис. 3.7. Одно из последствий «проклятия» размерности.

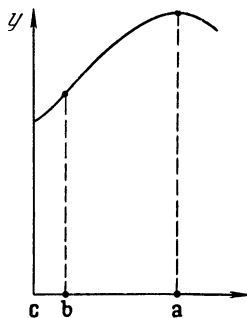


Рис. 3.6. Вертикальное сечение по линии, проходящей через точки a и b .

Это впечатление еще более заметно на единичном кубе, который разделен на тысячу кубических ячеек, каждая со стороной 0,10 единичной длины. Чтобы выделить десять процентов этой области, надо взять сто ячеек (на рис. 3.7 — объем, равный $0,4 \times 0,5 \times 0,5$). Мы видим, что десять процентов интервала неопределенности, которые выглядят достаточно малыми на прямой, на кубе кажутся довольно большими. Если мы имеем дело с функцией пятидесяти переменных, то гиперкуб, занимающий только десять процентов объема, будет иметь сторону, равную $(0,1)^{1/50} = 0,93!$

Это явление, которое на первый взгляд может показаться парадоксальным, возникает из-за того, что способ измерения линейных, одномерных объектов (с помощью процент-

ного отношения) мы хотим использовать для измерения многомерных объектов — объема и его многомерного обобщения. Таким образом, если мы имеем метод поиска, уменьшающий многомерный объем неопределенности до определенной его части, то эта величина в процентном отношении будет чрезвычайно мала по сравнению с диапазоном изменения отдельных независимых переменных. Эта трудность, которую можно назвать «безбрежностью» гиперпространства, будет рассмотрена ниже. О ней говорилось в замечаниях Хука и Дживса по методу случайного поиска Брукса ¹⁾, который также будет рассмотрен ниже.

Итак, эта многомерность причиняет нам вред в трех отношениях: она ослабляет нашу уверенность в унимодальности; она не позволяет использовать априорные меры эффективности, которые позволяют пользоваться мощным одномерным минимаксным методом; наконец, она заставляет нас искать области неопределенности, которые являются весьма малыми частями первоначальной области эксперимента. Но эти препятствия, которые затрудняют отыскание эффективных методов поиска, в то же самое время делают эти поиски более интересными. Исследования по решению задачи многомерного поиска фактически только начинаются.

3.05. Случайный поиск

Рассматривая выше проблему «размера» многомерных пространств, мы разбивали единичный куб на 1000 одинаковых кубических ячеек. Поставим в соответствие каждой ячейке среднее значение критерия эффективности и расположим ячейки последовательно, по мере ухудшения критерия, начиная от самой лучшей. Допустим, мы хотим найти какую-нибудь из ста лучших ячеек, соответствующих данной последовательности. Эта группа составляет десять процентов от тысячи ячеек.

При случайном выборе ячейки вероятность найти за одну пробу одну из ста лучших ячеек равна $100 : 1000 = 0,1$.

¹⁾ R. Hooke and T. A. Jeeves, Comments on Brooks' discussion of random methods, Operations Research 6, 6 (Nov. 1958), pp. 881.

Очевидно, вероятность противоположного события, т. е. не найти такую ячейку, равна $1 - 0,1 = 0,9$. Если же случайно выбрать две ячейки, то вероятность неудачи будет, естественно, меньше, чем при одной попытке, и составит $(0,9)^2 = 0,81$. Таким образом, при двух пробах вероятность обнаружить по крайней мере одну хорошую ячейку возрастает до $1 - 0,81 = 0,19$. Вообще после случайного выбора n ячеек вероятность $p(0,10)$ обнаружить по крайней мере одну ячейку из 10 процентов лучших ячеек равна $p(0,10) = 1 - (0,9)^n$. После 16 проб эта вероятность возрастает до 0,80, а 44 пробы дадут вероятность 0,99, т. е. нужная ячейка будет найдена почти наверняка. Заметим, что если бы область эксперимента была одномерной, то интервал неопределенности, равный 0,1, потребовал бы 18 одновременных проб или шести последовательных проб.

Рассмотренная процедура случайного поиска, которая предложена Бруксом ¹⁾, имеет два преимущества. Во-первых, можно не делать предположений о форме поверхности отклика — данный способ одинаково применим для многоэкстремальных функций так же, как и для унимодальных функций. Во-вторых, вероятность $p(f)$ обнаружить по крайней мере одну ячейку в лучшей части f области эксперимента не зависит от числа измерений, так как, обобщая рассмотренный выше случай $f = 0,1$, можно написать

$$p(f) = 1 - (1 - f)^n, \quad (3.4)$$

откуда

$$n = \frac{\log(1 - p(f))}{\log(1 - f)}. \quad (3.5)$$

В табл. 3.1, взятой из статьи Брукса, показано, как связаны f , $p(f)$ и n .

С другой стороны, случайный метод имеет недостатки. По существу он является пассивным, а не последовательным. Недостатки пассивных методов рассмотрены во второй главе. Более того, обширность многомерного пространства приводит к тому, что любой способ сокращения области неопределенности до заданных размеров оказывается не-

¹⁾ S. H. Brooks, Discussion of random methods for seeking maxima. Operations Research 6, 2 (Mar. 1958), pp. 244—51.

эффективным. Замечание Хука и Дживса по этому поводу было изложено выше.

Таблица 3.1

**Число требуемых проб
при отыскании максимума,
проводимого случайным методом**

$f \backslash p(f)$	0,80	0,90	0,95	0,99
0,10	16	22	29	44
0,05	32	45	59	90
0,025	64	91	119	182
0,01	161	230	299	459
0,005	322	460	598	919

Действительно, идеи Брукса являются более общими, чем те, которые мы рассматривали до сих пор. В соответствии с этими идеями нет необходимости делить область эксперимента на ячейки, а точки в этой области можно выбирать случайно. Брукс предложил вариант последовательного поиска, который он назвал ползущим (creeping) случайным методом. При этом первая оценка выбирается наугад, а следующие измерения производятся в окрестности первой оценки случайным образом. Важно только, чтобы эти пробы не располагались упорядоченно, а были бы раскиданы вокруг точки, соответствующей первой оценке. Лучшая из этих случайных проб принимается за центр следующего случайного исследования, область которого в какой-то степени уменьшается, затем процесс повторяется. Точное описание этого метода можно дать только при более глубоком применении понятий теории вероятности, чем нам хотелось в этой элементарной книге, и поэтому мы перейдем теперь к операциям, которые позволяют находить оптимум путем изучения геометрических свойств поверхности отклика.

3.06. Стратегия поиска по многим переменным

Задача поиска оптимума функции многих переменных состоит в том, чтобы после небольшого числа экспериментов найти ряд условий, при которых величина критерия y близка к оптимуму. Эту задачу можно поставить и иначе — за

наименьшее число проб найти оптимальное значение критерия с заданной точностью. Геометрически это означает, что нам нужно подниматься по поверхности отклика как можно быстрее, даже если информация о поверхности, которой мы располагаем, получена лишь из прошлых экспериментов.

Таким образом, каждый эксперимент преследует две цели: не только добиться хорошей величины критерия, но и дать полезную информацию о той области, которая, вероятно, соответствует желаемому значению критерия и куда следует поместить следующую группу экспериментов. Во время поиска необходимо непрерывно решать, какие шаги следует делать — рабочие или пробные. Если все испытания направлены лишь на изучение поверхности отклика, то можно узнать, где находится экстремум, но при этом не будет экспериментов вблизи экстремальной точки. С другой стороны, всякая попытка достичь вершины без предварительного исследования была бы недальновидна, так как без изучения функции поиск может закончиться далеко от экстремума. Разумный план, или стратегия, требует, чтобы рабочие и пробные шаги сочетались надлежащим образом.

Характер стратегий меняется по мере развития поиска. Вначале, когда о функции вообще ничего не известно, мы должны вести исследование в некоторой небольшой, случайным образом выбранной области с тем, чтобы расположить следующие пробные воздействия там, где значение критерия выше. В середине процесса поиска, после того как области с низким значением критерия отброшены, надо восходить как можно быстрее, проводя пробные исследования только в том случае, когда необходимо определять направление рабочих шагов. В конце поиска вблизи вершины необходимо интенсивно проводить исследования, чтобы получить хоть какое-то движение к экстремуму, так как наклон поверхности отклика вблизи максимума часто бывает слабым. Кроме того, исследование области в окрестности предполагаемого максимума необходимо для проверки его достоверности.

Таким образом, стратегия многомерного поиска подобно шахматной имеет три фазы: дебют, миттельшпиль и эндшпиль. Первоначальные действия (дебют) определяют исходную позицию. Все действия в середине (миттельшпиль)

направлены на получение преимущества. Действия в конце (эндшпиль) направлены на достижение выигрыша. Ниже будет показано, что различные схемы поиска различаются только средней фазой — миттельшпилем, так как каждая стратегия всегда начинается и кончается исследованиями. Стратегический подход, при котором экспериментатор меняет тактику по мере развития поиска, оказывается достаточно работоспособным на практике, как это показано в некоторых эмпирических исследованиях Лapidуса и др.¹⁾. Первая и последняя фазы стратегии поиска будут рассмотрены в этой главе. Стратегии миттельшпиля будут рассмотрены в четвертой главе.

ДЕБЮТ

Начнем обсуждение стратегии поиска с задачи расположения первых экспериментов. Так как предварительная информация относительно функции критерия отсутствует, то первые пробы будут направлены исключительно на ее изучение. Далее будет показано, что они определяют только направление подъема на поверхности отклика и путь, по которому нужно двигаться вверх от исходной группы экспериментов.

3.07. Линейные исследования

Чтобы избежать излишней абстрактности, рассмотрим сначала частную задачу нахождения максимума в области эксперимента $0 \leq x_1 \leq 4$, $0 \leq x_2 \leq 4$ для неизвестной функции $y(x_1, x_2)$ двух независимых переменных x_1 и x_2 . Так как о функции $y(x_1, x_2)$ ничего не известно, то любая точка в области эксперимента одинаково хороша для начала поиска. Для определенности выберем начало поиска точно в центре, который имеет координаты $(2,0; 2,0)$. Обозначим начальную точку через x_0 . Ее первая координата будет x_{01} , вторая x_{02} . Таким образом,

$$x_0 = (x_{01}, x_{02}). \quad (3.6)$$

¹⁾ L. Lapidus, E. Shapiro, S. Shapiro and R. E. Stillman, Optimization of process performance, A. I. Ch. E. J. 7, 2 (June 1961), pp. 288—294.

В данном случае $x_{01} = x_{02} = 2,0$. Обозначим результат эксперимента в точке x_0 через y_0 и предположим, что отклик имеет величину 5,70. Точка (x_{01}, x_{02}, y_0) , которую сокращенно обозначим y_0 , будет находиться на поверхности отклика над точкой x_0 , как это показано на рис. 3.8.

Результатов первой пробы не достаточно, чтобы определить положение следующего эксперимента. Предположим, однако, что известен наклон поверхности отклика в окрестности точки y_0 . Кроме того, имеется хотя бы грубое представление, при каких комбинациях изменений x_1 и x_2 может произойти увеличение критерия y . Чтобы найти наклон в направлении, параллельном оси x_1 , необходимо провести эксперимент $x_1 = (x_{11}, x_{12})$, вторая координата которого x_{12} остается той же, что и в первой пробе.

Таким образом, мы выбираем

$$x_{12} = x_{02}. \quad (3.7)$$

Первая координата x_{11} должна отличаться от x_{01} лишь незначительно. Для получения точной оценки наклона расположим x_1 как можно ближе к x_0 . Однако это расстояние должно быть таким, чтобы y_1 отличалось от y_0 . Возьмем, например,

$$x_1 = (2,1; 2,0) \quad (3.8)$$

и предположим, что

$$y = 5,72. \quad (3.9)$$

Положение после двух экспериментов соответствует рис. 3.9. Прямая, проходящая через точки y_0 и y_1 , лежит

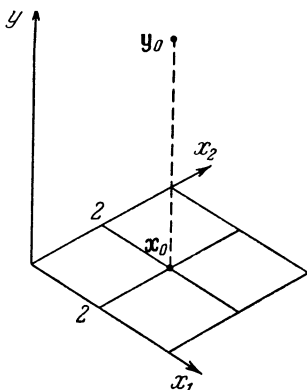


Рис. 3.8. Результат первого эксперимента

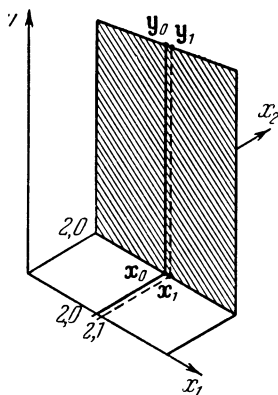


Рис. 3.9. Касательная к поверхности отклика в точке y_0 на плоскости $x_2 = 2,0$.

целиком в вертикальной плоскости $x_2 = 2,0$ и приближается к касательной к поверхности отклика в точке y_0 . Ее наклон равен

$$\left(\frac{\partial y}{\partial x_1}\right)_0 \approx \frac{y_1 - y_0}{x_{11} - x_{01}} = \frac{5,72 - 5,70}{2,1 - 2,0} = 0,2, \quad (3.10)$$

где индекс 0 показывает, что частная производная вычисляется в точке y_0 .

Более логично размещать следующий эксперимент там, где x_1 больше, чем в точках x_0 и x_1 , так как критерий,

по-видимому, возрастает в этом направлении. Действительно, можно провести одномерный поиск для того, чтобы найти самую высокую точку поверхности отклика на плоскости $x_2 = 2$. В этой точке мы сможем снова провести одномерный поиск в направлении x_2 , фиксируя координату x_1 , полученную на предыдущем этапе. Эту процедуру можно продолжить, фиксируя одну переменную и изменяя другую до тех пор, пока не будет найден максимум. К сожалению, как указали Бокс и Вильсон¹⁾, этим способом, более полно описанным в четвертой главе, не удастся найти максимум функции с гребнем, как показано на рис. 3.10. Если вести поиск вдоль линии

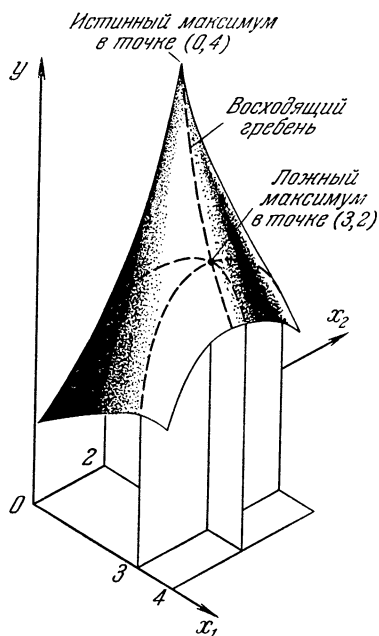


Рис. 3.10. Поверхность отклика с гребнем.

$x_2 = 2$, то вершина окажется в точке $(3, 2)$, где линия пересекает гребень. Попытки найти более высокую точку обречены

¹⁾ G. E. P. B o x and K. B. W i l s o n, The experimental attainment of optimal conditions, J. Roy, Stat. Soc. B13, 1 (1951).

на неудачу, так как точка (3, 2) выше, чем какая-либо другая точка на этой линии. Поэтому поиск будет закончен в точке (3, 2), вдали от действительного максимума в точке (0, 4). Линии уровня этого гребня показаны на рис. 3.11.

Может показаться, что нужно изменять координату x_2 в то же время, когда мы изменяем координату x_1 . Чтобы решить, должна координата x_2 возрасть или уменьшаться,



Рис. 3.11. Линии уровня поверхности, изображенной на рис. 3.10.

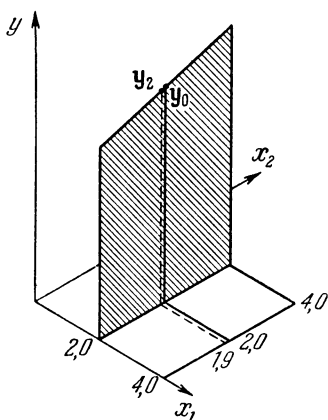


Рис. 3.12. Касательная к поверхности отклика в точке y_0 в плоскости $x_2 = 2,0$.

проведем другой эксперимент вблизи точки x_0 , варьируя на этот раз координату x_2 , оставляя x_1 постоянной и равной x_{01} . Поставим эксперимент в точке x_2 с координатами (2,0; 1,9). Решение уменьшать, а не увеличивать координату x_2 в этом опыте является, конечно, произвольным. Если предположить, что отклик равен 5,67, то после третьего эксперимента положение будет соответствовать рис. 3.12. Прямая, проходящая через точки y_0 и y_2 , близка к касательной к поверхности отклика в точке y_2 и имеет наклон, равный

$$\left(\frac{\partial y}{\partial x_2}\right)_0 \approx \frac{y_2 - y_0}{x_{22} - x_{02}} = \frac{5,67 - 5,70}{1,9 - 2,0} = 0,3. \quad (3.11)$$

Эта касательная лежит в вертикальной плоскости $x_1 = 2,0$.

3.08. Касательная плоскость

Теперь известен наклон поверхности отклика в двух данных направлениях — параллельном оси x_1 и параллельном оси x_2 . Что можно сказать о наклоне в других направлениях? На поверхности отклика достаточно трех точек (y_0 , y_1 и y_2) для определения плоскости, близкой к касательной к поверхности в точке y_0 . Найдем уравнение касательной плоскости. Плоскость в трехмерном пространстве удовлетворяет уравнению вида

$$y(x_1, x_2) = m_0 + m_1x_1 + m_2x_2, \quad (3.12)$$

где m_0 , m_1 и m_2 — константы. Плоскость является частным видом поверхности, так как имеет две степени свободы. Это подтверждается нашими геометрическими представлениями. Одно из свойств плоскости следует из вида уравнения (3.12), которое выражает критерий y как линейную функцию независимых переменных x_1 и x_2 . Под линейной функцией мы понимаем сумму слагаемых, одно из которых является константой, а другие — произведениями констант на одну из переменных в первой степени. Слово *линейная* взято из геометрии, так как линия пересечения двух плоскостей есть прямая. Если какое-либо из слагаемых в уравнении (3.12) имеет степень при x_1 или x_2 , не равную единице или содержит произведение x_1 на x_2 , то уравнение будет нелинейным, а поверхность — кривой.

Для задания касательной плоскости, описываемой уравнением (3.12), необходимо определить три константы m_0 , m_1 и m_2 . Для этого в уравнении (3.12) величины x_1 , x_2 и y заменим соответствующими значениями, найденными в результате трех проведенных экспериментов. Тогда получится система трех независимых уравнений с тремя неизвестными m_0 , m_1 и m_2 :

$$y_0 = m_0 + m_1x_{01} + m_2x_{02}; \quad (3.13a)$$

$$y_1 = m_0 + m_1x_{11} + m_2x_{12}; \quad (3.13b)$$

$$y_2 = m_0 + m_1x_{21} + m_2x_{22}. \quad (3.13c)$$

В данном случае эти уравнения будут иметь следующий вид:

$$5,70 = m_0 + 2,0m_1 + 2,0m_2; \quad (3.14a)$$

$$5,72 = m_0 + 2,1m_1 + 2,0m_2; \quad (3.14б)$$

$$5,67 = m_0 + 2,0m_1 + 1,9m_2. \quad (3.14в)$$

Остается только решить эти уравнения относительно m_0 , m_1 и m_2 . При определении уравнения касательной плоскости удобно иметь дело с отклонениями x_1 , x_2 и y от их значений в начальной точке y_0 . Обозначим эти отклонения для эксперимента $x_i = (x_{i1}, x_{i2})$ следующим образом:

$$\Delta x_{i1} = x_{i1} - x_{01}; \quad (3.15a)$$

$$\Delta x_{i2} = x_{i2} - x_{02}; \quad (3.15б)$$

$$\Delta y_i = y_i - y_0. \quad (3.15в)$$

В нашем примере

$$\begin{aligned} \Delta x_{i1} &= x_{i1} - 2,0, \\ \Delta x_{i2} &= x_{i2} - 2,0 \quad \text{и} \quad \Delta y = y_i - 5,70. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Данное преобразование координат устраняет необходимость определять константу m_0 , так как при вычитании уравнения (3.13a) из уравнений (3.13б) и (3.13в) с учетом уравнений (3.15) получим

$$\Delta y_i = m_1 \Delta x_{i1} + m_2 \Delta x_{i2}, \quad i = 1, 2. \quad (3.17)$$

Дальнейшее упрощение можно получить, выбирая точки x_1 и x_2 так, чтобы $\Delta x_{12} = 0$ и $\Delta z_{21} = 0$. В данном случае ясно, что

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{\Delta y_1}{\Delta x_{11}} = 0,2 \approx \left(\frac{\partial y}{\partial x_1} \right)_0, \\ m_2 &= \frac{\Delta y_2}{\Delta x_{22}} = 0,3 \approx \left(\frac{\partial y}{\partial x_2} \right)_0, \end{aligned} \quad (3.18)$$

и поэтому уравнение плоскости, касательной к поверхности отклика в точке y_0 , имеет вид

$$\Delta y = 0,2\Delta x_1 + 0,3\Delta x_2. \quad (3.19)$$

Эта касательная плоскость показана на рис. 3.13. Общий вид уравнения плоскости получается при объединении уравнений (3.12) и (3.15):

$$\Delta y = m_1 \Delta x_1 + m_2 \Delta x_2. \quad (3.20)$$

Из уравнения (3.19) касательной плоскости в точке y_0 можно определить изменение y для любой комбинации малых отклонений x_1 и x_2 . Например, можно ожидать, что значение y в точке $(2,1; 2,1)$ будет мало отличаться от величины $5,70 + 0,2 \times (0,1) + 0,3 \times (0,1) = 5,75$. Дальнейших измерений величины наклона можно не делать, так как при этом нельзя получить никакой дополнительной информации. Следовательно, в соответствии с геометрической интуицией для определения касательной плоскости в точке y_0 надо провести лишь три эксперимента. Конечно, можно провести любые три эксперимента, а не только те, которые мы выбрали, если только все они не лежат на одной прямой в плоскости $x_1 x_2$. Причина последнего ограничения состоит в том,

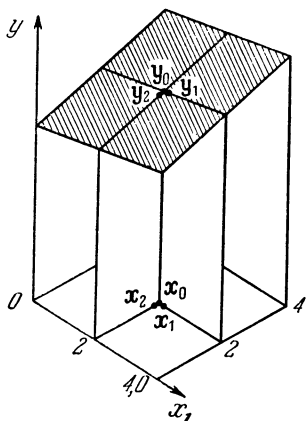


Рис. 3.13. Касательная плоскость в точке y_0 .

что для определения плоскости, проходящей через некоторую точку, необходимо иметь по крайней мере две различные прямые, проходящие через эту точку. Из алгебры известно, что три точки, взятые на одной и той же прямой, приводят к линейной зависимости уравнений (3.17). В этом случае уравнения (3.17) не могут дать единственного решения для m_1 и m_2 .

Чтобы определить местоположение будущих экспериментов, используем касательную плоскость (3.20) для аппроксимации поверхности отклика вблизи точки y_0 . Проверим, насколько приемлемо такое предположение. Будем считать, что критерий y является непрерывной функцией от x_1 и x_2 с непрерывными частными производными во всей области эксперимента (это предположение

в дальнейшем будет ослаблено). Разложим y в ряд Тейлора в окрестности точки y_0 :

$$\Delta y = \left(\frac{\partial y}{\partial x_1} \right)_0 \Delta x_1 + \left(\frac{\partial y}{\partial x_2} \right)_0 \Delta x_2 + O(x^2), \quad (3.21)$$

где $(\partial y / \partial x_i)_0$ — частная производная y по x_i в точке y_0 , а $O(x^2)$ представляет собой члены более высокого порядка. Для достаточно малых отклонений члены высокого порядка пренебрежимо малы по сравнению с линейными членами (членами первого порядка). В данном случае уравнение (3.21) имеет такой же вид, что и уравнение касательной плоскости (3.20). Следовательно, коэффициенты m_1 и m_2 можно интерпретировать как первые производные $(\partial y / \partial x_1)_0$ и $(\partial y / \partial x_2)_0$. И наоборот, линейные члены ряда Тейлора определяют уравнение касательной плоскости в точке y_0 . Следовательно, в непосредственной окрестности точки y_0 касательная плоскость хорошо аппроксимирует поведение критерия y .

3.09. Касательная к линии уровня

Когда производится поиск максимума y , нас интересуют только те комбинации Δx_1 и Δx_2 , для которых

$$\Delta y > 0. \quad (3.22)$$

Объединяя уравнения (3.17) и (3.22), получаем

$$m_1 \Delta x_1 + m_2 \Delta x_2 > 0. \quad (3.23)$$

Уравнение (3.23) является алгебраическим условием того, что приращения Δx_1 и Δx_2 приводят к увеличению y вблизи точки y_0 . В нашем примере неравенство (3.23) имеет следующий вид:

$$0,2 \Delta x_1 + 0,3 \Delta x_2 > 0. \quad (3.24)$$

Это неравенство определяет незаштрихованную область на рис. 3.14. Границей области является прямая $0,2 \Delta x_1 + 0,3 \Delta x_2 = 0$, проходящая через точку $(2,0; 2,0)$; ее наклон в плоскости $x_1 x_2$ равен

$$\frac{dx_2}{dx_1} = \frac{\Delta x_2}{\Delta x_1} = -\frac{2}{3}. \quad (3.25)$$

Геометрически эта линия является проекцией на плоскость x_1x_2 линии пересечения касательной плоскости в точке y_0 с горизонтальной плоскостью $y = y_0$ (в нашем случае $y_0 = 5,70$; см. рис. 3.15).

На основании информации, полученной в первых трех экспериментах, можно определить направления, по

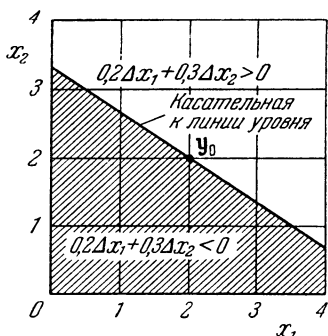


Рис. 3.14. Проекция касательной к линии уровня.

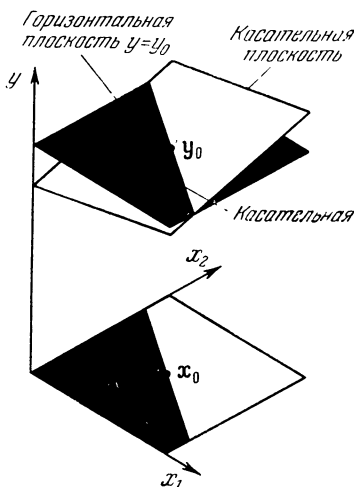


Рис. 3.15. Касательная к линии уровня в пространстве. Уравнение касательной плоскости.

$$y = y_0 + 0,2 \Delta x_1 + 0,3 \Delta x_2$$

которым происходит возрастание y вблизи точки y_0 . Эти направления лежат по одну сторону от прямой

$$m_1 \Delta x_1 + m_2 \Delta x_2 = 0. \quad (3.26)$$

Все направления, ведущие к уменьшению y , лежат по другую сторону прямой. Хотя мы и имеем теперь довольно грубое представление о том, где расположить следующий эксперимент, который должен привести к значительному увеличению y и поэтому должен быть на достаточном расстоянии от точки y_0 , однако точное решение мы вынуждены оставить до следующих разделов, где будут рассмотрены стратегии миттельшпиля. Далее будет видно, что линейная аппроксимация, кажущаяся довольно несовершенной, тем не менее присуща всем рассматриваемым методам поиска.

В этом разделе необходимо изложить еще два понятия. Первое имеет отношение к нелинейной (высокого порядка) аппроксимации, а второе связано с обобщением уже полученных результатов на случай функций, зависящих более чем от двух независимых переменных.

3.10. Нелинейная аппроксимация

Линейная аппроксимация в уравнениях (3.20) или (3.21) применима только для малых отклонений Δx_1 и Δx_2 , когда членами второго и более высокого порядка в разложении Тейлора можно пренебречь. Чтобы получить аппроксимацию, применимую в более широкой области, целесообразно использовать некоторые нелинейные члены высокого порядка.

Разложение в ряд Тейлора с точностью до членов второго порядка имеет вид

$$\Delta y = \left(\frac{\partial y}{\partial x_1} \right) \Delta x_1 + \left(\frac{\partial y}{\partial x_2} \right) \Delta x_2 + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 y}{\partial x_1^2} \right) (\Delta x_1)^2 + \right. \\ \left. + 2 \left(\frac{\partial^2 y}{\partial x_1 \partial x_2} \right) (\Delta x_1) (\Delta x_2) + \left(\frac{\partial^2 y}{\partial x_2^2} \right) (\Delta x_2)^2 \right] + O(\Delta x^3). \quad (3.27)$$

Все частные производные в этом разложении определяются в точке y_0 , а $O(\Delta x^3)$ представляет члены третьего и более высокого порядка от Δx . Вводя обозначения

$$m_{jk} = \left(\frac{\partial^2 y}{\partial x_j \partial x_k} \right)_0, \quad j, k = 1, 2, \quad (3.28)$$

мы получим выражение

$$\Delta y = m_1 \Delta x_1 + m_2 \Delta x_2 + \frac{1}{2} [m_{11} (\Delta x_1)^2 + \\ + 2m_{12} (\Delta x_1) (\Delta x_2) + m_{22} (\Delta x_2)^2], \quad (3.29)$$

в котором посредством эксперимента необходимо определять пять констант вместо двух для линейного случая. Это означает, что необходимо дополнительно провести три эксперимента, чтобы аппроксимировать поверхность отклика в точке y_0 квадратичной функцией. Эти эксперименты лучше провести в другой точке, расположенной выше на поверхности отклика, поскольку размер области локальной

квадратичной аппроксимации редко бывает намного обширнее, чем размер области простой линейной аппроксимации. Нецелесообразно проводить детальное исследование окрестности точки y_0 , так как она выбирается более или менее случайно и, вероятно, находится далеко от максимума. Когда же при поиске проводятся последние эксперименты вблизи точки максимума, можно применить аппроксимацию высокого порядка, как это предлагают Бокс и Вильсон ¹⁾.

В дебюте и миттельшпиле линейная аппроксимация дает достаточно хорошие результаты.

3.11. Обобщение на многомерный случай

Легко провести обобщение полученных результатов на случай функции многих независимых переменных, используя уже развитые алгебраические понятия. Пусть $y(x_1, x_2, \dots, x_k)$ — функция k независимых переменных, $x_0 = (x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0k})$ — точка, в которой размещается первый эксперимент, а y_0 — его результат. Определим отклонения

$$\Delta x_j = x_j - x_{0j}, \quad j = 1, 2, \dots, k, \quad (3.30a)$$

$$\Delta y = y - y_0, \quad (3.30b)$$

и пусть m_j — производная $(\partial y / \partial x_j)$ в точке y_0 . Линейная аппроксимация y в окрестности точки y_0 определяется выражением

$$\Delta y = \sum_{j=1}^k m_j \Delta x_j. \quad (3.31)$$

Чтобы определить коэффициенты m_j , необходимо произвести k экспериментов (не считая эксперимента в точке x_0) и решить одновременно k уравнений для констант m_j :

$$\Delta y_i = \sum_{j=1}^k \Delta x_{ij} m_j, \quad i = 1, 2, \dots, k, \quad (3.32)$$

¹⁾ См. ссылку на стр. 102.

при известных Δx_{ij} и Δy_i в каждом эксперименте. Эти вычисления можно упростить, принимая $\Delta x_{ij} = 0$ для всех $i = j$, и в этом случае из уравнения (3.32) можно получить уравнения

$$m_i = \frac{\Delta y_i}{\Delta x_{ii}}, \quad i = 1, 2, \dots, k. \quad (3.33)$$

При известных m_j комбинации приращений Δx_j , дающих возрастание y в окрестности y_0 , должны удовлетворять следующему неравенству:

$$\sum_{j=1}^k m_j \Delta x_j > 0. \quad (3.34)$$

Если рассматривать $(k + 1)$ -мерное пространство переменных y и x_j , то уравнение (3.31) описывает k -мерную гиперплоскость, касательную к поверхности отклика в точке y_0 . Граница между областью повышения, в которой происходит возрастание y , и областью понижения, в которой происходит его уменьшение, представляет собой, очевидно, $(n - 1)$ -мерную гиперплоскость, удовлетворяющую уравнению

$$\sum_{j=1}^k m_j \Delta x_j = 0. \quad (3.35)$$

ЭНДШПИЛЬ

Теперь было бы естественным начать изучение миттельшпиля, который должен привести нас в окрестность искомого оптимума. Оставим эту тему до следующей главы и перейдем прямо к обсуждению тактики эндшпиля, потому что она имеет много общего с только что рассмотренным дебютом. И дебют и эндшпиль связаны с локальными исследованиями, причем в дебюте проводится линейное изучение вблизи произвольной точки, а в эндшпиле — нелинейные исследования в окрестности оптимума. Таким образом, некоторое расширение уже известных нам понятий позволит сразу же построить тактику эндшпиля. Более того, некоторые из геометрических и алгебраических представлений, связанных с нелинейными исследованиями, будут полезны и при рассмотрении тактики миттельшпиля.

3.12. Нелинейные исследования

Бокс и Вильсон ¹⁾ отмечали, что зачастую одного лишь нахождения оптимума недостаточно; необходимо также знать, как ведет себя зависимая переменная в соседних точках. Поскольку в точке экстремума касательная плоскость будет горизонтальной, то в этой точке важно учесть кривизну, асимметрию и другие нелинейные показатели функции y ; поэтому в окрестности оптимума неизвестная функция аппроксимируется квадратичным выражением или выражением более высокой степени.

Если даже исследователя совсем не интересует поведение функции в окрестностях вершины, то все же необходимо тщательно проверить предполагаемый оптимум, так как вблизи него могут быть точки с лучшим значением критерия. Ниже мы рассмотрим пример, в котором аппроксимация квадратичным выражением позволяет обнаружить наличие некоторых особенностей, которые в ином случае учесть не удастся.

В первую очередь мы определим кривизну, оставив в разложении Тейлора только члены первого и второго порядков. Если функция асимметричная, то могут потребоваться и кубические члены. Это выяснится в дальнейшем при сравнении квадратичной аппроксимации с фактическими наблюдениями. Бокс ²⁾ указывал на опасность аппроксимации выражения высокой степени полиномом низкой степени. При использовании нелинейной аппроксимации с ростом степени объем работы быстро возрастает, поэтому хороший выбор алгебраического представления функции, как указано в главе 1, вполне оправдывает те дополнительные исследования, которые проводятся перед началом поиска.

Далее мы на частном примере изложим основы нелинейного исследования. Пусть требуется найти такое сочетание температуры и объема химического реактора, при котором обеспечивается максимальная прибыль с учетом потерь продукта и затрат на строительство. Была спроектирована

¹⁾ См. ссылку на стр. 102.

²⁾ G. E. P. Box, The exploration and exploitation of response surfaces, *Biometrics* 10 (1954), p. 16.

сложная математическая модель, связывающая прибыль (y долларов в день) с логарифмом температуры в градусах Цельсия (x_1 , безразмерная величина) и объемом реактора (x_2 , в кубических футах). Логарифмическая зависимость была выбрана потому, что согласно известному соотношению Аррениуса ¹⁾ в химической кинетике скорость реакции является экспоненциальной функцией температуры. Использование логарифма дает выражение, которое можно аппроксимировать полиномом невысокой степени.

В результате поиска, стратегия которого будет рассмотрена в главе 4, было найдено, что оптимум находится вблизи точки (2,45; 8,5), где наивысшая величина прибыли оказалась равной 756 долларов в день. Ежедневные прибыли в четырех ближайших точках следующие: $y(2,49; 8,5) = 574$; $y(2,45; 8,9) = 742$; $y(2,41; 8,5) = 646$; $y(2,45; 8,1) = 702$. Если расположить эти точки на плоскости x_1x_2 , то на графике пять точек образуют крест. Как мы увидим в главе 4, многие стратегии поиска вблизи предполагаемого оптимума дают аналогичную картину.

3.13. Аппроксимация без учета взаимосвязи

Уравнение (3.27) определяет ряд Тейлора для функции двух переменных, если пренебречь членами выше второго порядка:

$$\Delta y = m_1 \Delta x_1 + m_2 \Delta x_2 + \frac{1}{2} [m_{11} (\Delta x_1)^2 + 2m_{12} (\Delta x_1) (\Delta x_2) + m_{22} (\Delta x_2)^2]. \quad (3.36)$$

Это выражение содержит пять констант, но для их определения имеются только четыре точки (не считая базовой, которая является центром креста). Базовая точка имеет координаты (2,45; 8,5). Необходимо либо провести еще одно наблюдение, либо отбросить один член. Сначала пренебрежем членом, в который входят Δx_1 и Δx_2 . Тогда

$$\Delta y = m_1 \Delta x_1 + m_2 \Delta x_2 + \frac{1}{2} [m_{11} (\Delta x_1)^2 + m_{22} (\Delta x_2)^2]. \quad (3.37)$$

¹⁾ Т. Р. Мэ Кутчеон, Н. Селтз and J. C. Warner, General Chemistry (Princeton: D. Van Nostrand Co., Inc., 1939), p. 236. [См. также Н. Н. Семенов, О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности, Изд-во АН СССР, 1958. (Прим. ред.)]

Эта аппроксимация будет использована для оценки положения истинного оптимума; ее качество должно быть проверено с помощью контрольных измерений. Если аппроксимация недостаточно хороша, то отброшенным слагаемым пренебрегать нельзя, и для определения констант в этом случае придется использовать дополнительную точку.

Крестообразное расположение точек позволяет значительно упростить вычисления. Рассмотрим сначала константы m_1 и m_2 , связанные с переменной x_1 . Обозначим базовую точку $(2,45; 8,5)$ через x_0 . Пусть, далее, x_{11} — точка с координатами $(2,49; 8,5)$, которая находится справа от x_0 ; x_{12} — точка с координатами $(2,41; 8,5)$, которая находится слева от x_0 . Обозначив через Δy_{ij} разность $y(x_{ij}) - y(x_0)$, а через Δx_{ij} — расстояние от базовой точки до точки x_{ij} , мы можем написать уравнение (3.37) в следующем виде:

$$\Delta y_{11} = m_1 \Delta x_{11} + \frac{1}{2} m_{11} (\Delta x_{11})^2, \quad (3.38a)$$

$$\Delta y_{12} = m_1 \Delta x_{12} + \frac{1}{2} m_{11} (\Delta x_{12})^2. \quad (3.38b)$$

Но $\Delta x_{12} = -\Delta x_{11}$, поэтому последнее уравнение можно переписать следующим образом:

$$\Delta y_{12} = -m_1 \Delta x_{11} + \frac{1}{2} m_{11} (\Delta x_{11})^2. \quad (3.38b)$$

Суммирование уравнений (3.38a) и (3.38b) дает

$$m_{11} = \frac{\Delta y_{11} + \Delta y_{12}}{(\Delta x_{11})^2}. \quad (3.39a)$$

Вычитая уравнение (3.38b) из уравнения (3.38a), получаем

$$m_1 = \frac{\Delta y_{11} - \Delta y_{12}}{2\Delta x_{11}}. \quad (3.39b)$$

Вообще, если k независимых переменных расположены так, что имеются точки x_{i1} и x_{i2} такие, что

$$x_{i1} = x_0 + \Delta x_{i1} e_i \quad (3.40)$$

и

$$x_{i2} = x_0 - \Delta x_{i1} e_i, \quad (3.41)$$

где e_i — единичный вектор, то

$$m_{ii} = \frac{\Delta y_{i1} + \Delta y_{i2}}{(\Delta x_{i1})^2} \quad (3.42a)$$

и

$$m_i = \frac{\Delta y_{i1} - \Delta y_{i2}}{2\Delta x_{i1}}. \quad (3.42b)$$

В рассматриваемом примере уравнение аппроксимации имеет вид

$$\Delta y = -900\Delta x_1 + 50x_2 - 90\,000(\Delta x_1)^2 - 200(\Delta x_2)^2. \quad (3.43)$$

Продифференцируем это квадратичное выражение соответственно по Δx_1 и Δx_2 и приравняем производные нулю. Совместное решение этих двух уравнений даст координаты оптимума Δx_1^* и Δx_2^* . Итак,

$$\frac{\partial y}{\partial \Delta x_1} = -900 - 180\,000 \Delta x_1 = 0,$$

откуда $\Delta x_1^* = -0,005$. Аналогично $\Delta x_2^* = 0,125$.

Вообще для крестообразной схемы

$$\Delta x_i^* = \frac{m_i}{2m_{ii}} = \frac{(\Delta y_{i2} - \Delta y_{i1}) \Delta x_{i1}}{\Delta y_{i2} + \Delta y_{i1}}. \quad (3.44)$$

Анализ уравнения аппроксимации показывает, что оптимум действительно находится вблизи точки x_0 . Поэтому можно прийти к заключению, что оптимум найден. Было бы полезно, однако, проверить сначала другую точку. Кажется, что для проверки можно выбрать точку, в которой находится предсказанный оптимум. Но эта точка расположена так близко к точке x_0 , что ее трудно использовать для дальнейшего улучшения аппроксимации, если уравнение (3.43) окажется неточным. Будем поэтому проверять точку (2,41; 8,9), которая получена уменьшением x_1 на величину Δx_{11} и увеличением x_2 на Δx_{21} . Новая точка расположена в одном квадранте с точкой предсказанного оптимума и выбрана так, чтобы было удобно производить последующие вычисления. Из уравнения (3.43) можно определить, что прибыль в новой точке будет 636 долларов, т. е. на 120 долларов в день меньше, чем в лучшей

точке. Фактически же оказывается, что прибыль составляет только 490 долларов в день. Следовательно, взаимное влияние переменных настолько существенно, что эту простую модель использовать нельзя.

3.14. Взаимосвязь

Итак, аппроксимация функции y уравнением (3.37) не подходит, поэтому воспользуемся уравнением (3.36) с дополнительным членом $m_{12}(\Delta x_1)(\Delta x_2)$, учитывающим взаимосвязь. К счастью, вычисления при этом остаются достаточно простыми, так как в уравнениях, подобных (3.38), член взаимосвязи будет равен нулю и уравнения (3.39) для m_i и m_{ii} остаются справедливыми. Поэтому вычисленные ранее числовые значения m_1 , m_2 , m_{11} и m_{22} не изменятся. Чтобы вычислить m_{12} , нужно подставить величины известных констант в уравнение (3.27) для новой точки \mathbf{x}^{12} :

$$\Delta y^{12} = -264 = -900(-0,14) + 50(0,4) - \\ - 90\,000(0,14)^2 - 200(0,4)^2 + m_{12}(-0,04)(0,4), \quad (3.45)$$

откуда $m_{12} = 9000$, и ясно, что этой величиной пренебречь нельзя.

Прежде чем найти оптимум, соответствующий новому выражению, определим члены взаимосвязи, когда имеется более двух независимых переменных. Для k переменных в общем случае будет $k(k-1)/2$ членов взаимосвязи. Чтобы определить все константы, необходимо исследовать столько точек, сколько в уравнении членов взаимосвязи. Чтобы определить коэффициент m_{ij} , зададим новую точку

$$\mathbf{x}^{ij} \equiv \mathbf{x}_0 \pm \Delta x_i \mathbf{e}_i \pm \Delta x_j \mathbf{e}_j, \quad (3.46)$$

где символ \pm показывает, что знак может выбираться произвольно. Уравнение (3.36) для этой точки будет иметь единственную неизвестную m_{ij} , так как все константы m_i и m_{ii} уже определены.

Теперь мы снова определим положение оптимума, дифференцируя уравнение (3.36), которое в данном случае имеет вид

$$\Delta y = 900\Delta x_1 + 50\Delta x_2 - 90\,000(\Delta x_1)^2 + \\ + 9000(\Delta x_1)(\Delta x_2) - 200(\Delta x_2)^2. \quad (3.47)$$

Решение полученной системы двух уравнений имеет вид

$$\Delta x_1^* = -0,01,$$

$$\Delta x_2^* = -0,10.$$

Проверка в соответствующей точке $x^* = (2,44; 8,4)$ подтверждает небольшое увеличение прибыли (на 2 доллара в день), которое следует из уравнения (3.47). Сдвинем систему координат так, чтобы точка x^* совпала с началом координат. Обозначим

$$\Delta \bar{x}_1 \equiv x_1 - x_1^* = \Delta x_1 + 0,01, \quad (3.48a)$$

$$\Delta \bar{x}_2 \equiv x_2 - x_2^* = \Delta x_2 + 0,10. \quad (3.48b)$$

Квадратичное выражение в окрестности действительного оптимума можно получить, используя теорему Тейлора. Первую и вторую производные получим из уравнения (3.47). Известно, что в точке оптимума первая производная равна нулю, а величины вторых производных квадратичного выражения имеют одну и ту же величину, независимо от того, в какой точке они вычисляются. Поэтому

$$\Delta \bar{y} \equiv y - y^* = y - 756 = 90000 (\Delta \bar{x}_1)^2 + 9000 (\Delta \bar{x}_1) (\Delta \bar{x}_2) - 200 (\Delta \bar{x}_2)^2. \quad (3.49)$$

Правая часть этого уравнения называется *гомогенной квадратичной формой* двух переменных, потому что каждый член имеет вторую степень. Для независимых переменных гомогенная квадратичная форма имеет вид

$$\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \Delta \bar{x}_i m_{ij} \Delta \bar{x}_j, \quad (3.50)$$

где m_{ij} — известные константы.

3.15. Вершины и седла

Если точка x^* действительно соответствует максимуму, и члены третьего и высших порядков в ряде Тейлора пренебрежимо малы, то любые изменения $\Delta \bar{x}_1$ и $\Delta \bar{x}_2$ могут только уменьшить прибыль. Другими словами, величина $\Delta \bar{y}$ отрицательна при любых Δx_1 и Δx_2 . Такую функцию называют *отрицательно определенной*. Она имеет эллиптические

линии уровня, центром которых является вершина, как это показано на рис. 3.16, а. Известно, что квадратичные функции могут также давать гиперболические линии уровня, как на рис. 3.16, б. В таком случае точка x^* будет не вершиной, а наивысшей точкой перевала или седлообразной области, из которой некоторые направления ведут вверх, а некоторые вниз. В алгебраическом смысле квадратичная форма для седловой точки будет *неопределенной*,

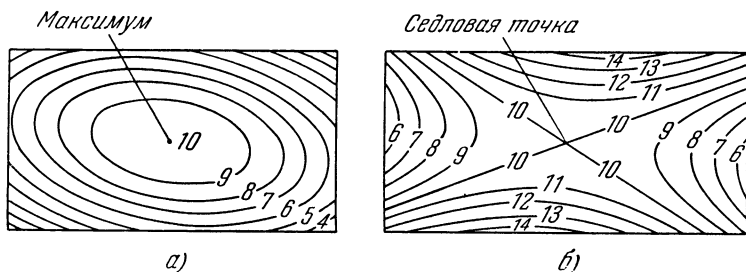


Рис. 3.16. Вершина квадратичной функции и седло: а) отрицательно определенная функция, дающая эллиптические линии уровня; б) неопределенная функция, дающая гиперболические линии уровня.

поскольку величина $\Delta \bar{y}$ отрицательна при одних сочетаниях $\Delta \bar{x}_1$ и $\Delta \bar{x}_2$ и положительна при других. В таком случае необходимо знать, какую форму, — определенную или неопределенную, — задает уравнение (3.49). Если квадратичная форма неопределенная, то желательно определить, в каких точках прибыль выше, чем в точке x^* .

Если члены $(\Delta \bar{x}_1)^2$ и $(\Delta \bar{x}_2)^2$ входят в уравнение с положительными знаками, величину $\Delta \bar{y}$ можно сделать положительной, приравняв нулю ту из переменных, первая степень которой входит в уравнение со знаком минус. При этом член взаимосвязи также станет равным нулю. Любая не равная нулю величина другой переменной, возведенная в квадрат, дает $\Delta y > 0$. Но в нашем примере это не так, и поэтому необходимо использовать более действенные методы.

Существует хорошо известный, хотя и связанный с трудоемкими вычислениями способ нахождения осей квадратичной формы. Такое преобразование называется приведением функции к *каноническому* виду. Оно состоит в нахождении всех корней уравнения, степень которого равна

числу независимых переменных. Если все корни отрицательны, квадратичная форма является отрицательно определенной, наличие хотя бы одного положительного корня

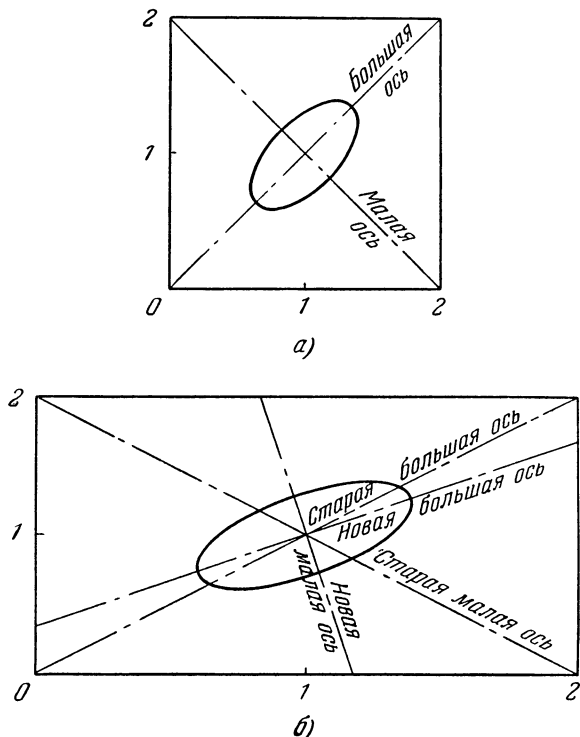


Рис. 3.17. Деформация эллипса вследствие изменения масштаба: а) старые координаты; б) новые координаты.

означает неопределенность. На первый взгляд такое преобразование кажется привлекательным, так как в результате многочисленных вычислений (решения k систем уравнений, каждая из которых содержит k уравнений с k неизвестными) можно найти направление осей квадратичной формы, которые помогут исследователю отчетливо представить себе функцию. К сожалению, при изменении масштаба любой независимой переменной эллипсы или гипер-

болы искажаются, и приходится вновь преобразовывать функцию к каноническому виду (рис. 3.17).

В обычной евклидовой геометрии понятие канонической формы определено единственным образом, однако в большинстве физических задач, в которых объективно нельзя определить расстояние, это не так. В рассматриваемой задаче приведение квадратичной формы к каноническому виду вряд ли дает большое преимущество, так как единицы измерения объема реактора были выбраны произвольно. Парадоксы, возникающие из того обстоятельства, что графики физических переменных обычно не являются евклидовыми (расстояние не определено), будут подробно рассмотрены в следующей главе. Читатели, которых интересует приведение к каноническому виду, могут при желании прочитать об этом в учебниках по алгебре ¹⁾, теории матриц ²⁾ или экспериментальному проектированию ³⁾.

3.16. Дополнение до квадрата

Существует один способ, позволяющий определить, является ли квадратичная форма эллиптической или гиперболической. Этот способ не сложен, и с его помощью можно определить, как двигаться от седловой точки, чтобы улучшить критерий. Дополнение до квадрата проводится последовательно до тех пор, пока вся квадратичная форма не будет выражена в виде суммы квадратов. После этого проверка определенности функции сводится просто к проверке знаков квадратичных членов. Если все они отрицательны, то квадратичная форма является отрицательно определенной.

Применим способ дополнения до квадрата в нашем примере. Для этого сгруппируем один из квадратичных чле-

¹⁾ G. Birkhoff and S. Mac Lane, A survey of modern algebra (New York: The Macmillan Company, 1953), pp. 275—78.

²⁾ R. A. Frazer, W. J. Duncan and A. R. Collar, Elementary matrices (Cambridge: Cambridge University Press, 1957), pp. 64—69.

³⁾ O. L. Davies, ed., The design and analysis of industrial experiments (New York: Hafner Publishing Co., Inc., 1956), pp. 522—31. [См. также: А. Г. Курош, Курс высшей алгебры, М., Физматгиз, 1963; Ф. Р. Гантмахер, Теория матриц, изд. 2-е, «Наука», М., 1966. (Прим. ред.)]

нов с членом взаимосвязи. После этого к первым двум членам добавим квадрат другой переменной так, чтобы сумма трех членов составляла полный квадрат. Чтобы скомпенсировать эту добавку, то же слагаемое вычтем из квадратичного члена. Выражение для двух переменных в результате этого преобразования сводится к сумме полных квадратов. Проведем указанные преобразования:

$$\begin{aligned}\Delta \bar{y} &= -90\,000 (\Delta \bar{x}_1)^2 + 9000 (\Delta \bar{x}_1) (\Delta \bar{x}_2) - 200 (\Delta \bar{x}_2)^2 = \\ &= -[90\,000 (\Delta \bar{x}_1)^2 - 9000 (\Delta \bar{x}_1) (\Delta \bar{x}_2) + 225 (\Delta \bar{x}_2)^2] + \\ &\quad + 25 (\Delta \bar{x}_2)^2 = - (300\Delta \bar{x}_1 - 15\Delta \bar{x}_2)^2 + 25 (\Delta \bar{x}_2)^2. \quad (3.51)\end{aligned}$$

Квадратичная форма в этом выражении является неопределенной, так как два квадратичных члена имеют различные знаки. Следовательно, точка x^* является не вершиной, а седлом. Выражение имело бы другой вид, если бы мы вначале исключили \bar{x}_2 . Но это не имеет значения, так как нас интересует лишь расположение знаков, которое называется *сигнатурой* функции.

Поскольку точка x^* является седлом, то имеется возможность дальнейшего увеличения прибыли. Для этого необходимо выбрать такое сочетание $\Delta \bar{x}_1$ и $\Delta \bar{x}_2$, при котором Δy в уравнении (3.51) будет положительным. Ради удобства сделаем первый член равным нулю, положив

$$\Delta \bar{x}_2 = 20\Delta \bar{x}_1. \quad (3.52)$$

Так как второй член всегда положителен, то приемлема любая пара величин, удовлетворяющая уравнению (3.52). Пусть $\Delta \bar{x}_1 = 0,02$ и $\Delta \bar{x}_2 = 0,4$. Из уравнения (3.51) можно определить, что в данной точке $\Delta \bar{y} = 4$. Если эта величина подтверждается экспериментом, то поиск необходимо продолжать в том же направлении. Если при выборе противоположных знаков получается такое же улучшение, то это указывает на необходимость проверки двух возможных вершин.

Если эксперименты не подтверждают предсказанных результатов, то приходится использовать кубическое уравнение. Этот случай мы здесь рассматривать не будем. Важно отметить, что направление улучшения прибыли находится на основании тех данных, которые на первый взгляд говорили о невозможности увеличения прибыли. Направление

увеличения можно найти только в том случае, если принять во внимание взаимосвязь переменных. Более простая модель непригодна, так как она содержит только квадратичные члены. На рис. 3.18 показаны линии уровня функции критерия для рассматриваемого примера.

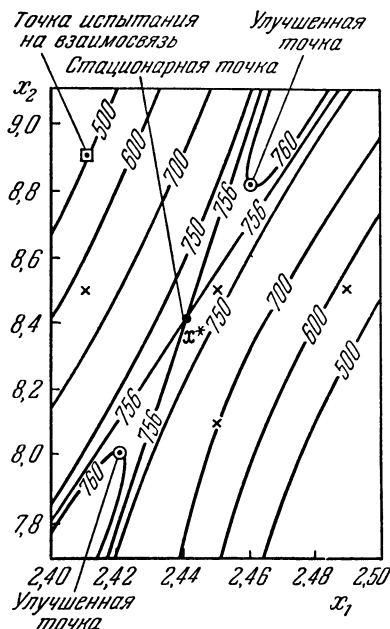


Рис. 3.18. Функция критерия. Крестиками обозначены точки исходного эксперимента.

Процесс дополнения до полного квадрата можно выполнить для любого числа переменных. Каждая итерация этой процедуры дает полный квадрат плюс остаток, включающий на одну переменную меньше, чем было до этого. Например, рассмотрим сведение к квадратичной форме следующей функции трех переменных:

$$\begin{aligned}
 & x_1^2 + 5x_2^2 + 6x_3^2 - 4x_1x_2 + \\
 & \quad + 2x_1x_3 - 8x_2x_3 = \\
 & = [(x_1^2 - 4x_1x_2 + 2x_1x_3) + \\
 & \quad + (4x_2^2 + x_3^2 + 4x_2x_3)] + \\
 & \quad + x_2^2 + 5x_3^2 - 4x_2x_3 = \\
 & = (x_1 - 2x_2 + x_3)^2 + \\
 & \quad + (x_2^2 - 4x_2x_3 + 4x_3^2) + x_3^2 = \\
 & = (x_1 - 2x_2 + x_3)^2 + \\
 & \quad + (x_2 - 2x_3)^2 + x_3^2. \quad (3.53)
 \end{aligned}$$

Здесь сначала были объединены и дополнены до квадрата все члены, содержащие x_1 , так что остаток содержал только x_2 и x_3 . Затем были собраны и снова дополнены до квадрата все оставшиеся члены, содержащие x_2 , причем остаток содержал только x_3 . Эта функция является положительно определенной и свидетельствует о том, что в начале координат находится минимум. Теоретическую основу этого метода развили Биркхоф и Маклейн ¹⁾.

¹⁾ См. ссылку ¹⁾ на стр. 120.

3.17. Эволюционные операции

Условия оптимума могут медленно изменяться со временем. Поэтому экспериментатор должен контролировать положение оптимума, непрерывно проверяя параметры нелинейной аппроксимации, подобранной в окрестности оптимума. Тогда любое смещение оптимума будет немедленно обнаружено.

В большинстве производственных операций широкого масштаба любые наблюдения связаны со значительными ошибками.

Необходимо проделать много повторных измерений, чтобы различить действительные изменения условий оптимума и флуктуации, вызванные случайным шумом. Экспериментирование с большим заводом очень дорого, поэтому контроль за положением оптимума возможен лишь при большом количестве располагаемой информации, относящейся к малым изменениям независимых переменных. Если быть настойчивым и использовать надлежащие статистические способы накопления и анализа информации, то можно обеспечить хорошую работу завода, медленно следуя за перемещением оптимума.

Идея адаптации системы при изменении условий ее работы без большого нарушения динамики и без уменьшения прибыли принадлежит Боксу ¹⁾, который назвал этот процесс процессом эволюционных операций, может быть в честь столетия открытия Чарльза Дарвина, которое отмечалось в то время. Математическая сторона эволюционных операций в данной книге не рассматривается, так как не у всех читателей предполагается достаточная подготовка в области статистики. В то же время этот метод заслуживает особого внимания, так как он проявил себя с положительной стороны при промышленной оптимизации. Его основные идеи очень близки к тем, которые мы рассмотрели при нелинейной аппроксимации поверхности отклика вблизи оптимума.

¹⁾ G. E. P. Box, Evolutionary operation: a method for increasing industrial productivity. Appl Statist. 6 (1957), pp. 81—101.

ГЛОБАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

Все стратегии поиска максимума предусматривают использование информации, получаемой из локальных экспериментов, для определения положения областей, в которых величина отклика выше. Новые эксперименты должны ставиться именно в этих областях, причем каждая новая группа экспериментов будет расположена на поверхности отклика выше предшествующей. Прежде чем детально описать различные методы поиска, уместно задать вопрос, при каких условиях процедуры подобного типа будут всегда приводить нас к вершине.

Чтобы ответить на этот вопрос, необходимо рассмотреть такие глобальные свойства поверхностей, как унимодальность и вогнутость, которым в дальнейшем будет дано точное определение. Термин *глобальное свойство*, заимствованный из дифференциальной геометрии ¹⁾, означает любое свойство, общее для всех точек поверхности, которое может рассматриваться как характеристика всей поверхности в целом. С другой стороны, *локальное свойство*, например наклон касательной плоскости, может меняться от точки к точке. Ниже излагается процедура поиска, которая включает переход от одной группы локальных экспериментов к другой, причем измерение локальных наклонов касательных используется в сочетании с известными (или с предполагаемыми) глобальными свойствами. По этой причине целесообразно рассмотреть некоторые важные глобальные свойства.

3.18. Траектории и параметрическое представление

Прежде чем перейти к рассмотрению глобальных свойств, введем понятие траектории в области эксперимента. Под траекторией из точки **a** в точку **b** в области эксперимента будем понимать любую непрерывную кривую с конечными точками **a** и **b**, которая целиком лежит в области экспери-

¹⁾ Dirk J. Struik, Lecture on classical differential geometry. Reading, Mass: Addison-Wesely Publishing Co., Inc., 1950. [См. также С. П. Фимиков, Курс дифференциальной геометрии, М., Гостехтеориздат, 1952. (Прим. ред.)]

мента. Можно считать, что такая траектория образуется при движении некоторой точки из **a** в **b**. В качестве такой движущейся точки удобно выбрать центр ряда последовательных локальных исследований, проводимых в процессе поиска.

В качестве примера рассмотрим движение по дуге окружности из точки **a** $\equiv (2, 2)$ в точку **b** $\equiv (1, 3)$ на рис. 3.19. Уравнение окружности с центром в точке $(1, 2)$ имеет вид

$$(x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 = 1. \quad (3.54)$$

Уравнение (3.54), связывающее две переменные, имеет только одну степень свободы. Пусть эта кривая есть результат движения некоторой точки из **a** в **b**. Выразим отдельно координаты x_1 и x_2 в виде функций, зависящих от одного параметра θ , который, пробегая ряд допустимых значений, вычерчивает линию дуги из точки **a** в **b**.

Рассмотрим выражения

$$x_1 = 1 + \cos \theta, \quad (3.55)$$

$$x_2 = 2 + \sin \theta. \quad (3.56)$$

Так как θ изменяется от 0 до $\pi/2$, то все точки четверти окружности вычерчиваются образующей точкой при движении из точки **a**, где $\theta = 0$, в точку **b**, где $\theta = \frac{\pi}{2}$. Выражение каждой координаты кривой с помощью одного параметра называют параметрическим представлением кривой.

Параметрическое представление в случае двух переменных может показаться искусственным. Однако им очень удобно пользоваться, чтобы описывать кривые в многомерном пространстве, так как кривая является одномерным объектом, и задав значение единственного параметра, можно сразу узнать все координаты точки. Сравним представление кривой в параметрической форме с представлением ее

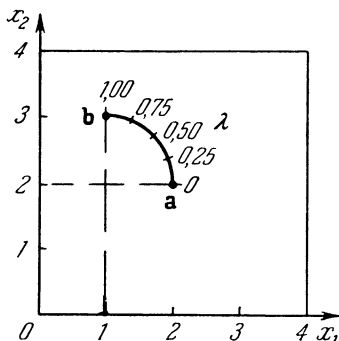


Рис. 3.19. Траектория по окружности.

в виде системы $k - 1$ уравнений, связывающих k независимых переменных. Для определения координаты точки на кривой, заданной системой $k - 1$ уравнений, нужно задаться одной координатой и решить эту систему уравнений, чтобы получить другие координаты. Это бывает трудной, а иногда и неразрешимой задачей. Другое преимущество параметрической формы состоит в том, что она позволяет нам определять направление движения вдоль кривой. Так, положительное (отрицательное) направление есть просто направление, в котором параметр возрастает (убывает).

Имеется много способов задания кривой в параметрической форме. Для простоты будем всегда использовать в качестве параметра длину кривой, измеряемую от начальной точки **a**. Чтобы нормировать параметр λ , определим его как расстояние (вдоль кривой) от точки **a**, поделенное на все расстояние (вдоль кривой) от точки **a** до конечной точки **b**. Таким образом, значение параметра λ в точке представляет долю длины кривой до рассматриваемой точки. Для дуги окружности на рис. 3.19 параметр λ задается выражением $\theta\pi/2$, где θ — угловой параметр уравнений (3.55) — (3.56). Параметрическое представление в этом случае имеет вид

$$x_1 = 1 + \cos \frac{\lambda\pi}{2}, \quad (3.57)$$

$$x_2 = 2 + \sin \frac{\lambda\pi}{2}, \quad (3.58)$$

причем $0 \leq \lambda \leq 1$. Легко проверить, что параметр λ равен нулю в точке **a** и единице — в точке **b**. Не касаясь общих вопросов представления кривых в параметрической форме, мы все же рассмотрим, как представить в параметрическом виде уравнение прямой, что пригодится нам в дальнейшем.

Пусть **a** и **b** — две точки в пространстве n измерений, и пусть **x** — любая точка на прямой, проходящей через **a** и **b**. Координаты этих точек можно записать следующим образом:

$$\mathbf{a} \equiv (a_1, a_2, \dots, a_n), \quad (3.59)$$

$$\mathbf{b} \equiv (b_1, b_2, \dots, b_n), \quad (3.60)$$

$$\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (3.61)$$

Параметрическое представление прямой, проходящей через точки **a** и **b**, имеет вид

$$x_j = a_j + (b_j - a_j) \lambda \quad \text{для всех } j. \quad (3.62)$$

Это эквивалентно векторному уравнению

$$\mathbf{x} - \mathbf{a} = \lambda (\mathbf{b} - \mathbf{a}). \quad (3.63)$$

Когда λ пробегает значения от нуля до единицы, \mathbf{x} движется по прямой, образуя все точки между **a** и **b**. Точки, находящиеся за точкой **b**, соответствуют значениям λ , большим единицы. Аналогично $\lambda < 0$ для точек, находящихся вне рассматриваемого интервала со стороны точки **a**. На рис. 3.20 показано, как изменяется λ вдоль прямой, проходящей через точки (2, 2) и (1, 3) на плоскости.

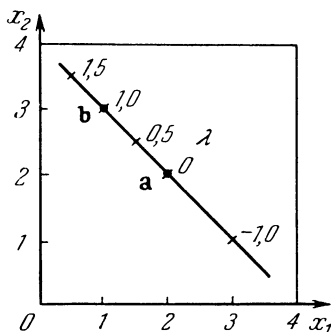


Рис. 3.20. Прямолинейная траектория.

3.19. Унимодальность

В предыдущем разделе было дано определение траектории и показано, как можно выразить движение по ней.

Теперь можно рассмотреть, как меняется значение y вдоль траектории. Критерий y является функцией координат эксперимента в точке \mathbf{x} , которые в свою очередь можно выразить посредством параметра λ :

$$y(x_1(\lambda), x_2(\lambda), \dots, x_k(\lambda)) = y(\lambda). \quad (3.64)$$

Поскольку y зависит только от одного параметра λ , можно заимствовать понятие унимодальности из теории одномерного поиска, которая развита в предыдущей главе. Пусть m представляет собой максимальную величину y , когда λ пробегает весь диапазон, и пусть λ^* есть значение λ , при котором y достигает максимума. Тогда

$$m \equiv \max_{0 \leq \lambda \leq 1} y(\lambda) \quad (3.65)$$

и

$$y(\lambda^*) \equiv m. \quad (3.66)$$

Пусть λ_1 и λ_2 ($\lambda_1 < \lambda_2$) — два произвольных значения параметра λ на единичном интервале. Тогда y унимодальна на траектории от **a** до **b**, если из неравенства

$$\lambda_2 < \lambda^* \quad (3.67a)$$

следует, что

$$y(\lambda_1) < y(\lambda_2), \quad (3.68)$$

а из неравенства

$$\lambda^* < \lambda_1 \quad (3.69)$$

следует

$$y(\lambda_1) > y(\lambda_2). \quad (3.70)$$

Теперь ясно, как определить унимодальность для функции k переменных. Пусть x^* — точка в области эксперимента, в которой y достигает максимального значения y^* , т. е.

$$y^* = \max_x y(x) \quad (3.71)$$

и

$$y(x^*) \equiv y^*. \quad (3.72)$$

Тогда функция $y(x)$ является унимодальной, если для каждой пары точек **a** и **b** в области эксперимента существует траектория, проходящая из точки **a** через точку x^* в точку **b**, на которой y унимодальна.

Это определение можно сформулировать более просто, если ввести понятие строго возрастающей траектории. Пусть λ_1 и λ_2 — два произвольных значения параметра λ из единичного интервала. Тогда говорят, что траектория строго возрастающая, если из неравенства

$$\lambda_1 < \lambda_2 \quad (3.73)$$

следует

$$y(\lambda_1) < y(\lambda_2), \quad (3.74)$$

т. е. функция $y(x)$ является унимодальной, если для любой точки **a** в области эксперимента найдется строго возрастающая траектория с максимумом в точке x^* . Второе определение эквивалентно первому. Поверхность, линии уровня которой показаны на рис. 3.21, *a*, является унимодальной, а поверхность на рис. 3.21, *б* — нет.

Нетрудно видеть, что при любом методе поиска, приводящем к строго возрастающим траекториям, в конце концов можно достигнуть вершины унимодальной функции, даже в том случае, когда поверхность поиска очень изогнута, как на рис. 3.21, а. С другой стороны, нельзя быть уверенным в успехе поиска, если функция имеет более одной вершины, как это показано на рис. 3.21, б. На этой

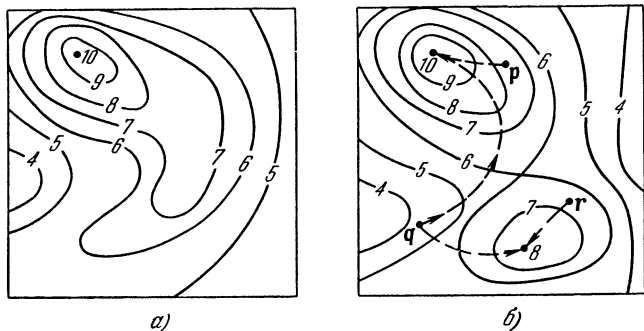


Рис. 3.21. Линии уровня двух поверхностей отклика: а) унимодальная функция; б) бимодальная функция.

бимодальной функции (т. е. функции с двумя вершинами) при поиске по строго возрастающей траектории вид траектории зависит от того, где начат поиск. Поиск, который начинается выше седла, закончится на какой-либо вершине, находящейся внутри того же контура, который окружен линией уровня с седловой точкой ($y = 6$). При поиске из точки **p** будет найдена более высокая вершина, а при начале из точки **г** поиск окончится на более низкой вершине. Поиск, начатый ниже $y = 6$, может сойтись в любой вершине, в зависимости от того, в каком месте будет пересечена линия уровня $y = 6$. Такой точкой является, например, точка **q** на рис. 3.21, б, в которой начинаются две строго возрастающие траектории, одна из которых идет к более высокой вершине, а другая — к более низкой.

Только что рассмотренное определение унимодальности является достаточно широким и годится для любой функции с единственной вершиной независимо от изгибов, оврагов

и гребней. Однако максимизировать функции с таким «плохим» поведением, как на рис. 3.21, *а*, приходится не часто. На практике чаще встречаются сравнительно гладкие функции, подобные функции, показанной на рис. 3.22, *а*.

В дальнейшем будет рассмотрен один метод, который применим только к таким гладким функциям, но не применим ко всем унимодальным функциям, поэтому сейчас мы дадим формальное определение таких функций.

3.20. Строгая унимодальность

Функция называется *строго унимодальной*, если прямая, проведенная из любой точки *а* в области эксперимента к вершине в точке x^* , является возрастающей траекторией. На рис. 3.22 показаны три строго унимодальные функции.

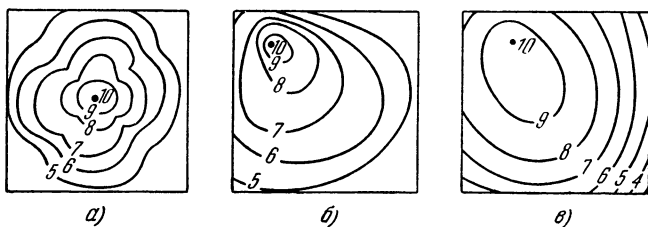


Рис. 3.22. Строго унимодальные функции: *а*) строго унимодальная функция; *б*) линейно унимодальная функция; *в*) вогнутая вниз функция.

Функции с овальными линиями уровня, показанные на рис. 3.22, *б* и *в*, на практике встречаются довольно часто. Например, в эту группу входит функция свободной энергии реагирующих химических веществ. Функции с многими гребнями, подобные функции, показанной на рис. 3.22, *а*, также являются строго унимодальными, хотя такие функции встречаются довольно редко. Поэтому удобно определить более ограниченный класс функций, в который последняя группа не входит. Функция будет называться *линейно унимодальной*, если она унимодальна вдоль любой прямой в области эксперимента (а не только по отношению к тем прямым, которые проходят через вершину).

Следует определить еще более ограниченный класс функций — функции, вогнутые вниз. Функцией, вогнутой вниз вдоль любой прямой в области эксперимента, называется такая функция, что для любых двух точек a и b выполняется неравенство

$$y[a + \lambda(b - a)] \leq y(a) + \lambda[y(b) - y(a)], \quad (3.75)$$

где λ — параметр, определяющий прямую между точками a и b . Функция на рис. 3.22, θ вогнута вниз (сравните ее с функциями, показанными на рис. 3.22, a и b , которые таковыми не являются). Любая вогнутая вниз функция является строго унимодальной (и, конечно, линейно унимодальной).

Итак, в этой главе были рассмотрены некоторые геометрические свойства поверхностей, которые будут полезны в дальнейшем. Попутно было введено понятие траектории в области эксперимента и показано удобство параметрического описания кривых в пространстве. Теперь мы подготовлены к изучению самих методов многомерного поиска.

Упражнения

1. Нарисовать изометрическую проекцию и три ортогональные проекции в области $-2 \leq x_1 \leq 2$, $-2 \leq x_2 \leq 2$ для следующих функций:

- а) $v = x_1 x_2$;
- б) $v = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$;
- в) $v = \exp(-x_1^2 + x_2^2)$;
- г) $v = \ln(x_1^2 + x_1 x_2 - 2x_2^2)$;
- д) $y = x_1^3 + x_2^3$;
- е) $y = x_1^2 x_2^2$.

Указать все максимумы, минимумы и седла.

2. Найти уравнение касательных к линии уровня в точке $(1; -2; 3)$ для функций:

- а) $y = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$;
- б) $y = \exp[x_1^2 + x_2^2 - x_1 + 3x_2 + 2]$;
- в) $y = \ln(x_1^3 + x_1 x_2 + x_2^3)$;
- г) $y = x_1^3 + x_2^3$.

3. Найти уравнение касательной к линии уровня, проходящей через точку $(-2, 1; -1, 4)$, используя следующие данные:

x_1	x_2	x_3	x_4	y
-2	1	-1	4	10,0
-1,9	1	-1	4	10,3
-2	1,1	-1	4	9,8
-2	1	-0,9	4	9,7
-2	1	-1	4,1	10,4

4. Вычислить значение y в предыдущей задаче в точке $(-1, 5; 0, 5; -0, 5; 4, 5)$.

5. Найти уравнение касательной к линии уровня, проходящей через точку $(3, 4)$, используя следующие данные:

x_1	x_2	y
3	4	6,4
3,2	4,2	6,8
2,8	4,1	6,3

6. Найти уравнение касательной к линии уровня, проходящей через точку $(-2, 5)$, используя следующие данные:

x_1	x_2	y
-2	5	11,5
-1,8	5,4	11,8
-2,2	4,6	11,2

7. Построить квадратичную аппроксимацию функции

$$y = \exp [2x_1^2 + 2x_2^2 + x_1 - 5x_2 + 10]$$

в окрестности точки $(0, 1)$. Какова предсказанная точка минимума при данной аппроксимации? Сравните предсказанную величину в этой точке с действительной величиной минимума.

8. По приведенным ниже данным построить квадратичную аппроксимацию с учетом и без учета взаимосвязи. Сравнить стационарные точки, предсказанные с использованием обоих уравнений аппрокси-

мации. Является ли стационарная точка максимумом, минимумом или седлом?

x_1	x_2	y	x_1	x_2	y
1,0	4,0	5,85	2,0	3,0	6,10
1,0	3,0	5,85	2,0	2,0	6,10
1,0	2,0	6,00	3,0	4,0	5,85
2,0	4,0	6,10	3,0	3,0	6,05

9. Указать, какие из следующих форм являются определенными и неопределенными:

- а) $x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2$;
- б) $x_1^2 - 4x_1x_2 + x_2^2$;
- в) $4x_1^2 + 2x_2^2 + 9x_3^2 - 4x_1x_2 + 12x_1x_3 + 8x_2x_3$;
- г) $x_1^4 - 4x_1^2x_2^2 + 5x_2^4$;
- д) $x_1^2 - 4x_1^2x_2 + x_1x_2^2$.

10. Указать, какие из следующих функций являются унимодальными, строго унимодальными, линейно унимодальными или выпуклыми в области $0 \leq x_1 \leq 2$, $0 \leq x_2 \leq 2$:

- а) $x_1^2 + x_2^2$;
- б) $\exp(-x_1^2 - x_2^2)$;
- в) $x_1^2 - x_2^2$;
- г) $x_1^2x_2^2$.

ГЛАВА 4

КАСАТЕЛЬНЫЕ И ГРАДИЕНТ

Просила дева: «Отдохни,
На грудь мне голову склони!»
Но взор его слезой блистал,
И он со вздохом отвечал:
Excelsior!

ЛОНГФЕЛЛО

После каждого локального исследования необходимо решить, в каком направлении двигаться дальше, чтобы улучшить критерий качества. В этой главе описываются две основные стратегии миттельшпиля, которые можно использовать при переходе от одного локального исследования к другому. При этом, как правило, для определения направления следующего шага используется линейная аппроксимация (в геометрическом смысле — касательная плоскость). Оба метода дополняют друг друга, и их можно применять в комбинации.

Прежде всего рассмотрим методы исключения касательными к линии уровня, называемые так потому, что при этом каждая локально измеренная касательная к линии уровня используется в качестве границы, исключающей часть области эксперимента из дальнейшего рассмотрения. В известном смысле они напоминают методы последовательного поиска (глава 2), при которых происходило последовательное уменьшение интервала неопределенности. Методы исключения касательными являются многомерными методами, эффективность которых можно оценить на основании размера оставшейся области неопределенности. Но их эффективность быстро уменьшается с появлением ошибок эксперимента, поэтому их можно использовать только для строго унимодальных функций, причем с ростом числа переменных вычисления становятся чрезвычайно громоздкими.

Затем будут изложены *метод градиента* и *метод наискорейшего подъема*. Эти методы представляют собой новый вид поиска в направлении, перпендикулярном касательным

к линиям уровня. Для некоторых случаев *направление градиента* дает наибольшую скорость изменения критерия на шаг. В отличие от метода касательных к линиям уровня методы градиента можно использовать для любой унимодальной функции, даже при наличии больших ошибок эксперимента. Но в большинстве практических случаев методы градиента допускают до некоторой степени произвольные решения при определении масштабов измерения независимых переменных. Такой произвол препятствует использованию этих методов по причинам, которые сейчас довольно трудны для понимания и поэтому будут рассмотрены в дальнейшем. Градиентный метод обнаруживает тенденцию к колебательности, но в главе 5 мы увидим, какие меры можно принять, чтобы избавиться от этого недостатка.

МЕТОД ИСКЛЮЧЕНИЯ КАСАТЕЛЬНЫМИ К ЛИНИЯМ УРОВНЯ ¹⁾

Описание стратегии миттельшпиля начнем с рассмотрения методов *исключения касательными к линиям уровня*. При этом используются касательные к линиям уровня (см. следующий раздел), последовательно определяемые с помощью локальных исследований строго унимодальных поверхностей, чтобы исключить часть области эксперимента из дальнейшего рассмотрения. Поскольку при этом используется информация, полученная при всех предыдущих локальных исследованиях, то с помощью этих методов можно очень быстро сузить область неопределенности. Эффективности таких методов, однако, вредит ошибка эксперимента, уменьшающая точность, с которой можно построить касательные к линиям уровня.

Начнем с алгебраического и геометрического определения касательной к линии уровня. На рис. 4.1 точка *a* лежит на линии уровня $y = 6$, а касательная к этой линии в точке *a* называется *касательной к линии уровня*. Уравнение касательной к линии уровня можно определить, если учесть, что вдоль линии уровня критерий не изменяется, т. е.

$$\Delta y \equiv 0. \quad (4.1)$$

¹⁾ D. J. Wilde, Optimization by the method of contour tangents, Am. Inst. Chem. Engrs. Journ. 9, 2 (March 1963), pp. 186—90.

Для малых изменений Δy_i при вариации независимых переменных x_i можно пользоваться линейной аппроксимацией, — уравнением (3.31). Поэтому уравнение касательной к линии уровня в точке a определяется уравнением (3.35)

$$\Delta y = \sum_i m_i \Delta x_i = 0, \quad (4.2)$$

где m_i — экспериментально определяемые константы. Когда имеются две независимые переменные, касательная к линии

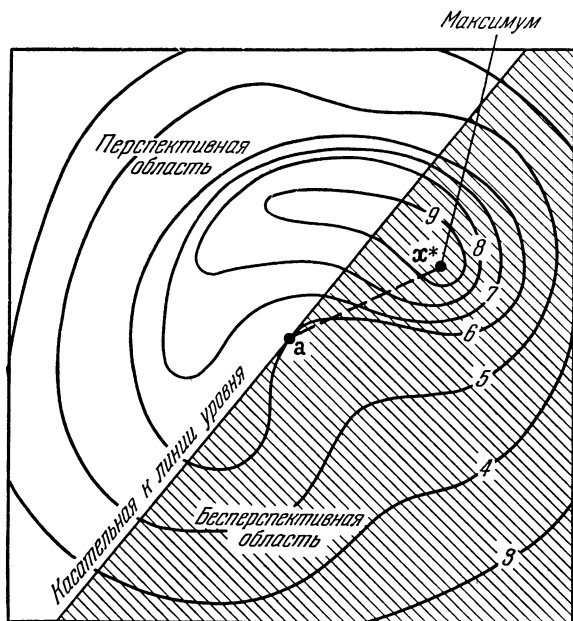


Рис. 4.1. Неприменимость метода к унимодальным функциям.

уровня, как это показано на рис. 4.1, есть линия в двумерной области эксперимента. Вообще n -мерная область эксперимента, определяемая n независимыми переменными, будет разделена касательной к линии уровня (в данном случае $(n - 1)$ -мерной гиперплоскостью) на две подобласти.

4.01. Исключение

Как мы указывали ранее, касательная к линии уровня в точке a образует границу между областью повышения, где касательная плоскость лежит над $y(a)$, и областью понижения, где имеет место обратное соотношение.

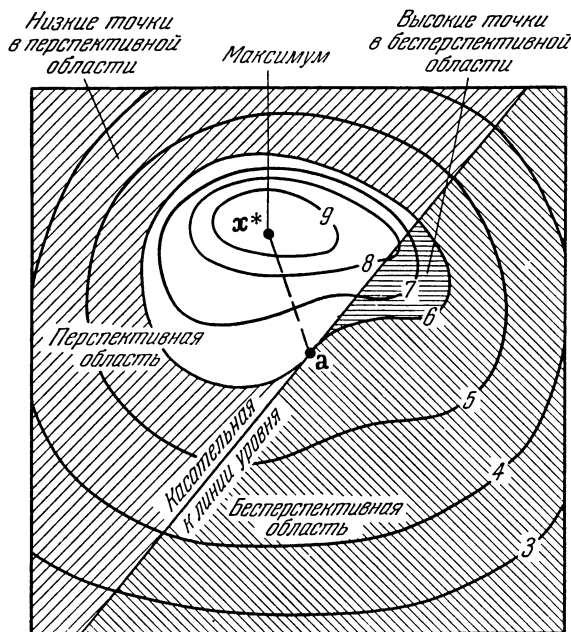


Рис. 4.2. Строго унимодальная функция.

Конечно, могут быть унимодальные функции, максимум которых находится в области понижения, как это показано, например, на рис. 4.1. Если, однако, мы ограничимся строго унимодальными функциями, то, как показано на рис. 4.2, нахождение точки максимума x^* в области понижения невозможно. В этом случае мы можем ограничить наши исследования лишь перспективной областью повышения.

Покажем теперь, что точка максимума x^* для строго унимодальных функций не может лежать с «нижней» стороны касательной к линии уровня, т. е.

$$\sum_i m_i (x_i^* - a_i) \geq 0, \quad (4.3)$$

где x_i^* и a_i — i -е компоненты точек x^* и a . Это утверждение можно доказать от противного. Предположим, что вопреки нашему утверждению, точка максимума x^* лежит с нижней стороны касательной к линии уровня:

$$\sum_i m_i (x_i^* - a_i) < 0. \quad (4.4)$$

Пусть x — любая точка на прямой, проведенной между точками a и x^* . Параметрическое представление точки x имеет вид

$$x_i - a_i = \lambda (x_i^* - a_i) \quad (4.5)$$

для всех i , где λ — параметр, пробегающий значения от 0 до 1:

$$0 \leq \lambda \leq 1. \quad (4.6)$$

Если точка x расположена достаточно близко к точке a , т. е. если λ достаточно мало (но не равно нулю), то величина критерия в точке x задается уравнением (3.31), которое в данном случае имеет вид

$$y(x) - y(a) = \sum_i m_i (x_i - a_i). \quad (4.7)$$

Так как λ положительно, то мы можем написать

$$y(x) - y(a) = \frac{1}{\lambda} \sum_i m_i (x_i^* - a_i), \quad (4.8)$$

откуда на основании предположения (4.4) следует, что

$$y(x) < y(a). \quad (4.9)$$

Но это означает, что критерий не является унимодальным вдоль прямой между точками a и x , а это противоречит нашему предположению, что функция y строго унимодальна. Это противоречие следует из уравнения (4.4),

которое поэтому является неверным. Таким образом, точка максимума x^* строго унимодальной функции не может лежать с нижней стороны касательной к линии уровня.

Из этого следует, что мы должны без колебаний устранить из дальнейшего рассмотрения всю бесперспективную область понижения. Такое отбрасывание целой области на основании только одного локального исследования является столь замечательным, что можно сначала заподозрить, что при этом совершается необоснованная экстраполяция. Заметим, однако, что исключение основано не на экстраполяции, а скорее на глобальном свойстве строгой унимодальности. Как показано на рис. 4.2, бесперспективная область может содержать части, где отклик выше, чем в точке a , точно так же, как в части перспективной области могут быть отклики более низкие, чем в точке a . Но это не меняет сути дела, так как метод исключения с помощью касательной к линии уровня основан на поиске *оптимального* отклика, даже если эксперимент попадает в область с низким откликом. Ниже мы покажем, как можно быстро выбраться из области с низким значением критерия, но сначала мы обсудим, как разместить следующую группу экспериментов в новой, уменьшенной области поиска.

4.02. Размещение новой группы экспериментов

После уменьшения размера области эксперимента необходимо решить, где провести следующую группу экспериментов, чтобы определить новую касательную к линии уровня. Ясно, что следующая группа должна быть где-то внутри желаемой области, чтобы вновь полученная касательная к линии уровня уменьшала размер области эксперимента.

Если последовательные локальные исследования будут выполняться только во внутренних точках, то область неопределенности может быть сделана по желанию сколь угодно малой. Этот факт вместе с унимодальностью критерия гарантирует, что к точке максимума x^* можно подойти сколь угодно близко, если только в распоряжении экспериментатора имеется достаточное количество экспериментов.

Хотя нас устраивает, что поиск по любой последовательности с внутренним расположением точек с течением времени приводит к максимуму, обычно мы хотим получить большие значения отклика как можно скорее. Ничего не зная относительно y , кроме унимодальности, мы не можем использовать прошлые значения y для управления поиском. Но мы знаем кое-что относительно независимых переменных x_i — нам известен вид остающейся области неопределенности. Следовательно, мы можем либо пытаться достигнуть, насколько это возможно, точки максимума x^* , либо сделать область неопределенности насколько возможно малой. В любом случае мы должны поместить каждую новую группу где-то в центре остающейся области неопределенности, ибо точка, лежащая на границе, может оказаться либо далеко от точки x^* , либо дать такую касательную к линии уровня, которая исключает лишь малую область.

Проиллюстрируем задачу размещения группы экспериментов на примере. На рис. 4.3 показана зависимость продуктивности химического реактора от рабочей температуры и давления. Поверхность отклика строго унимодальна. Заметим, что линии уровня не обязательно должны быть овальными и в данном случае оказываются довольно сложными. Предполагается, что экспериментатор ничего не знает о поверхности отклика, за исключением того, что оптимум лежит где-то между 400 и 600° по Фаренгейту и между четырьмя и девятью атмосферами. Ошибкой эксперимента пренебрегают, что при изучении математических моделей, которые слишком сложны для оптимизации прямыми методами, можно считать разумным.

Первая группа экспериментов, обозначенная на рис. 4.3 цифрой 1 в кружке, размещена в центре первоначальной прямоугольной области. Группа состоит из достаточного числа экспериментов (по крайней мере на один больше, чем число независимых переменных, — в данном случае три эксперимента) и позволяет определить касательную к линии уровня в окрестности данной группы. Эта касательная вместе с областью, которую она исключает, показана на рис. 4.3. Остающаяся трапециоидальная площадь, конечно, составляет ровно половину первоначального прямоугольника. Вторую группу помещают в «центр объема» трапеции-

дальной фигуры, где определяют новую касательную к линии уровня. Нахождение положения центра объема, так же как и трех других возможных центральных точек, будет рассмотрено в следующих разделах. Сейчас же мы отметим, что вновь исключается примерно половина оставшейся области. В этом примере процедура продолжается до тех

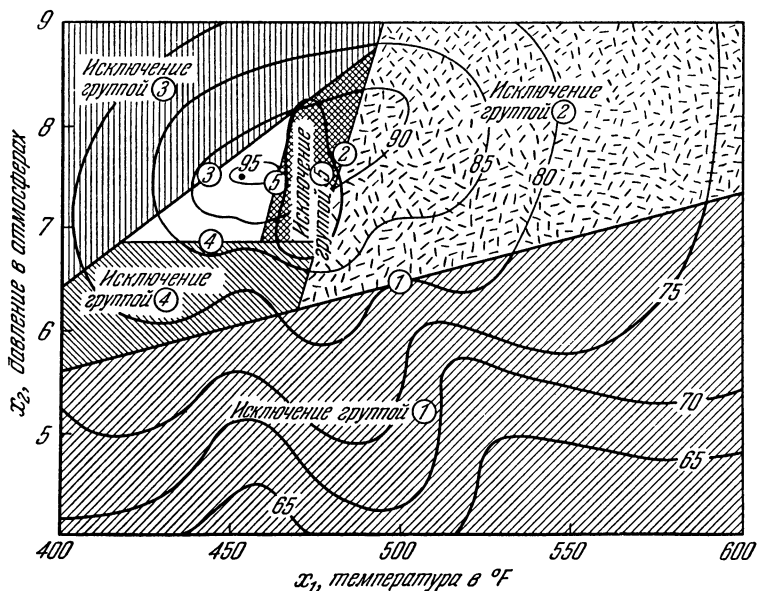


Рис. 4.3. Исключение касательными к линии уровня.

пор, пока не будет использовано пять групп (по крайней мере пятнадцать экспериментов). Поскольку каждая группа уменьшает площадь неопределенности примерно в два раза, то можно ожидать, что окончательная площадь будет равна примерно одной тридцать второй от первоначальной области (3,1%). Фактически окончательная область составляет 3,2% от первоначальной, хотя касательные к линиям уровня лежат под самыми различными углами.

Заметим, что группы 4 и 5 дают выход продукта меньше, чем группа 3. Это не удивительно, потому что группы

размещаются так, чтобы как можно скорее уменьшить область неопределенности, а получаемый выход не принимается во внимание. Как будет показано в дальнейшем, ценой небольшого числа дополнительных экспериментов можно получить такое размещение, что в каждой следующей группе выход оказывается по крайней мере не хуже, чем в предыдущих группах. В то же время необходимо, чтобы при этом область неопределенности эффективно уменьшалась. Теперь же мы вернемся к тому, как располагать последующие группы в «середине» области эксперимента.

Но где находится середина области? Этот вопрос легче задать, чем на него ответить, и в качестве кандидатов можно предложить четыре точки. Прежде чем обвинять нас в нерешительности, давайте отметим, что это столь же трудный вопрос, как и выбор характеристики, определяющей расположение центра статистической функции распределения. В каждом частном случае экспериментатор может использовать среднее значение, медиану или моду в зависимости от желания и возможностей производить вычисления. Так же и мы оставим выбор средней точки целиком на усмотрение читателя, хотя и выясним преимущества и недостатки каждой из возможностей, чтобы дать основу для разумного решения.

Четыре точки мы назовем соответственно *средней точкой* \bar{x} , *минимаксной точкой* x^m , *центром объема* или *медианой* \hat{x} и *центроидом* или *серединой* $\bar{\bar{x}}$. В частном случае, когда область неопределенности — прямоугольник, все четыре точки совпадают. На их положение не влияют масштабы измерения независимых переменных. Это свойство мы полностью оценим только тогда, когда будем изучать методы наискорейшего подъема. Всякий раз, когда область эксперимента выпуклая, т. е. всякая прямая, связывающая две граничные точки, лежит целиком внутри области, все точки лежат внутри этой области. Так как всякая область, целиком ограниченная гиперплоскостями, — выпуклая, то после выполнения нескольких групп экспериментов область неопределенности, как правило, будет выпуклой. И даже когда область не выпуклая, то на практике эти четыре точки чаще всего будут лежать внутри области. Хотя каждую из этих точек можно считать оптимальной в соот-

ветствии с некоторой мерой эффективности поиска, ни одна из них не может считаться неоспоримо лучшей. Поэтому мы ограничимся определением таких точек и рассмотрением их преимуществ и недостатков.

4.03. Средняя точка

Хотя положение средней точки x^* можно определить значительно легче, чем положение любой другой из четырех точек, в то же время эти вычисления основаны на самом тщательном измерении эффективности. Пусть s_i и t_i — соответственно минимальное и максимальное значения, принимаемые переменной x_i в области неопределенности, как показано на рис. 4.4:

$$\begin{aligned} s_i &= \min x_i \\ t_i &= \max x_i. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Расстояния от любой точки x в этой области до крайних точек измеряются параллельно соответствующей оси x_i : $(x_i - s_i)$ и $(t_i - x_i)$. Заметим, что в данном случае расстояния измеряются только параллельно осям. Позднее будет показано, что такие расстояния можно определять, не вводя масштаба, чего мы хотим избежать.

Следующую группу экспериментов будем производить в новой области с экстремальными значениями s'_i и t'_i , причем $s'_i \geq s_i$ и $t'_i \geq t_i$.

В худшем случае, как показано на рис. 4.4, б, в этих неравенствах надо брать знак равенства, и экстремальные значения не изменятся, хотя, конечно, новая область

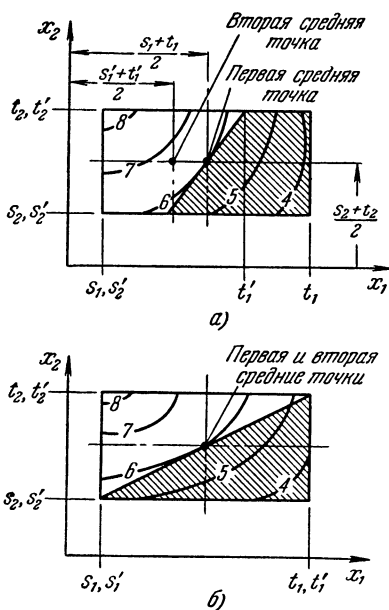


Рис. 4.4. Средняя точка: а) общий случай; б) наихудший случай.

обязательно будет меньше. Таким образом, расстояние $d(x_i)$ от точки x_i до самой удаленной граничной точки будет равно

$$d(x_i) = \max \{ (x_i - s_i), (t_i - x_i) \}. \quad (4.11)$$

Поместим новую группу экспериментов в точку x^* , где это расстояние будет минимальным для каждого x_i . Мы хотим выбрать координаты x_i^* точки x^* так, что

$$d(x_i) = \min_{s_i \leq x_i \leq t_i} d(x_i). \quad (4.12)$$

Ясно, что эта точка лежит на равном расстоянии от крайних точек, т. е. для всех i

$$x_i^* = \frac{(s_i + t_i)}{2}. \quad (4.13)$$

Поэтому x^* называется *средней точкой* области. Положение средней точки определяется очень просто, и кажется довольно очевидным, что следующую группу целесообразно поместить именно в эту точку, если только область не имеет сильных выпуклостей. Однако положение средней точки зависит в основном лишь от граничных точек и не зависит от точек, находящихся в центре области. Хотя положение средней точки инвариантно к изменениям масштаба, однако в общем случае оно изменяется при повороте осей координат. Операция поворота определена только в том случае, когда все переменные имеют одинаковую размерность. Но даже если их размерности не совпадают, то и тогда чувствительность положения средней точки к вращению неудовлетворительна хотя бы с эстетической точки зрения.

4.04. Минимум

Будем теперь рассматривать все точки независимо от их положения, а не только крайние точки, как это делалось выше. Кроме того, потребуем, чтобы гиперобъем (в случае двух измерений — площадь) области неопределенности после каждой группы экспериментов был возможно меньше. Чтобы сформулировать задачу, рассмотрим некоторую внутреннюю точку x и произвольную гиперплоскость (в случае

двух измерений — прямую), которая проходит через эту точку и описывается уравнением

$$\sum m_i \Delta x_i = 0, \quad (4.14)$$

где отклонения Δx_i , как обычно, измеряются от точки x . Эта гиперплоскость разделяет область неопределенности на две подобласти, гиперобъем которых будет зависеть от положения x_i и от констант m_i . Обозначим эти гиперобъемы через $v_1(x, m_i)$ и $v_2(x, m_i)$, причем

$$v_1(x, m_i) \leq v_2(x, m_i). \quad (4.15)$$

Хотя точка x может быть выбрана произвольно, направление гиперплоскости, касательной к линии уровня, заранее предсказать нельзя из-за наличия коэффициентов m_i . Заранее не известно также, где будет продолжаться поиск — в большей или в меньшей подобласти. В худшем случае новая область неопределенности будет иметь гиперобъем $v(x)$, равный

$$v(x) = \max_{m_i} \{v_2(x, m_i)\}. \quad (4.16)$$

Поместим следующую группу экспериментов в минимаксную точку x^m , где максимально возможный гиперобъем минимален:

$$v(x^m) = \min_x \{v(x)\}. \quad (4.17)$$

Минимаксная точка обладает несколькими ценными свойствами. Она нечувствительна не только к изменениям масштаба, но, в отличие от средней точки x^* , и к повороту осей. Более того, в принципе возможно с полной определенностью предсказать, какой максимально возможный гиперобъем остается после данного числа групп экспериментов, поставленных последовательно в минимаксных точках. Этот остаток будет априорной мерой эффективности минимаксного поиска в данной области. Такой априорной меры нельзя указать ни для трех других точек, рассматриваемых в этом разделе, ни для любого из методов поиска по многим переменным, которые будут рассмотрены ниже.

Основной недостаток минимаксной точки состоит в том, что ее довольно трудно вычислить даже для областей простой формы. Поэтому минимаксная точка представляет скорее теоретический, чем практический интерес.

4.05. Медиана

Первая из рассмотренных нами мер эффективности поиска учитывала расстояния только до граничных точек области, в то время как вторая совсем не была связана с понятием расстояния. Теперь мы рассмотрим еще один критерий, в котором учитываются расстояния до каждой точки области, измеряемые параллельно каждой из осей. Пусть $A_i(x)$ — гиперплощадь пересечения области эксперимента с гиперплоскостью, на которой координата x_i постоянна (рис. 4.5). Тогда среднее расстояние $\hat{d}_i(x')$ в направлении x_i , измеряемое от точки x' , определяется выражением

$$\hat{d}_i(x') \equiv \frac{\int_a^b |x_i - x'_i| A_i(x) dx_i}{\int_a^b A_i(x) dx_i}. \quad (4.18)$$

Знаменатель этого выражения представляет собой, конечно, гиперобъем области эксперимента.

Расположим x' так, чтобы минимизировать каждое среднее расстояние. Для этого приравняем нулю производную по x'_i :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx'_i} \left[\int_a^{x'_i} (x'_i - x_i) A_i(x_i) dx_i - \int_{x'_i}^b (x'_i - x_i) A_i(x_i) dx_i \right] = \\ = x'_i \frac{d}{dx'_i} \left[\int_a^{x'_i} A_i(x_i) dx_i \right] + \int_a^{x'_i} A_i(x_i) dx_i - x'_i A_i(x'_i) - \\ - x'_i \frac{d}{dx'_i} \left[\int_{x'_i}^b A_i(x_i) dx_i \right] - \int_{x'_i}^b A_i(x_i) dx_i + x'_i A_i(x'_i) = \\ = \int_a^{x'_i} A_i(x_i) dx_i - \int_{x'_i}^b A_i(x_i) dx_i = 0. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Таким образом, компоненты \hat{x}_i точки \hat{x} , для которой все средние расстояния минимальны, должны удовлетворять уравнению

$$\int_a^{\hat{x}_i} A_i(x_i) dx_i = \int_{\hat{x}_i}^b A_i(x_i) dx_i. \quad (4.20)$$

Так как эти два интеграла определяют гиперобъем подобластей, разделенных гиперплоскостью, для которой $x_i = \hat{x}_i$, мы будем называть точку \hat{x} *медианой* или *центром объема*.

Медиану вычислить легче, чем минимаксную точку, но все же вычисления могут быть довольно сложными, требуя применения метода проб и ошибок, так как каждое значение \hat{x}_i входит в виде предела определенного интеграла. Если имеется быстродействующее вычислительное устройство, то вычисления можно легко запрограммировать. Несмотря на вычислительные трудности, рассмотрение медианы не лишено интереса. Для многих встречающихся на практике задач касательная к линии уровня, проходящая через медиану, делит область на две примерно равные подобласти. Таким образом, медиана часто оказывается довольно близко от минимаксной точки, преимущества которой мы уже рассматривали. Хотя медиана не инвариантна к повороту осей координат, она нечувствительна к изменениям масштаба.

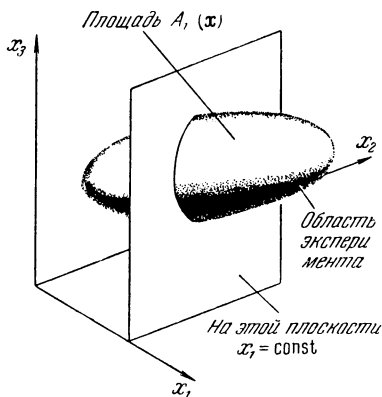


Рис. 4.5. Пересечение области эксперимента с одной из гиперплоскостей.

4.06. Центроид

Если в качестве критерия эффективности использовать среднеквадратичное расстояние $r_i(x)$, можно получить точку, вычислить которую намного легче, чем минимаксную точку или медиану.

Пусть

$$r_i(x') \equiv \left[\frac{\int_a^b (x_i - x'_i)^2 A_i(x_i) dx_i}{\int_a^b A_i(x_i) dx_i} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (4.21)$$

Приравняв нулю производную этого выражения по x'_i , найдем, что \bar{x}_i (величина x'_i , для которой расстояние $r_i(x'_i)$ минимально) определяется выражением

$$\bar{x}_i = \frac{\int_a^b x_i A_i(x_i) dx_i}{\int_a^b A_i(x_i) dx_i}. \quad (4.22)$$

Следовательно, \bar{x} — *центроид* или середина области, а $r_i(\bar{x})$ — радиус вращения. Момент инерции I_i относительно гиперплоскости $x_i = \bar{x}_i$ имеет вид $I \equiv V r_i^2(\bar{x})$, где V — гиперобъем области:

$$V = \int_a^b A_i(x_i) dx_i. \quad (4.23)$$

Из этих выражений видно, что \bar{x} — точка, для которой момент инерции и радиус вращения относительно любой координаты x_i минимальны.

Хорошо известно, что центроид инвариантен не только по отношению к изменениям масштаба, но также и к поворотам осей координат. Таким образом, среднеквадратичное расстояние и момент инерции относительно центроида минимальны. Расчеты, необходимые для определения центроида, намного легче, чем для минимаксной точки или медианы, так как при этом требуется только вычисление определенных интегралов.

4.07. Контрольные эксперименты¹⁾

Предположим, что в середине области из четырех предлагаемых точек была выбрана точка **b**, и пусть **a** — точка, в которой была размещена предыдущая группа экспериментов. Требуется провести в точке **b** не целую группу,

¹⁾ Авторский термин «pilot experiment». (Прим. ред.)

а единственный *контрольный эксперимент*. Если значение критерия y в точке **b** выше, чем в точке **a**, то следующую группу экспериментов можно расположить в окрестности точки **b**, определить новую касательную к линии уровня и продолжать исследования.

Но что делать, если величина y в точке **b** меньше, чем в точке **a**? Например, на рис. 4.6 критерий равен 8,0 в точке **a** и 7,2 — в точке **b**.

Можно, конечно, произвольно поместить следующую группу в точке **b**, полагая, что новая касательная к линии уровня уменьшит область неопределенности, каким бы критерием эффективности мы ни пользовались для определения местоположения точки **b**. Однако против такого подхода имеются практические возражения.

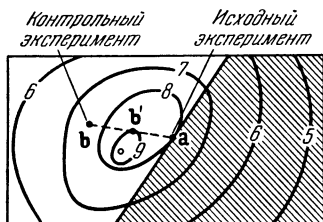


Рис. 4.6. Расположение контрольного эксперимента.

Во-первых, исследования, связанные с оптимизацией, редко являются самоцелью. Обычно они проводятся по просьбе предпринимателя, который хотя и плохо знает методы поиска, но чрезвычайно заинтересован в результатах каждого эксперимента. Верный путь потерять доверие такого человека в том и заключается, чтобы выполнить ряд экспериментов, которые дают более низкое значение y , чем в начале поиска. С его точки зрения такой результат эквивалентен неудаче. Во-вторых, такие исследования часто делаются непосредственно на производстве, где уменьшение y приводит к финансовым потерям. Хотя компания в исследовательских целях и может допустить затраты на один или два отдельных эксперимента, но просить ее постоянно мириться с потерями для постановки целой группы экспериментов было бы слишком много. Более того, концентрировать усилия при поиске в области с низким откликом вообще неразумно.

К счастью, если поверхность отклика является непрерывной, следующую группу всегда можно расположить в такой точке, где y больше, чем в точке **a**. К тому же новую касательную к линии уровня можно провести через контрольную точку **b**, чтобы сохранить все преимущества,

связанные с наличием еще одного эксперимента. Положение нового эксперимента находят при помощи поиска самой высокой точки на линии, соединяющей **a** и **b** (точка **b'** на рис. 4.6).

Рассмотрим, как протекает этот процесс. Так как точка **b** находится в перспективной области, то критерий при движении по прямой из **a** в **b** должен сначала улучшаться. Таким образом, если отклик в точке **b** меньше, чем в точке **a**, то значение y должно проходить через оптимум где-то между **a** и **b**, как показано на рис. 4.7.

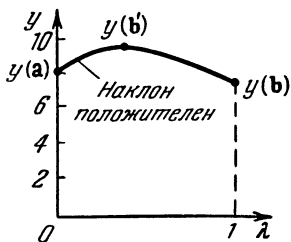


Рис. 4.7. Сечение функции y по прямой ab ; λ — относительное расстояние до точки **a**.

Это показывает, что шаг из точки **a** в точку **b** был слишком велик, так что мы оказались вне пределов желаемой области, как это показано на рис. 4.6 и 4.7. Уменьшив шаг, можно избежать этого.

Чтобы показать более строго, что между точками **a** и **b** имеется по крайней мере один максимум, можно воспользоваться теоремой Вейерштрасса¹⁾. Эта теорема утверждает, что функция, непрерывная на отрезке, всегда дости-

гает максимума внутри или на границе отрезка. Ясно, что этот максимум не может находиться в точке **b**, так как $y(b) < y(a)$. Он не может быть и в точке **a**, потому что наклон $dy/d\lambda$ в точке **a** положителен. Следовательно, максимум может лежать только внутри отрезка. Заметим, что здесь предполагалась только непрерывность, но не унимодальность.

Доказав, что между **a** и **b** должны существовать точки, которые обеспечивают лучший отклик не только по сравнению с **b**, но и по сравнению с **a**, мы тем самым обосновали постановку нового контрольного эксперимента внутри отрезка, прежде чем определить новую касательную к линии уровня. Если новый отклик не столь хорош, как в точке **a**, то можно подвинуться еще ближе к точке **a**, пока в конце концов не будет найдена лучшая точка.

¹⁾ Р. Курант, Д. Гильберт, Методы математической физики, М., Гостехиздат, 1951

Когда точки **a** и **b** находятся на небольшом расстоянии друг от друга, целесообразно находить относительный максимум на линии, соединяющей эти точки, как в точке **b'** на рис. 4.6. В такой точке производная $dy/d\lambda$ делается равной нулю (см. рис. 4.7). Это означает, что через эту точку проходит касательная к линии уровня. Если разместить группу экспериментов в точке **b'**, то можно утверждать, что следующая гиперплоскость, касательная к линии уровня, пройдет через точку **b**. Это выгодно, потому что любая гиперплоскость, проходящая через **b**, отсекает значительную часть остающейся области эксперимента. Продолжая этот процесс, мы можем быть уверены, что положение следующей группы даст более высокое значение критерия, чем в точке **a**, и, кроме того, получим касательную к линии уровня, которая значительно уменьшает область неопределенности.

Итак, в заключение отметим, что если отклик в точке **b** выше, чем в точке **a**, то следующую группу экспериментов надо размещать в точке **b**. Если же это не так, то следует искать локальный максимум на этой линии, чтобы следующая группа экспериментов дала хорошие значения критерия и привела к существенному уменьшению области неопределенности.

Этот процесс иллюстрируется рис. 4.8, на котором центр площади неопределенности, оставшейся после группы 3, помечен квадратиком с цифрой 3'. Первый контрольный эксперимент, помеченный кружком с цифрой 4, дает выход продукта 92%, тот же самый, что и в точке 3. Это дает основание предположить, что на участке между точкой 3 и этим экспериментом существует более высокая точка. Поэтому четвертая группа ставится в точке 4. В рассматриваемом примере имеются только две независимые переменные, поэтому новая касательная к линии уровня совпадает с линией, проходящей через точки 3 и 3'. Центр новой области неопределенности помечен квадратиком без цифры. Эксперимент в этой точке дает выход только 91%, т. е. ниже, чем в кружке с цифрой 4, поэтому целесообразно расположить опытный эксперимент в кружке с цифрой 5. В данной точке выход равен 93%, т. е. имеется явное улучшение. Поэтому между точками 5 в кружке и 4 в квадрате должны быть точки с лучшим выходом. Следующий конт-

рольный эксперимент в точке, обозначенной треугольником, также дает выход 93%. Это свидетельствует о том, что точка с более высоким выходом лежит между двумя контрольными экспериментами. В этом примере экспериментов больше не

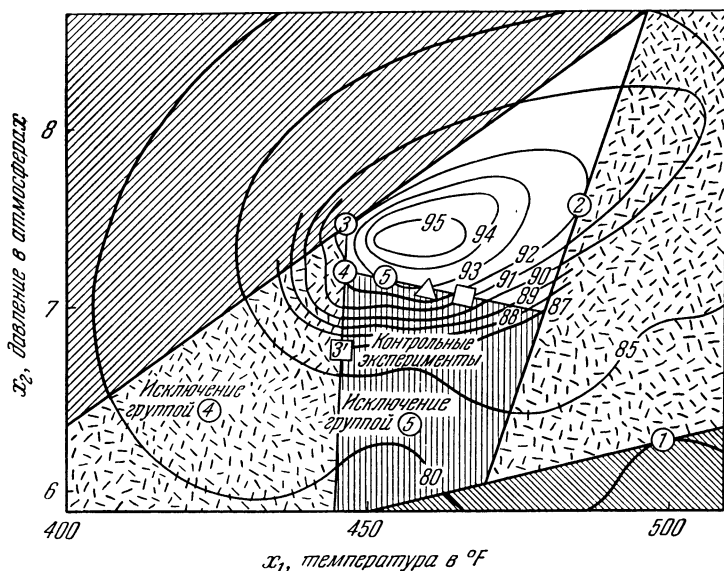


Рис. 4.8. Производительность химического реактора.

проводилось, так как предполагалось, что разрешающую способность увеличить нельзя. Таким образом, следующую группу экспериментов можно было бы проводить либо в точке 5 в кружке, либо в треугольнике. Заметим, что первый контрольный эксперимент был помещен в соответствии с рядом Фибоначчи, на трети расстояния от точки 4 в кружке.

4.08. Выводы

Метод поиска исключения касательными к линии уровня можно связать с методом Кифера, если видоизменить его так, чтобы в процессе поиска критерий только возрастал или по крайней мере не уменьшался. Для успешного при-

менения данного метода требуется строгая унимодальность поверхности отклика и малые ошибки эксперимента. Метод не зависит от выбора масштабов измерения, а экстраполяции можно избежать, если использовать глобальное свойство строгой унимодальности.

ГРАДИЕНТ И ПОДЪЕМ

Рассмотрим довольно частную задачу поиска вершины холма, сильно заросшего лесом и расположенного на низменности. Хотя из-за лесной чащи исследователь не только не видит вершины, но даже не может узнать форму холма, он в конце концов достигнет вершины (в случае унимодальности) просто за счет того, что он непрерывно поднимается вверх. К вершине его приведет любая дорога, но если он торопится, то, вероятно, он будет двигаться по тем направлениям, где наклон холма самый большой, при условии, конечно, что ему не придется при этом взбираться на отвесные скалы.

Эта интуитивно привлекательная идея восхождения по кратчайшей дороге является основой метода поиска, известного под названием *метода градиента*, или *метода наискорейшего подъема*¹⁾. В описанном выше географическом примере направление изменяется от точки к точке, но в каждой точке определяется единственным образом. Это направление совпадает с направлением перпендикуляра к линии уровня, как это показано на рис. 4.9. При методе наискорейшего подъема место следующей группы экспериментов определяется по направлению градиента.

В отличие от метода исключения касательными к линиям уровня метод градиента можно применять для любой унимодальной функции, а не только для строго унимодальных функций. Другое преимущество метода градиента состоит в том, что он может работать и при наличии ошибок

¹⁾ A. C a u c h y, Méthode générale pour la résolution des systemes d'equations simultanées, Compt. rend. Acad. Sci. Paris, 25 (1847), pp. 536—538; G. E. P. B o x and K. B. W i l s o n, On the experimental attainment of optimum conditions, J. Roy. Stat. Soc. B13, 1 (1951). [В отечественной литературе этот метод более известен под названием метода наискорейшего спуска. Это связано с тем, что чаще рассматривается поиск минимума, а не максимума. (Прим. ред.)]

состоящий в том, что в качестве направления наискорейшего подъема можно рассматривать любое из многих направлений. По этой причине мы будем опускать слово «наискорейший», говоря только о методах подъема.

4.09. Градиент

Теперь мы рассмотрим гипотетическую задачу о поиске полезных ископаемых. Предположим, что геологи открыли залежи минеральной руды под плоской низменностью. Чтобы добыть руду на поверхность, необходимо опустить к залежам вертикальный шахтный ствол. Если бы горно-рудная компания полностью знала размеры и форму залежей, то, разумеется, ствол следовало бы разместить так, чтобы туннели шахты не были слишком длинными. Предположим, что компания не располагает этой информацией и должна платить за бурение исследовательских скважин.

Капиталы компании ограничены, поэтому ей нужно начать добычу руды с минимальными предварительными затратами. Прибыль от первой продукции будет использована на то, чтобы углубить ствол шахты и разрабатывать залежи дальше. Таким образом, непосредственная задача состоит в том, чтобы при минимальном числе пробных скважин найти точку, в которой залежи находятся ближе всего к поверхности. Геологи устанавливают прямоугольную систему координат на поверхности с началом в первой открытой скважине. Независимыми переменными в задаче поиска являются x_1 , — расстояние от начала координат на восток, и x_2 , — расстояние от начала координат на север. Скважины, которые бурятся к югу или западу от начала координат, будут иметь отрицательные координаты. При бурении новой пробной скважины регистрируется глубина, на которой впервые показывается руда. Эта глубина вычитается из глубины исходной скважины. Получаемая при этом разность является удобным критерием эффективности y , который становится тем больше, чем ближе залежи расположены к поверхности:

$$y \equiv d_0 - d. \quad (4.24)$$

Цель программы бурения состоит в том, чтобы найти гребень подземного холма, образованного залежами полезных

ископаемых, или, точнее, координаты x_1 и x_2 , где критерий y максимален.

Если геолог рискнет предположить, что в интересующей его области залежи обладают свойством унимодальности, то он сможет применить метод наискорейшего подъема. Это потребует бурения вблизи исходной скважины двух пробных скважин для определения касательной плоскости к подземному холму в окрестности первой скважины. Как было отмечено при обсуждении локальных исследований, таким путем можно получить линейное уравнение касательной плоскости, т. е. уравнение (3.31):

$$\Delta y = m_1 \Delta x_1 + m_2 \Delta x_2, \quad (4.25)$$

которое в данном случае упрощается и принимает вид

$$y = m_1 x_1 + m_2 x_2, \quad (4.26)$$

так как в начале координат $y = 0$.

Для конкретности предположим, что первая исследовательская скважина лежит в 20 футах от исходной скважины и что там обнаружены залежи, залегающие на 5 футов глубже. Тогда $x_1 = (20, 0)$ и $y_1 = -5$. Предположим далее, что следующая скважина находится в 20 футах севернее начала координат, и там залежи находятся на 10 футов ближе к поверхности: $x_2 = (0, 20)$ и $y_2 = 10$. Тогда

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{5}{20} = -0,25, \\ m_2 &= \frac{10}{20} = 0,50. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Уравнение касательной плоскости в окрестности исходной точки x_0 имеет вид

$$y = -0,25x_1 + 0,5x_2. \quad (4.28)$$

На рис. 4.9 показано положение трех скважин и линии уровня касательной плоскости, проведенной через точку x_0 .

Теперь нужно найти направление, в котором критерий будет расти наиболее быстро, в соответствии с требованием метода наискорейшего подъема. Пусть θ — угол, измеренный против часовой стрелки от оси x_1 до луча, проведенного из начала координат. Тогда любая точка может быть задана в полярных координатах посредством расстояния r до на-

чала координат и угла θ от оси до проходящего через нее луча. Направление, в котором на единицу длины приходится максимальное увеличение y , является направлением наискорейшего подъема. Это направление проходит через самую высокую точку любой окружности с центром в начале координат, как показано на рис. 4.9, где радиус выбран равным 20 футам, чтобы в круг попали обе пробные скважины. Эти точки определяют соответственно направление наискорейшего подъема и спуска.

Направления наискорейшего подъема и спуска должны быть найдены по положению точек на круге радиуса 20 футов, где y принимает самое большое и самое малое значения. Поступая таким образом, найдем, что оба направления перпендикулярны касательным к линиям уровня и, следовательно, направлены в противоположные стороны. Координаты точек на окружности можно представить в виде функции угла θ :

$$x_1 = 20 \cos \theta, \quad (4.29a)$$

$$x_2 = 20 \sin \theta. \quad (4.29b)$$

Подставляя эти параметрические выражения в уравнение (4.26), можно выразить величину критерия y на окружности как функцию только угла θ :

$$y = m_1 (20 \cos \theta) + m_2 (20 \sin \theta). \quad (4.30)$$

Максимум y соответствует углу, при котором производная $dy/d\theta$ равна нулю:

$$\frac{dy}{d\theta} = -m_1 (20 \sin \theta) + m_2 (20 \cos \theta) = 0, \quad (4.31)$$

Вместо того чтобы находить этот угол, воспользуемся для получения координат x_1^* и x_2^* самой высокой точки уравнением

$$\frac{x_2^*}{x_1^*} = \frac{m_2}{m_1}. \quad (4.32)$$

Это уравнение справедливо для окружностей любого радиуса, так как радиус в него явно не входит ¹⁾.

¹⁾ Н. В. Phillips, Vector analysis (New York, John Wiley & Sons, Inc., 1949). [См. также: А. И. Мальцев, Основы линейной алгебры, М., Гостехиздат, 1956. (Прим. ред.)]

В нашем числовом примере отношение m_2/m_1 равно -2 , поэтому наивысшая точка находится там, где прямая

$$x_2 = -2x_1 \quad (4.33)$$

пересекается с окружностью

$$\sqrt{x_1^2 + x_2^2} = 20. \quad (4.34)$$

Производная $dy/d\theta$ равна нулю также и в точке минимума. Поэтому имеются две точки пересечения прямой с окружностью: $(-4\sqrt{5}, 8\sqrt{5})$ и $(4\sqrt{5}, -8\sqrt{5})$. Из уравнения (4.10) видно, что в первой точке имеется максимум, так как знаки ее координат совпадают со знаками коэффициентов m_1 и m_2 . При этом все члены уравнения становятся положительными:

$$y(-4\sqrt{5}, 8\sqrt{5}) = (-0,25)(-4\sqrt{5}) + \\ + 0,50(8\sqrt{5}) = 5\sqrt{5}. \quad (4.35)$$

Знаки координат другой точки противоположны знакам в точке максимума, поэтому все члены уравнения отрицательны. Это показывает, что вторая точка соответствует минимуму. Следовательно, направление наискорейшего подъема прямо противоположно направлению наискорейшего спуска.

Поучительно сравнить уравнение (4.32) для линии градиента с уравнением касательной к линии уровня, которое получается, если в уравнении (4.26) положить $y = 0$:

$$\frac{x_2}{x_1} = -\frac{m_2}{m_1}. \quad (4.36)$$

Из аналитической геометрии известно, что если наклоны двух линий взаимно обратны по величине и противоположны по знаку, то линии перпендикулярны. Таким образом, для двух независимых переменных направление наискорейшего подъема можно найти графически, вычерчивая линию, перпендикулярную к линии уровня. Горнорудная компания не должна, конечно, бурить следующую скважину в точке $(4\sqrt{5}, -8\sqrt{5})$, так как она расположена слишком близко к исходной скважине, чтобы оправдать расходы. Поэтому следует отойти подальше в надежде найти место, где залежи

расположены намного ближе к поверхности. Линия наискорейшего подъема может быть представлена в параметрической форме, в зависимости от расстояния r до начала координат:

$$r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = \frac{x_1}{m_1} \sqrt{m_1^2 + m_2^2}, \quad (4.37)$$

откуда

$$x_1 = \frac{m_1 r}{\sqrt{m_1^2 + m_2^2}} = \frac{-\sqrt{5} r}{5} = -0,447r. \quad (4.38)$$

Аналогично

$$x_2 = \frac{m_2 r}{\sqrt{m_1^2 + m_2^2}} = 0,894r. \quad (4.39)$$

Поэтому экстраполируемая оценка критерия определяется выражением

$$y = r \sqrt{m_1^2 + m_2^2} = 0,557r. \quad (4.40)$$

Чтобы y было положительным, необходимо, чтобы r было больше нуля; отрицательные величины y ведут нас в направлении наискорейшего спуска. Абсолютная величина r есть расстояние от начала координат, а наклон в направлении наискорейшего подъема равен 0,557 фута подъема на один фут расстояния.

Хотя теперь горнорудной компании известно направление, в котором следует продолжать поиск, однако не известно, как далеко надо отступить от первоначальной скважины. Расстояние до следующей скважины нельзя определить методом наискорейшего подъема. Надо взвесить возможные преимущества большого расстояния при бурении и опасность того, что градиент может резко изменить направление. Поэтому метод наискорейшего подъема, целиком основанный на локальном определении градиента, обязательно связан с необходимостью экстраполяции. Но если следующая пробная скважина оказывается неудачной, исследовательская группа всегда может двигаться в обратном направлении к началу координат, пока не обнаружит лучшей точки, как об этом говорилось в предыдущем разделе об опытных экспериментах. Как только одна из опытных скважин вдоль линии градиента покажет улучшение,

можно определить новое направление наискорейшего подъема в более перспективном месте. Процесс может повторяться до тех пор, пока прибыль превышает расходы по бурению.

4.10. Многомерные обобщения

Понятие градиента, или направления наискорейшего подъема, можно обобщить на случай функции k независимых переменных. Пусть уравнение линейной аппроксимации имеет вид

$$\Delta y = \sum_{i=1}^k m_i \Delta x_i; \quad (4.41)$$

тогда линию градиента можно параметрически представить следующим образом:

$$\Delta x_i = m_i \lambda, \quad i = 1, 2, \dots, k, \quad (4.42)$$

где λ — произвольный параметр линии. Из уравнений (4.15) и (4.16) получаем

$$\Delta y = \lambda \sum_{i=1}^k m_i^2. \quad (4.43)$$

Следовательно, Δy растет с ростом λ , и положительные значения λ определяют линию наискорейшего подъема. С другой стороны, линия наискорейшего спуска является геометрическим местом точек, для которого величина λ отрицательна. В качестве иллюстрации рассмотрим функцию

$$y = -2x_1^2 - x_2^2 - 3x_3^2 - 2x_4^2. \quad (4.44)$$

Проведем поиск по линии наискорейшего подъема из точки $p = (-1, 0, 3, -2)$. Линейную аппроксимацию функции y в этой точке можно получить дифференцированием, так как функция y в этом примере дана заранее. В соответствии с уравнением (4.41) выражение аппроксимации имеет вид

$$\Delta y = 4 \cdot \Delta x_1 + 0 \cdot \Delta x_2 - 18 \cdot \Delta x_3 + 8 \cdot \Delta x_4, \quad (4.45)$$

где $\Delta x_1 \equiv x_1 + 1$, $\Delta x_2 \equiv x_2$, $\Delta x_3 \equiv x_3 - 3$ и $\Delta x_4 \equiv x_4 + 2$. Из уравнения (4.42) получим уравнение линии наискорейшего подъема в параметрической форме:

$$\Delta x_1 = 4\lambda; \quad \Delta x_2 = 0; \quad \Delta x_3 = -18\lambda; \quad \Delta x_4 = 8\lambda \quad (4.46)$$

или

$$x_1 = -1 + 4\lambda; \quad x_2 = 0; \quad x_3 = 3 - 18\lambda; \quad x_4 = -2 + 8\lambda. \quad (4.47)$$

Система четырех уравнений относительно пяти переменных имеет одну степень свободы, что характерно для линии. Любое положительное значение λ определяет некоторую точку на линии наискорейшего подъема. Например, значению $\lambda = 2$ соответствует точка $(7, 0, -33, 14)$. Читатель может проверить, что точка $(1, 0, 6, 2)$ лежит на линии наискорейшего спуска (какова должна быть при этом величина λ ?).

Значения, которые функция y принимает вдоль линии наискорейшего подъема, можно выразить как функцию одного параметра λ , так как координаты всех точек линии выражаются через этот параметр. Из уравнений (4.44) и (4.47) получаем

$$y = -2(-1 + 4\lambda)^2 - 3(3 - 18\lambda)^2 - 2(-2 + 8\lambda)^2. \quad (4.48)$$

Чтобы получить величину λ , соответствующую максимуму y на этой линии, продифференцируем приведенное выше уравнение по λ :

$$\frac{dy}{d\lambda} = 404 - 2264\lambda = 0. \quad (4.49)$$

Следовательно, y имеет максимальное значение на линии наискорейшего подъема при $\lambda = 0,179$. Точка, соответствующая максимуму, имеет координаты $(-0,22; 0; -0,22; -0,58)$.

Линия наискорейшего подъема в параметрической форме всегда выражается одним уравнением для каждой из k координат. Всего имеется $k + 1$ переменных (считая λ). Множество этих точек всегда имеет одну степень свободы. Так как уравнения линейны, то все эти точки должны лежать в пространстве на одной прямой. Параметрическое представление дает возможность вместо k координат рассматривать единственное измерение, что упрощает исследо-

вание. На практике, когда вид функции заранее не известен, наивысшую точку на линии градиента всегда можно найти, если воспользоваться мощными одномерными методами, рассмотренными в главе 2. Таким образом, величину λ можно использовать в качестве независимой переменной при поиске методом Фибоначчи. В большинстве случаев многомерные методы поиска можно свести к последовательному проведению поиска в одномерном пространстве.

4.11. Неевклидов парадокс

В примере о геологических исследованиях при определении длины и нужного направления никаких затруднений не возникало, потому что задача была сформулирована как задача обычной евклидовой геометрии, с давних времен используемой землемерами. Теперь мы рассмотрим обычную задачу из области промышленности, в которой понятия длины и направления теряют свой обычный смысл. Будем вступать в этот неевклидов мир постепенно и терпеливо, так как он может показаться парадоксальным тому, кто попытается применять без разбора понятия евклидова пространства. Из дальнейшего станет ясно, что масштабы независимых переменных надо выбирать с большой осторожностью. Действительно, соответствующим выбором масштабов в «направление градиента» можно превратить любое из всего множества направлений.

Пусть некий гипотетический предприниматель занят химией, и пусть его задача состоит в том, чтобы получить наиболее выгодные условия работы для одного из процессов. В этом процессе сырье нагревают до температуры, при которой протекает реакция. В результате реакции получается товарный продукт, загрязненный примесями, образующимися во время реакции. Затем эти примеси удаляются, причем стоимостью процесса сепарации пренебрегать нельзя. Практически на экономичность данного процесса может влиять ряд факторов, но для простоты мы рассмотрим здесь только два — время и температуру.

Время реакции необходимо учитывать потому, что оно лимитирует скорость протекания процесса. Любое уменьшение затрат времени в производстве при прочих равных условиях приводит к повышению производительности. Тем-

пература также влияет на скорость всех химических реакций. Небольшое увеличение температуры повышает скорость производства основного продукта и поэтому также увеличивает производительность. К сожалению, высокая температура ускоряет и нежелательные реакции, которые приводят к образованию примесей или выгоранию основного продукта. Очевидно, большое время выдержки несовместимо с высокой температурой, так как при этом будет произведено малое количество низкокачественного продукта. С другой стороны, нецелесообразно слишком быстро подавать сырье в реактор с низкой температурой, так как при этом после реакции оставалось бы большое количество сырья. Тогда его пришлось бы отделять от продукта и вновь подавать в реактор. Линии уровня прибыли на графике температуры x_1 в зависимости от времени выдержки x_2 в данном случае выглядят примерно так, как показано на рис. 4.9.

Предположим, что предприниматель ввел в производство новый процесс. Согласно оценкам проектировщиков наилучшие условия работы должны соответствовать примерно пяти минутам выдержки при температуре 1000°C . Первый цикл проводится при этих условиях, а соответствующая ему норма прибыли равна 10 долларам в минуту. Для определения изменений прибыли в окрестности оптимума главный инженер предусматривает два пробных цикла, один при температуре, повышенной на 20°C , и другой при выдержке, увеличенной на 20 сек. Чтобы числа в этой задаче были те же, что в примере с горными исследованиями, предположим, что разница в прибыли для этих опытов составляет соответственно -5 центов и $+10$ центов. Обозначая Δx_1 изменения температуры, Δx_2 — изменения выдержки времени и Δy — изменения нормы прибыли, можно видеть, что полученные ранее коэффициенты действительны и для данного случая:

$$\Delta y = -0,25\Delta x_1 + 0,50\Delta x_2. \quad (4.50)$$

Применим и в данной задаче метод наискорейшего подъема. На первый взгляд кажется разумным начертить линии уровня критерия y в функции температуры x_1 и времени выдержки x_2 , как и в примере о геологических исследованиях. В обычных прямоугольных координатах можно

получить «карту», идентичную рис. 4.9, если в том же масштабе изобразить один градус Цельсия и одну минуту. Процедуру выбора масштабов, которую большинство из нас выполняет подсознательно, можно формализовать, если положить, что s_1 и s_2 — масштабы измерений x_1 и x_2 , т. е. количества x_1 и x_2 , отвечающие единице длины по осям графика. Таким образом, s_1 есть число градусов по Цельсию, приходящихся на одно деление, а s_2 — число минут выдержки, соответствующих одному делению. В первом случае масштабы были такими, что $s_1 = s_2$, и линия градиента описывалась уравнением (4.32):

$$\Delta x_2 = -2\Delta x_1. \quad (4.51)$$

В примере о геологических исследованиях масштабы по вертикальной и горизонтальной осям были равны. Конечно, было бы абсурдом делать их различными, так как в геометрии на плоскости 20 футов с юга на север представляют собой то же самое, что и 20 футов, измеренных с востока на запад или в любом другом направлении. Нельзя, однако, делать такое же сравнение между градусом Цельсия и минутой времени. По этой причине совсем не обязательно, чтобы в задаче о химическом реакторе температурный масштаб по вертикали был равен масштабу времени по горизонтали. На практике масштабы просто выбирают так, чтобы было удобно изобразить данную задачу на графике.

Посмотрим, что случится, если сократить масштаб по оси температур вдвое, так что $s_2 = 2s_1$. Как показано на рис. 4.10, при таком изменении масштаба горизонтальная температурная ось вытягивается вдвое относительно первоначальной длины, и наклоны всех линий становятся по сравнению с рис. 4.9 вдвое меньше. Таким образом, хотя уравнение касательной к линии уровня (4.50) при произвольном изменении масштаба не меняется,

$$\Delta x_2 = 0,50\Delta x_1, \quad (4.52)$$

ее наклон к линии уровня при новом выборе масштаба будет только 0,25. Аналогично наклон линии, описываемой уравнением (4.32), становится равным -1 , и ясно, что эти наклоны не являются обратными по величине и противоположными по знаку, как это было раньше.

Поэтому линия, которая была линией градиента на рис. 4.9, на рис. 4.10 уже не является направлением наискорейшего подъема. Новая линия градиента перпендикулярна касательной к линии уровня. Наклон линии градиента равен -4 , а ее уравнение имеет вид

$$\Delta x_2 = -8\Delta x_1. \quad (4.53)$$

Новая линия градиента показана на рис. 4.10.

Чтобы проверить, действительно ли новая линия градиента определяет направление наискорейшего подъема,

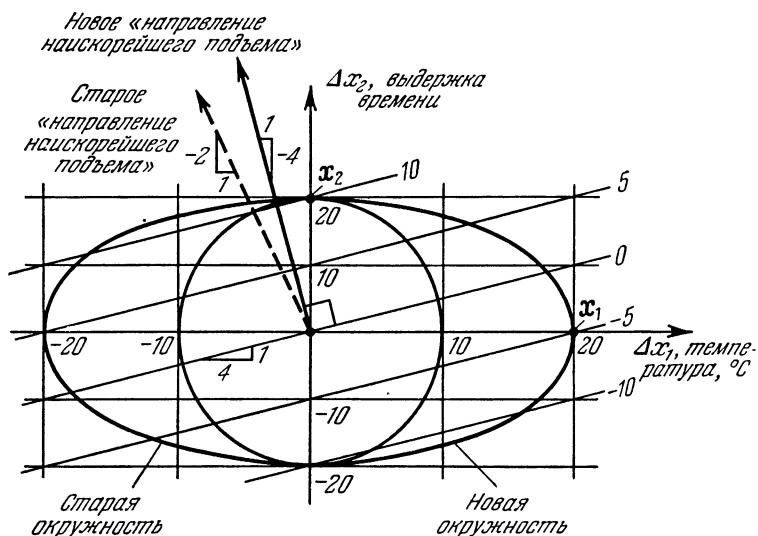


Рис. 4.10. Неевклидов парадокс.

проведем окружность с центром в начале координат. Ясно, что самая высокая точка окружности лежит на линии градиента. Вследствие изменения масштаба эта окружность не проходит через обе экспериментальные точки, как окружность на рис. 4.9. Действительно, точки окружности на рис. 4.9 преобразуются на рис. 4.10 в эллипс. Самая высокая точка этого эллипса лежит, конечно, на старой линии градиента.

Итак, теперь имеется два различных уравнения (4.51) и (4.53), причем каждое из них определяет точки на «линии градиента». Более того, любое уравнение вида

$$\Delta x_i = c_i \frac{m_i}{|m_i|} \lambda, \quad i = 1, 2, \dots, k, \quad (4.54)$$

где c_i — произвольные положительные константы, может быть параметрическим уравнением линии наискорейшего подъема.

Таким образом, в рассмотренной задаче любая прямая линия соответствующим выбором масштабов может быть превращена в линию градиента. Рассмотрим этот парадокс глубже.

4.12. Расстояние, масштаб и неопределенность размерности

В предыдущих геометрических примерах было выяснено, что во многих физических задачах нельзя единственным образом определить направление наискорейшего подъема. Можно только указать направления, ведущие вверх, направления, ведущие вниз, и горизонтальные направления. Для измерения «крутизны» необходимо определить расстояние во всех направлениях, а не только параллельно осям x_1 и x_2 . Это легко выполнить в ситуациях, имеющих ясный геометрический смысл, когда понятие длины равно применимо ко всем направлениям, как в примере о геологических исследованиях. В таких случаях расстояние r между двумя точками задается теоремой Пифагора:

$$r = \sqrt{(\Delta x_1)^2 + (\Delta x_2)^2}. \quad (4.55)$$

Это однозначное определение расстояния позволяет построить окружность с центром в начале координат, которая необходима для определения направления наискорейшего подъема. Пространство, в котором расстояние можно определить при помощи уравнения (4.55), называется евклидовым.

Но при изучении химического реактора таким образом определить расстояние нельзя. Даже если уравнение (4.55) применить чисто формально, то придется складывать «квад-

ратные градусы Цельсия» [единицы $(\Delta x_1)^2$] с «квадратными минутами» [единицы $(\Delta x_2)^2$]. С неопределенностью размерности мы сталкиваемся и в уравнении (4.32), которое определяет направление наискорейшего подъема:

$$\frac{x_2^*}{x_1^*} = \frac{m_2}{m_1}. \quad (4.56)$$

Коэффициент m_1 представляет собой частную производную $(\partial y / \partial x_1)$ и поэтому должен иметь размерность нормы прибыли на единицу изменения температуры; аналогично m_2 имеет размерность нормы прибыли на единицу времени выдержки и отношение m_2 / m_1 будет иметь размерность [температура/время]. Это несовместимо с размерностью левого члена в уравнении (4.56), который должен иметь размерность [время/температура].

В какой-то мере от этой досадной трудности можно избавиться, начертив линии уровня на бумаге, так как миллиметровка в любом случае является евклидовым пространством, даже если исходная задача не является евклидовой. Поступив таким образом, мы уже не будем иметь дела с физическими переменными x_1 и x_2 и с их вызывающими раздражение размерностями. Вместо этого воспользуемся преобразованными переменными x'_1 и x'_2 , которые определяются следующим образом:

$$x'_1 \equiv \frac{x_1}{s_1}$$

и

$$x'_2 \equiv \frac{x_2}{s_2}, \quad (4.57)$$

где s_1 и s_2 — выбранные масштабы. Все новые переменные будут иметь размерность длины, а единицей измерения — деление на осях диаграммы.

В новых переменных расстояние r' можно определить следующим образом:

$$r' = \sqrt{(\Delta x'_1)^2 + (\Delta x'_2)^2}. \quad (4.58)$$

В пространстве этих переменных критерий записывается в виде уравнения

$$\Delta y = m'_1 \Delta x'_1 + m'_2 \Delta x'_2, \quad (4.59)$$

где

$$m'_1 = \frac{m_1}{s_1}, \quad (4.60)$$

$$m'_2 = \frac{m_2}{s_2}. \quad (4.61)$$

Поэтому уравнение градиента в евклидовом пространстве на миллиметровой бумаге имеет вид

$$\frac{\Delta x'_2}{\Delta x'_1} = \frac{m'_2}{m'_1}. \quad (4.62)$$

Это уравнение можно проверить, проведя тот же вывод, что и в примере о геологических исследованиях. В зависимости от исходных физических переменных направление наискорейшего подъема определяется зависимостью

$$\frac{\Delta x_2}{\Delta x_1} = \left(\frac{s_1}{s_2}\right)^2 \frac{m_2}{m_1}. \quad (4.63)$$

Поэтому уравнение (4.32) направления наискорейшего подъема в евклидовом пространстве является частным случаем уравнения (4.63), в котором масштабы выбраны равными. Так как направление наискорейшего подъема зависит от применяемых масштабов, слово «наискорейший» лучше опускать и говорить только о методах подъема.

4.13. Выбор масштабов

Метод подъема можно применить к любой унимодальной функции, в то время как метод исключения касательными к линии уровня можно использовать только для строго унимодальных функций. Независимо от выбора масштаба с помощью метода подъема в конце концов находится вершина, и если выбор масштабов произведен разумно, то можно обеспечить быструю сходимость.

Бюлер, Шах и Кемпторн ¹⁾ изучали влияние масштабов на скорость сходимости методов подъема. Считая, что

¹⁾ R. J. Buehler, B. V. Shah and O. Kempthorne, Some properties of steepest ascent and related procedures for finding optimum conditions, Iowa State University Statistical Laboratory (April 1961), pp. 8—10, 18.

квадратичные функции имеют эллипсоидальные линии уровня, они нашли, что при наилучшем выборе масштабов линии уровня будут близки к сферическим. В этом нет ничего удивительного, так как для сферических линий уровня все линии градиента проходят через максимум.

Хотя их выводы получены только для ограниченного класса квадратичных функций, по всей видимости они применимы в общем случае, поэтому мы и использовали их в разделе 1.08. Эти выводы состоят в том, чтобы 1) выбирать масштабы измерения так, что единичное изменение каждой независимой переменной *в точке оптимума* дает то же самое изменение функции, что и единичное изменение любой другой независимой переменной, и 2) брать такие представления, при которых независимые переменные не взаимосвязаны, т. е. отсутствуют члены, содержащие функции более чем одной переменной.

Чтобы следовать этим правилам, нужно располагать достаточным количеством информации, недостаток которой вынуждает делать те или иные предположения. Можно надеяться, что теоретические сведения о конкретной оптимизируемой системе позволят произвести выбор масштабов более или менее обоснованно, но при этом нужно помнить, что для заданной поверхности отклика и исходной точки скорость сходимости метода подъема при плохом выборе единиц измерения «может быть сколь угодно медленной» ¹⁾).

4.14. Седла

При поиске методом градиента траектория проходит вдали от седловых точек. В этом состоит важное преимущество данного метода. Зеллнику удалось показать, что разработанная им и его коллегами ²⁾ по фирме Сайентифик Дизайн программа поиска по градиенту для ЦВМ никогда не приводит к седловой точке, так что единственный способ испытать подпрограмму исследования окрестности седла состоит в том, чтобы начать поиск именно в этой

¹⁾ См. ссылку на стр. 168.

²⁾ H. E. Zellnick, N. E. Sondak and R. S. Davis, Gradient search optimization, Chem. Eng. Progr. 58, 8 (1962), pp. 35—41

точке. На рис. 4.11 пунктирные линии градиента наложены на линии уровня бимодальной поверхности отклика. Через седло из бесчисленного числа возможных линий градиента проходит только одна. Другие линии ведут либо к одной вершине, либо к другой. Следовательно, при поиске методом

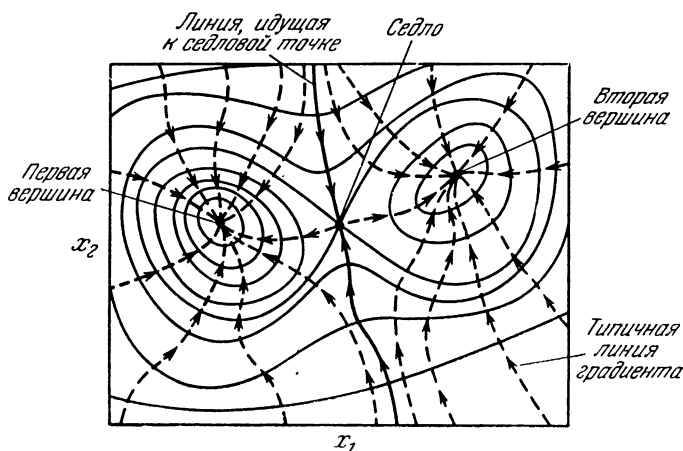


Рис. 4.11. Линии градиента при наличии седловой точки.

градиента вероятность встретиться с седлом весьма мала. Однако предусмотрительный экспериментатор должен в конце поиска проверить, не нашел ли он вместо вершины седло.

4.15. Заключение

В методе подъема максимум ищется путем восхождения к вершине, а не исключением касательными к линии уровня. Методы градиента («наискорейшего» подъема) во многих реальных ситуациях тесно связаны с более или менее произвольным выбором единиц или масштабов измерения. Эти методы обычно не приводят к седловым точкам и сходятся для любой унимодальной функции даже при наличии значительных ошибок эксперимента. Для строго унимодальных функций можно комбинировать методы подъема и исключения.

Упражнения

1. Для правильного треугольника, вершины которого расположены в точках $(0,0)$, $(1,0)$ и $(0,1)$, определить координаты:

- а) средней точки,
- б) минимаксной точки,
- в) медианы,
- г) центроида.

2. Для правильного треугольника, вершины которого расположены в точках $(0, 0)$, $(1/2, 1/2)$, $(1/2, -1/2)$, определить координаты:

- а) средней точки,
- б) минимаксной точки,
- в) медианы,
- г) центроида.

3. Найти максимум функции

$$y = \exp(-x_1^2 - 4x_2^2 - 9x_3^2)$$

в области эксперимента

$$-1 \leq x_i \leq 3 \quad (i = 1, 2, 3),$$

применяя метод исключения касательными к линии уровня. Установить, какие точки используются при поиске — средние точки, медианы или центроиды. Определить площадь окончательного интервала неопределенности. Определить величину y , получаемую на каждом шаге. Для экономии времени касательные к линиям уровня можно получать дифференцированием, а не непосредственными измерениями.

4. Применить метод наискорейшего подъема для предыдущей задачи дважды, помещая каждую новую группу экспериментов в высокой точке вдоль предыдущей линии наискорейшего подъема. Регистрировать величины y , получаемые в каждом шаге. Для экономии времени там, где это возможно, проводить непосредственное дифференцирование.

5. Начертить четыре касательных к линии уровня и четыре линии градиента в области $-2 \leq x_1 \leq 2$, $-2 \leq x_2 \leq 2$ для следующих функций:

- а) $\exp(-x_1^2 - 4x_2^2)$;
- б) $\ln(x_1^2 + 4x_2^2)$;
- в) $x_1^2 + 4x_2^2$;
- г) $x_1 x_2$;
- д) $x_1^2 + x_2^2$.

6. Функция y зависит от четырех независимых переменных x_1 , x_2 , x_3 и x_4 . В следующей таблице приведены значения y , измеренные в восьми различных точках.

а) Определить координаты какой-нибудь точки, лежащей на линии наискорейшего подъема, проходящей через точку $(0, 1, -1, 3)$ (не приводить в качестве ответа саму точку $(0, 1, -1, 3)$).

б) Определить координаты любой точки (за исключением точки $(0, 1, -1, 3)$), лежащей в гиперплоскости, касательной к линии уровня и проходящей через точку $(0, 1, -1, 3)$.

x_1	x_2	x_3	x_4	y	x_1	x_2	x_3	x_4	y
0	1	-1	3	5	0	-1	-1	3	7
1	1	-1	3	7	0	1	1	3	7
2	1	-1	3	9	0	1	-1	2	5
-1	2	-1	3	2	0	2	0	3	5

7. Требуется определить координаты точки, в которой неизвестная функция y имеет максимум на линии, проведенной между двумя точками $(1, -1, 0, 2)$ и $(-5, -1, 3, 1)$.

а) Считая, что функция унимодальна и полностью разрешима на этой линии, определить координаты точек, в которых нужно произвести следующее измерение функции, полагая, что последовательно проводится пять экспериментов.

б) Каков будет конечный интервал неопределенности координаты x_1 ?

ГЛАВА 5

УСКОРЕННЫЙ ПОИСК ВДОЛЬ ГРЕБНЯ

«Смотри: шатнулся ствол сосны,
На склоне этой крутизны
Лавины жди наверняка!»
Но донеслось издалека:
Excelsior!

ЛОНГФЕЛЛО

Познакомившись с геометрическими и алгебраическими соотношениями для касательных и градиента, мы переходим теперь к изучению более сложных методов поиска по многим переменным. Как следует из самого названия главы, в этих процедурах используется ускорение сходимости уже описанных методов поиска. Идея этого ускорения основана на том, что большинство поверхностей отклика имеет один или несколько гребней, ведущих к оптимуму. Поэтому если удастся попасть на гребень, то можно, следуя по нему, быстро достичь вершины.

Само понятие «гребень» будет введено далее, после изучения одного простого алгоритма поиска по одной переменной при фиксированных значениях остальных переменных. Будет показано, что гребень на поверхности отклика возникает в том случае, когда между переменными существует значительная связь. Это приводит к тому, что рассматриваемый в примере метод поиска сильно замедляется и может оказаться вообще непригодным. Правда, от этого недостатка можно избавиться, применяя градиентные методы. Но в этом случае движение вдоль гребня носит более или менее зигзагообразный характер, в зависимости от того, под каким углом траектория подходит к гребню. Из дальнейшего изложения станет также ясно, что в действительности понятие «гребень» весьма расплывчато, а его главные характеристики условны. Основное содержание настоящей главы посвящено методам ускорения процедуры поиска. Мы перейдем к ним после того, как, опираясь на идею разрешающей способности для зависимых переменных, более строго определим понятие «разрешаемый гребень».

Методы ускорения поиска можно разбить на два класса. Первый эффективен при поиске вдоль прямолинейных гребней, второй — вдоль криволинейных. К весьма эффективным методам первой группы относится способ параллельных касательных (ПК), предложенный Шахом, Бюлером и Кемпторном¹⁾. Один из вариантов этого метода был предложен, по-видимому, независимо от первой группы авторов Пауэллом²⁾. В том случае, когда поверхность отклика ограничена концентрическими эллипсоидами, метод ПК позволяет определить *точное* местоположение оптимума не более чем за $(2k - 1)$ одномерных оптимизаций (k — число независимых переменных). Хотя этот метод изучался лишь для эллипсоидов, его можно применить для поиска и на других классах функций.

На криволинейных гребнях успешными оказались методы непосредственного поиска. Они требуют очень простых вычислений, а их основная идея состоит в том, что выбор последующих шагов осуществляется с учетом предыдущей информации. Известную практическую ценность представляет метод поиска с помощью конфигураций, предложенный Хуком и Дживсом³⁾ и разработанный далее Вудом⁴⁾. Этот метод предназначен в основном для движения по криволинейным гребням. Для этой цели хорошо приспособлен также метод поиска с осторожной тактикой, изобретенный Муджелем⁵⁾. Более сложный метод, который далее будет называться методом вращающихся координат, был предложен Розенброком⁶⁾. Основное до-

¹⁾ R. J. Buehler, B. V. Shah and O. Kempthorne, The method of parallel tangents (PARTAN) for finding an optimum. Tech. Ref., No 2, office of Naval Research Contr. Nonr.-5030 (05). Iowa State University Statistical Laboratory (April 1961, rev. Aug. 1962).

²⁾ M. J. D. Powell, An iterative method for finding stationary values of a function of several variables, Computer J. 5, 2 (July 1962), pp. 147—51.

³⁾ R. Hooke and T. A. Jeeves, «Direct search» solution of numerical and statistical problems, J. Assoc. Comp. Mach. 8, 2 (Apr. 1962), pp. 212—229.

⁴⁾ C. F. Wood, Application of direct search to the solution of engineering problems, Westinghouse Scientific paper 6-4-1210-1-P.

⁵⁾ R. A. Muehle, A nonlinear digital optimizing program for process control systems, Proc. Western Joint Computer Conf. (1962).

⁶⁾ H. H. Rosenbrock, An automatic method for finding the greatest or least value of a function, Computer J. 3, 3 (Oct. 1960), pp. 175—184.

стоинство этого метода состоит в том, что он позволяет избежать многих затруднений, связанных с движением по двумерным гребням. Впрочем, А. Харкинсу удалось показать, что на этом классе функций к сходным результатам приводит метод ПК¹⁾.

5.01. Метод сечений

По-видимому, первым методом, с которого начинает исследователь, является метод сечений или метод поочередного поиска по каждой переменной²⁾. Сущность его состоит в том, что одну из независимых переменных подвергают воздействию до тех пор, пока критерий качества не перестанет улучшаться, затем переходят к другой переменной и т. д. Вообще говоря, этот метод, описанный Фридманом и Севеджем³⁾, не всегда позволяет найти максимум даже при выпуклых линиях уровня. Поэтому его практическая ценность весьма ограничена, несмотря на то, что характеристики метода не зависят от масштаба функции, по которой ведется поиск.

Простейший метод сечений, описанный Фридманом и Севеджем, предусматривает поочередное изменение каждой переменной при фиксированных значениях остальных. Это приводит к поиску наивысшей точки на прямой $\Delta x_i = 0$ при $i \neq j$, где j — номер изменяемой переменной. После того как эта точка найдена, x_j фиксируется и начинается поиск по другой переменной. Эта процедура продолжается до тех пор, пока не будет найден оптимум. Поскольку каждое звено траектории поиска параллельно одной из координатных осей, общая траектория поиска по двум независимым переменным образует лестницу, показанную на рис. 5.1.

Из рис. 5.1 видно, что качество этого метода существенно зависит от вида линий уровня. Наиболее эффективным

¹⁾ Об этом А. Харкинс сообщил автору в марте 1963 г.

²⁾ В советской литературе этот метод поиска известен под названием метода Гаусса—Зайделя. (Прим. ред.)

³⁾ M. Friedman and L. S. Savage Selected techniques of statistical analysis (New York: McGraw-Hill Book Co., Inc., 1947). [См. также: Б. Л. Варден, Математическая статистика, М., ИЛ, 1960. (Прим. ред.)]

он оказывается в том случае, когда линии уровня представляют собою окружности или эллипсы, главные оси которых параллельны координатным осям. Физически

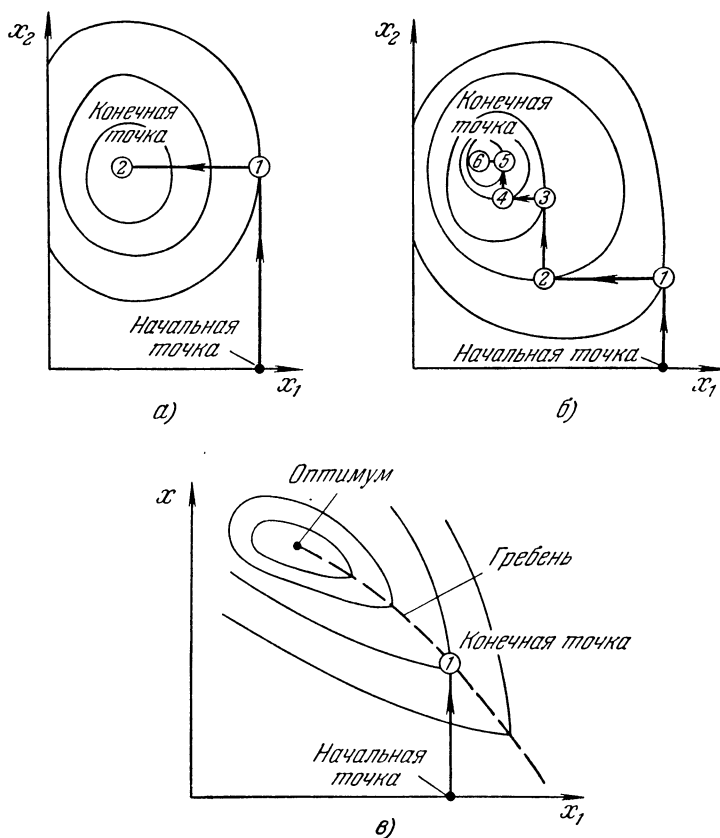


Рис. 5.1. Поиск методом сечений: а) переменные независимы — поиск эффективен; б) между переменными существует связь — поиск малоэффективен; в) сильная связь — поиск неэффективен.

это означает, что переменные независимы. Если же главные оси фигур повернуты относительно координатных осей, то приходится много раз изменять направление поиска, прежде чем оптимум будет достигнут (рис. 5.1, б). Метод

сечений оказывается совершенно непригодным при поиске на поверхности отклика с крутым гребнем, ибо нельзя продвинуться вверх по гребню из любой его точки, не имея возможности перемещаться по диагонали (рис. 5.1, в).

Пытаясь обойти этот недостаток метода поочередного поиска по каждой переменной, Бокс и Вильсон предложили метод подъема, использующий движение по направлениям, не параллельным координатным осям ¹⁾. Исследуя влияние структуры гребня на качество метода сечений, Бюлер, Шах и Кемпторн пришли к выводу, что сам по себе этот метод без сочетания с другими способами на поверхностях с гребнями работать не может ²⁾.

5.02. Разрешаемые гребни

Прежде чем переходить к изучению других методов поиска, необходимо уяснить, что представляет собою гребень и как он влияет на процесс поиска оптимума. Географический смысл этого термина в данном случае оказывается недостаточным, и для того чтобы исследовать движение по гребню с единых позиций, приходится прибегнуть к понятию «разрешаемый гребень». Прежде чем ввести это понятие, рассмотрим, почему оказывается неудовлетворительным географическое понимание «гребня».

На рис. 5.2 изображены два человека, рассматривающих гору с различных позиций. С точки зрения мистера А точки кривой А лежат на гребне, так как он со своего места видит, что они образуют профиль горы. В то же время мистер В должен увидеть иной гребень. В действительности же любая точка, которая в зависимости от желания рассматривается с той или иной позиции, может оказаться на гребне. Если существуют несколько точек, которые при рассматривании их под различными углами кажутся расположенными на гребне, то они впредь будут называться «формфактором гребня». Если же эти точки располагаются примерно на одной высоте, то вся гора целиком может быть названа гребнем. Таким образом, географи-

¹⁾ G. E. P. Box and K. B. Wilson, The experimental attainment of optimum conditions, J. Roy. Stat. Soc. B13 (1951), p. 1.

²⁾ См. ссылку на стр. 168.

ческая трактовка понятия «гребень» полезная при построении модели поверхности отклика, является все же недостаточно четкой для анализа методов восхождения по гребню.

Назовем *гребнем* геометрическое место точек, на котором процесс поиска методом сечений останавливается, не дойдя до оптимума. Поэтому любая точка гребня — лучшее, что

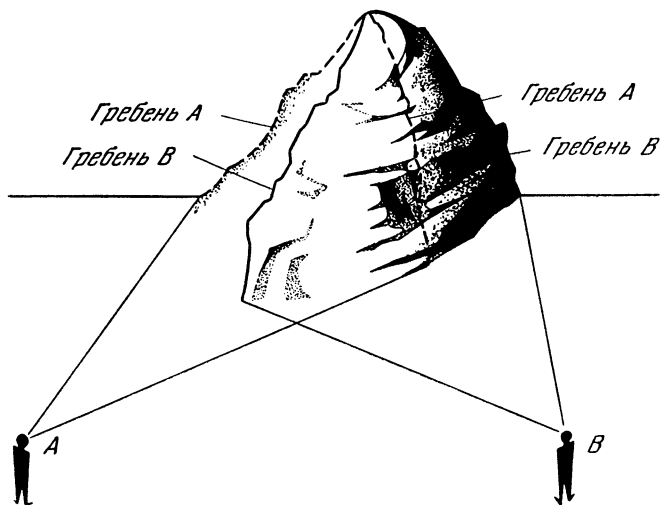


Рис. 5.2. «Гребни» в географическом смысле.

может быть достигнуто при движении по направлению, параллельному одной из координатных осей. Такой гребень изображен на рис. 5.1, в, остальные две поверхности отклика, приведенные на рис. 5.1, не имеют гребней, соответствующих этому определению.

Гребень подобного типа возникает только в том случае, когда линия уровня целиком расположена в одном квадранте (в двумерном случае, или в одном ортанте в многомерном). В свою очередь это возможно только тогда, когда линия уровня обладает точкой излома, в которой первые производные терпят разрыв. Конечно, метод сечений может оказаться непригодным и при гладких линиях уровня. Причина этого заключается в том, что для устойчивого

различия наблюдения должны быть разделены некоторым конечным интервалом. Пусть $\varepsilon_i > 0$ — то наименьшее расстояние между двумя точками линии, параллельной оси x_i , при котором разность между результатами наблюдений еще может быть определена. Будем называть ε_i разрешающей способностью в направлении x_i . Очевидно,

$$y(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k) \neq y(x_1, \dots, x_i + \varepsilon_i, \dots, x_k). \quad (5.1)$$

Будем говорить, что точка $(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k)$ находится на разрешаемом гребне, если она расположена выше любых

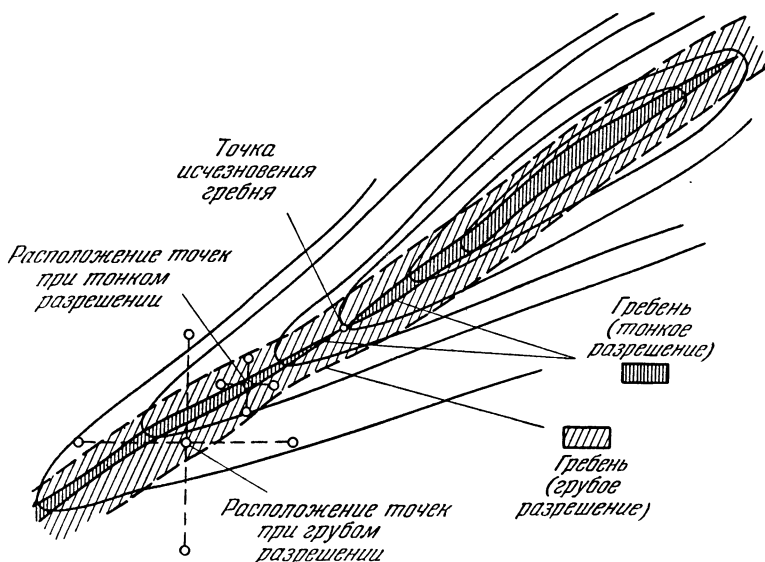


Рис. 5.3. Гребни при тонком и грубом разрешении.

точек $(x_1, \dots, x_i + \varepsilon_i, \dots, x_k)$ и $(x_1, \dots, x_i - \varepsilon_i, \dots, x_k)$. Если же эта точка лежит ниже всех соседних точек, то будем говорить, что она находится в разрешаемом овраге. Разрешаемые гребни играют значительную роль в задачах максимизации. В общем случае разрешаемые гребни представляют собою скорее область, чем линию. Это хорошо видно из рис. 5.3, где разрешаемый гребень становится

все уже по мере увеличения разрешающей способности. При достаточном разрешении гребень может исчезнуть вообще.

Если поверхность отклика содержит разрешаемый гребень, то с помощью метода поочередного поиска по каждой переменной до ее вершины добраться невозможно. В этом случае более успешным оказывается метод исключения касательной к линии уровня; наличие гребня приводит здесь лишь к образованию длинной и узкой области неопределенности. Гребень успешно отслеживается и с помощью методов подъема, однако их применение приводит к зигзагообразной траектории поиска (рис. 5.5), если только, по счастливой случайности, не удастся сразу попасть на гребень. К хорошему результату приводят также описываемые ниже методы параллельных касательных и метод конфигураций.

МЕТОД ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ КАСАТЕЛЬНЫХ

Начнем изучение ускоренного поиска с метода параллельных касательных (ПК), предложенного Шахом, Бюлером и Кемпторном ¹⁾. Этот метод обладает рядом достоинств, которые характерны для рассмотренных выше более простых способов поиска.

Он пригоден, как и методы подъема, при поиске на гребнях, а его поведение может быть сделано инвариантным относительно изменения масштаба переменных. Поскольку в качестве основных геометрических характеристик при этом используются касательные к линии уровня, его можно применять и как метод исключения. Основная стратегия метода параллельных касательных опирается на глобальные свойства эллипсоидов. В том случае, когда линии уровня критерия являются концентрическими, метод ПК позволяет определить точное положение оптимума после небольшого, заранее известного числа измерений. Кроме того, он обладает рядом свойств, позволяющих двигаться по гребню и при неэллиптических линиях уровня. Это делает его полезным при поиске вдоль прямолинейных гребней. В общем можно сказать, что метод параллельных

¹⁾ См. ссылку ¹⁾ на стр. 174.

касательных является общей стратегией, в которой используется описанная выше тактика дебюта, миттельшпиля и эндшпиля.

Изучение метода ПК преследует две цели. Во-первых, мощность и элегантность этого метода делают необходимым его включение в любую книгу, посвященную экспериментальным методам поиска. Пожалуй, не менее важно и то, что метод ПК позволяет проверить читателю свои знания геометрии многомерного пространства и применить некоторые геометрические понятия при решении задач.

5.03. Метод ускоренного подъема

Предположим, что благодаря удачному выбору представления и масштаба поверхность отклика является поверхностью вращения в пространстве двух переменных. Линии уровня такой функции представляют собою концентрические окружности, причем центр их соответствует точке максимума (рис. 5.4). Местоположение этой точки может

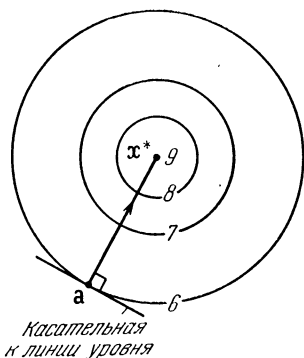


Рис. 5.4. Круговые линии уровня.

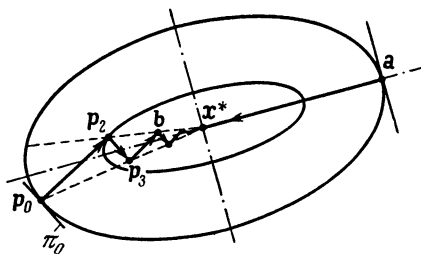


Рис. 5.5. Эллиптические линии уровня.

быть найдено с помощью нормали к линии уровня, построенной в точке a . Наивысшая точка нормали и соответствует вершине функции. В общем случае, когда функции произвольного числа переменных соответствуют концентрические гиперсферы уровня, поиск оптимума также сводится к одному одномерному пробному шагу из любой точки по направлению нормали, ибо в этих условиях все

линии градиента проходят через вершину функции и являются прямыми линиями.

Однако подобная удача в выборе масштаба и представления встречается редко. Обычно приходится рассматривать функции, которым соответствуют концентрические эллиптические линии уровня (рис. 5.5). Применим к функции, изображенной на рис. 5.5, метод наискорейшего подъема. Если точка, в которой начинается поиск, так же как и точка a (рис. 5.4), лежит на одной из главных осей системы эллипсов, то линия градиента пройдет точно через вершину и весь поиск заканчивается после одного шага. Во всех остальных случаях траектория поиска является ломаной линией $p_0p_2p_3b$ и т. д. (рис. 5.5). Интересно отметить, что с помощью метода наискорейшего подъема в принципе нельзя достичь вершины за конечное число шагов. Это объясняется тем, что по мере приближения к максимуму длина шага сокращается. Однако подойти к вершине можно сколь угодно близко и поиск заканчивается довольно быстро, если только начальная точка не расположена слишком близко к главной оси.

Нетрудно видеть, что зигзагообразная траектория поиска целиком лежит в области, ограниченной двумя прямыми линиями, пересекающимися в вершине. Это наводит на мысль о том, что поиск из точки p_3 следует вести не в направлении градиента к точке b , а вдоль прямой линии p_0p_3 . В этом случае точка максимума будет найдена после трех одномерных движений:

- 1) от точки p_0 к p_2 в направлении градиента;
- 2) от точки p_2 к p_3 также в направлении градиента и, наконец,
- 3) из точки p_3 вдоль линии p_0p_3 .

Этот способ ускорения метода наискорейшего подъема был впервые предложен Форсайтом и Моцкиным¹⁾; он представляет собою двумерный вариант ускоренного метода параллельных касательных (УПК). На рис. 5.5 начальная точка обозначена p_0 , а точка p_1 опущена вообще. Причина этого станет ясна в дальнейшем, после обобщения метода УПК на многомерный случай.

¹⁾ G. E. Forsythe and T. S. Motzkin, Acceleration of the optimum gradient method, Preliminary Report (abstract). Bull. Amer. Math. Soc. 57 (1951), pp. 304—305.

5.04. Двумерный вариант обобщенного метода параллельных касательных

Из рис. 5.5 видно, что линия p_3p_2 параллельна касательной π_0 в точке p_0 . И так как p_3 является наивысшей точкой линии p_3p_2 , то p_0 — наивысшая точка касательной π_0 . Это позволяет построить общий метод поиска центра системы концентрических эллипсов. Он сводится к следующему. Определяется направление касательной π_0 к

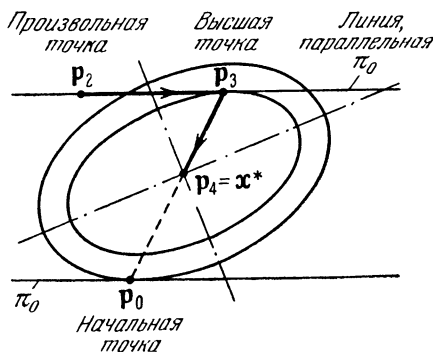


Рис. 5.6. Метод ОПК на плоскости.

линии уровня в точке p_0 (рис. 5.6), затем строится произвольная линия, параллельная π_0 , и на ней находится наивысшая точка, которая необходимо лежит на одной прямой с p_0 и центром x^* системы. Местоположение центра x^* определяется далее путем поиска вдоль линии p_3p_0 . Этот метод не использует градиентов и является двумерным вариантом обобщенного метода параллельных касательных (ОПК).

Перейдем теперь к анализу методов УПК и ОПК. Введем в рассмотрение функцию критерия $y(x_1, x_2)$ двух переменных и потребуем, чтобы ее линии уровня представляли собою концентрические эллипсы с центром в точке $x^* \equiv (x_1^*, x_2^*)$. Общее уравнение такого эллипса имеет вид

$$Q(x_1, x_2) \equiv \frac{1}{2} a_{11} (x_1 - x_1^*)^2 + a_{12} (x_1 - x_1^*) (x_2 - x_2^*) + \frac{1}{2} a_{22} (x_2 - x_2^*)^2 = \text{const}, \quad (5.2)$$

где $Q(x_1, x_2)$ — однородная квадратичная форма, a_{11}, a_{12}, a_{22} — некоторые постоянные. В главе 3 было показано, что для того, чтобы эта функция имела вершину, она должна быть отрицательно определенной:

$$Q(x_1, x_2) < 0 \text{ при всех } x_1, x_2. \quad (5.3)$$

Следует отметить, что функция критерия не обязательно должна быть квадратичной формой. Чтобы ее линии уровня были эллипсами, ей достаточно быть лишь функцией от квадратичной формы:

$$y(x_1, x_2) = y[Q(x_1, x_2)]. \quad (5.4)$$

Например, функция вида $\exp Q(x_1, x_2)$ обладает эллиптическими линиями уровня, но сама, естественно, не является квадратичной. Расположение эллиптических контуров друг относительно друга также не влияет на режим поиска методом ПК.

Рассмотрим полупрямую, начинающуюся в центре x^* и проходящую через две точки $x_1 \equiv (x_{11}, x_{12})$ и $x_2 \equiv (x_{21}, x_{22})$. Векторное уравнение этого луча имеет вид

$$x_2 - x^* = \lambda(x_1 - x^*), \quad (5.5)$$

где λ — постоянная, равная отношению расстояний от x^* до x_2 и x_1 . Значения квадратичных форм $Q(x_2)$ и $Q(x_1)$ связаны следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} Q(x_2) &\equiv a_{11}(x_{21} - x_1^*)^2 + a_{12}(x_{21} - x_1^*)(x_{22} - x_2^*) + \\ &+ a_{22}(x_{22} - x_2^*)^2 = a_{11}\lambda^2(x_{11} - x_1^*)^2 + \\ &+ a_{12}\lambda^2(x_{11} - x_1^*)(x_{12} - x_2^*) + a_{22}\lambda^2(x_{12} - x_2^*)^2, \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$Q(x_2) = \lambda^2 Q(x_1). \quad (5.7)$$

Следовательно, для двух любых точек x_1 и x_2 , лежащих на одной прямой с центром, имеет место равенство

$$x_2 - x^* = \left(\frac{Q_2}{Q_1}\right)^{1/2} (x_1 - x^*), \quad (5.8)$$

где

$$Q_i = Q(x_i - x^*), \quad i = 1, 2. \quad (5.9)$$

Если положение контура Q_1 известно, то положение контура Q_2 может быть найдено, если увеличить расстояние

до точек Q_1 в радиальном направлении в $\sqrt{\frac{Q_2}{Q_1}}$ раз. Именно благодаря радиальному подобию эллипсов метод ПК и оказывается действенным.

Рассмотрим теперь касательные к линиям уровня в точках x_1 и x_2 , лежащих на одной прямой с вершиной x^* . Обозначим произвольную точку $x \equiv (x_1, x_2)$. В соответствии с уравнением (3.26) геометрическое место точек x касательной π_2 в точке x_2 удовлетворяет соотношению

$$\left(\frac{\partial Q_2}{\partial x_1}\right)(x_1 - x_{21}) + \left(\frac{\partial Q_2}{\partial x_2}\right)(x_2 - x_{22}) = 0, \quad (5.10)$$

где dQ_2/dx_i — частная производная Q_2 по x_i в точке x_2 . Аналогично для касательной π_1 в точке x_1

$$\left(\frac{\partial Q_1}{\partial x_1}\right)(x_1 - x_{11}) + \left(\frac{\partial Q_1}{\partial x_2}\right)(x_2 - x_{12}) = 0. \quad (5.11)$$

Из уравнения (5.7) получаем

$$\left(\frac{\partial Q_2}{\partial x_i}\right) = \lambda^2 \left(\frac{\partial Q_1}{\partial x_i}\right), \quad i = 1, 2. \quad (5.12)$$

Поэтому уравнение для π_2 может быть записано с теми же коэффициентами, что и для π_1 :

$$\left(\frac{\partial Q_1}{\partial x_1}\right)(x_1 - x_{21}) + \left(\frac{\partial Q_1}{\partial x_2}\right)(x_2 - x_{22}) = 0. \quad (5.13)$$

Следовательно, обе касательные имеют один и тот же тангенс угла наклона:

$$\frac{x_2 - x_{22}}{x_1 - x_{21}} = - \frac{(\partial Q_1 / \partial x_1)}{(\partial Q_1 / \partial x_2)} = \frac{x_2 - x_{12}}{x_1 - x_{11}}. \quad (5.14)$$

Это и означает, что π_1 и π_2 параллельны. Итак, мы показали, что если две точки x_1 и x_2 лежат на одной прямой с центром x^* семейства эллиптических линий уровня, то касательные π_1 и π_2 к линиям уровня в этих точках параллельны.

Уравнения (5.7) и (5.12), справедливые для концентрических эллипсов, действительны лишь в том случае, когда соответствующие точки лежат на одной прямой с центром. Более того, прямая линия может касаться эллипса только в своей наивысшей точке. Следовательно, наивысшие

точки всех касательных лежат на одной прямой с центром. Этот факт и лежит в основе обобщенного метода параллельных касательных (рис. 5.6).

Метод ОПК требует для своего применения лишь параллельности линий и возможности одномерного поиска. Оба эти условия инвариантны относительно изменения масштаба и поворота осей, а это важно по двум причинам. Во-первых, это упрощает анализ метода в гиперпространстве так как можно переходить от эллиптических контуров к сферическим. Во-вторых, такая особенность дает возможность построить инвариантный по отношению к масштабу метод ПК (ИПК), совершенно нечувствительный к выбору единицы измерения.

5.05. Многомерный вариант метода параллельных касательных

Предположим, что критерий эффективности является функцией от отрицательно определенной квадратической формы переменных x_1 , x_2 и x_3 . Гиперповерхности уровня такой функции представляют собою эллипсоиды в трехмерной области. В этих условиях метод ПК применяется в два этапа. Вначале находится плоскость, содержащая центр, а затем на этой плоскости уже используется двумерный вариант метода ПК. Первые четыре шага в трехмерном варианте метода ПК полностью совпадают с процедурой поиска на плоскости. На пятом шаге определяется расположение плоскости, содержащей точку x^* . Процедура поиска такова, что одновременно с нахождением этой плоскости становятся известными и три точки на ней. Они используются далее для поиска на плоскости, и с их помощью определяется положение центра x^* (обозначенного на рис. 5.7 точкой p_6).

Рис. 5.7 иллюстрирует применение метода УПК для поиска в трехмерном пространстве. Первые четыре шага совпадают с методом УПК на плоскости, которая на рис. 5.7 изображена для удобства горизонтальной.

В силу того, что проекции эллипсоидов на любую секущую плоскость являются эллипсами, точка p_4 , в которой критерий достигает максимума, принадлежит построенной горизонтальной плоскости. Интуитивно ясно, что следую-

щая точка p_5 может быть найдена с помощью одномерного поиска из p_4 в направлении вертикального градиента. Необходимо отметить, что эта линия параллельна линии пересечения касательных плоскостей π_0 и π_2 .

Из рис. 5.7 видно, что точки p_2 , p_4 и p_5 расположены на плоскости π_{245} в том порядке, который характерен для

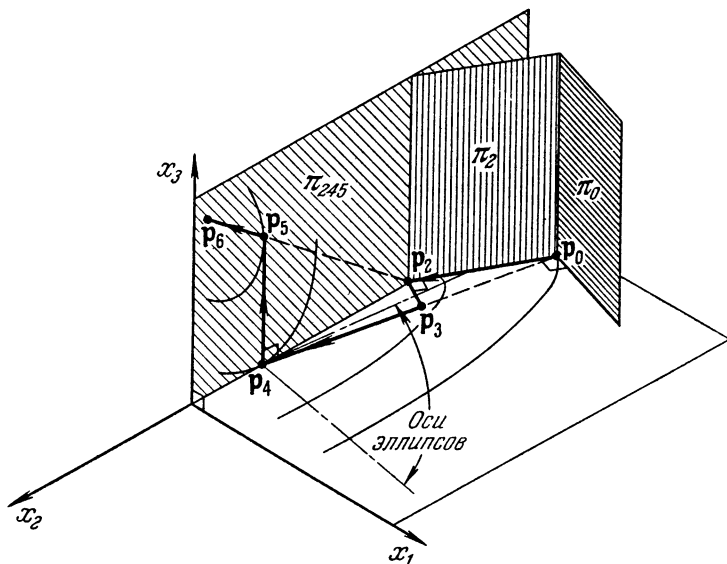


Рис. 5.7. Метод УПК в пространстве.

двумерного варианта метода ПК. Это объясняется тем, что вертикальная плоскость π_2 , касательная к эллипсоиду в точке p_2 , пересекает π_{245} по линии, которая обязательно параллельна вертикали p_5p_4 . Следовательно, продолжая поиск вдоль линии p_5p_2 , мы приходим к точке p_6 , которой соответствует наибольшее по сравнению с другими точками плоскости π_{245} значение критерия. Если теперь удастся доказать, что вершина x^* также лежит в плоскости π_{245} , то отсюда немедленно будет следовать, что p_6 и есть вершина. Для этого достаточно показать, что четыре точки p_2 , p_4 , p_5 и x^* лежат в одной плоскости. При доказательстве

этого факта мы будем следовать геометрическим идеям Шаха, Бюлера и Кемпторна ¹⁾).

Доказательство того, что точки лежат в одной плоскости, опирается на поведение обобщенного метода ПК на сферических контурах. Предположим, что исходные эллипсоиды подвергаются вначале повороту до тех пор, пока их оси

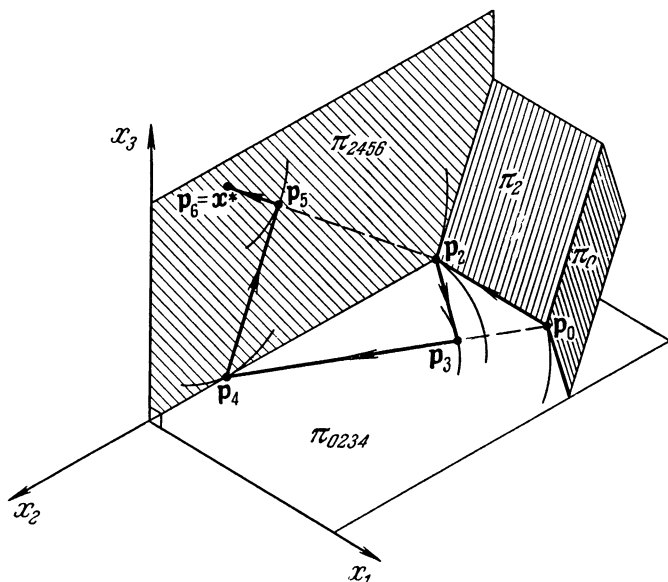


Рис. 5.8. Метод ОПК при сферических контурах уровня.

не будут параллельными координатным осям, а затем производится изменение масштаба по переменным x_2 и x_3 до полного равенства всех трех осей. Эллипсоиды перейдут, таким образом, в сферы. В результате этих преобразований теряются свойства перпендикулярности ускоренного метода ПК, но зато сохраняется параллельность линий, а точки, лежащие на одной прямой или плоскости, переходят в точки, также обладающие этим свойством. Таким образом, если точки p_2 , p_4 , p_6 и x^* в результате преобразо-

¹⁾ См. ссылку ¹⁾ на стр. 174.

вания оказались в одной плоскости, то они лежали в одной плоскости и до преобразования. Более того, метод ОПК пригоден для поиска на плоскости π_{0234} , содержащей первые четыре точки, так же как и на плоскости π_{2456} , содержащей точки $\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_4, \mathbf{p}_5$ и \mathbf{p}_6 . Процедура поиска методом ОПК в трехмерном пространстве состоит из следующих этапов (рис. 5.8):

1. Произвольным образом выбираются начальная точка \mathbf{p}_0 и прямая, проходящая через нее, но не лежащая в плоскости π_0 , касательной к эллипсоиду в точке \mathbf{p}_0 . Находится наивысшая точка \mathbf{p}_2 этой прямой.

2. Через \mathbf{p}_2 проводится произвольная линия, параллельная π_0 и не лежащая в плоскости π_2 , касательной к эллипсоиду в точке \mathbf{p}_2 . Наивысшая точка этой прямой обозначается \mathbf{p}_3 .

3. Находится наивысшая точка \mathbf{p}_4 , лежащая на линии $\mathbf{p}_0\mathbf{p}_2$.

4. Определяется \mathbf{p}_5 — наивысшая точка единственной линии, проходящей через \mathbf{p}_4 параллельно линии пересечения плоскостей π_0 и π_2 .

5. Находится \mathbf{p}_6 — наивысшая точка линии $\mathbf{p}_2\mathbf{p}_5$. Эта точка и есть искомый центр \mathbf{x}^* системы трехмерных эллипсоидов.

Применение в данном доказательстве сферических контуров удобно тем, что любая линия, соединяющая центр \mathbf{x}^* с любой точкой \mathbf{p}_i , перпендикулярна к соответствующей касательной плоскости π_i . В частности, $\mathbf{p}_2\mathbf{x}^*$ перпендикулярна к π_2 , а $\mathbf{p}_4\mathbf{x}^*$ — к π_4 . Поскольку линия $\mathbf{p}_2\mathbf{p}_0$ принадлежит обоим этим плоскостям, она должна быть перпендикулярна к плоскости $\pi_{24\mathbf{x}^*}$, содержащей точки $\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_4, \mathbf{x}^*$. Далее, линия $\mathbf{p}_5\mathbf{p}_4$ была проведена параллельно линии пересечения плоскостей π_0 и π_2 . Так как π — перпендикулярна $\mathbf{p}_0\mathbf{x}^*$, а π_2 — к $\mathbf{p}_2\mathbf{x}^*$, то линия пересечения этих плоскостей перпендикулярна плоскости $\pi_{24\mathbf{x}^*}$, в которой лежит прямая $\mathbf{p}_2\mathbf{p}_0$. Поэтому и линия $\mathbf{p}_5\mathbf{p}_4$ перпендикулярна прямой $\mathbf{p}_2\mathbf{p}_0$. Это в свою очередь означает, что линия $\mathbf{p}_5\mathbf{p}_4$ лежит в плоскости $\pi_{24\mathbf{x}^*}$, также перпендикулярной $\mathbf{p}_2\mathbf{p}_0$. Отсюда следует, что \mathbf{p}_5 принадлежит плоскости $\pi_{24\mathbf{x}^*}$ или, что то же самое, \mathbf{x}^* лежит в π_{245} , содержащей точки $\mathbf{p}_2\mathbf{p}_4$ и \mathbf{p}_5 . Поскольку \mathbf{p}_6 является наивысшей точкой плоскости π_{245} , то точка \mathbf{x}^* должна совпадать с ней. К этому выводу приводят оба метода: УПК и ОПК.

5.06. Преимущества метода УПК

Во всем семействе методов параллельных касательных наиболее удачным является метод УПК. Если в системе эллипсов некоторые из осей равны, то он обеспечивает наименьшее время поиска центра системы. Это особенно ясно видно, когда равны все оси системы. В этом случае эллипсоиды превращаются в сферы, а линия градиента — в прямую линию, проходящую через p_0 и центр системы $x^* = p_2$. Поиск заканчивается за один шаг.

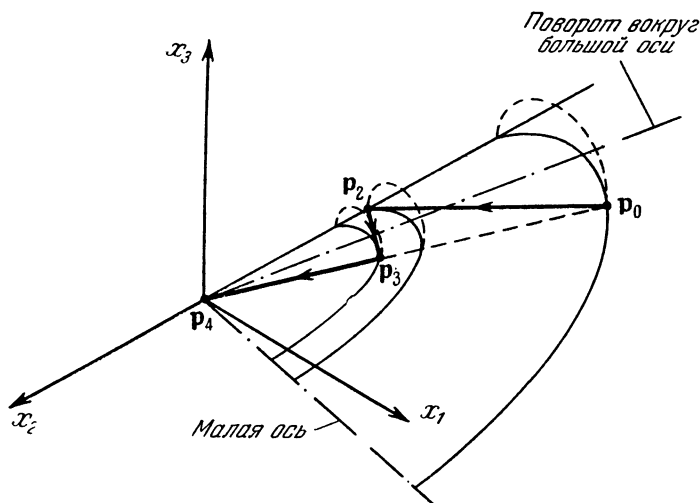


Рис. 5.9. Метод УПК на эллипсоидах вращения.

Рассмотрим пример. Предположим, что только две оси равны, а гиперповерхности уровня являются эллипсоидами вращения. В результате первых четырех шагов поиска фиксируется некоторая плоскость, на которую эллипсоиды проектируются в виде эллипсов с центром в точке p_4 . Из рис. 5.9 видно, что эта плоскость π_{024} , которая для удобства изображена горизонтальной, перпендикулярна к плоскостям, касательным к системе эллипсоидов в точках p_0 и p_2 . Эту систему эллипсоидов можно построить двумя способами: во-первых, путем вращения плоскости эллипсов вокруг биссектрисы угла $p_0p_4p_2$, которая, таким образом,

станет одной из осей системы, и, во-вторых, вращением эллипсов вокруг другой оси, также расположенной в плоскости π_{024} , но перпендикулярно к первой.

По определению эллипсоид вращения может быть получен лишь путем вращения эллипса вокруг одной из его осей. Никакая другая линия эллипса для этого не пригодна. Поэтому рассмотренные варианты исчерпывают все возможности построения эллипсоидов вращения с помощью эллипсов, лежащих на плоскости π_{024} . Отсюда также следует, что p_4 — единственная точка, которая может быть центром x^* этой системы эллипсоидов, имеющих две одинаковые оси.

Полученный результат нетрудно обобщить на функции любого числа переменных. Это связано с тем, что когда лишь две оси системы не равны, метод УПК сводит процедуру отыскания вершины к поиску на плоскости, проходящей через вершину x^* . Метод ОПК этим свойством не обладает, так как в общем случае касательные плоскости π_0 и π_2 не перпендикулярны к π_{024} , если только направление поиска не определяется с помощью градиента.

5.07. Два примера на применение метода УПК

Все приведенные до сих пор доказательства носили чисто геометрический характер. Поэтому для уяснения перехода к соответствующим алгебраическим выражениям рассмотрим два числовых примера. В первой задаче требуется найти максимум функции $y = -2x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$. Поскольку две оси равны, то для решения задачи требуется лишь двумерный поиск. Во втором примере надо найти максимум выражения $y = -2x_1^2 - x_2^2 - 3x_3^2$. Здесь уже потребуется трехмерный поиск. Обе функции отрицательно определены, а их вершины лежат в начале координат $(0, 0, 0)$. Выбранные примеры носят, конечно, искусственный характер. Это сделано ради простоты и для того, чтобы сосредоточить внимание читателя на самой методике поиска. В обычных условиях вид функции неизвестен; в противном случае координаты центра находились бы немедленно путем дифференцирования и последующего решения совместной системы уравнений. В данных примерах знание вида функции избавляет нас от необходимости определять

направляющие косинусы m_1 , m_2 и m_3 касательной плоскости в некоторой точке, ибо они просто равны значениям частных производных dy/dx_i ($i = 1, 2, 3$) в той же точке. Таким образом, направляющие косинусы функции $-2x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$ в точке \mathbf{a} (a_1, a_2, a_3) соответственно равны $m_1 = -4a_1$; $m_2 = -2a_2$; $m_3 = -2a_3$. Уравнение плоскости, касательной к y в точке \mathbf{a} , имеет вид

$$-4a_1(x_1 - a_1) - 2a_2(x_2 - a_2) - 2a_3(x_3 - a_3) = 0, \quad (5.15)$$

где $\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2, x_3)$ — точка касательной плоскости.

В реальных условиях направляющие косинусы должны определяться экспериментально с помощью методов, описанных в главе 3. Другое удобство искусственных задач состоит в том, что высшая точка линии поиска может быть также найдена аналитически. Для этого координаты точек линии и функция критерия выражаются через единственный параметр λ (см. главу 3):

$$y(\lambda) = y[x_1(\lambda), x_2(\lambda), x_3(\lambda)], \quad (5.16)$$

а затем определяется значение λ , соответствующее условию $dy/d\lambda = 0$. Эта методика будет освещена далее при решении задач. Необходимо только иметь в виду, что в реальных условиях наивысшую точку приходится находить не дифференцированием, а с помощью одномерного поиска (см. главу 2).

Начнем поиск максимума функции

$$y = -2x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 \quad (5.17)$$

из произвольно выбранной точки $\mathbf{p}_0 = (-1, 1, -1)$. Уравнение плоскости, касательной в точке \mathbf{p}_0 , имеет вид

$$4(x_1 + 1) - 2(x_2 - 1) + 2(x_3 + 1) = 0. \quad (5.18)$$

Используя формулу (4.42), находим параметрические уравнения градиента в точке \mathbf{p}_0 :

$$x_1 = -1 + 4\lambda; \quad x_2 = 1 - 2\lambda; \quad x_3 = -1 + 2\lambda, \quad (5.19)$$

где λ — искомый параметр. Выражаем через λ функцию критерия:

$$y = -2(-1 + 4\lambda)^2 - (1 - 2\lambda)^2 - (-1 + 2\lambda)^2. \quad (5.20)$$

Решая уравнение

$$\frac{dy}{d\lambda} = -8[2(4\lambda - 1) + (2\lambda - 1)] = 0, \quad (5.21)$$

находим значение $\lambda^* = 0,3$ и координаты наивысшей точки линии:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_2 &= (-1 + 4(0,3); \\ 1 - 2(0,3); -1 + 2(0,3)) &= (0,2; 0,4; -0,4). \end{aligned} \quad (5.22)$$

Дальнейшее движение из \mathbf{p}_2 идет вдоль линии градиента, удовлетворяющей параметрическим уравнениям

$$x_1 = 0,2 - 0,8\lambda; \quad x_2 = 0,4 - 0,8\lambda; \quad x_3 = -0,4 + 0,8\lambda. \quad (5.23)$$

Нетрудно убедиться в том, что на этой линии $y(\lambda)$ принимает максимальное значение при $\lambda^* = 0,375$. Поэтому

$$\mathbf{p}_3 = (-0,1; 0,1; -0,1). \quad (5.24)$$

Переходим к первому ускоренному подъему вдоль линии $\mathbf{p}_0\mathbf{p}_3$. Векторное уравнение этой линии имеет вид

$$\mathbf{x} - \mathbf{p}_0 = \lambda(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_0), \quad (5.25)$$

откуда

$$\mathbf{x} = (-1 + 0,9\lambda; 1 - 0,9\lambda; -1 + 0,9\lambda). \quad (5.26)$$

Максимум функции критерия $y = -4(1 - 0,9\lambda)^2$ на этой линии достигается при $\lambda^* = 10/9$. Отсюда

$$\mathbf{p}_4 = (0, 0, 0). \quad (5.27)$$

Легко показать, что направляющие косинусы плоскости, касательной в точке \mathbf{p}_4 , равны нулю, а это возможно лишь в том случае, когда \mathbf{p}_4 совпадает с вершиной \mathbf{x}^* . Таким образом, для нахождения точки $\mathbf{p}_4 = \mathbf{x}^*$ потребовалось на два шага меньше, чем при обычном трехмерном поиске. Это не случайно. Равенство двух осей системы эллипсоидов позволило сократить число шагов за счет применения метода УПК.

Для нахождения вершины второй функции $y = -2x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$ требуется большее число операций. Векторное уравнение линии градиента в точке \mathbf{a} имеет вид

$$\mathbf{x} = \mathbf{a} + \lambda(-4a_1, -2a_2, -6a_3). \quad (5.28)$$

Начальной точке $\mathbf{p}_0 = (-1, 1, -1)$ соответствует следующая линия градиента:

$$\mathbf{x} = (-1 + 4\lambda; 1 - 2\lambda; -1 + 6\lambda). \quad (5.29)$$

Это выражение обращается в максимум при $\lambda^* = 0,1944$, откуда

$$\mathbf{p}_2 = (-0,22222; 0,61111, 0,16666). \quad (5.30)$$

Следующая точка \mathbf{p}_3 соответствует наивысшей точке линии градиента, восстановленной в \mathbf{p}_2 . Легко показать, что

$$\mathbf{p}_3 = (0,01807; 0,28071; -0,10366). \quad (5.31)$$

Первый ускоренный подъем приводит к точке

$$\mathbf{p}_4 = (0,1084; 0,2169; -0,0241), \quad (5.32)$$

которая, как легко проверить, лежит в одной плоскости с \mathbf{p}_0 и \mathbf{p}_3 . Поскольку направляющие косинусы касательной в точке \mathbf{p}_4 плоскости не равны нулю, то поиск продолжается. Второй этап поиска методом УПК осуществляется вдоль линии

$$\mathbf{x} = (0,1084 - 0,4337\lambda; 0,2169 - 0,4337\lambda; -0,0241 + 0,1446\lambda). \quad (5.33)$$

Ее наивысшая точка соответствует $\lambda^* = 0,3167$, и

$$\mathbf{p}_5 = (-0,0289; 0,0795; 0,0217). \quad (5.34)$$

Второй, и последний в трехмерном случае, ускоренный подъем осуществляется вдоль линии $\mathbf{p}_2\mathbf{p}_5$ по направлению от \mathbf{p}_2 к \mathbf{p}_5 . Поскольку нам известно заранее, что в данном примере $\mathbf{x}^* = (0, 0, 0)$, то надо проверить, лежат ли в одной плоскости точки \mathbf{p}_2 , \mathbf{p}_5 и начало координат, ибо в этом случае \mathbf{p}_6 совпадает с \mathbf{x}^* . Путем непосредственного подсчета находим

$$\mathbf{p}_5 = 0,130 \mathbf{p}_2. \quad (5.35)$$

Значит, \mathbf{p}_2 и \mathbf{p}_5 лежат на одном и том же луче, проходящем через начало координат. Следовательно,

$$\mathbf{p}_6 = \mathbf{x}^* = (0, 0, 0). \quad (5.36)$$

ляется положение касательной плоскости π_{2k} . Восхождение из точек \mathbf{p}_{2k} осуществляется вдоль линий, параллельных касательным плоскостям $\pi_0, \pi_2, \dots, \pi_{2k-2}$ ($k = 1, 2, \dots, n - 1$). Этому условию параллелизма метод УПК удовлетворяет автоматически. Точки с четной нумерацией \mathbf{p}_{2k} определяются в результате ускоренного подъема вдоль линии $\mathbf{p}_{2k-4} \mathbf{p}_{2k-1}$ ($k = 2, 3, \dots, n$). Точка \mathbf{p}_2 располагается в вершине произвольной линии, начинающейся в \mathbf{p}_0 . Особенно тщательно надо следить за тем, чтобы точка \mathbf{p}_{2k-1} с нечетной нумерацией не появлялась на касательной плоскости π_{2k} , порожденной предыдущей точкой \mathbf{p}_{2k-2} ($k = 2, 3, \dots, n$). В противном случае возможно совпадение двух точек. То же самое относится и к точке \mathbf{p}_2 ; она не должна попасть на π_0 . Процесс заканчивается в точке \mathbf{p}_{2n} после 2_{n-1} одномерных шагов и n измерений положения касательных плоскостей, включая и последнюю плоскость в точке \mathbf{p}_{2n} .

5.09. Метод ПК, инвариантный относительно выбора масштабов

В рассмотренных выше примерах не было алгебраической интерпретации параллелизма, поскольку вся процедура поиска сводилась к перемещению из нечетных точек к четным в направлении градиента. Ниже на одном примере будет показано применение метода параллельных касательных для анализа более общих схем, где метод наискорейшего подъема неприменим. Излагаемый далее метод приводит к одной и той же траектории поиска вне зависимости от масштаба измерений и потому называется инвариантным относительно масштаба методом параллельных касательных (ИПК). Если поверхность отклика ограничена эллипсоидами, то любой метод из семейства ПК приведет к искомой вершине \mathbf{p}_{2n} , и в этом идеальном случае метод ИПК не обладает особым преимуществом. С другой стороны, стратегия метода ПК, в которой используется подъем и ускорение, оказывается пригодной при поиске на более общих классах функций. В этих условиях инвариантность относительно масштаба может оказаться полезной.

Метод ИПК требует, чтобы независимые переменные располагались в определенном порядке. Без потери общ-

ности можно предположить, что этот порядок задается последовательностью x_1, x_2, x_3 и т. д. Тогда точка \mathbf{p}_2 располагается на единственной прямой линии $\mathbf{p}_0\mathbf{p}_2$, на которой все переменные, кроме x_1 , зафиксированы. Следующая точка \mathbf{p}_3 лежит на линии, параллельной плоскости π_0 , на которой изменяются лишь x_1 и x_2 . Эта линия также единственна, поскольку гиперплоскость π_0 имеет $n - 1$ степеней свободы, из которых $n - 2$ связаны требованием постоянства x_3, x_4, \dots, x_n . В общем случае ускоренный поиск, начинающийся в любой точке \mathbf{p}_{2k} с четным индексом, идет вдоль единственной линии, параллельной $\pi_0, \pi_2, \dots, \pi_{2k-2}$, на которой все переменные, кроме x_1, x_2, \dots, x_{k+1} , зафиксированы. При этом методе поиска используется та же процедура, что и при ОПК.

Будем вновь искать точку максимума x^* функции $y = -2x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$, но на этот раз методом ИПК. Как и ранее, начнем поиск из точки $\mathbf{p}_0 = (-1, 1, -1)$. Вначале определим уравнение касательной плоскости π_0 , которое понадобится в дальнейшем. В соответствии с (5.15) имеем для π_0 уравнение

$$4(x_1 + 1) - 2(x_2 - 1) + 2(x_3 + 1) = 0. \quad (5.37)$$

Следующая точка \mathbf{p}_2 должна располагаться на линии, вдоль которой изменяется только x_1 . Текущая точка этой линии имеет координаты $(x_1, 1, -1)$, а функция критерия $-2x_1^2 - 2$ принимает максимальное значение при $x_1 = 0$. Отсюда

$$\mathbf{p}_2 = (0, 1, -1). \quad (5.38)$$

Точка \mathbf{p}_0 должна лежать на плоскости, содержащей \mathbf{p}_2 и параллельной π_0 . Рассмотрим две произвольные плоскости, уравнения которых имеют вид

$$m_{01}(x_1 - p_{01}) + m_{02}(x_2 - p_{02}) + m_{03}(x_3 - p_{03}) = 0 \quad (5.39)$$

и

$$m_{21}(x_1 - p_{21}) + m_{22}(x_2 - p_{22}) + m_{23}(x_3 - p_{23}) = 0, \quad (5.40)$$

где m_{ij} и p_{ij} ($i = 0, 2; j = 1, 2, 3$) — известные постоянные. Первая плоскость содержит точку (p_{01}, p_{02}, p_{03}) , вторая — (p_{21}, p_{22}, p_{23}) . Две плоскости параллельны в том и только в том случае, когда соответствующие угловые коэффициенты пропорциональны, т. е. $m_{01} = km_{21}$; $m_{02} = km_{22}$;

$m_{03} = km_{23}$, k — некоторая постоянная. Поэтому плоскость, проходящая через \mathbf{p}_2 параллельно π_0 , должна удовлетворять уравнению

$$4x_1 - 2(x_2 - 1) + 2(x_3 + 1) = 0. \quad (5.41)$$

Коэффициенты этого уравнения заимствованы из (5.37). Следует отметить, что (5.11) не совпадает с уравнением касательной плоскости π_2 , содержащей \mathbf{p}_2 :

$$-2(x_2 - 1) + 2(x_3 + 1) = 0. \quad (5.42)$$

Второе условие, которому отвечает точка \mathbf{p}_3 , состоит в том, что она должна принадлежать плоскости $x_3 = -1$, поскольку могут изменяться лишь x_1 и x_2 . Это ограничение, совместно с уравнением (5.41), позволяет выразить координаты всех точек в виде функции единственной переменной, например x_2 , ибо

$$x_1 = \frac{1}{2}(x_2 - 1). \quad (5.43)$$

Так как имеется всего лишь одна степень свободы, то \mathbf{p}_3 должна лежать на некоторой прямой. Ее текущие координаты $\left[\frac{1}{2}(x_2 - 1), x_2, -1\right]$, а функция критерия на ней определяется выражением

$$y = -\frac{1}{2}(x_2 - 1)^2 - x_2^2 - 1. \quad (5.44)$$

Решая уравнение $dy/dx_2 = 0$, находим точку максимума $x_2 = \frac{1}{3}$. Таким образом,

$$\mathbf{p}_3 = \left(-\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, -1\right). \quad (5.45)$$

Как обычно, точка \mathbf{p}_4 соответствует максимуму линии $\mathbf{p}_0\mathbf{p}_3$. Точки \mathbf{x} этой линии должны удовлетворять уравнению

$$\mathbf{x} = \mathbf{p}_0 + \lambda(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_0) = (-1, 1, -1) + \lambda\left(\frac{2}{3}, -\frac{2}{3}, 0\right). \quad (5.46)$$

Читатель легко может убедиться в том, что максимум достигается при $\lambda = 3/2$. Поэтому

$$\mathbf{p}_4 = (0, 0, -1). \quad (5.47)$$

Эта точка является наивысшей на всей плоскости $x_3 = -1$.

Далее поиск продолжается в направлении, параллельном обоим плоскостям π_0 и π_2 . Из уравнений (5.37) и (5.42) следует, что эти точки должны удовлетворять одновременно двум уравнениям:

$$4x_1 - 2x_2 + 2(x_3 + 1) = 0 \quad (5.48)$$

и

$$-2x_2 + 2(x_3 + 1) = 0. \quad (5.49)$$

Эта система содержит два уравнения с тремя неизвестными. Поэтому она обладает не более чем одной степенью свободы и определяет линию в пространстве. В данном случае все три переменные должны быть свободны, ибо фиксация любой из них приведет к потере единственной степени свободы. Выразим x_1 и x_2 через x_3 . Очевидно, $x_1 = 0$, а $x_2 = x_3 + 1$. На этой линии максимум критерия $y = -(x_3 + 1)^2 - x_3^2$ достигается в точке $x_3 = -\frac{1}{2}$. Отсюда

$$\mathbf{p}_5 = \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right). \quad (5.50)$$

И, наконец, точка \mathbf{p}_6 располагается на линии, проходящей через \mathbf{p}_2 и \mathbf{p}_5 . Поскольку \mathbf{p}_2 и \mathbf{p}_6 лежат на одной прямой с началом координат, то, как и следовало ожидать,

$$\mathbf{p}_6 = (0, 0, 0) = \mathbf{x}^*. \quad (5.51)$$

В заключение выпишем общие алгебраические уравнения, которым должны удовлетворять координаты каждой точки \mathbf{p}_{2k+1} с нечетным индексом ($k = 1, 2, \dots, n-1$).

Пусть уравнение касательной плоскости с четным индексом π_{2j} ($j = 0, 1, 2, \dots, k-1$) имеет вид

$$\sum_{l=1}^n m_{(2j)l} (x_l - p_{(2j)l}) = 0. \quad (5.52)$$

Здесь $m_{(2j)l}$ — угловые коэффициенты π_{2j} , а $p_{(2j)l}$ — координаты точек \mathbf{p}_{2j} . Уравнения (5.39) и (5.40) являются частными случаями (5.52) при $j = 0$ и $j = 1$ соответственно. Отметим также, что суммирование по l идет до n — числа независимых переменных. Таким образом, уравнение (5.52) относится к гиперпространству. Чтобы линия, проходящая

через \mathbf{p}_{2k} , была параллельна плоскостям $\pi_0, \pi_2, \dots, \pi_{2k-2}$, необходимо выполнение следующих условий:

$$\sum_{l=1}^n m_{(2j)l} (x_l - p_{(2k)l}) = 0, \quad j = 0, 1, \dots, k-1. \quad (5.53)$$

Система (5.53) определяет гиперплоскость размерности $n - k$. Метод ИПК требует, чтобы только $k + 1$ первых переменных оставались свободными. Это означает, что остальные $n - (k + 1)$ переменных фиксируются, после чего остается лишь одна степень свободы, и определяется единственная линия, по которой ведется поиск.

5.10. Контуры неэллиптического типа

Как известно, методы параллельных касательных дают хорошие результаты при поиске на эллиптических контурах. В связи с этим возникают два вопроса: первый — каковы показатели метода ПК при поиске на неэллиптических системах контуров; второй — существуют ли вообще иные типы контуров, на которых оправдано применение метода ПК.

Дадим вначале ответ на первый вопрос. Сущность метода ПК такова, что он пригоден для поиска на любой функции. В общем случае, когда форма поверхности отклика отличается от эллипсоидальной, точка \mathbf{p}_{2n} не совпадает с максимумом. Однако ничто не мешает исследователю начать новую процедуру поиска методом ПК, отталкиваясь уже от \mathbf{p}_{2n} . Более того, исследователь может поочередно использовать все предыдущие касательные плоскости, кроме π_0 . В этом случае он должен вести поиск из точки \mathbf{p}_{2n} вдоль единственной линии, параллельной плоскостям $\pi_2, \pi_4, \pi_6, \dots, \pi_{2n-2}$. И вообще при $k \geq n$ точка \mathbf{p}_{2k+1} должна лежать на линии, проходящей через \mathbf{p}_{2k} и параллельной одновременно всем плоскостям π_{2j} , $(k - n) < j < (k - 1)$. Такая разновидность метода ПК, в которой используются поочередно подъемы и ускорения, может быть применена к любой функции. Что касается УПК, то он приводит к хорошим результатам только в том случае, когда удается подобрать соответствующий масштаб измерений и сделать поверхности уровня близкими к сферическим. Благодаря

значительному числу ускорений можно ожидать, что метод окажется успешным и при наличии прямолинейных гребней. И, наконец, естественно предположить, что вблизи точки оптимума функция критерия зачастую слабо отличается от квадратичной вследствие малости высших членов разложения в ряд Тейлора.

Переходим ко второму вопросу: существуют ли неэллипсоидальные функции, на которых метод ПК оказывается

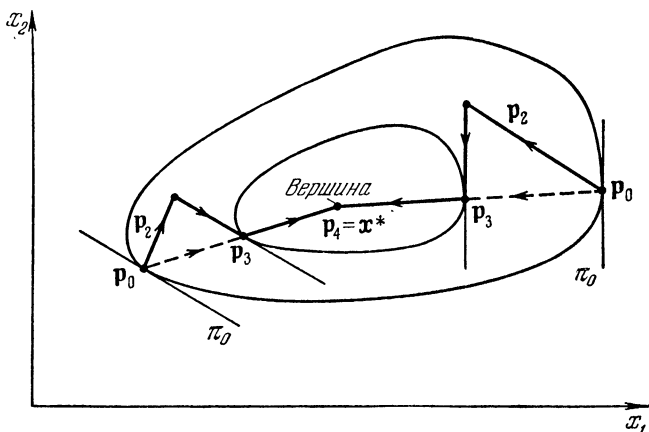


Рис. 5.11. Двумерный вариант метода ОПК при радиально-подобных линиях уровня.

успешным. В двумерной области ответ на него положителен: свойства ПК сохраняются для любой системы радиально подобных контуров (рис. 5.11). Однако в пространстве трех и более чисел переменных радиального подобия на плоскости уже недостаточно. Идея метода ПК состоит в поиске наивысшей точки некоторой секущей плоскости, и потому для получения результата необходима радиальная симметрия функции критерия во всех возможных направлениях. Эллипсоиды таким свойством обладают, поскольку пересечение $(n - 1)$ -мерной плоскости с n -мерным эллипсоидом является $(n - 1)$ -мерным эллипсоидом. Другие функции, обладающие этим свойством, нам не известны.

5.11. Выводы

Метод параллельных касательных предназначен для поиска оптимума функции, обладающей концентрическими эллипсоидальными поверхностями уровня, и для этой цели используются поочередно подъемы и ускорения. Оптимум функции n переменных находится не более чем за $2n - 1$ одномерных процедур поиска и измерений касательных плоскостей. Этот метод пригоден для поиска на любой унимодальной функции и обеспечивает эффективное отслеживание прямолинейных гребней. Он требует весьма небольшого количества информации, но зато сопряжен с громоздкими вычислениями. В том случае, когда соответствующим выбором масштаба удастся приблизить поверхности уровня к сферам, целесообразно применять УПК. Полезной модификацией является также метод ИПК. В том случае, когда функция строго унимодальна, он может быть использован как метод исключения областей неопределенности.

МЕТОД КОНФИГУРАЦИЙ

Хук и Дживс¹⁾ разработали логический метод, позволяющий удерживаться на ребре острого гребня при поиске вдоль него. В основе этого метода, который они называли методом конфигураций (pattern search), лежит гипотеза локальной неизменности направления поиска. Применение этой стратегии особенно благоприятно при поиске вдоль прямолинейных гребней, ибо в этом случае предыдущую информацию удастся использовать наиболее полно.

На первом этапе, в районе начальной точки, поиск ведется медленно, с помощью небольших шагов. По мере успешного продвижения вперед их длина возрастает, и это длится до тех пор, пока выбранное направление правильно. Затем поиск замедляется, вся процедура повторяется вновь и начинается движение в новом направлении. По мере приближения к вершине длина шага сокращается. По-видимому, этот метод поиска хорошо приспособлен для решения

¹⁾ R. Hooke and T. A. Jeeves, «Direct search» solution of numerical and statistical problems, Journ. of Assoc. Comp. Math. 8, 2 (April 1961), pp. 212—229.

задач связанных с построением кривых методом наименьших квадратов. Так, Д. Химмельблау использует его для оценки параметров нелинейных уравнений термодинамики и кинетики по результатам эксперимента. (Кстати, он первым обратил наше внимание на этот метод.) Блюм применил его для оптимизации химических процессов. Хук и Дживс сообщили об успешном приложении этого метода к задаче восстановления кривой потока нейтронов в ядерном реакторе. Им удалось экспериментально установить, что время поиска растет пропорционально первой степени числа переменных. Этот результат тем более замечателен, что в классических процедурах объем вычислений растет пропорционально кубу числа переменных. Причина такого сокращения времени состоит в том, что гребень в действительности является одномерным объектом и вполне может быть охарактеризован одним параметром. Таким образом, высокая эффективность метода, обнаруженная вначале эмпирически, в значительной степени объясняется возможностью движения по гребню, причем резко сокращается размерность задачи.

На базе этого метода поиска фирма Вестингауз создала устройство «Опкон» и применила его для автоматической оптимизации режима экспериментальной установки компании Доу Кемикл. Установка предназначена для получения стирена путем католитической дигидрогенизации этилбензола¹⁾.

В качестве критерия был принят максимум выхода стирена. Устройство «Опкон» может применяться для регулирования (с заданной точностью) любой пары следующих независимых переменных: скорости подогревания (потока пара), температуры реактора и скорости подачи этилбензола. Регулятор «Опкон» применялся также для оптимизации режима дистилляционной колонны²⁾. Аналогичное устройство, названное «Оптимат», было создано фирмой Эллиот³⁾.

1) Progress report on Opcon, Control Engineering 6 (Nov. 1959), p. 124.

2) E. A. Weiss, D. H. Archer and D. A. Burt, Computer sets tower for best run. Petr. Ref. 40, 10 (Oct. 1961), pp. 169—174.

3) D. A. Bell, Intelligent machines (New York, Blaisdell Publ. Co., 1962), pp. 62—63.

5.12. Основы метода

Для уяснения того, что же мы называем конфигурацией, полезно представить себе стрелу, конец которой лежит в начальной точке поиска, а острие — в конечной. Поиск начинается в некоторой произвольно выбранной базовой точке \mathbf{b}_1 и ведется шагами длиной δ_i по каждой независимой переменной x_i ($i = 1, 2, \dots, k$). Пусть δ_i представляет собою вектор, все составляющие которого, кроме δ_i , равны нулю. Определяются значения критерия в двух последовательных точках \mathbf{b}_1 и $\mathbf{b}_1 + \delta_i$. Если новой точке $\mathbf{b}_1 + \delta_i$ соответствует улучшение критерия качества, то ее называют временной вершиной, обозначают \mathbf{t}_{11} и дальнейший поиск ведут уже из нее. Двойной индекс 11 в этом случае означает, что: 1) ведется первый этап поиска; 2) изменению подвергалась первая независимая переменная x_1 . Если же $\mathbf{b}_1 + \delta_i$ соответствует худшее значение критерия, то проверяют точку $\mathbf{b}_1 - \delta_i$. Возможно, однако, что обе точки $\mathbf{b}_1 + \delta_i$ и $\mathbf{b}_1 - \delta_i$ окажутся непригодными. В этом случае временной вершиной служит сама точка \mathbf{b}_1 . Пусть, например, ищется максимум. Тогда

$$\mathbf{t}_{11} = \begin{cases} \mathbf{b}_1 + \delta_1, & \text{если } y(\mathbf{b}_1 + \delta_1) > y(\mathbf{b}_1); \\ \mathbf{b}_1 - \delta_1, & \text{если } y(\mathbf{b}_1 - \delta_1) > y(\mathbf{b}_1) > y(\mathbf{b}_1 + \delta_1); \\ \mathbf{b}_1 & \text{если } y(\mathbf{b}_1) > \\ & > \max [y(\mathbf{b}_1 + \delta_1), y(\mathbf{b}_1 - \delta_1)]. \end{cases} \quad \begin{matrix} (5.54a) \\ (5.54b) \\ (5.54b) \end{matrix}$$

Рис. 5.12 соответствует уравнению (5.54б).

Из вершины \mathbf{t}_{11} аналогичным образом осуществляется поиск по следующей независимой переменной x_2 . В общем случае для j -й временной вершины \mathbf{t}_{1j} , найденной продвижением из $\mathbf{t}_{1,j-1}$, можно записать:

$$\mathbf{t}_{1j} = \begin{cases} \mathbf{t}_{1,j-1} + \delta_j, & \text{если } y(\mathbf{t}_{1,j-1} + \delta_j) > y(\mathbf{t}_{1,j-1}); \\ \mathbf{t}_{1,j-1} - \delta_j, & \text{если } y(\mathbf{t}_{1,j-1} - \delta_j) > y(\mathbf{t}_{1,j-1}) > \\ & > y(\mathbf{t}_{1,j-1} + \delta_j), \\ \mathbf{t}_{1,j-1}, & \text{если } y(\mathbf{t}_{1,j-1}) > \\ & > \max [y(\mathbf{t}_{1,j-1} + \delta_j), y(\mathbf{t}_{1,j-1} - \delta_j)]. \end{cases} \quad \begin{matrix} (5.55a) \\ (5.55b) \\ (5.55b) \end{matrix}$$

Если положить $t_{10} = b_1$, то это выражение охватывают все случаи $1 < j < k$. Рис. 5.12 соответствует уравнению

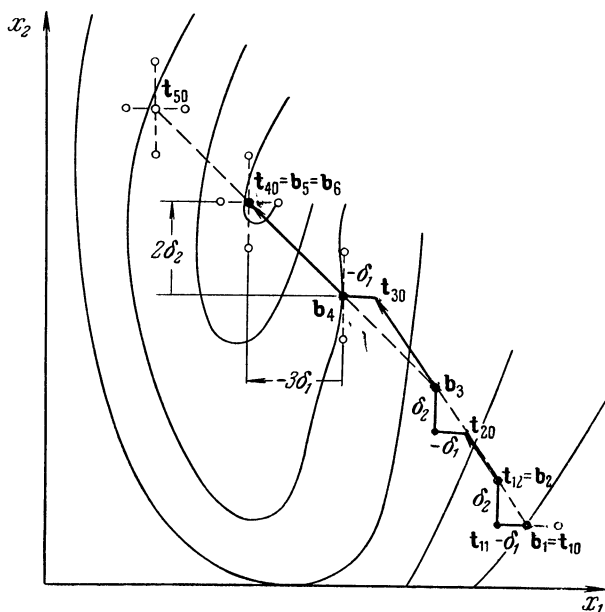


Рис. 5.12. Поиск гребня.

(5.55a) при $j = 2$. В результате первого этапа поиска по всем переменным находится временная вершина t_{1k} , которой дают название второй базовой точки и обозначают b_2 : $t_{1k} = b_2$.

5.13. Результирующие шаги

Пара базовых точек b_1 и b_2 определяет первую конфигурацию. Дальнейшая процедура поиска основывается на следующей гипотезе: предполагается, что направление движения из новой базовой точки остается тем же, что и на предыдущем участке. Опираясь на эту гипотезу, в данном случае отказываются от пробных движений вблизи точки b_2 и продвигаются в направлении b_1b_2 сразу на двойную

длину вектора $\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2$. Это движение определяет новую временную вершину \mathbf{t}_{20} второй конфигурации, начинающейся в точке \mathbf{b}_2 . Точка \mathbf{t}_{20} определяется следующим образом:

$$\mathbf{t}_{20} \equiv \mathbf{b}_1 + 2(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1) = \mathbf{b}_2 + (\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1) = 2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1. \quad (5.56)$$

Двойной индекс 20 означает, что осуществляется второй цикл поиска и пробных движений не было. Далее, вокруг точки \mathbf{t}_{20} совершаются пробные шаги, цель которых определить, не нуждается ли выбранное направление в коррекции. С помощью уравнений, аналогичных (5.55), находятся новые временные вершины $\mathbf{t}_{21}, \mathbf{t}_{22}, \dots, \mathbf{t}_{2k}$. Этот цикл пробных шагов по всем переменным завершается нахождением вершины \mathbf{t}_{2k} , которая и служит третьей базовой точкой \mathbf{b}_3 (рис. 5.12), если только \mathbf{t}_{2k} не совпадает с \mathbf{b}_2 . Новая временная вершина \mathbf{t}_{30} определяется в результате движения вдоль линии $\mathbf{b}_2\mathbf{b}_3$:

$$\mathbf{t}_{30} = 2\mathbf{b}_3 - \mathbf{b}_2. \quad (5.57)$$

В частности, на рис. 5.12 оказалось, что она лежит на одной прямой с точками \mathbf{b}_2 и \mathbf{b}_1 . Это означает, что в данном случае изменять направление поиска не понадобилось. Интересно отметить, что благодаря правильно выбранному направлению увеличилась и длина шага. Действительно,

$$\mathbf{b}_3 - \mathbf{b}_2 = 2(\mathbf{t}_{20} - \mathbf{b}_2) = 2(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1). \quad (5.58)$$

Аналогичным образом ведется поиск и на третьей конфигурации. Предположим далее, что в результате пробных шагов по x_1 и x_2 временной вершиной оказалась точка \mathbf{t}_{31} , которой соответствует лучшее, чем \mathbf{b}_3 , значение критерия. В этом случае

$$\mathbf{b}_4 = \mathbf{t}_{32} = \mathbf{t}_{31}, \quad (5.59)$$

что приводит к изменению направления поиска. Как видно из рис. 5.12, длина шага все еще возрастает. Пусть в результате пробных шагов на четвертой конфигурации было найдено, что \mathbf{t}_{40} осталась временной вершиной, но $y(\mathbf{t}_{40}) > y(\mathbf{b}_4)$. В этом случае

$$\mathbf{b}_5 = \mathbf{t}_{42} = \mathbf{t}_{41} = \mathbf{t}_{40}. \quad (5.60)$$

так что направление дальнейшего движения и длина шага остаются неизменными. Четвертой конфигурации $\mathbf{b}_5 - \mathbf{b}_4$ соответствуют компоненты $(-3\delta_1, 2\delta_2)$. Длина их отражает эффект предыдущих движений, сделанных в правильном направлении вдоль осей x_1 (три шага влево) и x_2 (два шага вверх).

Предположим, что дальнейшее продвижение из точки \mathbf{b}_5 приводит к тому, что конфигурация разрушается (рис. 5.12). В этом случае $\mathbf{b}_6 = \mathbf{b}_5$, а это означает, что либо найдена вершина функции, либо поиск привел к разрешаемому гребню. Для выяснения ситуации приходится предпринимать дальнейшие шаги.

5.14. Тактика слежения за гребнем

Итак, первый этап поиска привел к точке \mathbf{b}_6 , и никакая его модификация не в состоянии помочь нам продвинуться вперед. Поэтому будем считать первый этап оконченным и попытаемся построить новую процедуру поиска, используя точку \mathbf{b}_5 в качестве базовой. Предварительно только обозначим ее \mathbf{b}_6 , поскольку новый этап начинается с шестой конфигурации. Как и ранее, поиск начинается с пробных шагов около временной вершины $\mathbf{t}_{60} = \mathbf{b}_6$. Может оказаться, что длина принятого пробного шага настолько велика, что невозможно обнаружить имеющийся гребень. В этом случае ее приходится уменьшать. Рис. 5.13 соответствует ситуации, когда уменьшение длины пробного шага вдвое позволило добиться положительного результата и продвинуться, хотя и незначительно, по направлению к оптимуму.

Последующие конфигурации до восьмой включительно характеризуются некоторым изменением направления поиска и увеличением шагов.

На девятой, десятой и одиннадцатой конфигурациях направление гребня совпадает с направлением поиска, а величина шага остается неизменной. В точке \mathbf{b}_{12} начинается искривление гребня и в соответствии с этим меняется направление поиска, а длина шага сокращается. Это продолжается до точки \mathbf{b}_{16} , где гребень вновь становится прямолинейным. Шестнадцатая конфигурация характеризуется резким ростом результирующего шага, но уже на семнадцатом процедура поиска вновь обрывается.

5.15. Окончание поиска

Итак, мы пришли к последней базовой точке, в данном случае $b_{17} = b_{18}$, и теперь попытаемся найти девятнадцатую конфигурацию путем дальнейшего сокращения длины пробных шагов. В ситуации, показанной на рис. 5.13, это не приводит к успеху, и поиск считается законченным

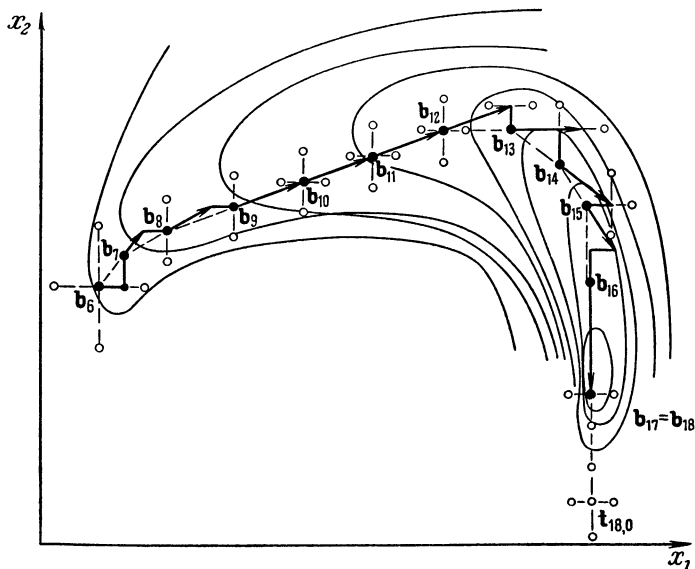


Рис. 5.13. Движение по гребню.

после того, как длина пробного шага станет меньше заранее выбранной величины (на рис. 5.13 эта величина достигается после второго сокращения длины шага). В данном случае b_{17} и в самом деле является точкой максимума функции с точностью до разрешающей способности.

Из разобранный примера видно, насколько точно метод конфигураций позволяет двигаться по гребню до его вершины. Характеристики этого метода инвариантны относительно масштаба измерений, но, конечно, зависят от величины пробного шага и скорости, с которой уменьшается его длина при разрешении гребня.

5.16. Дискретные переменные

Вуд¹⁾ показал, что рассмотренный выше метод поиска связан с рядом затруднений, если некоторые из переменных изменяются дискретно, а такое положение имеет место в значительном числе задач. Действительно, дискретно изменяются, например, номинальный размер труб и толщина пластин трансформатора, число тарелок в дистилляционных колоннах, сечение медного провода, численность персонала и т. д. Подобная ситуация может трактоваться как многомерное обобщение задачи, рассмотренной в гл. 2.

Один из подходов к решению этой проблемы состоит в следующем. Предполагают, что дискретные переменные непрерывны, обычным путем находят фиктивное значение оптимума, а затем округляют его до ближайшей допустимой дискретной величины. Хотя эта процедура и кажется вполне разумной для достаточно хороших функций, однако совсем не ясно, чего же собственно можно добиться на этом пути. Более того, отнюдь не всегда целесообразно проводить такую интерполяцию функций, заданных дискретно.

Неопределенность функции в интервалах между дискретами приводит к увеличению промежутков неопределенности и расширению зоны неразрешимости гребня. Это в свою очередь затрудняет поиск, поскольку найти гребень за счет уменьшения длины пробного шага уже нельзя. Рис. 5.14 иллюстрирует подобное положение. Предполагается, что переменная x_1 принимает только целочисленные

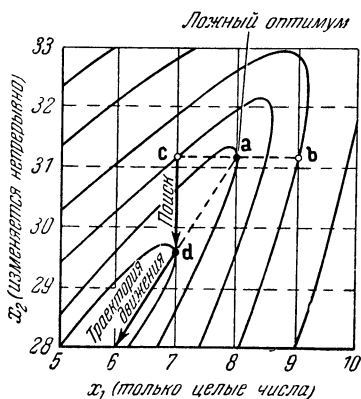


Рис. 5.14. Поиск при одной дискретной переменной.

¹⁾ C. F. Wood, Recent developments in «Direct Search» techniques, Westinghouse Research Report 62-159-522-R1 (July, 1962).

значения, а x_2 изменяется непрерывно. Обычный метод конфигураций сразу приводит к гребню в точке $a = (8; 31,2)$, одной из координат которой является число 8. Дальнейшие пробные шаги показывают, что ни одна из точек $c = (9; 31,2)$ и $b = (7; 31,2)$, ближайших к a в направлении x_1 , не лежит ближе a к оптимуму. Поиск прекращается, хотя вершина не достигнута.

В качестве выхода из этого положения Вуд предложил один способ, напоминающий метод параллельных касательных. Его идея состоит в следующем. Предлагается двигаться к ближайшей или наиболее перспективной точке (в данном случае $x_1 = 7$) и находить наилучшее значение непрерывной переменной с помощью поиска меньшей размерности. Эта новая точка (на рис. 5.14 $d = (7; 29, 7)$) совместно с начальной точкой a определяет направление дальнейшего движения вдоль гребня. Предполагается, что подобная модификация в состоянии привести к требуемому результату. Вуду удалось получить некоторые обнадеживающие результаты в этом направлении, однако он ими не удовлетворен в связи с большим объемом поиска по непрерывным переменным. По-видимому, здесь пригодны и методы квадратической аппроксимации, рассмотренные в разд. 3.13—3.16, по крайней мере в тех точках, где метод конфигураций отказывает.

5.17. Метод вращающихся координат

Еще одну процедуру непосредственного поиска предложил Розенброк¹⁾. Она проверялась при поиске минимума функции

$$y = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \quad (5.61)$$

и оказалась весьма эффективной. Как видно из рис. 5.15, ее минимум расположен в точке $(1; 1)$, лежащей в неглубокой криволинейной долине. Метод вращающихся координат, как мы его будем далее называть, отличается от метода конфигураций, изложенного выше, процедурой осуществле-

¹⁾ Н. Н. Rosenbrock, An automatic method for finding the greatest or least value of a function, Computer J. 3, 3 (Oct. 1960), pp. 175—184.

ния пробных шагов. Вместо того, чтобы изменять каждую переменную независимо, как делается в методе конфигураций, Розенброк предлагает вначале повернуть систему координат таким образом, чтобы одна из ее осей совпала

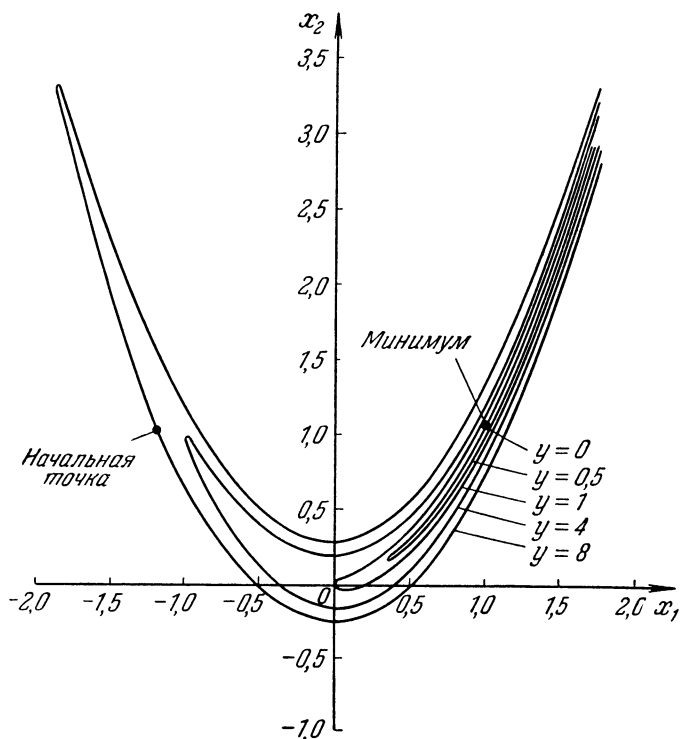


Рис. 5.15. Криволинейная долина.

с направлением гребня, а другая была ей перпендикулярна. При этом предполагаемое направление гребня определяется с помощью предыдущих экспериментов. Такое предварительное преобразование позволяет весьма эффективно двигаться вдоль гребня. Вместо того, чтобы совершать пробный шаг в каждом направлении, Розенброк, по сути дела, пытается найти оптимальную точку на каждой линии. Этот непрерывный процесс аналогичен регулированию

длины шага в методе конфигураций. Поворот вектора и изменение масштаба оказывают исключительно сильное влияние, как об этом можно судить на основании исследований функции (5.61). Примером тому служит табл. 5.1, в которой приведены результаты, полученные с помощью различных методов поиска за 200 шагов при начальной точке $(-1,2; 1)$. Этот метод был описан Вудом в 1962 г.

Таблица 5.1

Результаты поиска после 200 шагов.
Функция $y = 100(x_2 - x_1)^2 + (1 - x_1)^2$

Методы	x_1	x_2	y
Метод сечений	-0,970	0,945	3,882
Метод УПК	-0,605	0,371	2,578
Обычный метод конфигураций	0,803
Метод конфигураций с регулируемым шагом	0,0103
Метод вращающихся координат	0,995	0,991	0,000022
Оптимум	1	1	0

Новая система координат должна определяться после каждой серии пробных шагов.

В качестве примера мы рассмотрим функцию двух переменных, а затем приведем общие формулы, пригодные для поиска в гиперпространстве. Предположим, что базовая точка \mathbf{b}_i i -й конфигурации имеет координаты $(2;3)$ (рис. 5.16), а вершина \mathbf{b}_{i+1} этой конфигурации (кстати, она же является и базой следующей конфигурации) лежит в точке с координатами $(2,4; 2,7)$. Тогда одна из осей $(i+1)$ -го этапа поиска должна проходить в направлении

$$(\mathbf{b}_{i+1} - \mathbf{b}_i) = (0,4; -0,3). \quad (5.62)$$

Введем безразмерный вектор единичной длины ξ_1 , соответствующий $(\mathbf{b}_{i+1} - \mathbf{b}_i)$. Он получается в результате нормирования вектора $(\mathbf{b}_{i+1} - \mathbf{b}_i)$, т. е. в результате деления каждой составляющей $(\mathbf{b}_{i+1} - \mathbf{b}_i)$ на его длину:

$$[(0,4)^2 + (0,3)^2]^{1/2} = 0,5. \quad (5.63)$$

В нашем случае

$$\xi_1 = (0,8; -0,6). \quad (5.64)$$

Второй вектор ξ_2 образуется с помощью ξ_1 и вектора A_2 , полученного из ξ_1 путем замены в нем первой составляющей нулем:

$$A_2 \equiv (0; -0,3). \quad (5.65)$$

Вычислим вначале проекцию A_2 на ξ_1 . Как показано на рис. 5.16, эта проекция также является вектором с составляющими

$$\begin{aligned} & [(0) \cdot (0,8) + (-0,3) \times \\ & \times (-0,6)] (0,8; -0,6) = \\ & = (0,144; -0,108). \end{aligned} \quad (5.66)$$

Вычитание этой проекции из A_2 определяет новый вектор B_2 , перпендикулярный ξ_1 :

$$\begin{aligned} B_2 &= (0; -0,3) - \\ &- (0,144; -0,108) = \\ &= (-0,144; -0,192). \end{aligned} \quad (5.67)$$

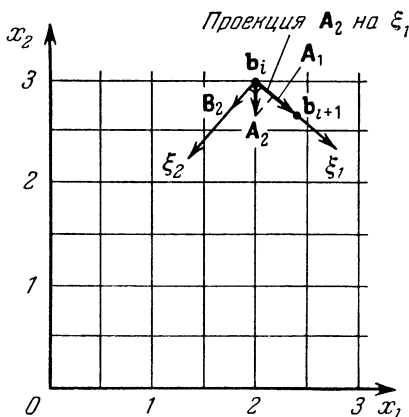


Рис. 5.16. Вращение координат.

Вектор B_2 и определяет направление второй оси в новой системе координат. Обозначим через ξ_2 единичный вектор, соответствующий этой оси. Он определяется в результате нормировки вектора B_2 длины

$$[(0,144)^2 + (0,192)^2]^{1/2} = 0,240; \quad \xi_2 = \frac{B_2}{0,240} = (-0,6; -0,8).$$

Сравнивая угловые коэффициенты ξ_1 ($-3/4$) и ξ_2 ($4/3$), легко убедиться в том, что векторы ξ_1 и ξ_2 перпендикулярны. Чтобы построить $(i+1)$ -ю конфигурацию, следует теперь отыскать максимум в направлении ξ_1 . Векторное уравнение линии, вдоль которой производится поиск, имеет вид

$$x = b_{i+1} + \lambda_1 \xi_1 = (2,4; 2,7) + \lambda_1 (0,8; -0,6) \quad (5.68)$$

или в параметрической форме

$$\begin{aligned}x_1 &= 2,4 + 0,8\lambda_1; \\x_2 &= 2,7 - 0,6\lambda_1,\end{aligned}\quad (5.69)$$

где λ_1 — параметр. Предположим, что оптимальное значение y на этой линии соответствует $\lambda_1 = 2$. Тогда первая временная вершина этого поиска

$$t_{i+1,1} = (4,0; 1,5). \quad (5.70)$$

Дальнейшее движение из этой точки осуществляется в направлении ξ_2 . Уравнение линии поиска в параметрической форме имеет вид

$$\begin{aligned}x_1 &= 4,0 - 0,6\lambda_2; \\x_2 &= 1,5 - 0,8\lambda_2,\end{aligned}\quad (5.71)$$

где λ_2 — параметр. Пусть оптимальное значение λ_2 равно 0,5. Тогда вторая временная вершина, одновременно служащая и следующей базовой точкой, находится в точке

$$t_{i+1,2} = b_{i+2} = (3,7; 1,1). \quad (5.72)$$

Используя b_{i+2} и старую базовую точку b_{i+1} , можно определить положение новой системы координат. Следует отметить, что на любом этапе выражение отдельных шагов в направлении ξ_1 и ξ_2 через первоначальные координаты x_1 и x_2 не представляет труда.

В том случае, когда функция зависит от k независимых переменных, систему k взаимно перпендикулярных векторов $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ следует строить, опираясь на следующую совокупность k векторов A_1, A_2, \dots, A_k :

$$A_1 \equiv (b_{i+1} - b_i) \equiv (a_1, a_2, \dots, a_k), \quad (5.73a)$$

$$A_2 = (0, a_2, \dots, a_k), \dots \quad (5.73б)$$

$$A_k = (0, 0, \dots, 0, a_k). \quad (5.73в)$$

Первый вектор системы $\{\xi\}$ находится путем нормировки A_1 :

$$\xi_1 \equiv \frac{A_1}{\left[\sum_{i=1}^k a_i^2\right]^{1/2}} \equiv (\xi_{11}, \xi_{12}, \dots, \xi_{1k}). \quad (5.74)$$

Далее с помощью A_2 строится вектор B_2 , нормальный к ξ_1 :

$$B_2 \equiv A_2 - \xi_1 \left[\sum_{i=1}^k \xi_{1i} a_i \right] \equiv (b_{21}, b_{22}, \dots, b_{2k}). \quad (5.75)$$

Нормируя его, можно найти ξ_2 :

$$\xi_2 \equiv \frac{B_2}{\left[\sum_{i=1}^k b_{2i}^2 \right]^{1/2}} = (\xi_{21}, \xi_{22}, \dots, \xi_{2k}). \quad (5.76)$$

Продолжая аналогичные вычисления, можно получить B_3 , ξ_3 , B_4 , ξ_4 и т. д. Наконец,

$$B_k \equiv A_k - \xi_{k-1} \left[\sum_{i=1}^k \xi_{k-1,i} a_i \right]^{1/2} \equiv (b_{k1}, b_{k2}, \dots, b_{kk}) \quad (5.77)$$

и

$$\xi_k \equiv \frac{B_k}{\left[\sum_{i=1}^k b_{ki}^2 \right]^{1/2}}. \quad (5.78)$$

Эта процедура, описанная Розенброком в его статье, носит название процесса ортогонализации по Граму—Шмидту ¹⁾. Она устраняет зависимость между переменными, что зачастую бывает очень полезным (см. разделы 1.08 и 5.01).

5.18. Метод поиска с осторожной тактикой

Один метод движения по гребню, который, по-видимому, хорошо приспособлен для поиска на криволинейных гребнях, хотя и излишне медлителен — на прямолинейных, был предложен Муджелем ²⁾. (В этой статье рассматриваемому методу соответствует подпрограмма «гребень».) На рис. 5.17 базовая точка B расположена на разрешаемом гребне.

¹⁾ G. Birkhoff, S. MacLane, A survey of modern algebra (New York, The Macmillan Company, 1953), pp. 192—193. [См. также А. Г. Курош, Курс высшей алгебры, изд. 7-е, М., Физматгиз, 1962. (Прим. ред.)]

²⁾ R. A. Muehle, A nonlinear digital optimizing program for process control systems, Proc. of Western Joint Computer Conf. (1962).

Пробные шаги по обоим переменным показали, что точка **b** является наилучшей. В этих условиях подпрограмма «гребень» рекомендует проверить значение критерия также в точке $\frac{a_1 + a_2}{2}$, где a_1 и a_2 — найденные ранее точки, кото-

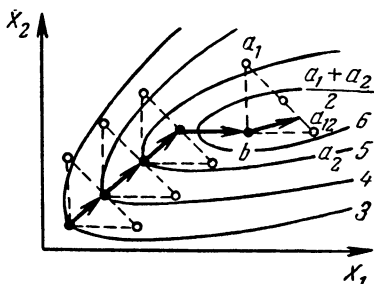


Рис. 5.17. Метод поиска вдоль криволинейных гребней.

рым соответствуют наилучшие (за исключением точки **b**) значения критерия.

Если точке $\frac{a_1 + a_2}{2}$ действительно соответствует лучшее, чем точке **b**, значение критерия, то далее применяется метод поочередного поиска по каждой переменной. Если же ей отвечает ухудшение критерия, то следует попытаться применить метод квадрати-

ческой аппроксимации. Пусть следующей проверке подлечит точка a_{12} . Тогда

$$a_{12} = (1 - r) a_1 + r a_2, \quad (5.79)$$

где

$$r = \frac{y(a_1) - y(a_2)}{2 \{2y[(a_1 + a_2)/2] - y(a_1) - y(a_2)\}}. \quad (5.80)$$

Читатель легко может убедиться в том, что этим выражениям соответствует наивысшая точка линии $a_1 a_2$, найденная с помощью квадратической аппроксимации. Если эта точка соответствует улучшению критерия, то возобновляется процедура поочередного поиска, в противном случае вновь переходят к пробам и т. д. Из рис. 5.17 видно, как идет движение по гребню.

5.19. Недостатки рассмотренных методов

Все рассмотренные ранее процедуры могут вообще оказаться излишними, если в результате поиска гребень будет пропущен. Принципиальный дефект метода конфигураций состоит в том, что все пробные шаги осуществляются только параллельно координатным осям. В этом случае информа-

ция о том, что делается в других направлениях, отсутствует, и потому вполне возможен пропуск гребня за счет слишком коротких пробных шагов. Даже метод Муджеля может привести к ошибочным результатам.

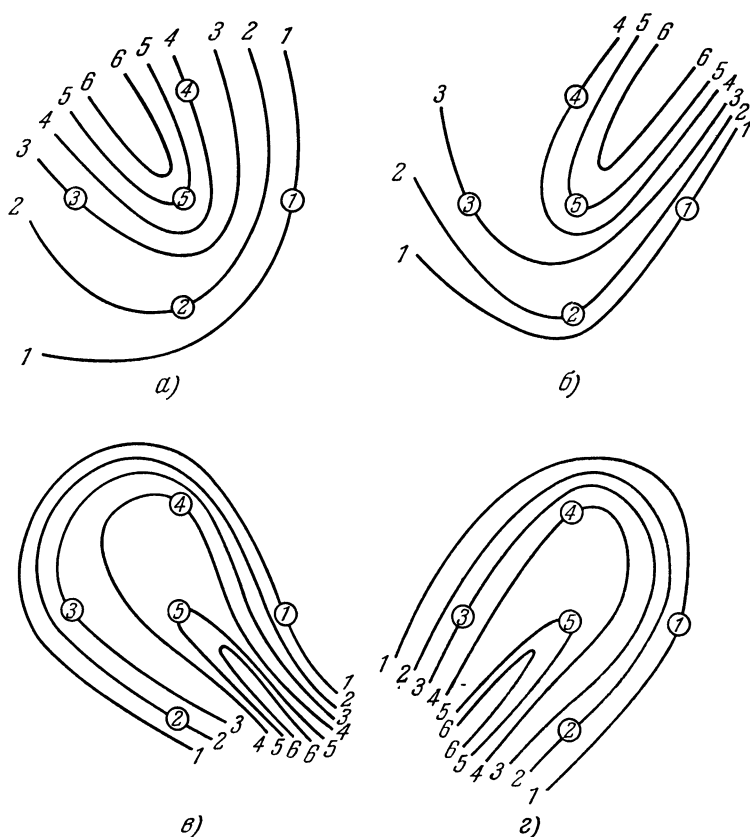


Рис. 5.18. Опасные гребни.

Для того чтобы понять причину этого явления, рассмотрим рис. 5.18, предложенный Грейвсом. Во всех четырех случаях метод конфигураций, даже при соответствующем разрешении, не в состоянии обнаружить гребень. Только метод Муджеля позволяет исследовать поверхность на

рис. 5.18, а, и то лишь в первоначальной стадии поиска. Правда, если обеспечить достаточное разрешение, то в конце концов в этом случае будет найдено направление гребня. Таким образом, логические методы, хорошо приспособленные для движения по гребню, оказываются совершенно непригодными для обнаружения их. В силу этого мы поддерживаем мысль Бокса о том, что экспериментатор всегда должен стараться исследовать окрестность любого обнаруженного оптимума и убедиться в том, что он не лежит на гребне. Для этой цели разработан ряд методов. Они рассмотрены в разделах 3.13—3.16.

5.20. Заключение

Для движения по гребню с помощью логических методов поиска приходится использовать ряд простых правил, а также результаты предыдущих наблюдений. Вычислительные процедуры здесь относительно проще, чем в ранее рассмотренных геометрических методах. Логические методы хорошо приспособлены для отслеживания длинных прямолинейных гребней, которые, по-видимому, встречаются довольно часто в задачах сглаживания и восстановления кривых. Хотя их можно применять для поиска на любой унимодальной поверхности отклика, даже при измерениях с помехами, однако всегда есть опасность остановки на гребне, не доходя до оптимума. В этом случае приходится прибегать к различным нелинейным исследованиям, рассмотренным в гл. 3.

Упражнения

1. Используя метод сечений Фридмана и Севеджа, найти минимум следующих функций, отправляясь из заданной точки:

а) $x_1^2 + 3x_2^2 + 2x_3^2$; (2, -2, 1);

б) $2x_1^2 + 2x_1x_2 + 5x_2^2$; (2, -2).

Поиск закончить не более чем за четыре этапа.

2. Используя метод УПК, найти минимум следующих функций, отправляясь из заданной точки.

а) $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2$; (2, -2, 1, -1);

б) $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + 2x_4^2$; (2, -2, 1, -1);

в) $2x_1^2 + x_2^2 + 3x_3^2$; (2, -2, 1);

г) $2x_1^4 + 2x_1^2x_2^2 + 5x_2^4$; (2, -2).

3. Найти минимум функций, приведенных в примере 2, используя метод ИПК.

4. Используя метод конфигураций, минимизировать функцию

$$y = 5x_1^2 + 6x_1x_2 + 5x_2^2 + 8x_1 + 24x_2 + 32.$$

Дополнительные условия: начать поиск из начала координат, положить на первом этапе $\delta_1 = \delta_2 = 0,1$, а при необходимости эти шаги последовательно делить пополам. Остановиться при $\delta_1 = \delta_2 = 0,025$. Закончить поиск не более чем за 5 этапов.

5. Используя метод вращающихся координат, решить задачу 4 не более чем за 5 вращений.

6. Имеется конфигурация, начинающаяся в $(5; 7; -3; 2)$ и оканчивающаяся в $(4,9; -2,5; 0)$. Найти четыре ортогональных единичных вектора $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$, определяющих систему вращающихся координат. Какой вид должны иметь координаты следующей базовой точки, выраженные через независимые переменные, если оптимальные шаги в этих направлениях имеют длину 2; 1; $-0,5$; 0 соответственно?

7. Докажите справедливость уравнений (5.79) и (5.80).

ГЛАВА 6

ОШИБКИ ЭКСПЕРИМЕНТА

Набрел на тело верный пес.
Героя снег почти занес,
Но флаг в ладони ледяной
Сжимал он с твердостью стальной.
Excelsior!

ЛОНГФЕЛЛО

В предыдущих главах мы полностью игнорировали ошибки эксперимента или рассматривали их весьма бегло. Такая позиция имеет смысл при исследовании строго определенной математической модели. Однако при изучении действительных физических или экономических систем приходится стать на более реалистическую основу. Дело в том, что в большинстве практических задач наши измерения или прогнозы являются лишь более или менее точными оценками интересующих нас данных. Случайные ошибки искажают действительные результаты, и это в значительной степени затрудняет поиск оптимума.

Будем далее называть *помехой* любую ошибку измерения или неопределенность прогноза. Можно показать, что при наличии помех многие рассмотренные выше методы вообще не в состоянии привести к оптимуму. Так, например, случайная ошибка измерения при поиске методом Фибоначчи может привести к исключению именно той области, которая содержит оптимум. Это сделает дальнейший поиск просто бессмысленным. И вообще само понятие «эффективность метода» теряет смысл, если нет гарантий сходимости процедуры поиска к оптимуму. Поэтому вначале приходится исследовать сходимость метода, а уже потом его эффективность. В данной главе рассматриваются асимптотические процедуры поиска, позволяющие находить оптимум даже при наличии помех. Они известны под общим названием «методы стохастической аппроксимации». Первая подобная схема была предложена Г. Роббинсом и С. Монро в 1951 г. и предназначалась для отысканий корня функции в усло-

виях помех ¹⁾. Здесь слово «аппроксимация» указывает на то, что положение оптимума отыскивается приближенно, по результатам предыдущих измерений.

Термин «стохастический» обусловлен здесь случайным характером ошибок эксперимента. Вскоре после опубликования работы Роббинса и Монро вышла статья Кифера и Вольфовица ²⁾. Идеи стохастической аппроксимации применяются в ней для поиска максимума унимодальной функции одной переменной в условиях помех. Обобщение на многомерный случай было сделано Блюмом ³⁾, которому пришлось для этого использовать градиент в смысле Бокса и Вильсона.

Эти и другие ранние исследования были далее объединены и обобщены Дворецким ⁴⁾. Его точка зрения широко использована в настоящей главе. Понимание работы Дворецкого позволит читателю самому строить схемы стохастической аппроксимации и сводить доказательство их сходимости к проверке слабых условий теорем Дворецкого. Кроме того, в данной главе будут разобраны работы Чжуна ⁵⁾, Ходжеса и Лемана ⁶⁾ и Кестена ⁷⁾, посвященные исследованию скорости сходимости и ее увеличению. Это поможет читателю строить процедуры, быстро приводящие к оптимуму.

¹⁾ H. Robbins and S. Monro, A stochastic approximation method, *Annals of Math. Stat.* 22 (1951), pp. 400—407.

²⁾ J. Kiefer and J. Wolfowitz, Stochastic estimation of the maximum of a regression function, *Annals of Math. Stat.* 23 (1952), pp. 463—66.

³⁾ J. R. Blum, Multidimensional stochastic approximation methods, *Annals of Math. Stat.* 25 (1954), pp. 737—44.

⁴⁾ A. Dvoretzky, On stochastic approximation, *Proc. 3rd Berkeley Sym. on Math. Stat. and Prob.*, J. Neyman (ed.), (Berkeley: University of California Press, 1956), pp. 39—55.

⁵⁾ K. L. Chung, On a stochastic approximation method, *Annals of Math. Stat.* 25 (1954), pp. 463—483.

⁶⁾ J. L. Hodges and E. L. Lehman, Two approximations to the Robbins-Monro Process, *Proc. 3rd Berkeley Sym. on Math. Stat. and Prob.*, J. Neyman (ed.) (Berkeley: University of California Press, 1956), pp. 95—104.

⁷⁾ H. Kesten, Accelerated stochastic approximation, *Annals of Math. Stat.* 29 (1958), pp. 41—59. [См. также: Ш. С. Л. Чанг, Синтез оптимальных систем автоматического управления, изд-во «Машиностроение», М., 1964. (Прим. ред.)]

6.01. Направление поиска и длина шага

Стохастическая аппроксимация во многом подобна обычным процедурам последовательных приближений, которые применяются при отсутствии помех. Здесь также основными показателями являются направление поиска и длина шага. Выбор направления производится так же, как и в детерминированном случае. В обоих вариантах исследователь ведет себя так, как будто он не сомневается в достоверности экспериментальных данных и полностью игнорирует возможную погрешность. Появление ошибки, конечно, приводит к удалению от цели. Но, как будет показано ниже, при правильном выборе длины шага это временное ухудшение не сказывается на окончательном результате.

По мере движения к цели обе схемы аппроксимации, — стохастическая и детерминистская, — требуют все меньших корректирующих воздействий. Это означает, что процедура поиска асимптотически сходится. Чтобы ускорить процесс, желательно сокращать длину шага как можно быстрее. Основное различие между стохастической и детерминистской процедурами и состоит в максимально допустимой скорости, с которой можно производить это сокращение. Еще при изучении метода Фибоначчи было показано, что в отсутствие помех длина шага может уменьшаться очень быстро. Однако если есть опасность ошибки, то слишком быстрое сокращение длины шага может привести к асимптотической погрешности. В этих условиях поиск будет по-прежнему сходиться, но к неправильному значению. Далее будет показано, что скорость сокращения шагов в значительной мере ограничена именно наличием помех.

6.02. Новые измерения и старые средние значения

Изучение стохастической аппроксимации приводит нас к общей задаче о степени влияния новой информации на результаты прежних экспериментов. Интуиция подсказывает, что если наши действия опираются на обширный опыт, то новые данные не должны вызывать серьезных изменений, особенно если возможны значительные ошибки эксперимента. С другой стороны, если процесс начался недавно, то способ управления им должен существенно опираться

на новую информацию. Следуя идее Ш. Чанга ¹⁾, рассмотрим один частный случай этой задачи, для которого удастся найти количественное решение. Его изучение поможет нам понять более сложные и общие проблемы, обсуждаемые в этой главе.

Предположим, что надо оценить выходной сигнал y некоторой системы, независимые переменные x_i которой поддерживаются на постоянном уровне. Пусть значение y определяется по результатам n измерений z_1, z_2, \dots, z_n с шумами. Предположим, что малые и большие ошибки равновероятны. Тогда наилучшей оценкой является арифметическое среднее

$$\bar{z}_n \equiv \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n z_i. \quad (6.1)$$

Найдем связь между \bar{z}_n , последним наблюдением z_n , и предыдущим средним значением \bar{z}_{n-1} :

$$\bar{z}_n = \frac{z_1 + \dots + z_{n-1} + z_n}{n} = \left(\frac{n-1}{n} \right) \bar{z}_{n-1} + \frac{z_n}{n}. \quad (6.2)$$

Мы видим, что старое среднее \bar{z}_{n-1} входит с весом $1 - (1/n)$, а новое наблюдение имеет вес, обратно пропорциональный общему числу измерений. Таким образом, с увеличением числа наблюдений влияние новой информации падает.

Эта идея взвешивания новых измерений пропорционально $1/n$ ($1, 1/2, 1/3, 1/4, \dots$) является хорошим эмпирическим правилом. Сам набор чисел $1/n$ называется гармонической последовательностью. Необходимо только его умело применять. Так, например, может оказаться, что молодой инженер, изучающий производство, склонен игнорировать обширный опыт, накопленный в процессе работы. В этом случае он придает новой информации чрезмерно большой вес и, как следствие, предлагает неоправданно крупные изменения в производственном процессе. С другой стороны, наш анализ основан на предположении о том, что значение y не меняется в процессе наблюдений. Если на самом деле

¹⁾ Ш. С. Л. Ч а н г, Синтез оптимальных систем автоматического управления, изд-во «Машиностроение», М., 1964.

изменения имеют место, то старые данные уже не должны входить в среднее значение. Руководители предприятий, имеющие длительный опыт работы с определенными производственными условиями, должны тщательно проверять полученные данные, прежде чем решительно защищать статус-кво. Они должны быть уверены в том, что неизбежные изменения процесса не приводят к старению информации.

6.03. Гармоническая последовательность

Гармоническая последовательность $1, 1/2, 1/3, \dots$ была введена выше при изучении очень простого примера, в котором значения независимых переменных фиксированы. Этим ее значение не исчерпывается. Из дальнейшего изложения станет ясно, насколько важна ее роль в теории стохастической аппроксимации, при анализе схем с непрерывно меняющимися условиями. Если длина шага уменьшается по гармоническому закону, то процедура поиска приводит к цели независимо от того, насколько удалена от нее начальная точка. Причина этого состоит в следующем. Сама гармоническая последовательность расходится, т. е.

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} = \infty, \quad (6.3)$$

но в то же время последовательности вида $1/n^p$ при $p > 1$ сходятся:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^p} < \infty. \quad (6.4)$$

Если в процессе управления длина шага уменьшается в соответствии со сходящимся рядом, то есть опасность не дойти до цели, поскольку величина общей коррекции ограничена. Гармоническая же последовательность является расходящейся и в принципе обеспечивает неограниченную коррекцию.

Гармоническая последовательность обладает еще одной особенностью, весьма полезной для стохастической аппроксимации.

Сумма квадратов ее членов сходится:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = 1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{9} + \frac{1}{16} + \dots < \infty. \quad (6.5)$$

Это свойство особенно важно для рассматриваемых далее технических приложений. Его смысл состоит в том, что в процессе поиска отдельные случайные ошибки компенсируют друг друга. Вот почему гармоническую последовательность можно рассматривать как общий закон, в соответствии с которым в условиях помех взвешиваются новые и старые данные.

ПОИСК КОРНЯ

Прежде чем перейти к изучению общих принципов стохастической аппроксимации, рассмотрим первую и самую простую процедуру из этого класса, метод Роббинса—Монро, предназначенный для поиска корня в присутствии помех. Как будет показано далее, этот метод легко приспособляется и для отыскания оптимума.

6.04. Процедура Роббинса—Монро

Начнем наше изложение со свойств изучаемой функции. Будем исследовать функцию $y(x)$, зависящую от одной независимой переменной и обращающуюся в нуль в единственной точке $x = \hat{x}$, т. е. $y(\hat{x}) = 0$. Предположим далее, что $y(x) < 0$ при $x < \hat{x}$ и $y(x) > 0$ при $x > \hat{x}$. Пусть помехи отсутствуют, а x придано некоторое значение. Тогда по величине $y(x)$, соответствующей этому x , можно судить о том, где находится выбранное значение x — слева или справа от корня \hat{x} , и определить направление движения к \hat{x} . Если интервал неопределенности ограничен, то наиболее эффективным методом поиска является метод дихотомии, описанный в главе 2. В применении к поиску корня эта процедура последовательного деления пополам получила название метода Больцано ¹⁾.

¹⁾ R. G. Stanton, Numerical methods for science and engineering (Englewood Cliffs, N. J., Prentice-Hall, Inc., 1961), pp. 83—84. [См. также: Б. П. Демидович, И. А. Марон, Основы вычислительной математики, изд. 2-е, М., Физматгиз, 1963. (Прим. ред.)]

Предположим теперь, что измерения $y(x)$ производятся с ошибками. В этом случае необходимо различать истинное, но не известное нам значение функции y и известную, но, вероятно, не точную *оценку* этого значения, вычисленную по результатам измерений с помехами. Обозначим эту оценку через z . Она является случайной величиной, ибо даже при постоянном значении x наблюдения z флуктуируют случайным образом от одного эксперимента к другому. Пронумеруем все эксперименты, начиная с первого, и будем снабжать индексом n величины, относящиеся к n -му испытанию. С учетом этого запись $z(x_n)$ обозначает результат n -го эксперимента при некотором заданном значении x .

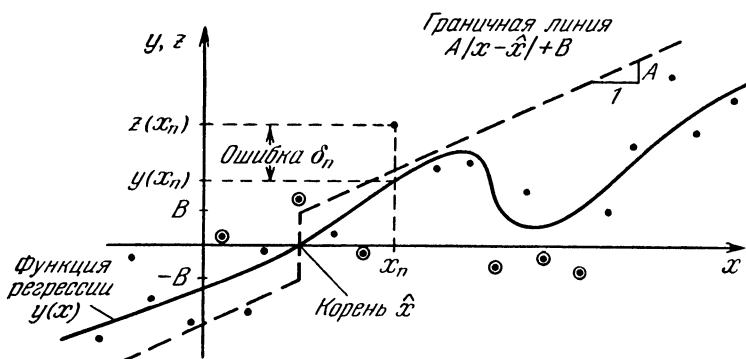


Рис. 6.1. Поиск корня в присутствии помех.

Индекс n указывает на то, что результат опыта зависит не только от величины x , но в значительной мере и от случая. Проиллюстрируем это примером. Пусть x_i и x_j — два равных между собой значения x , относящиеся к разным опытам (т. е. $x_j = x_i$, но $j \neq i$). Очевидно, им соответствуют и равные значения функции, т. е. $y(x_i) = y(x_j)$; однако благодаря случайному характеру помех результаты опытов, вообще говоря, будут различны, т. е. $z(x_i) \neq z(x_j)$.

Рис. 6.1 иллюстрирует поведение функции $y(x)$, случайный характер наблюдений z и трудности, с которыми сталкивается экспериментатор при наличии помех. Сплошная линия обозначает исследуемую функцию $y(x)$, которую в статистике принято называть *функцией регрессии*. Резуль-

таты отдельных наблюдений изображены в виде точек, разбросанных вокруг этой линии. Кроме того, на рисунке имеются точки, обведенные кружками. Это — результаты наиболее неблагоприятных экспериментов, которые могут привести к поиску в неправильном направлении. Например, четыре такие точки, расположенные справа от \hat{x} , лежат в области отрицательных значений и создают иллюзию того, что текущее значение x лежит левее \hat{x} . В одном из экспериментов x фактически совпадает с величиной \hat{x} . Однако его результат, искаженный помехами, создает впечатление того, что корень расположен левее. Впрочем, надо отметить, что большинство наблюдений (на рис. 6.1 — простые точки), хотя и искажается помехами, но тем не менее указывает правильное направление поиска.

6.05. Случайные помехи

Прежде чем переходить к дальнейшему изложению, остановимся вкратце на свойствах случайной помехи. Для этого нам придется привлечь некоторые элементарные понятия теории вероятностей, краткое объяснение которых мы будем давать по мере надобности. Более подробное изложение этих вопросов имеется в любой книге по теории вероятностей или статистике ¹⁾.

Предположим, во-первых, что наблюдения являются *несмещенными*. Это означает, что при любом фиксированном x среднее значение различных возможных наблюдений $z_i(x)$ равно истинному значению $y(x)$. Это среднее значение обычно называют *математическим ожиданием* z и определяют следующим образом:

$$E\{z(x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} z(x) p(z) dz. \quad (6.6)$$

Наблюдения являются несмещенными в том и только в том случае, если для любого x

$$E\{z(x)\} \equiv y(x). \quad (6.7)$$

Это предположение является гарантией того, что арифмети-

¹⁾ В. Феллер, Введение в теорию вероятностей и ее приложение, М., изд-во «Мир», 1964.

ческое среднее результатов наблюдений при фиксированном значении x с увеличением числа наблюдений сходится к $y(x)$. Таким образом, сделав при заданном x число наблюдений достаточно большим, можно довольно точно определить, по какую сторону от \hat{x} расположен x . Такая процедура, однако, неэффективна, и в действительности изменение x делается после каждого эксперимента.

Второе предположение касается разброса наблюдений. Величина разброса обычно характеризуется *дисперсией*, которая при заданном x определяется как математическое ожидание квадрата разности $z(x) - y(x)$:

$$\sigma^2(x) \equiv E \{ [z(x) - y(x)]^2 \}. \quad (6.8)$$

Чтобы наблюдения $z(x)$ не оказывались слишком часто сколь угодно далеки от истинного значения $y(x)$, надо, чтобы дисперсия $\sigma^2(x)$ при любом x была ограниченной. Пусть σ^2 — некоторое конечное число, большее, чем любое из значений $\sigma^2(x)$. Тогда при всех x должно выполняться условие

$$\sigma^2(x) < \sigma^2 < \infty. \quad (6.9)$$

Во всех точках, где это условие нарушается, направление дальнейшего поиска невозможно установить независимо от числа наблюдений.

В процедуре Роббинса—Монро независимая переменная x изменяется по закону

$$x_{n+1} = x_n - a_n z(x_n), \quad (6.10)$$

где x_{n+1} , x_n — значения x соответственно в $(n+1)$ -м и n -м экспериментах, $z(x_n)$ — результат n -го эксперимента, a_n — некоторый член последовательности положительных чисел, удовлетворяющей условию

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = 0. \quad (6.11)$$

Последовательность чисел a_n должна отвечать еще двум условиям. Сумма ее членов должна расходиться:

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n = \infty, \quad (6.12)$$

а сумма квадратов членов — сходиться:

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 < \infty. \quad (6.13)$$

Этим условиям удовлетворяет, например, гармоническая последовательность чисел $1/n$: $1, 1/2, 1/3, 1/4, \dots$. Из всех последовательностей вида n^{-p} , отвечающих требованию (6.12), эта последовательность обеспечивает наиболее быстрое сокращение длины шага.

Так как изменения на каждом шаге пропорциональны результату последнего наблюдения, то надо быть уверенным в том, что функция регрессии ограничена при всех конечных значениях x . Во избежание чрезмерно больших выбросов потребуем, чтобы функция $y(x)$ по обе стороны от корня была ограничена прямыми линиями

$$|y| < A|x - \hat{x}| + B < \infty, \quad (6.14)$$

где A и B — некоторые постоянные. Эти границы показаны на рис. 6.1. Вообще говоря, данное требование не является чрезмерно жестким, так как на практике обычно известен некоторый конечный интервал, внутри которого лежит корень, и можно предположить, что в этом интервале условие (6.14) удовлетворяется. Для доказательства сходимости процедуры Роббинса—Монро знание величин A и B необязательно. Однако ниже будет показано, что если угловой коэффициент A известен хотя бы приближенно, то процесс поиска зачастую может быть ускорен.

6.06. Сходимость

Роббинс и Монро показали, что при выполнении всех этих разумных условий их процедура сходится в средне-квадратическом смысле. Это означает, что с увеличением числа наблюдений n математическое ожидание квадрата разности $(x_n - \hat{x})$ стремится к нулю, т. е.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \{E[(x_n - \hat{x})^2]\} = 0. \quad (6.15)$$

Блюму ¹⁾ удалось усилить этот результат. Он показал, что

¹⁾ J. R. Blum, Approximation methods which converge with probability one, Annals of Math. Stat. 25 (1954), pp. 382—386.

при $n \rightarrow \infty$ последовательность x_n сходится к \hat{x} с вероятностью единица, т. е.

$$p \{ \lim x_n = \hat{x} \} = 1, \quad (6.16)$$

где символ $p \{ \}$ означает вероятность события, стоящего в скобках. Ниже будет показано, что обе эти формы сходимости вытекают из более поздней и общей работы Дворецкого.

6.07. Сравнение стохастического и детерминистского методов

Представляется интересным сравнить скорость, с которой сокращается длина шага в стохастической процедуре Роббинса—Монро и в детерминистском методе Больцано.

Метод Больцано предусматривает последовательное деление отрезков пополам, поэтому модуль отношения длины последующего шага к длине предыдущего всегда равен 1/2:

$$\left| \frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}} \right| = \frac{1}{2}. \quad (6.17)$$

В методе Роббинса—Монро это отношение зависит как от вида функции $y(x)$, так и от случайных ошибок эксперимента. Это делает невозможным непосредственное сравнение сразу для всех возможных классов функций $y(x)$. Однако от элемента случайности можно избавиться, если перейти от самих случайных величин к их математическим ожиданиям. Кроме того, для понимания сути процесса достаточно рассмотреть лишь два крайних случая, когда y остается постоянным при всех значениях x или меняется по линейному закону. В первом случае можно записать:

$$\frac{E \{ |x_{n+1} - x_n| \}}{E \{ |x_n - x_{n-1}| \}} = \frac{a_n}{a_{n-1}}, \quad (6.18)$$

где $n = 2, 3, \dots$. Полагая, что последовательность a_n подчиняется гармоническому закону, находим

$$\frac{E \{ |x_{n+1} - x_n| \}}{E \{ |x_n - x_{n-1}| \}} = \frac{n-1}{n} = 1 - \frac{1}{n}. \quad (6.19)$$

Во втором случае ($y = Ax$) имеем

$$\frac{E\{|x_{n+1} - x_n|\}}{E\{|x_n - x_{n-1}|\}} = \frac{a_n x_n}{a_{n-1} x_{n-1}} = (n-1) \frac{1 - 1/(n-1)}{n} = \frac{n-2}{n} = 1 - \frac{2}{n}. \quad (6.20)$$

В обоих случаях это отношение при $n \rightarrow \infty$ стремится к единице снизу. Таким образом, наличие помех заставляет поддерживать длину шага довольно большой, особенно на заключительном этапе поиска.

Метод Роббинса—Монро легко приспособить и для поиска оптимума. Предположим, что надо найти минимум функции регрессии $w(x)$, а измеряемой величиной является производная dw/dx , т. е.

$$y = \frac{dw}{dx}. \quad (6.21)$$

Очевидно, корень функции y соответствует стационарной точке (максимуму, минимуму или точке перегиба) исходной функции w . Если y удовлетворяет приведенным ранее условиям, то w унимодальна и имеет единственный минимум, который может быть найден по методу Роббинса—Монро. Однако на практике измерение производной связано со значительными трудностями. Поэтому для поиска оптимума применяется несколько более сложный, но специально разработанный для этих целей и потому зачастую более эффективный метод Кифера—Вольфовица. Этот метод будет описан далее после изучения основ стохастической аппроксимации.

ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ

Теперь, когда нам известно, как действует схема стохастической аппроксимации, мы можем перейти к изучению ее сущности. Как выяснится из дальнейшего изложения, нецелесообразно рассматривать только метод Роббинса—Монро. Более правильным будет сосредоточить вначале основное внимание на общей схеме и лишь после этого переходить к отдельным процедурам.

6.08. Выделение случайной составляющей

Дворецкий предложил рассматривать любую процедуру стохастической аппроксимации как обычный, свободный от ошибок метод последовательных приближений, но с наложенной на него случайной составляющей. Эту идею Бертрам¹⁾ применил к анализу самонастраивающихся систем управления. Мы также станем на эту точку зрения и, выделив случайную составляющую, подвергнем ее анализу независимо от остальной части схемы. Рассмотрим, например, метод Роббинса—Монро. В соответствии с уравнением (6.10) имеем

$$x_{n+1} = x_n - a_n z(x_n). \quad (6.22)$$

Результат наблюдения $z(x_n)$ может быть представлен в виде суммы истинного, хотя и неизвестного значения $y(x_n)$ и помехи δ_n :

$$z(x_n) \equiv y(x_n) + \delta_n. \quad (6.23)$$

Тогда уравнение (6.10) принимает вид

$$x_{n+1} = [x_n - a_n y(x_n)] - a_n \delta_n. \quad (6.24)$$

С точки зрения вопросов сходимости выражение, стоящее в скобках, может рассматриваться как полностью детерминистская схема поиска. Обозначим это свободное от ошибок преобразование символом $T(x_n)$, т. е.

$$\underline{T(x_n)} \equiv x_n - a_n y(x_n). \quad (6.25)$$

Таким образом, вся случайность сосредоточена в слагаемом $(-a_n \delta_n)$. Обозначим это слагаемое r_n :

$$\underline{r_n} \equiv -a_n \delta_n. \quad (6.26)$$

Тогда общее выражение для процедуры стохастической аппроксимации принимает вид

$$x_{n+1} = T(x_n) + r_n. \quad (6.27)$$

¹⁾ J. E. Bertram, Control by stochastic adjustment, Applications and Industry (AIEE, Jan. 1960). [См. также: Ш. С. Л. Ч а н г, Синтез оптимальных систем автоматического управления, М., изд-во «Машиностроение», 1964. (Прим. ред.)]

Конкретный вид преобразования $T(x_n)$ выбирается исследователем. Выделение случайной составляющей надо производить так, чтобы помеха оказалась несмещенной, т. е. математическое ожидание ее было равно нулю. Как видно из уравнения (6.7), метод Роббинса—Монро удовлетворяет этому требованию:

$$\begin{aligned} E\{r_n\} &= E\{-a_n \delta_n\} = -a_n E\{z(x_n) - y(x_n)\} = \\ &= -a_n [E\{z(x_n)\} - y(x_n)] = 0. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Поскольку преобразование $T(x_n)$ полностью свободно от ошибок, то казалось бы естественно начать анализ с него, а затем уже переходить к случайному члену r_n . Однако зачастую влияние помех можно исследовать настолько просто, что создается впечатление, будто проблемы сходимости детерминистской части изучить сравнительно гораздо сложнее. Поэтому мы и начнем с анализа помех.

6.09. Подавление помех

Влияние помех, вообще говоря, полностью устранить нельзя, однако для практических целей этого и не требуется, — достаточно лишь уменьшить вносимые ими искажения до определенного уровня. Этого можно добиться с помощью некоторого процесса компенсации, в котором положительные и отрицательные ошибки, накапливаясь в течение длительного интервала времени, взаимно погашаются. Этот процесс требует, однако, чтобы длина шага сокращалась не очень быстро. Таким образом, анализ помех приводит к нижней границе скорости, с которой должна уменьшаться длина шага. Понятно, что гораздо больший интерес представляет верхняя граница, так как конечная цель поиска состоит в нахождении оптимума в возможно более короткий срок. Однако бывает полезным и знание нижней границы — например, в том случае, когда начальная оценка, по всей видимости, расположена далеко от цели и быстрое сокращение длины шага нежелательно.

Дворецкий показал, что для сходимости в среднеквадратическом и с вероятностью единица требуется выполнение двух условий: первое — помеха должна быть несмещенной

$$E\{r_n\} = 0; \quad (6.29)$$

второе — сумма дисперсий помех должна быть конечной при любой возможной бесконечной процедуре поиска:

$$\sum_{n=1}^{\infty} E \{r_n^2\} < \infty. \quad (6.30)$$

Не входя в детали тонких рассуждений Дворецкого, мы постараемся вкратце обосновать необходимость требований (6.29) и (6.30) с эвристической точки зрения и на примере метода Роббинса—Монро покажем, как доказывается справедливость этих условий в конкретной схеме. Таким образом, читателю, построившему собственную процедуру стохастической аппроксимации, достаточно будет проверить лишь условия (6.29) и (6.30) и сослаться далее на теорему Дворецкого. Мы уже обсуждали требования несмещенности оценок в методе Роббинса—Монро. Любое смещение исказило бы наши представления о функции регрессии и могло бы привести к тому, что поиск сходился бы к неправильному значению. Несмещенность помехи в методе Роббинса—Монро вытекает из уравнения (6.28).

Перейдем теперь к требованию сходимости ряда, составленного из дисперсий. Мы будем придерживаться здесь взглядов Чанга ¹⁾. Суммарная ошибка, внесенная всеми помехами, равна $\sum_{n=1}^{\infty} r_n$. Если помехи образуют последовательность независимых случайных величин, то дисперсия суммарной ошибки равна математическому ожиданию суммы квадратов отдельных ошибок:

$$E \left\{ \left(\sum_{n=1}^{\infty} r_n \right)^2 \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} E \{r_n^2\}. \quad (6.31)$$

Предположим, что в соответствии с уравнением (6.30) эта сумма конечна и равна S . Выделим m первых испытаний. Тогда дисперсия остальных опытов равна

$$\sum_{n=m+1}^{\infty} E \{r_n^2\} = S - \sum_{n=1}^m E \{r_n^2\}. \quad (6.32)$$

¹⁾ Ш. С. Л. Ч а н г, Синтез оптимальных систем автоматического управления, М., изд-во «Машиностроение», 1964.

В силу положительной определенности слагаемых второй член, стоящий в правой части равенства, необходимо увеличивается с ростом m . Соответственно левая часть равенства с ростом m уменьшается, стремясь в пределе к нулю. Физический смысл этого явления состоит в том, что с ростом m относительное влияние помех становится все меньшим, что полностью удовлетворяет требованиям задачи. Конечно, это справедливо только в том случае, когда сумма (6.30) конечна.

Рассмотрим влияние условия (6.30) на поведение последовательности a_n в методе Роббинса—Монро. В соответствии с уравнением (6.26) дисперсия общей ошибки равна

$$S = \sum_{n=1}^{\infty} E \{r_n^2\} = \sum_{n=1}^{\infty} E \{a_n^2 \delta_n^2\} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 E \{\delta_n^2\}. \quad (6.33)$$

Математическое ожидание величины δ_n^2 — квадрата ошибки в n -м опыте — есть не что иное, как дисперсия ошибки $\delta^2(x_n)$ из уравнения (6.8). В схеме Роббинса—Монро предполагается, что эта дисперсия всюду ограничена:

$$E \{\delta_n^2\} = \sigma^2(x_n) < \sigma^2 < \infty. \quad (6.34)$$

Таким образом,

$$S = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 \sigma^2(x_n) < \sigma^2 \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2. \quad (6.35)$$

Сумма S будет конечной в том и только том случае, когда

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 < \infty, \quad (6.36)$$

что полностью совпадает с условием (6.13), наложенным Роббинсом и Монро.

Как отмечалось выше, сумма членов гармонического ряда бесконечна, но в то же время любая последовательность, сходящаяся быстрее, имеет конечную сумму. Следовательно, надо потребовать, чтобы выполнялось соотношение

$$a_n = \frac{k_1}{n^{k_2}}, \quad (6.37a)$$

где

$$k > \frac{1}{2}. \quad (6.37b)$$

Постоянная k_1 может быть любым положительным числом. Таким образом, последовательность вида $1/\sqrt{n}$ ($1, 1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{3}, 1/2, 1/\sqrt{5}, \dots$) сходится слишком медленно для того, чтобы подавить суммарную ошибку. Однако любая последовательность вида $n^{-(\frac{1}{2} + \epsilon)}$, $\epsilon > 0$, уже пригодна для наших целей.

Приведенное здесь простое доказательство является типичным для всех методов стохастической аппроксимации. Хотя помехи и усложняют эксперимент, однако теоретический анализ неопределенности не связан с большими затруднениями. В действительности зачастую гораздо сложнее доказать сходимость регулярной составляющей.

6.10. Регулярная составляющая

При анализе регулярной составляющей в любой схеме стохастической аппроксимации надо учитывать две возможности: первая — значение x_n может оказаться настолько близко к цели \hat{x} , что следующая коррекция перебросит

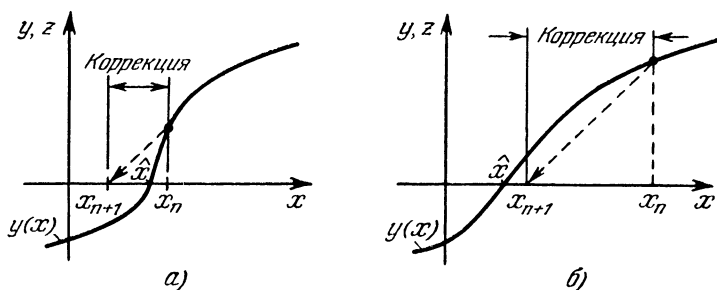


Рис. 6.2. Поведение регулярной составляющей: а) перерегулирование возможно; б) перерегулирование невозможно.

x_{n+1} по другую сторону от \hat{x} и даже увеличит расстояние до корня (рис. 6.2, а); вторая: x_n значительно удалено от \hat{x} , и нет опасности перехода за значение корня (рис. 6.2, б).

Рассмотрим первую ситуацию. Обозначим максимум возможного перерегулирования на n -м шаге через α_n . Для сходимости процесса поиска в этом случае надо, чтобы с ро-

стом n величина α_n стремилась к нулю. Иными словами, при достаточно больших n должны выполняться условия

$$|T(x_n) - \hat{x}| \leq \alpha_n \quad (6.38a)$$

и

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_n = 0. \quad (6.38b)$$

Если же опасность перехода за корень исключена, то желательно, чтобы расстояние между x_n и \hat{x} сокращалось с каждым шагом. Обозначим через γ_n абсолютную величину расстояния, на которое изображающая точка приблизилась к цели в результате n -го шага. Тогда процедура должна удовлетворять условию

$$|T(x_n) - \hat{x}| \leq |x_n - \hat{x}| - \gamma_n. \quad (6.39)$$

Хотя по мере приближения x_n к \hat{x} эффект восстановления, связанный с γ_n , должен стремиться к нулю, равенство $\gamma_n = 0$ нежелательно ни при каких n , ибо в этом случае процесс поиска может остановиться, не дойдя до цели. Поэтому надо потребовать, чтобы сумма γ_n была неограниченной:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n = \infty. \quad (6.40)$$

Смысл этого условия состоит в том, что при необходимости (т. е. когда x_n стремится к некоторой точке, отличной от \hat{x}) суммарное корректирующее воздействие может быть сделано сколь угодно большим.

На самом деле необязательно, чтобы расстояние сокращалось уже на ранних этапах поиска. Дворецкий предложил следующее более слабое условие:

$$|T(x_n - \hat{x})| \leq (1 + \beta_n) |x_n - \hat{x}| - \gamma_n, \quad (6.41)$$

где β_n — некоторое положительное число, возрастающее с увеличением расстояния. По мере сходимости процедуры поиска β_n должно стремиться к нулю, причем требуется

$$\sum_{n=1}^{\infty} \beta_n < \infty. \quad (6.42)$$

Процедура Роббинса—Монро, в которой $\beta_n = 0$ при всех n , удовлетворяет более простому условию (6.39). Покажем на примере данного метода, как доказывается справедливость этих условий в конкретном случае.

6.11. Сходимость регулярной составляющей процедуры Роббинса—Монро

Для доказательства того, что процедура Роббинса—Монро удовлетворяет условиям (6.38, а) и (6.39), Дворецкий ввел дополнительно две последовательности положительных чисел ε_n и ρ_n такие, что

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \varepsilon_n = 0, \quad (6.43)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n = 0. \quad (6.44)$$

При каждом n ρ_n есть нижняя грань значений $y(x_n)$ для всех x_n , отстоящих от цели \hat{x} по крайней мере на ε_n . Иными словами, если

$$|x_n - \hat{x}| > \varepsilon_n, \quad (6.45a)$$

то

$$|y(x_n)| > \rho_n. \quad (6.45b)$$

Таким образом, если значение x_n отстоит сравнительно далеко от \hat{x} , то коррекция, вызванная эффектом восстановления, будет по абсолютной величине не меньше, чем $a_n \rho_n$. Так как сумма членов a_n предполагается бесконечной (см. уравнение (6.12)), то легко выбрать ρ_n так, что

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n \rho_n = \infty. \quad (6.46)$$

Иными словами, именно $a_n \rho_n$ создает тот эффект восстановления, который обеспечивается в (6.39) членом γ_n ; уравнение (6.46) показывает, что при таком выборе удовлетворяется и условие (6.40). Справедливость уравнения (6.39) проверяется непосредственной подстановкой в него (6.45) с учетом вида преобразования в схеме Роббинса—Монро:

$$|T(x_n) - \hat{x}| \equiv |x_n - a_n y(x_n) - \hat{x}| = |x_n - \hat{x} - a_n |y(x_n)| < |x_n - \hat{x}| - \gamma_n. \quad (6.47)$$

Рассмотрим теперь возможность перехода за корень. Поскольку ε_n выбирается так, чтобы при $|x_n - \hat{x}| > \varepsilon_n$ переход за значение корня был невозможен, то дальнейшему изучению подлежат лишь те ситуации, для которых в результате коррекции выполняется условие

$$|T(x_n) - \hat{x}| \leq \varepsilon_n. \quad (6.48)$$

В соответствии с уравнением (6.43) последовательность ε_n стремится к нулю. Поэтому условию (6.38) можно практически удовлетворить, полагая $\varepsilon_n = \alpha_n$.

Однако возможность перехода за корень все же надо иметь в виду. Она возникает в том случае, когда коррекция $a_n y(x_n)$ превосходит по абсолютной величине первоначальное расстояние $|x_n - \hat{x}|$. В этих условиях преобразование Роббинса—Монро удовлетворяет соотношению

$$|T(x_n) - \hat{x}| = a_n |y(x_n)| - |x_n - \hat{x}|. \quad (6.49)$$

Теперь нам и понадобится предположение о том, что зависящая переменная удовлетворяет ограничениям вида (см. (6.14))

$$|y(x_n)| < A|x_n - \hat{x}| + B < \infty. \quad (6.50)$$

Следовательно,

$$|T(x_n) - \hat{x}| < (a_n A - 1)|x_n - \hat{x}| + a_n B. \quad (6.51)$$

Так как $a_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$, то существует некоторый номер m , начиная с которого $a_n A < 1$. Тогда для всех $n \geq m$

$$|T(x_n) - \hat{x}| < a_n B. \quad (6.52)$$

Следовательно, условие перехода за корень (6.38) может быть выполнено, если положить

$$\alpha_n \equiv \max \{\varepsilon_n, a_n, B\}. \quad (6.53)$$

Таким образом, при достаточно больших n метод Роббинса—Монро удовлетворяет требованию (6.38). Этим завершается доказательство того, что процедура Роббинса—Монро удовлетворяет условиям Дворецкого и потому обеспечивает сходимость в среднеквадратическом и с вероятностью 1 к корню \hat{x} .

6.12. Условия Дворецкого

В предыдущих разделах постепенно были введены, обоснованы и проиллюстрированы условия, которым должна отвечать сходящаяся процедура стохастической аппроксимации. Они получили название условий Дворецкого. Для удобства дальнейшего изложения сейчас мы соберем их все вместе и изложим в самой общей форме. При этом надо иметь в виду, что коррекция не должна обязательно зависеть только от последнего наблюдения. При желании можно использовать все предыдущие замеры. Эту возможность мы будем иметь в виду, используя запись $T_n(x_1 \dots x_n)$.

Теорема Дворецкого. Пусть $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$ ($n = 1, 2, \dots$) — некоторые неотрицательные действительные числа, удовлетворяющие условиям

$$1) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_n = 0; \quad (6.386)$$

$$2) \quad \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n < \infty; \quad (6.42)$$

$$3) \quad \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n = \infty. \quad (6.40)$$

Пусть x — действительное число, а T_n — измеримые преобразования, удовлетворяющие условию

$$4) \quad |T_n(x_1, \dots, x_n) - \hat{x}| \leq \leq \max \{ \alpha_n [(1 + \beta_n) |x_n - \hat{x}| - \gamma_n] \} \quad (6.54)$$

при всех действительных x_1, \dots, x_n . Пусть r_n — случайные величины и

$$5) \quad x_{n+1} = T(x_1, \dots, x_n) + r_n \text{ при } n > 0. \quad (6.27)$$

Тогда условия $E \{x_1^2\} < \infty$,

$$6) \quad \sum_{n=1}^{\infty} E \{r_n^2\} < \infty \quad (6.30)$$

и

$$7) \quad E \{r_n\} = 0 \quad (6.29)$$

с вероятностью 1 для всех n обеспечивают сходимость в среднеквадратическом:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E \{ (x_n - \hat{x})^2 \} = 0 \quad (6.15)$$

и сходимость с вероятностью 1:

$$P \{ \lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \hat{x} \} = 1. \quad (6.16)$$

Дворецкому удалось не только доказать эту сильную теорему, но и получить ряд ее ценных обобщений. Например, последовательности α_n , β_n , γ_n необязательно должны быть независимыми от наблюдений x_1, \dots, x_n . Используя этот факт, можно проверить, насколько эффективен стохастический вариант такой классической схемы последовательных приближений, как метод Ньютона—Рафсона, опирающийся при поиске корня на оценку первой производной ¹⁾. Дворецкий также показал, что допустимо даже локальное смещение оценки. Оно только не должно быть асимптотическим. Иными словами, теорема справедлива и в том случае, когда условие 7) заменяется более слабым требованием

$$\sum_{n=1}^{\infty} E \{ r_n \} < \infty \quad (6.55)$$

при всех возможных последовательностях x_1, \dots, x_n . Остальные обобщения носят более специальный характер и приводятся в его статье.

ПОИСК МАКСИМУМА

Выше было показано, что процедура Роббинса—Монро после небольшой модификации может быть использована и для поиска максимума. Однако ее применение для этих целей является не очень перспективным, поскольку нахождение производных с любой точностью в произвольной точке сопряжено с известными трудностями.

¹⁾ L. Lapidus, Digital computation for chemical engineering (New York: McGraw-Hill Book Co., Inc., 1962), p. 288. [См. также: Б. П. Демидович, И. А. Марон, Основы вычислительной техники, изд. 2-е, М., Физматгиз, 1963. (Прим. ред.)]

6.13. Метод Кифера—Вольфовица

Спустя год после публикации статьи Роббинса и Монро появилась стохастическая процедура Кифера—Вольфовица, предназначенная специально для поиска максимума. Вместо нахождения производной $y'(x_n)$ в точке x_n они предложили вычислять средний угловой коэффициент

$$\frac{z(x_n + c_n) - z(x_n - c_n)}{2c_n}, \quad (6.56)$$

где $z(x_n + c_n)$ и $z(x_n - c_n)$ — два наблюдения, соответствующих значениям $x_n + c_n$, $x_n - c_n$, а c_n — некоторая

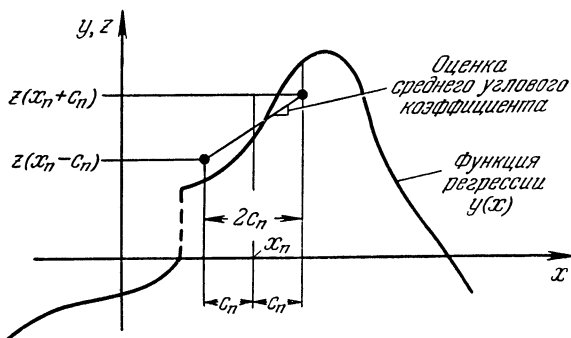


Рис. 6.3. Оценка среднего углового коэффициента по методу Кифера—Вольфовица.

постоянная. Эту идею иллюстрирует рис. 6.3, на котором изображены типичная унимодальная функция и результаты измерений при наличии помех. Знак этого углового коэффициента определяет перспективное направление дальнейшего поиска. В соответствии с процедурой Кифера—Вольфовица координата центра x_{n+1} следующей пары замеров вычисляется так:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{a_n [z(x_n + c_n) - z(x_n - c_n)]}{c_n}, \quad (6.57)$$

где a_n — некоторый член последовательности положительных чисел, определяющих длину шага, а c_n — расстояние

между двумя предыдущими наблюдениями. В пределе и длина шага $2a_n$, и расстояние $2c_n$ стремятся к нулю, т. е.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = 0, \quad (6.58a)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} c_n = 0, \quad (6.58b)$$

так что процесс асимптотически сходится. Чтобы величина суммарного корректирующего воздействия была достаточна для достижения точки максимума, последовательность шагов должна удовлетворять условию

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n = \infty. \quad (6.59)$$

С другой стороны, для подавления помехи требуется, чтобы

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{a_n}{c_n} \right)^2 < \infty. \quad (6.60)$$

В первоначальной статье Кифер и Вольфовиц наложили на a_n и c_n еще ряд условий, как оказалось впоследствии, излишних.

Если функция регрессии y и помехи удовлетворяют некоторым разумным ограничениям, то процесс сходится к точке максимума унимодальной функции как в среднем квадратическом, так и с вероятностью единица. Как и в процедуре Роббинса—Монро, ошибка эксперимента должна быть равномерно ограниченной и иметь нулевое математическое ожидание (см. уравнения (6.29) и (6.30)). От функции регрессии y требуется, чтобы значения среднего углового коэффициента для любой пары наблюдений лежали в пределах некоторого сектора, ограниченного прямыми линиями, т. е. при всех $x_1 \neq x_2$ должно выполняться условие

$$|y(x_2) - y(x_1)| < A|x_2 - x^*| + B < \infty, \quad (6.61)$$

где x^* — истинная координата вершины, A и B — некоторые постоянные. Это ограничение аналогично уравнению (6.14) в схеме Роббинса—Монро; его назначение — исключить колебательность при поиске. Приведенные условия являются весьма слабыми и не вызывают на практике затруднений; им удовлетворяют даже функции вида

$y = -x^2$ и $y = \exp \{-x^2\}$. Читателю предоставляется возможность доказать, что процедура Кифера—Вольфовица удовлетворяет условиям Дворецкого, и сравнить свои построения с методикой Дворецкого.

6.14. Нормализация длины шага

В обеих рассмотренных выше процедурах длина шага выбиралась пропорциональной результату измерений — значению функции в схеме Роббинса—Монро и среднему угловому коэффициенту в методе Кифера—Вольфовица. Такая идея имеет смысл, если при удалении от цели измеряемые значения имеют тенденцию к возрастанию по абсолютной величине. В этом случае большие шаги соответствуют меньшей вероятности ошибки, и наоборот.

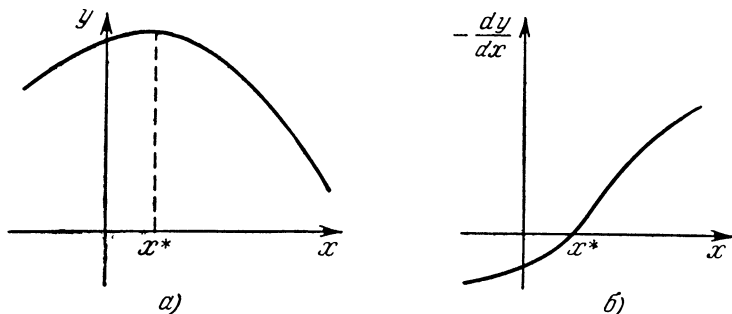


Рис. 6.4. Функции, удовлетворяющие сформулированным требованиям: а) унимодальная функция; б) монотонно возрастающая функция.

На рис. 6.4 изображены функции регрессии, для которых обычные схемы эффективны. На рис. 6.4, б приведена монотонно возрастающая функция: $y(x_2) > y(x_1)$ тогда и только тогда, когда $x_2 > x_1$. Ее корень может быть найден достаточно эффективно с помощью процедуры Роббинса—Монро. Далее, на рис. 6.4, а изображена унимодальная функция, производная которой монотонно убывает (рис. 6.4, б). Такие функции называются *вогнутыми вниз*, они не имеют точек перегиба, и к ним хорошо приложим метод Кифера—Вольфовица.

Рассмотрим, однако, чуть более сложную унимодальную функцию (рис. 6.5, а). Ее производная уже не является монотонной функцией (рис. 6.5, б), но обладает максимумом и минимумом, которые соответствуют точкам перегиба $y(x)$. В этих условиях показатели метода Кифера—Вольфовица значительно ухудшаются. Во-первых, резко падает скорость поиска в районе пологой части функции, вдали

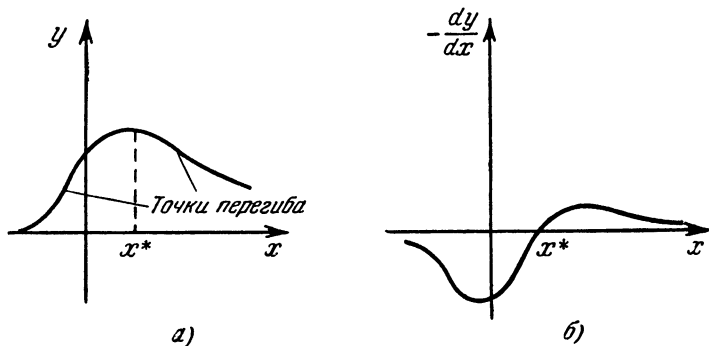


Рис. 6.5. Функции, требующие нормализации: а) унимодальная функция с точками перегиба; б) немонотонная функция.

от точки максимума x^* . Во-вторых, в районе крутого подъема, вблизи левой точки перегиба, процедура поиска идет с большим ускорением, в результате чего текущая точка минует максимум и переходит в новую пологую область, но расположенную уже по другую сторону от вершины. Таким образом, большая часть времени тратится на бесполезные медленные подъемы по склону и последующие скачки через вершину с одного склона на другой. На эту нежелательную особенность процедуры Кифера—Вольфовица указал В. Б. Крус-Диас (Техасский университет), осуществивший ряд эмпирических исследований, которые еще не опубликованы.

Таким образом, любое нарушение четности функции или ее симметрии относительно вершины может существенно повлиять на ход поиска методом Кифера—Вольфовица и замедлить его сходимость.

В этих условиях, по-видимому, предпочтительнее опираться лишь на знак, а не на величину среднего углового

коэффициента. Для такого *нормализованного* варианта ¹⁾ можно записать:

$$x_{n+1} = x_n + a_n \operatorname{sign} \left\{ \frac{z(x_n + c_n) - z(x_n - c_n)}{2c_n} \right\}, \quad (6.62)$$

где $\operatorname{sign} \{u\}$ (читается «сигнум») обозначает знак выражения, стоящего в скобках. Функцию $\operatorname{sign} \{u\}$ можно определить и иначе:

$$\operatorname{sign} \{u\} \equiv \frac{u}{|u|},$$

при условии, что

$$\operatorname{sign} \{0\} \equiv 0. \quad (6.63)$$

Таким образом, если оценка среднего углового коэффициента положительна, то изображающая точка смещается вправо и т. д. Используя теорему Дворецкого, можно показать, что этот нормализованный процесс сходится при тех же условиях, что и метод Кифера—Вольфовица. Эмпирические исследования показали, что эта процедура, как и следовало ожидать, свободна от описанных выше недостатков. Аналогично в нормализованном варианте метода Роббинса—Монро

$$x_{n+1} = x_n - a_n \operatorname{sign} \{z(x_n)\}. \quad (6.64)$$

Необходимо отметить, что вблизи максимума функция всегда вогнута вниз, независимо от того, как она ведет себя на периферии. Аналогично, все функции вблизи корня монотонны. Таким образом, в конце процедуры поиска эффективность ненормализованных методов возрастает. Кроме того, функции с перегибами вида $y = \exp \{-x^2\}$ можно свести к вогнутым функциям с помощью логарифмического преобразования $y' = \ln y$.

¹⁾ В работе В. Фабиана (V. F a b i a n, Stochastic approximation methods, Чехословацкий математический журнал, т. 10 (85), № 1, 1960) для ускорения сходимости при определении величины шага также предлагается использование только знака случайной величины z . Э. Д. Аведьян показал, что такая замена правомерна только в одном частном случае. См. его работу «К одной модификации алгоритма Роббинса и Монро», Автоматика и телемеханика, № 4, 1967 г. (Прим. ред.).

6.15. Ускорение

В идеальной схеме стохастической аппроксимации поиск вдали от вершины должен вестись с помощью больших шагов, а по мере приближения к цели их длина должна падать. Из изложенного выше следует, что на вогнутых функциях процедура Кифера—Вольфовица действительно обладает этим свойством.

Кестен предложил процедуру, которая ведет себя аналогичным образом на гораздо более широком классе функций и вместе с тем весьма перспективна в смысле ускорения поиска. Его идея опирается на следующие рассуждения. Вдали от вершины ошибки в определении направления поиска маловероятны и потому изменений направления будет относительно немного. Однако вблизи цели следует ожидать выбросов, способных привести к колебаниям вокруг вершины. Более того, в районе максимума значение измеряемой переменной близко к нулю и ее знак в значительной мере определяется помехой. Поэтому степень близости к максимуму можно оценить, учитывая число изменений направления. Уменьшать длину шага надо лишь при изменении направления поиска. Независимо от Кестена эта идея была впоследствии предложена также Лапидусом и др.¹⁾

Рассмотрим, например, модификацию метода Кифера—Вольфовица, выполненную по Кестену. Пусть для определенности длина шага подчиняется гармоническому закону: $1, 1/2, 1/3, \dots$. Предположим также для простоты, что процедура нормализована (тем самым мы избавляемся от необходимости учитывать вид функции y). Во второй строке табл. 6.1 приведена последовательность знаков средних угловых коэффициентов, полученная в ходе гипотетического поиска. Поскольку нас интересует максимум функции регрессии y , то эти знаки определяют направление поиска: например, плюс означает, что координату x надо увеличивать. В третьей и четвертой строках приведены размеры шагов в обычной и нормализованной схемах Кифера—Вольфовица. Полагая, что начальная точка поиска

¹⁾ L. Lapidus, E. Shapiro, S. Shapiro and R. E. Stillman, Optimization of process performance, A. I. Ch. E. J. 7, 2 (June 1961), p. 290.

x_1 лежит далеко слева от вершины, мы видим, что в процедуре Кестена в течение первых трех испытаний используются большие шаги. На четвертом шаге знак наблюдения изменяется. Это говорит о том, что, возможно, произошел переход за вершину. В соответствии с методом только в этот момент длина шага сокращается наполовину. К этому времени длина шага в схеме Кифера—Вольфовица уже уменьшилась до $1/8$, и вполне возможно, что текущее значение x находится еще весьма далеко от вершины. Последующие изменения знака наблюдений приводят в схеме Кестена к быстрому сокращению длины шага вблизи максимума.

Таблица 6.1

Ускоренный и обычный методы поиска максимума

Номер испытания	1	2	3	4	5	6	7	8	Общий путь
Знак наблюдения	+	+	+	—	—	+	—	+	
Длина шага в обычном методе	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{5}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{7}$	$\frac{1}{8}$	$1 \frac{149}{280}$
Длина шага в ускоренном методе	1	1	1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{5}$	$2 \frac{17}{60}$

Кестен показал, что его процедура обеспечивает сходимость с вероятностью единица при несколько более жестких условиях, чем это требуется в обычной схеме Кифера—Вольфовица. Впрочем, эти условия не вызывают на практике особых затруднений, и мы их упоминаем лишь ради полноты изложения. Кестен потребовал, чтобы каждый член последовательности a_n был меньше всех предыдущих, т. е.

$$a_{n+1} < a_n \quad \text{при всех} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.65)$$

Во всяком случае гармоническая последовательность этому условию удовлетворяет. Кроме того, он потребовал, чтобы расстояние $2c_n$, разделяющее каждую пару наблюдений, оставалось постоянным:

$$c_n = \text{const} \quad \text{при всех} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.66)$$

В обычном методе Кифера—Вольфовица $c_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$.

Кроме того, Кестен построил ускоренный вариант процедуры Роббинса—Монро и доказал его сходимость с вероятностью единица. Его теоремы содержат общие условия, при которых ускоренные методы поиска сходятся с вероятностью единица, и в этом смысле они подобны теоремам Дворецкого.

6.16. Многомерный поиск

До сих пор наше исследование ограничивалось лишь функциями одной переменной. Теперь мы переходим к изучению многомерных задач, в которых функция y зависит уже от k переменных: x_1, x_2, \dots, x_k .

В отсутствие помех переход от функций одного аргумента к функциям многих переменных сопряжен со значительными трудностями. Это объясняется тем, что в одномерном пространстве существуют мощные методы исключения, которым нет аналога в многомерных пространствах. Сколь это ни парадоксально, но при наличии помех такой переход осуществляется совершенно безболезненно. В значительной мере это объясняется тем, что в условиях помех методы исключения оказываются непригодными уже в одномерном случае. Более того, все теоретические предпосылки, нужные для постановки многомерной задачи, уже были изложены в главах 3 и 4.

Анализу будут подвергнуты два подхода. Первый принадлежит Блюму, который предложил использовать для поиска максимума функции многих переменных при наличии шумов метод наискорейшего подъема, когда поиск ведется в направлении градиента. Доказательство сходимости метода Блюма может быть получено путем непосредственного обобщения теоремы Дворецкого. Вводится система координат, в которой точка (x_1, x_2, \dots, x_k) задается вектором x :

$$x \equiv (x_1, x_2, \dots, x_k). \quad (6.67)$$

«Расстояние» от точки x до вершины x_1^* ($x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*$) определяется следующим равенством:

$$x - x^* \equiv \left[\sum_{i=1}^k (x_i - x_i^*)^2 \right]^{1/2}. \quad (6.68)$$

В этом случае в теореме Дворецкого абсолютные величины разностей $(x_n - x^*)$ надо заменить на $|x_n - x^*|$. Введенное таким образом расстояние несколько произвольно, поскольку оно зависит от выбора масштаба переменных. Это, однако, не вызывает каких-либо затруднений, если изучаются вопросы сходимости. Трудности, подобные тем, которые обсуждались в гл. 4, возникают лишь при исследовании скорости сходимости.

Пусть масштаб измерений выбран таким образом, что задача решается в безразмерных единицах. Блюм определяет наклон касательной плоскости в точке x_n по результатам наблюдений в x_n и k других точках, отличающихся от x_n тем, что в каждой из них только к одной из координат прибавляется c_n — некоторый член последовательности $\{c_n\}$.

Пусть e_j есть j -й единичный вектор, у которого j -я координата равна единице, а все остальные — нулю. Тогда n -я группа экспериментов требует наблюдений в следующих $(k + 1)$ точках:

$$\begin{aligned} x_n^0 &= x_n, \\ x_n^1 &= x_n + c_n e_1, \\ x_n^2 &= x_n + c_n e_2, \\ &\vdots \\ x_n^k &= x_n + c_n e_k. \end{aligned} \quad (6.69)$$

Этот набор точек изображен на рис. 6.6, а.

Обозначим через z_n^j наблюдаемое значение функции в точке x_n^j . Иными словами,

$$z_n^j \equiv z(x_n^j), \quad j = 1, 2, \dots, k. \quad (6.70)$$

Благодаря наличию помех величина z_n^j отличается от истинного значения y_n^j функции регрессии в точке x_n^j . В качестве оценки градиента в точке x_n Блюм предлагает использовать вектор, j -я компонента которого равна $(z_n^j - z_n)/c_n$. Последующая группа экспериментов располагается вблизи базовой точки x_{n+1} , лежащей в направлении вычисленного градиента. Если обозначить через a_n текущую длину шага, то

$$x_{n+1} = x_n + \frac{a_n [(z_n^1 - z_n), (z_n^2 - z_n), \dots, (z_n^k - z_n)]}{c_n}. \quad (6.71)$$

Последовательности a_n и c_n должны удовлетворять тем же самым условиям (6.58), (6.59) и (6.60), что и соответствующие коэффициенты в одномерной процедуре Кифера—Вольфовица. На функцию регрессии и помехи также накладываются некоторые разумные ограничения, но они не сильнее, чем в одномерном случае. Например, от функции градиента требуется, чтобы она была ограничена некоторыми

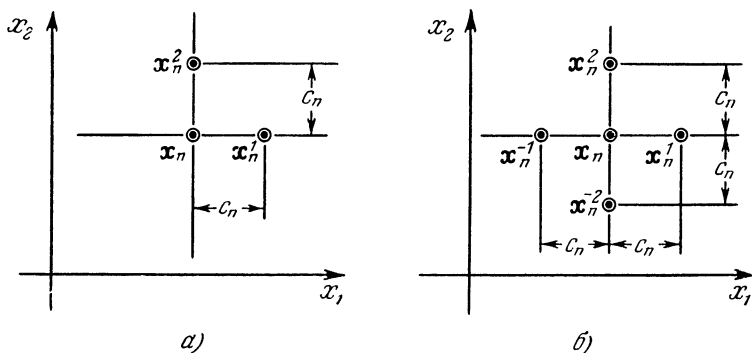


Рис. 6.6. Многомерный поиск: а) асимметричные измерения по методу Блума; б) симметричные измерения по методу Кифера — Вольфовица.

плоскостями в любой точке и для любой возможной последовательности $\{c_n\}$. К помехе же, как обычно, предъявляется требование ограниченности дисперсии.

Можно показать, что метод Блума удовлетворяет условиям Дворецкого и процедура поиска сходится к вершине x^* в среднеквадратическом и с вероятностью единица. Но, к сожалению, как показал Сакс ¹⁾, этот метод обладает одним существенным недостатком: эксперименты благодаря их асимметричному расположению начинают группироваться вокруг ложного значения, и это резко замедляет скорость сходимости к истинному максимуму. В качестве выхода Сакс предложил симметричную процедуру, которая и является настоящим многомерным вариантом симметричного метода Кифера—Вольфовица. Как показано на рис. 6.6, б,

¹⁾ J. S a c k s, Asymptotic distribution of stochastic approximation procedures, *Annals of Math. Stat.* 29 (1958), pp. 397—398.

процедура Сакса опирается на пару наблюдений по каждой из независимых переменных, причем эти наблюдения располагаются симметрично около базовой точки \mathbf{x}_n . Таким образом, по сравнению с процедурой Блума Саксу требуется еще k дополнительных точек:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_n^{-1} &= \mathbf{x}_n - c_n \mathbf{e}_1, \\ \mathbf{x}_n^{-2} &= \mathbf{x}_n - c_n \mathbf{e}_2, \\ &\vdots \\ \mathbf{x}_n^{-k} &= \mathbf{x}_n - c_n \mathbf{e}_k. \end{aligned} \quad (6.72)$$

Поскольку в точке \mathbf{x}_n никаких измерений не производится, то Саксу нужно $2k$ наблюдений, в то время как Блему — лишь $k + 1$. Оценка градиента по Саксу в точке \mathbf{x}_n представляет собою вектор с составляющими $(z_n^j - z_n^{-j})/2c_n$. Таким образом, для этого метода

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \frac{a_n [(z_n^1 - z_n^{-1}), (z_n^2 - z_n^{-2}), \dots, (z_n^k - z_n^{-k})]}{2c_n}. \quad (6.73)$$

Обычные условия, которым должны отвечать соответствующие последовательности, функция регрессии и помехи, нужны для доказательства сходимости этой процедуры в среднеквадратическом и с вероятностью единица.

СКОРОСТЬ СХОДИМОСТИ

Условия, которые требуются для сходимости всех процедур стохастической аппроксимации, настолько слабы, что, естественно, возникает вопрос: какая же из последовательностей является наилучшей? Для того чтобы ответить на этот вопрос, надо ввести, как обычно, некоторую меру эффективности процедуры поиска.

В отсутствие помех для этой цели весьма полезным оказался интервал неопределенности — область значений x , в пределах которой с достоверностью лежит вершина. При наличии помех вместо достоверности приходится рассматривать вероятность. Качество поиска характеризуется некоторым числом p — вероятностью того, что вершина лежит в пределах вероятностного интервала неопределенно-

сти. Величина p обычно выбирается в пределах от 0,95 и выше. В дальнейшем изложении вероятностное определение интервала неопределенности, однако, использоваться не будет. Вместо него мы будем оперировать со среднеквадратической ошибкой $E \{(x_n - \hat{x})^2\}$, или СКО, которая уже встречалась при изучении сходимости. Будем обозначать ее V_n , где индекс n означает номер испытания. Эту величину зачастую можно вычислить даже тогда, когда интервал неопределенности найти вообще невозможно. Более того, величина интервала неопределенности растет пропорционально квадратному корню из СКО, а поскольку наша цель состоит не столько в том, чтобы найти интервал неопределенности, сколько в том, чтобы сделать его как можно меньшим, то достаточно добиться минимума V_n , что зачастую сделать гораздо проще.

В соответствии с уравнением (6.15) мы будем рассматривать только те процедуры, для которых

$$\lim_{n \rightarrow \infty} V_n \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} E \{(x_n - \hat{x})^2\} = 0. \quad (6.74)$$

Мы будем также изучать схемы, для которых величина V_n не обязательно является минимально возможной на первых этапах поиска, но зато в пределе быстро стремится к нулю. Выполнение этих условий, однако, не всегда совместимо, и поэтому оба случая будут изучаться порознь.

6.17. Оптимальный метод поиска корня

Синтез оптимальных процедур стохастической аппроксимации мы проиллюстрируем на примере одной работы Дворецкого, относящейся к методу Роббинса—Монро. Результат Дворецкого является частным случаем его более общей теоремы, которая приложима и к другим процедурам. Содержание этой теоремы будет приведено далее. Как обычно, результаты будут изложены в самой наглядной форме. Более подготовленный читатель, который, возможно, заинтересуется некоторыми тонкостями доказательства, отсылается к оригинальным работам.

Итак, пусть ищется единственный корень линейной функции, изображенной на рис. 6.7. Поиск ведется в усло-

виях помех. Первое значение x_1 выбирается случайным образом, второе вычисляется по формуле

$$x_2 = x_1 - a_1 z_1 = (x_1 - a_1 y_1) - a_1 r_1. \quad (6.75)$$

Разобьем процесс на регулярную и случайную составляющие.

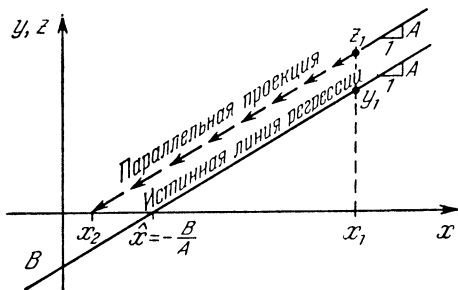


Рис. 6.7. Оптимальная процедура при известном угловом коэффициенте.

Пусть прямая линия отвечает уравнению

$$y = Ax + B, \quad (6.76)$$

и пусть угловой коэффициент A известен. Поэтому

$$x_2 = (1 - a_1 A) x_1 - a_1 B - a_1 r_1. \quad (6.77)$$

Положим

$$a_1 = \frac{1}{A}. \quad (6.78)$$

Тогда

$$x_2 = -\frac{B}{A} - \frac{r_1}{A}. \quad (6.79)$$

Вычисляя математическое ожидание обеих частей этого равенства при нулевом среднем значении помехи, находим:

$$E \{x_2\} = -\frac{B}{A}. \quad (6.80)$$

Благодаря тому, что корень уравнения (6.76) в точности равен B/A , такой выбор коэффициента a_1 приводит к совпадению среднего значения x_2 с точкой \hat{x} и минимизирует СКО V_2 . Эта оптимальная процедура изображена на рис. 6.7

и состоит из двух этапов. На первом этапе через точку наблюдения z_1 проводится линия, параллельная линии регрессии, на втором определяется x_2 — точка пересечения этой линии с осью x ¹⁾.

Настолько простые задачи поиска встречаются, конечно, редко. Однако довольно часто приходится иметь дело с

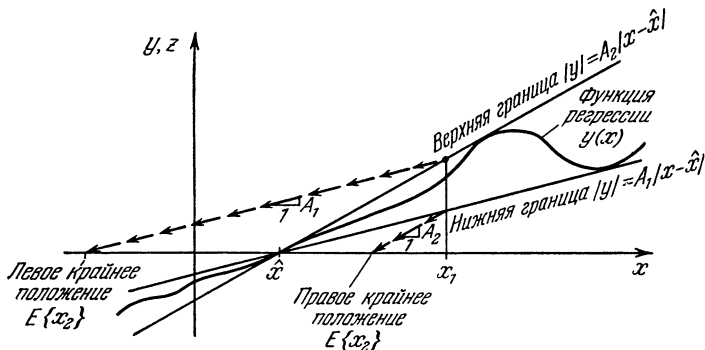


Рис. 6.8. Функция, ограниченная прямыми линиями.

функциями регрессии, ограниченными сверху и снизу некоторыми прямыми с известными заранее угловыми коэффициентами. Подобная ситуация изображена на рис. 6.8. Она отвечает следующему ряду неравенств:

$$0 < A_1 |x - \hat{x}| \leq |y(x)| \leq A_2 |x - \hat{x}| < \infty. \quad (6.81)$$

На первый взгляд кажется, что корень \hat{x} может быть найден немедленно, — в этой точке должны пересекаться обе прямые линии. Следует, однако, иметь в виду, что для определения угловых коэффициентов A_1 и A_2 знание \hat{x} отнюдь не обязательно. Значение этих постоянных состоит в другом: они априори определяют верхнюю и нижнюю границы математического ожидания коррекции, которая может понадобиться при данном расстоянии от корня.

¹⁾ Здесь автор неточен. Фактически $E\{(x_2 - \hat{x})^2\} = y_1(a_1 - 1/A_1)^2 + a_1^2\sigma^2$, поэтому выбор $a_1 = 1/A$ не является оптимальным и допустим только при $x_1 \gg \hat{x}$. (Прим. ред.)

Пусть первый эксперимент был произведен в точке x_1 . Величина ошибки, а следовательно, и результат наблюдения, конечно, случайны. Но в распоряжении экспериментатора остается выбор постоянной a_1 — величины, обратной угловому коэффициенту прямой, проходящей через точку z_1 . Пересечение этой прямой с осью x определяет точку x_2 . В целях предосторожности экспериментатор должен рассматривать два крайних случая, которые могут иметь место: 1) $y(x_1)$ принадлежит нижней граничной прямой и 2) $y(x_1)$ принадлежит верхней прямой. В первом случае он относится к нижней прямой

$$y(x_1) = A_1(x_1 - \hat{x}), \quad (6.82)$$

и потому

$$E\{x_2\} - \hat{x} = (1 - a_1 A_1)(x_1 - \hat{x}). \quad (6.83)$$

Если же наблюдаемое значение y_1 относится к верхней прямой, то

$$y(x_1) = A_2(x_1 - \hat{x})$$

и

$$E\{x_1\} - \hat{x} = (1 - a_1 A_2)(x_1 - \hat{x}). \quad (6.84)$$

На рис. 6.8 показано, к чему приводит выбор a_1 в каждом из этих крайних случаев. Если a_1 выбирается равным A_2 , то $E\{x_2\}$ совпадает с крайним возможным положением справа от \hat{x} , а если $a_1 = A_1$, то с крайним слева.

Поступим осторожно и применим минимаксную стратегию. Наибольшая возможная ошибка $E\{x_2\}$ соответствует, очевидно, максимальному из выражений (6.87) и (6.88):

$$\max\{|E\{x_2\} - \hat{x}|\} = \max\{|(1 - a_1 A_1)|x_1 - \hat{x}|, \\ (a_1 A_2 - 1)|x_1 - \hat{x}|\}. \quad (6.85)$$

Вычислим значение a_1 , доставляющее минимум (6.85). Оно соответствует равенству членов, стоящих в скобках:

$$1 - a_1 A_1 = a_1 A_2 - 1. \quad (6.86)$$

Следовательно, оптимальное значение

$$a_1 = \frac{2}{A_1 + A_2}. \quad (6.87)$$

Отсюда

$$\min (\max \{ |E \{x_2\} - \hat{x}| \} = \frac{A_2 - A_1}{A_1 + A_2} |x_1 - \hat{x}|. \quad (6.88)$$

Таким образом, при минимаксном подходе функция регрессии заменяется некоторой гипотетической прямой линией с усредненным угловым коэффициентом $\frac{A_1 + A_2}{2}$. Поэтому уравнение (6.88) аналогично (6.78).

6.18. Сокращение длины шага

Вероятно, весьма заманчиво было бы еще раз повторить эти рассуждения и сделать вывод о том, что каждый член последовательности a_n должен быть равен $2/(A_1 + A_2)$. Однако эта последовательность не удовлетворяла бы условиям Дворецкого хотя бы потому, что ее общий член не стремится к нулю. Более того, после минутного размышления нетрудно увидеть и то, что такая последовательность накапливала бы эффект воздействия помех и потому СКО V_n беспредельно бы возрастала. Поэтому для сходимости процедуры поиска надо потребовать, чтобы последующие члены a_n были меньше $2/(A_1 + A_2)$:

$$a_n < \frac{2}{A_1 + A_2}, \quad n = 2, 3, \dots \quad (6.89)$$

С учетом этого условия уравнение (6.85) принимает вид

$$|E \{x_2\} - \hat{x}| \leq (1 - a_1 A_1) |x_1 - \hat{x}|.$$

В общем случае можно записать:

$$|E \{x_{n+1}\} - \hat{x}| \leq (1 - a_n A_1) |x_n - \hat{x}|, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.90)$$

В этих условиях среднеквадратическая ошибка вычисляется следующим образом:

$$\begin{aligned} E \{(x_{n+1} - \hat{x})^2\} &= E \{[(E \{x_{n+1}\} - \hat{x}) + (x_{n+1} - E \{x_{n+1}\})]^2\} = \\ &= |E \{x_{n+1}\} - \hat{x}|^2 + E \{(x_{n+1} - E \{x_{n+1}\})^2\} = \\ &= |E \{x_{n+1}\} - \hat{x}|^2 + E \{a_n^2 (z_n - y_n)^2\} = \\ &= |E \{x_{n+1}\} - \hat{x}|^2 + a_n^2 E \{\delta_n^2\}, \quad (6.91) \end{aligned}$$

где δ_n — ошибка n -го опыта. Как и в (6.9), предполагается, что дисперсия ошибки $E\{\delta_n^2\}$ всюду ограничена:

$$\{\delta_n^2\} < \sigma^2 < \infty. \quad (6.92)$$

Учитывая уравнения (6.90), (6.91) и (6.92), находим верхнюю границу для СКО:

$$V_{n+1} \equiv E\{(x_{n+1} - \hat{x})^2\} \leq (1 - a_n A_1)^2 V_n + a_n^2 \sigma^2. \quad (6.93)$$

Задача теперь состоит в том, чтобы выбором величины a_n сделать эту верхнюю границу как можно меньшей. Дифференцируя (6.93) по a_n и приравнявая результат нулю, находим оптимальное значение a_n :

$$a_n = \frac{A_1 V_n}{\sigma^2 + A_1^2 V_n}. \quad (6.94)$$

Подставляя это значение в (6.93), получаем

$$V_{n+1} \leq \frac{\sigma^2 V_n}{\sigma^2 + A_1^2 V_n}. \quad (6.95)$$

Еще раз напомним, что эти соотношения были выведены при условии, что все члены последовательности a_n не превышают $2/A_1 + A_2$, т. е.

$$a_n < \frac{2}{A_1 + A_2}, \quad n = 2, 3, \dots \quad (6.96)$$

Пусть это условие справедливо для a_1 . Тогда оно выполняется и для всех остальных коэффициентов. В этом случае необходимо, чтобы начальная оценка x_1 была настолько близка к корню, что СКО V_1 удовлетворяло бы неравенству

$$a_1 = \frac{A_1 V_1}{\sigma^2 + A_1^2 V_1} \leq \frac{2}{A_1 + A_2}. \quad (6.97)$$

Следовательно, для V_1 должно иметь место неравенство

$$V_1 \leq \frac{2\sigma^2}{A_1(A_2 - A_1)}. \quad (6.98)$$

Так как

$$V_1 \equiv E\{(x_1 - \hat{x})^2\} = |x_1 - \hat{x}|^2, \quad (6.99)$$

то уравнение (6.98) определяет верхнюю грань C для расстояния от x_1 до точки оптимума:

$$|x - x_1| \leq C = \sqrt{\frac{2\sigma^2}{A_1(A_2 - A_1)}}. \quad (6.100)$$

В том случае, когда нельзя быть уверенным, что это условие действительно выполняется, надо поддерживать коэффициенты равными $2/(A_1 + A_2)$ до тех пор, пока последовательность не подойдет настолько близко к корню, что уравнение (6.100) начнет удовлетворяться. Первый эксперимент, удовлетворивший этому условию, можно рассматривать как первый член некоторой новой последовательности, к которой оптимальная процедура Дворецкого уже применима.

Выразим коэффициенты a_n и среднеквадратические ошибки V_n через найденную верхнюю границу C . Выбирая $V_1 \leq C^2$, из уравнений (6.94) и (6.95) находим

$$a_n = \frac{A_1 C^2}{\sigma^2 + n A_1^2 C^2}. \quad (6.101)$$

Это приводит к следующему выражению для верхней грани СКО:

$$V_n \leq \frac{\sigma^2 C^2}{\sigma^2 + (n-1) A_1^2 C^2}. \quad (6.102)$$

Последовательность Дворецкого является минимаксной в том смысле, что никакая другая последовательность не приводит к меньшему значению предела для правой части (6.102). Знак равенства в (6.101) и (6.102) соответствует наихудшему возможному случаю, когда $|x_1 - \hat{x}| = C$, а $|y| = A_1 |x - \hat{x}|$.

Подставляя уравнение (6.100) в (6.101) и (6.102), находим

$$a_n = \frac{1}{A_1 \left[n + \left(\frac{A_2 - A_1}{2A_1} \right) \right]}, \quad (6.103)$$

$$V_n \leq \frac{\sigma^2}{A_1 \left[\frac{A_2 - A_1}{2} + (n-1) A_1 \right]}. \quad (6.104)$$

Уравнение (6.103) может показаться неожиданным. Из него следует, что оптимальная последовательность не под-

вержена воздействию помех и, более того, даже не является гармонической! Из уравнения (6.104) вытекает, что помехи влияют лишь на величину интервала неопределенности. Грубо говоря, вероятностный интервал неопределенности после каждого эксперимента пропорционален стандартному отклонению (корню квадратному из СКО) помехи.

Если бы выполнялось условие $A_2 = A_1$, то последовательность Дворецкого принимала бы вид $1/A_1 n$, что совпадает с линейным случаем (см. уравнение (6.78)). Лишь при этом условии она подчиняется гармоническому закону, во всех остальных случаях в знаменателе присутствует дополнительно положительное число. При больших n последовательность становится почти гармонической, а влияние углового коэффициента A_2 верхней прямой на величину шага становится все меньшим. Однако влияние A_1 сохраняется все время. Объясняется это тем, что при больших n последовательность ведет себя так, будто функция регрессии совпадает с прямой с угловым коэффициентом A_1 . При малой величине A_1 значение СКО V_n в течение длительного времени остается большим.

6.19. Асимптотика

Асимптотическое поведение обычных гармонических последовательностей изучалось в работах Чанга, Ходжеса и Лемана. Они показали, что, выбирая

$$a_n = \frac{1}{ny'(\hat{x})}, \quad (6.105)$$

где $y'(\hat{x})$ — угловой коэффициент функции регрессии, вычисленный в точке $x = \hat{x}$, можно сделать значение V_n малым при достаточно больших n . При таком выборе a_n величина V_n стремится к $\sigma^2/\{n[y'(\hat{x})]^2\}$, что, конечно, меньше σ^2/nA_1^2 . Следовательно, высокая эффективность процедуры Дворецкого при малых выборках достигается за счет уменьшения эффективности при больших n .

В заключение мы рассмотрим три этапа процесса поиска корня в присутствии помех. Вначале, когда цель еще далека, надо выбрать большие значения коэффициентов:

$$a_n = \frac{2}{A_1 + A_2}, \quad n = 1, 2, \dots, m. \quad (6.106)$$

С некоторого момента времени начнет удовлетворяться условие (6.100), и дальнейшие шаги должны подчиняться закону

$$a_{m+n} = \frac{A_1 C^2}{\sigma^2 + n A_1^2 C^2}, \quad n = 1, 2, \dots, m, \quad (6.107)$$

где m — номер последнего эксперимента, для которого уравнение (6.100) еще не справедливо. И, наконец, вблизи корня \hat{x} асимптотическую эффективность обеспечивает закон

$$a_{m+n} = \frac{1}{ny'(\hat{x})}, \quad n = m' + 1, m' + 2, \dots \quad (6.108)$$

6.20. Оптимальный метод поиска максимума

Выше отмечалась возможность поиска максимума с помощью обычного метода Роббинса—Монро. Точно так же для этой цели можно применить и его оптимальный вариант. Однако ради полноты изложения мы рассмотрим здесь вкратце модификацию процедуры Кифера—Вольфовица, выполненную по Дворецкому. Это даст нам возможность изложить методику Дворецкого более четко, чем это было сделано в предыдущем разделе. Основная идея состоит в том, что для функции регрессии строятся некоторые границы, позволяющие уменьшить ошибки за счет регулярной части преобразования, когда ошибка умножается на число, меньшее единицы.

Иными словами, преобразование $T(x_n)$ должно удовлетворять неравенству

$$|T(x_n) - \hat{x}| \leq F_n |x_n - \hat{x}|, \quad (6.109a)$$

где

$$0 \leq F_n \leq 1. \quad (6.109b)$$

Повторяя те же рассуждения, что и при выводе уравнения (6.95), находим

$$E \{ (x_{n+1} - \hat{x})^2 \} \equiv V_{n+1} \leq F_n^2 V_n + \sigma_n^2, \quad (6.110)$$

где σ_n^2 — дисперсия случайной составляющей r_n . Если множитель F_n является непрерывной функцией последовательности a_n , то оптимальное значение a_n , минимизирующее

правую часть этого неравенства, может быть найдено путем дифференцирования. Предполагая, что начальные значения a_1 и V_1 известны, таким способом можно получить некоторое рекуррентное соотношение, связывающее последующие коэффициенты a_n и среднеквадратические ошибки V_n .

При оптимизации обычной процедуры Кифера—Вольфовица надо иметь в виду не только последовательность $\{a_n\}$, но и $\{c_n\}$. По имеющимся у нас сведениям, в литературе пока еще нет работ, посвященных управлению последовательностью $\{c_n\}$. Наши попытки восполнить этот пробел натолкнулись на большие трудности и также не привели к успеху. Тем не менее можно предложить некоторую модифицированную процедуру, в которой величина c_n поддерживается неизменной в течение всего процесса поиска. При дальнейшем изложении будем полагать $c_n = c$ при всех n , где число c не зависит от номера n .

Поскольку функция регрессии y и дисперсия помехи σ^2 ограничены, то оптимальный закон управления последовательностью a_n может быть найден почти аналогично формулам предыдущего раздела. Для того чтобы сделать аналогию более очевидной, а изложение кратким, мы введем средний угловой коэффициент

$$y' \equiv \frac{y(x+c) - y(x-c)}{2c}. \quad (6.111)$$

Предположим, что значения углового коэффициента y' лежат в некотором конусе

$$0 \leq \bar{A}_1 |x - x^*| \leq |y'| \leq \bar{A}_2 |x - x^*| < \infty, \quad (6.112)$$

где \bar{A}_1 и \bar{A}_2 — известные постоянные. Тогда сама функция регрессии целиком расположена между двумя параболоми, вторые производные которых связаны с \bar{A}_1 и \bar{A}_2 .

Пусть, как и в методе Роббинса—Монро, верхняя граница дисперсии ошибки при одном наблюдении z равна $\bar{\sigma}^2$. (Здесь z обозначает результат наблюдения функции регрессии, а не среднего углового коэффициента.) Предел $\bar{\sigma}^2$ дисперсии ошибки в определении углового коэффициента z' равен

$$E \left\{ \left[\frac{\delta(x+c) - \delta(x-c)}{2c} \right]^2 \right\} \leq \frac{\sigma^2}{2c^2} \equiv \bar{\sigma}^2. \quad (6.113)$$

Читателю предоставляется доказать, что если

$$|x_1 - x^*| \leq \bar{C} = \sqrt{\frac{2\bar{\sigma}^2}{\bar{A}_1(\bar{A}_2 - A_1)}}, \quad (6.114)$$

а

$$a_n = \frac{\bar{A}_1 \bar{C}^2}{\bar{\sigma}^2 + n \bar{A}_1 \bar{C}^2} = \frac{1}{\bar{A}_1 \left[n + \left(\frac{\bar{A}_2 - \bar{A}_1}{2\bar{A}_1} \right) \right]}, \quad (6.115)$$

то наименьшая верхняя граница для среднеквадратической ошибки определяется следующим выражением:

$$V_n \leq \frac{\bar{\sigma}^2 \bar{C}^2}{\bar{\sigma}^2 + (n-1) \bar{A}_1 \bar{C}^2} = \frac{\bar{\sigma}^2}{\bar{A}_1 \left[\frac{\bar{A}_2 - \bar{A}_1}{2} + (n-1) \bar{A}_1 \right]}. \quad (6.116)$$

Здесь n — число пар наблюдений y , по которым находится оценка y' . Последние три уравнения аналогичны выражениям (6.102), (6.103) и (6.104) соответственно.

Из этого раздела, посвященного изучению скорости сходимости, вытекает мораль: «Чем больше исследователь знает о системе, тем эффективнее поиск ее оптимума». Но разве не это составляет основной предмет данной книги?

Так в сумраке у снежных скал,
Прекрасный в смерти он лежал.
Его завет горит всегда,
Как путеводная звезда:
Excelsior!

ЛОНГФЕЛЛО

Упражнения

1. Используя метод Роббинса—Монро, найти корень функции $y = x^3 + x$, выбирая в качестве начальной точки $x = 10$. Принять, что длина шага подчиняется закону $a_n = 0,02/n$. Провести моделирование помех, подбрасывая после каждого измерения монету и прибавляя (отнимая) некоторое число k к вычисленному значению y , если монета выпала решкой (орлом). Таким образом, $z_n = y(x_n) + r_n$,

$$r = \begin{cases} k, & \text{если монета выпала решкой,} \\ -k, & \text{если монета выпала орлом.} \end{cases}$$

Сделать по 10 шагов при трех значениях k :

а) $k = 0$;

б) $k = 1$;

в) $k = 2$.

Результаты записать.

2. Прodelать то же самое, используя оптимальную стратегию Дворецкого.

3. Найти максимум функции $\exp(-x^2 + x)$, используя метод Кифера — Вольфовица при $a_n = 1/n$ и $c_n = 1/\sqrt{n}$. Начальная точка $x = 2,00$. Провести моделирование помех тем же способом, что и в упражнении 1. Сделать не более 10 шагов при:

а) $k = 0$;

б) $k = 0,1$;

в) $k = 0,2$.

4. Повторить упражнение 3, нормализуя длину шага и используя процедуру Кестена.

5. Повторить упражнение 4, полагая $c_n = 1,00$ и используя процедуру Дворецкого для нахождения корня.

6. Найти максимум функции $\exp(-x_1^2 - x_2^2 + x_1 - x_2)$, полагая $a_n = 1/n$ и $c_n = 1/\sqrt{n}$. Провести моделирование тем же способом, но подбрасывая монету после каждого измерения несколько раз. Прodelать 10 шагов при:

а) $k = 0$;

б) $k = 0,1$;

в) $k = 0,2$.

7. Опираясь на метод Ньютона — Рафсона, построить его стохастический вариант для поиска корня функции одной переменной.

8. Доказать, что процедура упражнения 7 удовлетворяет условиям Дворецкого.

9. Построить стохастическую процедуру поиска максимума функции одной переменной при квадратичной функции регрессии:

а) опираясь на последние три измерения;

б) методом наименьших квадратов по результатам последних четырех измерений;

в) методом наименьших квадратов по результатам всех измерений.

10. При каких условиях, если они вообще существуют, сходятся схемы, предложенные в упражнении 9?

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Адаптивное управление 23
Аппроксимация квадратичная
117
— линейная 108, 134
— нелинейная 109
— — в эндшпиле 112
— стохастическая 220, 231

«Безбрежность» гиперпространства 96

Вейерштрасса теорема 150
Взаимосвязь, учет при аппроксимации 116

Гармоническая последовательность 223, 224
Гиперповерхность 92
Гиперпространство 92
Глобальные свойства 124
Гомогенная квадратичная форма 117
Градиент 155, 160
Градиентный метод 134, 153 и д.
Гребень на поверхности отклика 173, 178
— разрешаемый 179

Дворецкого условия 240
Дебют в стратегии многомерного поиска 99, 100 и д.
Дискретные переменные 209
Дисперсия 228
Дихотомия 47
Доминирование 78
Дополнение до квадрата 120

Задача поиска 17 (см. также *Поиск...*)
— — детерминированная 17, 19 и д.
— — дискретная 65
— — мультимодальная (многоэкстремальная) 22
— — стохастическая 20
— — унимодальная 22

Интервал неопределенности 34, 95
Исключение касательными к линии уровня 135, 137

Канонический вид квадратичной формы 118
Касательная к линии уровня 107, 135
Кифера—Вольфовица процедура 242, 247
Коэффициенты масштабные 24
Критерий значимости 45
— эффективности поиска 33

Линия уровня 91
Локальное свойство 124

Масштаб в методе градиента 167
Математическое ожидание 227
Медиана 147
Метод Больцано отыскания корней 47, 225
— вращающихся координат 210
— градиента (наискорейшего подъема) 134, 153

- Метод дихотомии 47
 — золотого сечения 59
 — Кифера—Вольфовица 242, 247
 — конфигураций 202
 — оптимальный поиска корня 253
 — параллельных касательных (ПК) 180 и д.
 — — — инвариантный (ИПК) 186, 196
 — — — обобщенный (ОПК) 183, 189
 — — — ускоренный (УПК) 182, 189, 190
 — поиска с осторожной тактикой 215
 — Роббинса—Монро 225, 238, 241
 — сечений 175
 — Фибоначчи 47, 60
 — фиктивных точек 69
 Методы стохастической аппроксимации 220 и д.
 Минимакс 36, 144
 Миттельшпиль в стратегии многомерного поиска 99, 134 и д.
 Многомерность 93
 Мульти-modalность (многоэкстремальность) 22

 Неевклидов парадокс 162 и д.
 Несмещенные наблюдения 227

 Область неопределенности 34, 95
 — эксперимента 92
 Операции эволюционные 123
 Отклик 88
 Ошибка среднеквадратическая (СКО) 253
 — эксперимента 15, 45, 220 и д.

 Парадокс неевклидов 162 и д.
 Плоскость, касательная к поверхности отклика 104
 Поверхность отклика 88
 Поиск 17 (см. также *Метод...*)
 — золотым сечением 60
 — корня 225

 Поиск методом сечений 175
 — — Фибоначчи 47, 60
 — многомерный 98, 249
 — одномерный 28 и д.
 — однородными парами 43
 — оптимальный 33
 — пассивный 21, 39, 65
 — по дискретным точкам 64
 — последовательный 21, 45, 65
 — с осторожной тактикой 215
 — случайный 96
 — — ползущий 98
 Помеха случайная 220, 227
 — —, подавление 233
 Последовательность гармоническая 223, 224
 — Фибоначчи 56
 Представление кривой параметрическое 124
 — критерия 24
 Принцип минимакса 35
 Проекция изометрическая 86
 — ортогональная 91
 «Проклятие размерности» 93, 95
 Пространство евклидово 166

 Разрешаемый гребень 179
 Разрешающая способность 179
 Рандомизация 69 и д.
 Регулярная составляющая 236

 Свойство глобальное 124
 — локальное 124
 Седло 169
 Сигнатура функции 121
 Скорость сходимости 20
 Случайная составляющая 232
 Способ оптимизации 17
 Среднее арифметическое 223
 Среднеквадратическая ошибка (СКО) 253
 Средняя точка области 142, 143
 Степени свободы 89
 Стратегия поиска 17
 — — доминирующая 78
 — — минимаксная 36
 — — оптимальная 33
 — — пассивная 21, 39
 — — по многим переменным 98

- Стратегия поиска последовательная 21, 45
— — смешанная 74
— — ϵ -минимаксная 41
Сходимость 20, 230
- Теорема Вейерштрасса 150
— Дворецкого 240
Точка минимаксная 145
— средняя 142, 143
Траектория в области эксперимента 124
- Унимодальность 22, 28, 30, 127
— линейная 130
— строгая 130, 137
Управление адаптивное 23
Уравнение Люкаса 61
Условие параллелизма 196
Условия Дворецкого 240
- Форма квадратичная гомогенная 117
— —, приведение к каноническому виду 118
Формфактор гребня 177
Функция бимодальная 129
— вогнутая 131, 244
- Функция квадратичная 118
— линейно унимодальная 130
— отрицательно определенная 117
— регрессии 227
— строго унимодальная 128, 137
— унимодальная 29, 30, 128
— — выпуклая 30
— — непрерывная 29, 30
- Центр объема 147
Центроид 148
- «Черный ящик» 15
Числа Фибоначчи 57, 61
Число степеней свободы 89
- Шум 20
- Эволюционные операции 123
Эксперимент, ошибки 15
Экстремум 19
Эндшпиль в стратегии многомерного поиска 111
Эффективность поиска, критерий 33, 94

Д. Дж. Уайлд

Методы поиска экстремума

М., 1967 г., 268 стр. с илл.

(Серия «Теоретические основы технической кибернетики»)

Редактор *В. Н. Новосельцев*

Техн. редактор *А. А. Благовещенская*

Корректор *А. С. Бакулова*

Сдано в набор 20/X 1966 г. Подписано к печати 11/II 1967 г. Бумага $84 \times 108^{1/8}$. Физ. печ. л. 8,38. Условн. печ. л. 14,07. Уч.-изд. л. 12,97.
Тираж 11 000 экз. Цена книги 1 р. 13 к.
Заказ № 654.

Издательство «Наука»

Главная редакция

физико-математической литературы.
Москва, В-71, Ленинский проспект, 15.

Ордена Трудового Красного Знамени
Ленинградская типография № 1 «Печатный Двор»
имени А. М. Горького
Главполиграфпрома Комитета по печати при
Совете Министров СССР, г. Ленинград,
Гатчинская ул., 26.

