

УДК 519.6

КВАЗИНЬЮТОНОВСКИЙ ДВУХШАГОВЫЙ МЕТОД МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИИ НЕВЯЗКИ

П. А. Мазуров¹, А. В. Елесин¹, А. Ш. Кадырова¹

Предлагается квазиньютоновский двухшаговый метод минимизации функции невязки, учитывающий овражность минимизируемой функции. На каждой итерации двухшагового метода смещение параметров проводится в два этапа, что позволяет обходить изгибы дна оврага и тем самым ускорить процесс минимизации. На примере численного решения модельной задачи идентификации коэффициента фильтрации трехмерного напорного пласта и минимизации тестовых функций показана эффективность двухшагового метода в сравнении с одним из вариантов метода Левенберга–Марквардта.

Ключевые слова: минимизация функции невязки, обратная задача.

Введение. Будем рассматривать нелинейную задачу наименьших квадратов $\min_x J(x)$. Здесь $J(x) = \frac{1}{2} R^T R$ — функция невязки, $x = (x_1, \dots, x_N)$ — вектор переменных минимизации, $R^T = (r_1, \dots, r_M)$ — вектор невязки и $r_j = r_j(x)$ — нелинейные функции. Наиболее эффективными методами безусловной минимизации функции невязки являются методы второго порядка, требующие построения матрицы вторых производных (матрицы Гессе). Однако построение матрицы вторых производных приводит к большим вычислительным затратам. Поэтому на практике обычно используются квазиньютоновские методы (см. [1–5]). В этих методах матрица Гессе (или ее обратная) аппроксимируется с помощью первых производных. В квазиньютоновских методах, как и в других стандартных методах минимизации, последовательность переменных минимизации x строится таким образом, чтобы целевая функция монотонно убывала.

В настоящей статье предлагается двухшаговый метод минимизации квазиньютоновского типа, учитывающий овражность целевой функции. Двухшаговый метод основывается на следующей идее. На каждой итерации вдали от точки минимума первый шаг делается достаточно большим вдоль дна оврага и при изменении направления дна оврага проводится подъем на его склон. На втором шаге осуществляется спуск. Это позволяет обходить изгибы дна оврага и тем самым ускорять процесс минимизации. Значение целевой функции после первого шага может увеличиться, но по итерациям целевая функция монотонно убывает.

Построен алгоритм двухшагового метода минимизации функции невязки. Алгоритм протестирован на модельной задаче идентификации коэффициента фильтрации трехмерного неоднородного напорного пласта и при минимизации тестовых функций. Результаты тестирования показали высокую скорость сходимости предложенного алгоритма. Для построения алгоритма использовались запасы чувствительности в направлениях главных осей пространства минимизируемых параметров [6,7]. В окрестности точки минимума $J(x) = 0$ запас чувствительности в i -м направлении характеризует приращение функции невязки по этому направлению до точки минимума.

Запас чувствительности функции невязки. В окрестности точки x приближенные приращения функции невязки и градиента можно записать в виде [1–4]

$$J(x) - J(x - s) \approx g^T(x)s - \frac{1}{2} s^T G(x)s, \quad (1)$$

$$g(x) - g(x - s) \approx G(x)s, \quad (2)$$

$g(x) = (g_1, \dots, g_N)$ — градиент функции невязки с компонентами $g_i = g_i(x) = \frac{\partial J}{\partial x_i}$, $G(x) = \left\{ \frac{\partial^2 J}{\partial x_i \partial x_j} \right\}$ — матрица Гессе и $s = (s_1, \dots, s_N)$ — вектор отклонений. Предполагая, что точка $x - s$ является точкой

¹ Институт механики и машиностроения КазНЦ РАН, ул. Лобачевского, 2/31, 420111, Казань; П. А. Мазуров, вед. научн. сотр., e-mail: mazurov@mail.knc.ru; А. В. Елесин, старш. научн. сотр., e-mail: elesin@mail.knc.ru; А. Ш. Кадырова, научн. сотр., e-mail: kadyrova@mail.knc.ru

минимума функции невязки и в точке минимума выполняются равенства $J(x - s) = 0$ и $g(x - s) = 0$, из уравнений (1) и (2) получим

$$J(x) \approx \frac{1}{2} g^T s^N = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N g_i s_i^N, \quad (3)$$

где s_i^N — компоненты вектора отклонений Ньютона $s^N = G^{-1}(x)g$, $g = g(x)$. Каждое слагаемое $g_i s_i^N$ в (3) характеризует приращение функции невязки за счет i -й переменной. При приближении точки x к точке минимума $x - s$ в случае ограниченных вторых производных $\frac{\partial^2 r_k}{\partial x_i \partial x_j}$ и при $r_k = r_k(x) \rightarrow 0$ матрицу Гессе

трицу Гессе $\left\{ \frac{\partial^2 J}{\partial x_i \partial x_j} \right\} = \left\{ \sum_{k=1}^M \frac{\partial r_k}{\partial x_i} \frac{\partial r_k}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^M \frac{\partial^2 r_k}{\partial x_i \partial x_j} r_k \right\}$ можно аппроксимировать с помощью матрицы

чувствительности $A = \left\{ \frac{\partial r_k}{\partial x_i} \right\}$ следующим образом: $G \approx H = A^T A = \left\{ \sum_{k=1}^M \frac{\partial r_k}{\partial x_i} \frac{\partial r_k}{\partial x_j} \right\}$. Градиент функции невязки выражается через матрицу чувствительности в виде $g = A^T R$. Для вектора отклонений Гаусса–Ньютона $s^{GN} = H^{-1}g$ при невырожденной квадратной матрице A ($N = M$) получим выражение

$\sum_{i=1}^N s_i^{GN} g_i = g^T s^{GN} = (A^{-1}R)^T (A^T R) = R^T R$, где $P_i = s_i^{GN} g_i$ — запас чувствительности i -й переменной

и $P = \sum_{i=1}^N P_i$ — запас чувствительности функции невязки [6, 7]. В окрестности точки минимума запас чувствительности P_i характеризует приращение функции невязки за счет i -й переменной.

Введем главную систему координат в пространстве переменных минимизации, получаемую с использованием SVD-разложения матрицы $H = V \Sigma V^T$, где V — ортогональная матрица, $\Sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ — диагональная матрица, σ_i — сингулярные числа, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_N > 0$ [3]. В этой системе координат компоненты $s_{V_i}^{GN}$ вектора отклонений Гаусса–Ньютона $s^{GN} = V^T s^{GN}$ определяются из уравнений $\sigma_i s_{V_i}^{GN} = g_{V_i}$ ($i = 1, \dots, N$), где g_{V_i} — компоненты градиента $g_V = V^T g$.

Запас чувствительности в направлении i -й оси главной системы координат является неотрицательной величиной $P_{V_i} = s_{V_i}^{GN} g_{V_i} = \frac{g_{V_i}^2}{\sigma_i} = (s_{V_i}^{GN})^2 \sigma_i \geq 0$ и в окрестности точки минимума характеризует приращение функции невязки в i -ом направлении.

Запас чувствительности функции невязки является инвариантной величиной относительно указанного преобразования системы координат: $P_V = \sum_{i=1}^N P_{V_i} = g_V^T s_{V_i}^{GN} = (V^T g)^T (V^T s^{GN}) = g^T s^{GN} = P$.

Таким образом, в случае $N = M$ функцию невязки можно представить в виде $2J(x) = P = P_V$. В случае $N < M$ для функции невязки выполняется неравенство $2J(x) \geq P = P_V$ (см. [6, 7]).

Модельная задача идентификации коэффициента фильтрации по замерам напора в наблюдательных точках. Однофазная стационарная фильтрация жидкости в трехмерном неоднородном напорном пласте Ω подчиняется закону Дарси и описывается уравнением [8]

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xy} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{xy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = 0, \quad (4)$$

где K_{xy} , K_z — коэффициенты фильтрации и $h = h(x, y, z)$ — напор.

Пласт Ω пятислойный (≈ 40 км \times 30 км \times 200 м), слои зонально-неоднородные. Первый слой пласта состоит из одиннадцати, а слои со второго по пятый — из пятнадцати зон однородности, т.е. $\Omega = \bigcup_{k=1}^{71} \Omega_k$.

Каждая зона однородности Ω_k характеризуется двумя значениями коэффициента фильтрации K_{xyk}^{tr} , K_{zk}^{tr} . Значения коэффициента фильтрации K_{xyk}^{tr} , $k = 1, \dots, 71$, брались в пределах от 0.1 м/сут до 100 м/сут, а значения K_{zk}^{tr} , $k = 1, \dots, 71$, — в пределах от 0.0001 м/сут до 0.02 м/сут. В каждой зоне расположены по две наблюдательные точки. На кровле пласта заданы граничные условия второго рода (от -9.2×10^{-3} м/сут до 2×10^{-3} м/сут). Подошва и боковая поверхность непроницаемы, за исключением участка боковой поверхности пятого слоя, на котором заданы граничные условия первого рода $h = 80$ м. Для дискретизации уравнения (4) использовался метод конечных элементов. Полученная в результате

дискретизации система линейных алгебраических уравнений решалась методом сопряженных градиентов с предобуславливающей матрицей в виде неполного разложения Холесского [9].

Из решения уравнения (4) при заданных значениях коэффициента фильтрации K_{xyk}^{tr} , K_{zk}^{tr} определялись значения напора в наблюдательных точках h_j^{tr} , $j = 1, \dots, 142$. Затем по значениям напора $h_j^* = h_j^{tr} + \delta_j$ (δ_j — задаваемая погрешность) восстанавливались логарифмы значений коэффициента фильтрации $K = \{K_i\}_{i=1}^{142} = \{\ln K_{xyk}, \ln K_{zk}\}_{k=1}^{71}$ из минимума функции невязки $J(K) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{142} (h_i - h_i^*)^2$, где $h_i = h_i(K)$ — вычисленные значения напора в наблюдательных точках. В процессе идентификации параметры K_{xyk}^{tr} , K_{zk}^{tr} и значения погрешностей δ_j считались неизвестными.

Построение двухшагового алгоритма минимизации функции невязки. В большинстве алгоритмов минимизации квазиьютоновского типа новые значения параметров на каждой итерации определяются по формуле $K^{n+1} = K^n - s_\mu$, где $s_\mu = (s_{\mu 1}, \dots, s_{\mu N}) = (H + \mu^n E)^{-1} g$, E — единичная матрица и n — номер итерации. Модификации метода Левенберга–Марквардта отличаются различной стратегией изменения параметра μ^n в процессе минимизации [3, 4, 10, 11]. При больших значениях μ^n направление минимизации близко к направлению минимизации метода наискорейшего спуска, при малых значениях μ^n направление минимизации близко к направлению минимизации метода Гаусса–Ньютона.

Рассмотрим алгоритм минимизации функции невязки, в котором параметр $\mu^n \geq 0$ ищется методом золотого сечения из условия минимума функции невязки $\min_{\mu^n} J(K^n - s_\mu)$. Значения по итерациям функции невязки и среднеквадратического отклонения коэффициента фильтрации

$$\Delta \ln K_{xyz}^n = \left[\sum_{k=1}^{71} \frac{(\ln K_{xyk}^{tr} - \ln K_{xyk}^n)^2 + (\ln K_{zk}^{tr} - \ln K_{zk}^n)^2}{142} \right]^{1/2},$$

полученные при решении задачи без погрешности в замерах напора, приведены на рис. 1.

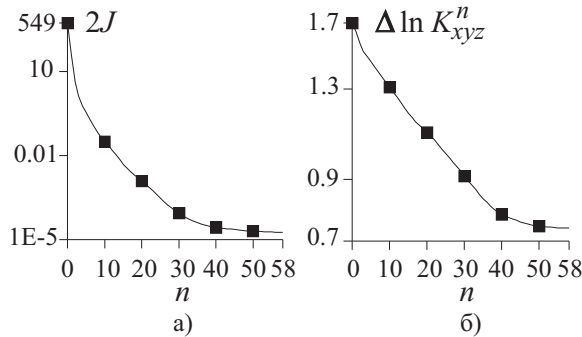


Рис. 1. Удвоенная функция невязки $2J$ (а), среднеквадратическое отклонение $\Delta \ln K_{xyz}^n$ (б)

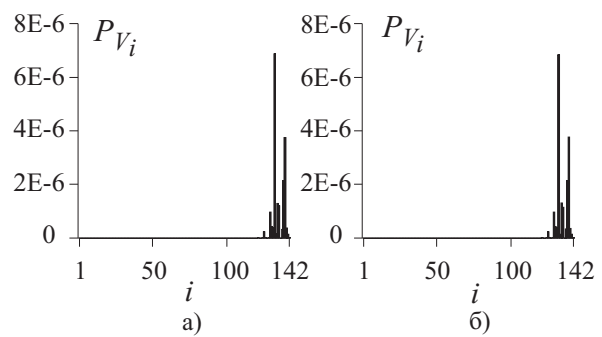


Рис. 2. Запасы чувствительности P_{V_i} после 58-й (а) и 59-й (б) итераций

Процесс минимизации остановлен по критерию медленной сходимости, в течение трех итераций:

$$J(K^n) - J(K^{n+1}) < 0.01J(K^n), \tag{5}$$

при этом не была достигнута заданная точность по напору в наблюдательных точках:

$$\Delta h_{\max} = \max_j |h_j(K^n) - h_j^*| \leq 10^{-6} \text{ м.} \tag{6}$$

Число обусловленности $\eta = \frac{\sigma_1}{\sigma_N}$ матрицы H , характеризующее степень овражности, в процессе минимизации было не менее 2.42×10^{10} .

Выполним еще одну дополнительную итерацию. Удвоенное значение функции невязки уменьшилось незначительно (с 1.84×10^{-5} до 1.83×10^{-5}), параметр μ^n определился равным 2.38×10^{-4} . Рассмотрим распределение запасов чувствительности по осям в главной системе координат на последних итерациях процесса минимизации (рис. 2).

Из графиков, приведенных на рис. 2, видно, что распределение запасов чувствительности после 58-й и 59-й итераций практически совпадает, при этом весь запас чувствительности в основном сосредоточен на последних осях, соответствующих малым сингулярным числам. Для овражной функции большие сингулярные числа соответствуют склону, а малые — дну оврага [5].

Проведем смещение переменных минимизации, полученных после 58-й итерации, при различных значениях параметра μ^n в два шага как две отдельные итерации. На первом шаге переменные минимизации смещаются на величину $s_\mu = (s_{\mu 1}, \dots, s_{\mu N})$ и принимают значения $K^n - s_\mu$. Распределение запасов чувствительности в полученной точке показано на рис. 3, значения функции невязки, максимального отклонения параметров $s_{\max} = \max_i |s_{\mu i}|$, суммы запасов чувствительностей на первых и последних осях приведены в табл. 1.

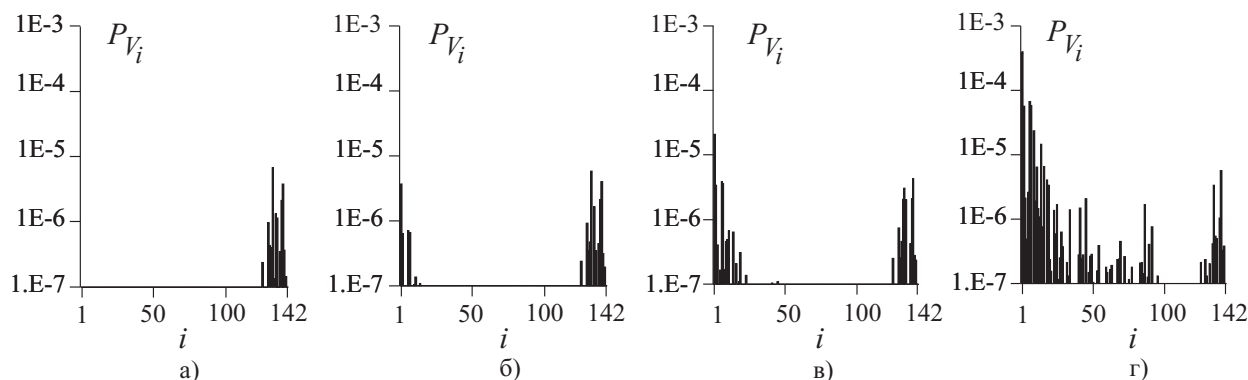


Рис. 3. Распределение запасов чувствительности при различных значениях μ^n после первого шага: а) $\mu^n = 2.38 \times 10^{-4}$, б) $\mu^n = 10^{-5}$, в) $\mu^n = 0.5 \times 10^{-5}$, г) $\mu^n = 10^{-6}$

Таблица 1

μ^n	$2J$	s_{\max}	$\sum_{i=1}^{125} P_{V_i}$	$\sum_{i=126}^{142} P_{V_i}$
2.38×10^{-4}	1.83×10^{-5}	6.16×10^{-3}	2.56×10^{-7}	1.80×10^{-5}
1.00×10^{-5}	2.38×10^{-5}	0.14	6.95×10^{-6}	1.69×10^{-5}
0.50×10^{-5}	5.31×10^{-5}	0.28	3.70×10^{-5}	1.60×10^{-5}
1.00×10^{-6}	6.85×10^{-4}	1.12	6.72×10^{-4}	1.29×10^{-5}

Из рис. 3 и табл. 1 видно, что при уменьшении параметра μ^n запас чувствительности растет на осях, соответствующих большим сингулярным числам (склон оврага), при этом функция невязки и максимальное отклонение параметров растут. Запас чувствительности на осях, соответствующих малым сингулярным числам, уменьшается. На втором шаге смещение переменных минимизации проведем в направлениях, соответствующих большим сингулярным числам, на величину $\tilde{s}_V = (\tilde{s}_{V_1}, \dots, \tilde{s}_{V_N})$, $\tilde{s}_{V_i} = \frac{g_{V_i}}{\sigma_i}$, $i = 1, \dots, q$, $\tilde{s}_{V_i} = 0$, $i = q + 1, \dots, 142$. Номер оси q брался в зависимости от величин μ^n и σ_i :

при $\mu^n = 2.38 \times 10^{-4}$ номер оси брался равным 110 ($\sigma_{110} = 2.78 \times 10^{-4}$, $\sigma_{111} = 2.32 \times 10^{-4}$),
 при $\mu^n = 10^{-5}$ — равным 123 ($\sigma_{123} = 1.01 \times 10^{-5}$, $\sigma_{124} = 8.51 \times 10^{-6}$),
 при $\mu^n = 0.5 \times 10^{-5}$ — равным 126 ($\sigma_{126} = 0.52 \times 10^{-5}$, $\sigma_{127} = 0.38 \times 10^{-5}$),
 при $\mu^n = 10^{-6}$ — равным 129 ($\sigma_{129} = 1.71 \times 10^{-6}$, $\sigma_{130} = 7.45 \times 10^{-7}$).

Полученные распределения запасов чувствительности приведены на рис. 4.

Удвоенное значение функции невязки после второго шага:

при $\mu^n = 2.38 \times 10^{-4}$ стало равным 1.83×10^{-5} ,
 при $\mu^n = 10^{-5}$ — равным 1.71×10^{-5} ,
 при $\mu^n = 0.5 \times 10^{-5}$ — равным 2.14×10^{-5} ,
 при $\mu^n = 10^{-6}$ — равным 1.65×10^{-4} .

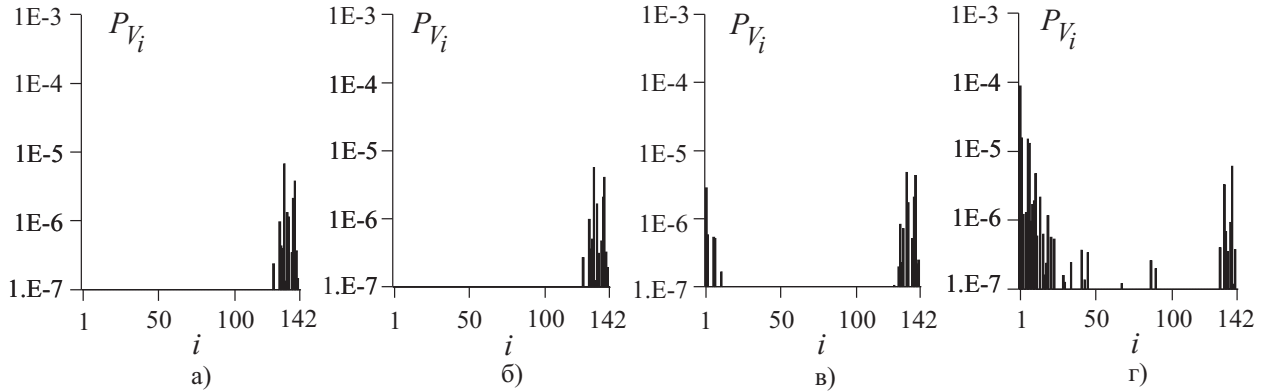


Рис. 4. Распределение запасов чувствительности при различных значениях μ^n после второго шага: а) $\mu^n = 2.38 \times 10^{-4}$, б) $\mu^n = 10^{-5}$, в) $\mu^n = 0.5 \times 10^{-5}$, г) $\mu^n = 10^{-6}$

Удвоенное значение функции невязки при $\mu^n = 10^{-5}$ уменьшилось с 1.84×10^{-5} до 1.71×10^{-5} .

Рассмотрим двухшаговый алгоритм ДА минимизации функции невязки, в котором оба этапа выполняются в течение одной итерации. На каждой итерации определяется минимум функции невязки по параметру μ^n при смещении параметров в два шага. На первом шаге параметры смещаются по формуле $K^{n+1/2} = K^n - s^1$, где $s^1 = s_\mu$. На втором шаге проводится дополнительное смещение параметров по направлениям, соответствующим большему сингулярным числам. Параметры смещаются по формуле $K^{n+1} = K^{n+1/2} - s^2$, где $s^2 = V\tilde{s}_V$, $\tilde{s}_V = \frac{\tilde{g}_V}{\sigma_i}$, $i = 1, \dots, q$, $\tilde{s}_V = 0, i = q + 1, \dots, 142$, \tilde{g}_V — компоненты вектора $\tilde{g}_V = V^T \tilde{g}$, $\tilde{g} = A^T \tilde{R}$ и \tilde{R} — вектор невязок в точке $K^{n+1/2}$. Номер оси q выбирается из условия $\sigma_q > \mu^n \geq \sigma_{q+1}$. Параметр $\mu^n \geq 0$ ищется методом золотого сечения из условия минимума функции невязки $\min_{\mu^n} J(K^n - s^1 - s^2)$.

Для определения вектора s^1 используются значения невязок в точке K^n , а для определения вектора s^2 — значения невязок в точке $K^{n+1/2}$. В обоих случаях матрица чувствительности A вычисляется в точке K^n . Можно отметить, что основные вычислительные затраты в процессе минимизации приходятся на формирование матрицы чувствительности A . Необходимые производные берутся из решения уравнений, полученных дифференцированием по переменным минимизации уравнения (4) и соответствующих ему граничных условий.

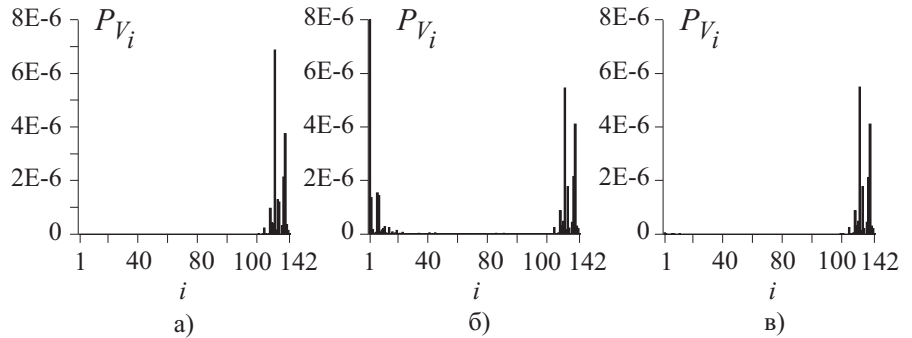


Рис. 5. Распределение запасов чувствительности до итерации (а), после первого шага алгоритма ДА (б), после второго шага алгоритма ДА (в)

Вернемся к переменным минимизации, полученным после 58-й итерации, и рассмотрим одну итерацию по предложенному алгоритму ДА. Минимальное значение функции невязки было получено при $\mu^n = 7.43 \times 10^{-6}$, удвоенное значение функции невязки уменьшилось с 1.84×10^{-5} до 1.69×10^{-5} . Распределение запасов чувствительности по шагам в процессе одной итерации алгоритма ДА показано на рис. 5.

Численные результаты. Используем предложенный двухшаговый алгоритм ДА для решения модельной задачи идентификации коэффициента фильтрации без погрешности в замерах напора. Приведем результаты сравнения алгоритма ДА с одним из вариантов метода Левенберга–Марквардта [10]. Значения параметров на каждой итерации в методе Левенберга–Марквардта определялись по формулам $K^{n+1} = K^n - s_\mu$, $\mu^{n+1} = \frac{1}{2} \mu^n$, где μ^n — параметр Марквардта и E — единичная матрица. При нарушении условия $J(k^{n+1}) < J(K^n)$ коэффициент μ^n увеличивался в два раза до тех пор, пока данное условие не выполнится. Начальное значение параметра μ^0 бралось на порядок больше максимального сингулярного

числа матрицы H .

Результаты, полученные двухшаговым алгоритмом ДА и методом Левенберга–Марквардта без погрешностей в замерах напора, приведены на рис. 6 (■ — метод Левенберга–Марквардта, ▲ — алгоритм ДА). Процесс минимизации останавливался при достижении заданной точности по напору (6) в наблюдательных точках.

Задача идентификации коэффициента фильтрации является обратной задачей и относится к классу некорректно поставленных задач [4, 12–15]. При наличии погрешностей в замерах напора значения идентифицируемых параметров, начиная с некоторой итерации, удаляются от своих истинных значений, при этом функция невязки продолжает уменьшаться. Для выбора номера итерации с итоговыми значениями коэффициента фильтрации применяются специальные правила останова процесса минимизации или прерывания полученной последовательности значений минимизируемой функции. Эти правила являются одним из регуляризирующих элементов решения обратных задач.

В данной работе номер итерации с итоговыми значениями коэффициента фильтрации выбирался в случае остановки процесса минимизации по критерию медленной сходимости (5) следующим образом:

- 1) определялся номер итерации k , с которого начинается медленная сходимость процесса минимизации;
- 2) определялся максимальный номер $i = 1, 2, \dots$, при котором выполняется условие $J^{k-i} < 1.5 J^k$;
- 3) итоговые значения коэффициента фильтрации брались с итерации с номером $k - i$.

Результаты, полученные предложенным алгоритмом и методом Левенберга–Марквардта при различных значениях погрешностей в замерах напора, приведены на рис. 7–10 (■ — метод Левенберга–Марквардта, ▲ — алгоритм ДА).

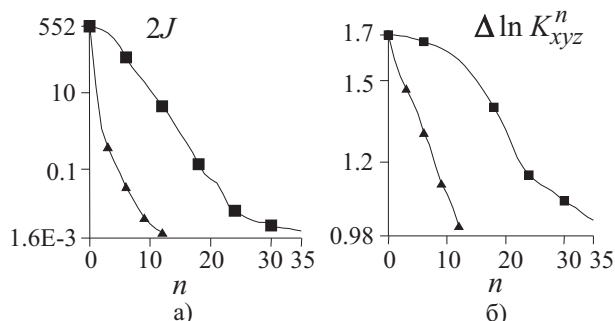


Рис. 7. Удвоенная функция невязки J (а), средноквадратическое отклонение $\Delta \ln K_{xyz}^n$ (б), полученные при погрешности $\delta_j = 0.1$

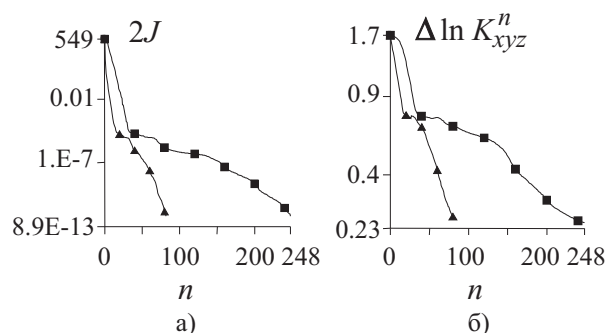


Рис. 6. Удвоенная функция невязки $2J$ (а), средноквадратическое отклонение $\Delta \ln K_{xyz}^n$ (б), полученные без погрешности в замерах напора ($\delta_j = 0$)

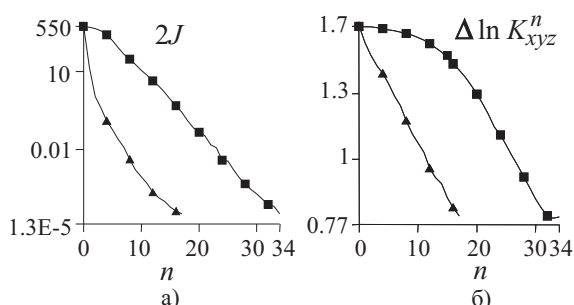


Рис. 8. Удвоенная функция невязки J (а), средноквадратическое отклонение $\Delta \ln K_{xyz}^n$ (б), полученные при погрешности $\delta_j = 0.01$

Из приведенных на рис. 6–10 результатов следует, что алгоритм ДА имеет более высокую скорость сходимости по сравнению с методом Левенберга–Марквардта при решении модельной задачи идентификации коэффициента фильтрации.

Используем предложенный двухшаговый алгоритм ДА для минимизации тестовых функций [5, 16]:

- 1) функция Розенброка $J(x) = 100(x_1^2 - x_2)^2 + (1 - x_1)^2$, начальное приближение $x^0 = (-1.2; 1)$;
- 2) функция Пауэлла $J(x) = (x_1 + 10x_2^2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4$, начальное приближение $x^0 = (3; -1; 0; 1)$;

- 3) двумерная экспоненциальная функция $J(x) = \sum_{a=0.1, 0.1}^1 \left((e^{-ax_1} - e^{-ax_2}) - (e^{-a} - e^{-10a}) \right)^2$, начальное приближение $x^0 = (1; 1)$.

В [16] приведены результаты минимизации функции Пауэлла методом Давидона–Флетчера–Пауэлла (значение функции 7.52×10^{-12} достигается за 25 итераций) и функции Розенброка методом Флетчера–

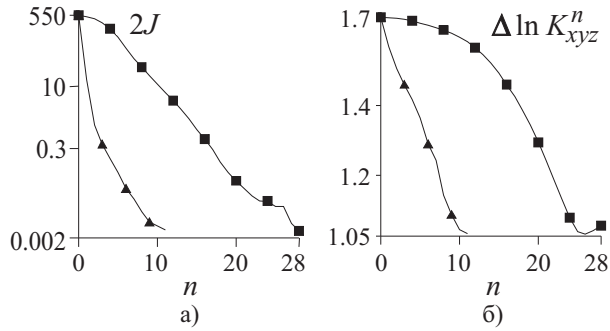


Рис. 9. Удвоенная функция невязки J (а), среднеквадратическое отклонение $\Delta \ln K_{xyz}^n$ (б), полученные при погрешности $\delta_j = -0.1$

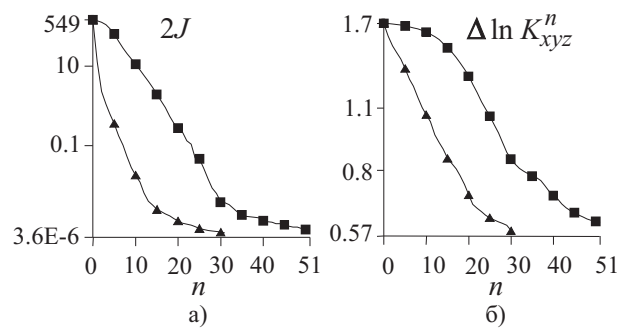


Рис. 10. Удвоенная функция невязки J (а), среднеквадратическое отклонение $\Delta \ln K_{xyz}^n$ (б), полученные при погрешности $\delta_j = -0.01$

Таблица 2

Число итераций n , полученное при минимизации тестовых функций

Функция	Алгоритм ДА	Метод Левенберга–Марквардта
Розенброка	1	26
Пауэлла	6	30
Двумерная экспоненциальная	4	18

Ривса (точка минимума (1; 1) достигается за 47 итераций). При минимизации функции Пауэлла алгоритмом ДА значение функции 5.72×10^{-13} достигается за 6 итераций, а точка минимума функции Розенброка достигается за одну итерацию. Число итераций, необходимое для достижения точности по невязке $r_{\max} = \max_j |r_j(x)| < 10^{-6}$, полученное при минимизации тестовых функций двухшаговым алгоритмом ДА и методом Левенберга–Марквардта, приведено в табл. 2.

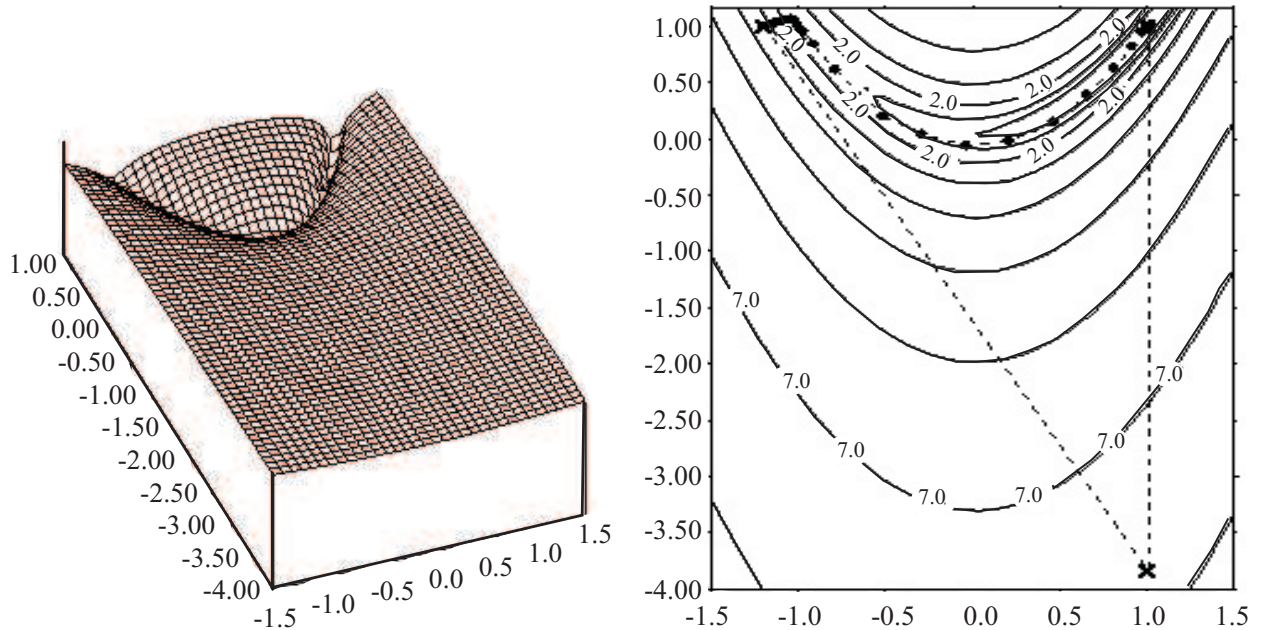


Рис. 11. Поверхность логарифма функции Розенброка (а), последовательные приближения переменных минимизации (б), полученные методом Левенберга–Марквардта (●) и алгоритмом ДА (×)

Из результатов, приведенных в табл. 2, следует, что двухшаговый алгоритм ДА, как и в случае модельной задачи идентификации коэффициента фильтрации, имеет более высокую скорость сходимости по сравнению с методом Левенберга–Марквардта. Далее рассмотрим более подробно процесс минимизации

функции Розенброка. На рис. 11 показан общий вид поверхности логарифма функции Розенброка и последовательные приближения переменных минимизации, полученные методом Левенберга–Марквардта и алгоритмом ДА.

Видно, что в методе Левенберга–Марквардта на первых итерациях осуществляется спуск на дно оврага, затем происходит движение вдоль дна оврага. В алгоритме ДА минимум достигается за одну итерацию при $\mu = 0$. Первый шаг делается достаточно большим от точки $(-1.2; 1)$ до точки $(1; -3.84)$, вследствие чего происходит подъем на склон оврага. Значение функции Розенброка увеличивается с 24.2 до 2342.6. На втором шаге осуществляется спуск в точку минимума. Значение функции Розенброка уменьшается с 2342.6 до 5.8×10^{-26} . Таким образом обходится изгиб дна оврага, что позволяет достигнуть точки минимума за одну итерацию.

Заключение. Построен квазиньютоновский двухшаговый алгоритм минимизации функции невязки. В алгоритме на каждой итерации вдали от точки минимума первый шаг делается достаточно большим вдоль дна оврага и при изменении направления дна оврага проводится подъем на его склон. На втором шаге осуществляется спуск. Это позволяет обходить изгибы дна оврага и тем самым ускорить процесс минимизации. Проведено сравнение предложенного двухшагового алгоритма с одним из вариантов метода Левенберга–Марквардта на примере решения модельной задачи идентификации коэффициента фильтрации трехмерного напорного анизотропного пласта и минимизации тестовых функций. Полученные результаты показывают более высокую скорость сходимости предложенного двухшагового алгоритма.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. М.: Изд-во МФТИ, 1994.
2. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1988.
3. Дэниел Дж., Шнабель Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. М.: Мир, 1988.
4. Sun N.-Z. Inverse problems in groundwater modeling. Norwell: Kluwer, 1994.
5. Черноруцкий И.Г. Методы оптимизации и принятия решений. СПб.: Изд-во Лань, 2001.
6. Мазуров П.А., Габидуллина А.Н., Елесин А.В., Кадырова А.Ш. Запасы чувствительности в задачах идентификации коэффициента фильтрации трехмерных пластов // Вычислительные методы и программирование. 2004. 5, № 1. 50–61.
7. Мазуров П.А., Габидуллина А.Н., Елесин А.В., Кадырова А.Ш. К расположению наблюдательных точек в задачах идентификации коэффициента фильтрации неоднородного пласта // Вычислительные методы и программирование. 2005. 6, № 1. 105–114.
8. Мироненко В.А. Динамика подземных вод. М.: Изд-во Московского государственного горного университета, 1996.
9. Hill M.C. Solving groundwater flow problems by conjugate-gradient methods and the strongly implicit procedure // Water Resour. Res. 1990. 26, N 9. 1961–1969.
10. Летова Т.А., Пантелеев А.В. Экстремум функций в примерах и задачах. М.: Изд-во МАИ, 1998.
11. Hill M.C. Methods and guidelines for effective model calibration. US Geological Survey Water-Resources Investigations Report 98-4005. Denver, Colorado, 1998.
12. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1986.
13. Васин В.В., Агеев А.Л. Некорректные задачи с априорной информацией. Екатеринбург: УИФ Наука, 1993.
14. Морозов В.А. Алгоритмические основы методов решения некорректно поставленных задач // Вычислительные методы и программирование. 2003. 4, № 1. 134–145.
15. Бакушинский А.Б., Кокурин М.Ю. Итерационные методы решения некорректных операторных уравнений с гладкими операторами. М.: Едиториал УРСС, 2002.
16. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс. М.: Радио и связь, 1988.

Поступила в редакцию
23.01.2009