

Р.З. Деянов, Б.М.Щедрин

## АЛГОРИТМ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО СПУСКА ПО СИСТЕМЕ ЛОКАЛЬНЫХ МИНИМУМОВ

Решение задач интерпретации данных физического эксперимента требует разработки эффективных методов глобальной оптимизации, поскольку наименьшее значение целевой функции обеспечивает наилучшее значение параметров математической модели. В работе [1] был предложен метод материальной точки, взятый из курса механики: дифференциальными уравнениями описывается движение материальной точки по поверхности, определяемой целевой функцией. Практика применения метода материальной точки привела к идее новой постановки задачи глобальной минимизации [2]: спуск в точку локального минимума и затем выход из нее с целью отыскания области, где значения функции меньше, чем в последнем локальном минимуме. В дальнейшем, данный подход был развит для функции многих переменных [3]: для нахождения области притяжения другой точки локального минимума решается нелинейное скалярное уравнение со многими неизвестными.

В этой работе рассматривается следующая постановка задачи минимизации функции нескольких переменных:

*Для непрерывной функции  $f(x)$  заданной на компактном односвязном множестве  $K \subseteq \mathbb{R}^n$  и имеющей только конечное число локальных минимумов, требуется найти хотя бы одно значение  $x^* \in K$  такое, чтобы достигался глобальный минимум*

$$\min f(x) = f(x^*), \quad x \in K. \quad (1)$$

Очевидно, в силу заданных условий, решение задачи существует (но, не единственно). Не ограничивая общности, будем считать известным значение

$$f(x^*) = f^* = 0. \quad (1^*)$$

Введем понятие области притяжения точки локального минимума (т.л.м.)  $x_0$ :

*Для некоторого фиксированного алгоритма  $A$  (алгоритма поиска т.л.м.) определяем область притяжения как множество обладающее следующим свойством: стартуя из точки множества, данный алгоритм  $A$  находит заданную т.л.м.  $x_0$ .*

Теперь приведем идею алгоритма. Стартуя из некоторой начальной точки, мы находим т.л.м.  $x_0$  со значением функции в этой точке  $f_0$ . Если

$f_0 = 0$ , то задача решена, если  $f_0 > 0$ , то по исходной функции составляется уравнение, решение которого позволяет выйти в область притяжения уже другой т.л.м. со значением функции уже меньше предыдущего:  $f_1 < f_0$ . Циклически повторяя эти шаги, в конечном итоге, в силу конечности числа т.л.м., приходим к значению  $f(x^*) = 0$ .

Рассмотрим обоснование алгоритма. Пусть посредством алгоритма А найдена т.л.м.  $x_0 \in K$ ,  $f_0 = f(x_0)$ . Без ограничения общности можно считать, что точка  $x_0$  является внутренней точкой множества  $K$ . Рассмотрим разбиение множества  $K = K^- \cup K^+$ , где  $K^- = \{x \in K, f(x) < f_0\}$ ,  $K^+ = \{x \in K, f(x) \geq f_0\}$ . Если  $K^-$  пусто, то  $x_0$  - решение задачи (1). Пусть  $K^-$  не пусто, т.е. существует хотя бы одна область притяжения т.л.м. со значением функции в ней меньшим чем  $f_0$ . Для текущей точки т.л.м.  $x_0$  введем функцию:

$$R(x, \alpha) = f_0 - \left( \frac{\|x - x_0\|}{d} \right)^{2\alpha}, \quad x \in K,$$

$\alpha > 0$ ,  $d = \max_{x, y \in K} \|x - y\|$  (под  $\|\cdot\|$  будем понимать евклидову норму).

Значение  $d > 0$  существует в силу того, что  $K$  - компактное односвязное множество. Согласно алгоритму нам необходимо из текущей области притяжения т.л.м.  $x_0$  перейти в область притяжения другой т.л.м., где значение функции будет меньше  $f_0$ . Для этого рассмотрим уравнение

$$R(x, \alpha) = f(x), \quad x \in K^-. \quad (2)$$

По предположению  $K^-$  не пусто, поэтому  $\exists \varepsilon$  ( $0 < \varepsilon < 1$ ) такое, что выполняется  $f(x_\varepsilon) = f_0 - \varepsilon$  для некоторого  $x_\varepsilon \in K^-$ ; далее пусть  $f_\varepsilon = f(x_\varepsilon)$ . Подставляя  $f_\varepsilon$  в (2), получим соответствующее значение для  $\alpha$ :

$$\alpha_\varepsilon = \frac{\ln \varepsilon}{\ln \left( \frac{\|x_0 - x_\varepsilon\|}{d} \right)^2} > 0$$

( $x_0 \neq x_\varepsilon$ ; знаменатель отличен от нуля, т.к.  $x_0$  внутренняя точка множества  $K$ ).

Таким образом, решение уравнения (2) существует. Но, само решение  $x_\varepsilon$  неизвестно. Поэтому необходимо указать значение  $\alpha$  независимое от  $x_\varepsilon$

такое, чтобы решение уравнения (2) существовало. В работе [3] доказывается, что для  $\alpha_\eta$ :

$$\alpha_\eta = \frac{\ln \varepsilon}{\ln \left(\frac{\eta}{d}\right)^2} > 0,$$

где  $\eta = \max_{x \in K} \|x_0 - x\|$  решение уравнения (2)  $x_\eta$  существует и оно принадлежит области притяжения уже другой т.л.м.  $x_1$  и будет выполняться:  $f(x_1) \leq f(x_\eta) < f_0$ . Таким образом, осуществляется переход из одной т.л.м.  $x_0$  в другую т.л.м.  $x_1$  с выполнением условия:  $f(x_1) < f_0$ . Данная процедура выполняется в цикле по мере нахождения новых значений т.л.м. и поскольку число этих точек конечно, то в результате будет найдена точка удовлетворяющая (1).

Как показала практика применения данного алгоритма, эффективность данного подхода в большей степени зависит от эффективности решения нелинейного уравнения (скалярного) со многими неизвестными (2). При этом, точность нахождения параметра  $\alpha$  не является принципиальной. Более того, практика использования алгоритма показала, что можно брать достаточно большие значения этого параметра (поскольку функция  $R(x, \alpha)$  является монотонно возрастающей по  $\alpha$ ).

Рассмотрим данный алгоритм и вычислительную схему на примере функции одной переменной. Ставим задачу

$$\min_{x \in [a, b]} f(x) = f(x^*), \quad f(x) \in C[a, b], \quad (3)$$

где функция имеет только конечное число т.л.м. (например, непрерывные

$$\text{функции типа } f = \begin{cases} 0, & \text{при } x = 0 \\ x^2 + x(\sin \frac{1}{x} + 1), & \text{при } 0 < x \leq 1 \end{cases}$$

из рассмотрения исключаем).

При этом, пусть выполняется условие (1\*):  $f(x^*) = 0$ .

Без ограничения общности, можно считать, что в окрестности т.  $a$  функция  $f(x)$  монотонно убывает.

1. Пусть посредством алгоритма А поиска локального минимума найдена ближайшая к т.  $a$  т.л.м.  $x_0$ . Если  $x_0 < b$  переходим к п.2. Если  $x_0 \geq b$ , то очевидно решением задачи (3) будет  $x^* = b$  (в силу монотонности функции); в этом случае - останов.
2. Полагаем  $c = x_0$  и рассматриваем отрезок  $[c + \delta, b]$  (где  $\delta$  - достаточно малое положительное число такое, что  $c + \delta < b$  и на отрезке

$[c, c+\delta]$  функция  $f(x)$  монотонно возрастает – это возможно, т.к. т.л.м. являются изолированными точками в силу их конечного количества).

$$\text{Полагаем } f_0 = f(x_0), \quad \alpha^* = \frac{\ln \varepsilon}{\ln \left( \frac{b-x_0}{b-a} \right)^2}.$$

3. Численно находим один из корней уравнения:

$$\frac{f-f_0}{\left( \frac{x-x_0}{b-a} \right)^{2\alpha^*}} + 1 = 0, \quad x \in [c+\delta, b]. \quad (4)$$

Если уравнение решения не имеет, то принимаем т.л.м.  $x_0$  за точку глобального минимума:  $x^* = x_0$ ; в противном случае переходим к п.2.

Если дополнительно известно, что функция является дифференцируемой, то решение (4) можно искать итерационным методом Ньютона. Для текущей т.л.м.  $x_0$  полагаем

$$\mathbb{F}(x) = \frac{f-f_0}{\left( \frac{x-x_0}{b-a} \right)^{2\alpha^*}} + 1, \quad x \in [x_0+\delta, b].$$

Тогда  $x_{n+1} = x_n - \frac{\mathbb{F}(x_n)}{\mathbb{F}'(x_n)}$ ,  $x_1 = x_0 + \delta$ ,  $n = 1, 2, \dots$ , или

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f_n - f_0 + \left( \frac{x_n - x_0}{b-a} \right)^{2\alpha^*}}{f'_n - 2\alpha^* \frac{f_n - f_0}{x_n - x_0}}.$$

Для достаточно больших  $\alpha^*$  итерационный процесс сходится [3].

Рассмотрим на графике шаги алгоритма на примере минимизации функции  $f(x) = 0.25(3x^4 - 28x^3 + 84x^2 - 96x + 64)$ ,  $x \in [0, 5]$ . Стартуя из т.  $a = 0$ , мы получим ближайшую к ней т.л.м.  $x_0 = 1$ , со значением функции в ней  $f_0 = 6.75$ . Рассмотрим графики функции  $f(x)$  и  $R(x, \alpha)$  на рис.1.

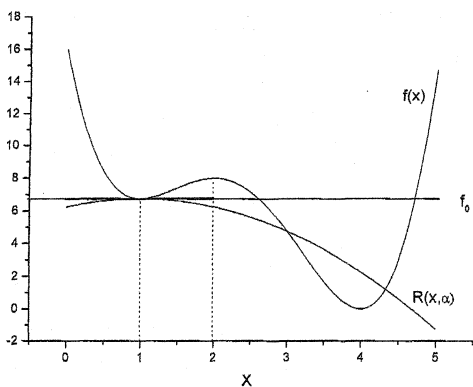


Рис.1. Графики функции  $f(x)$  и  $R(x, \alpha)$ .

Очевидно, областью притяжения т.л.м.  $x_0 = 1$ . является отрезок  $x \in [0, 2]$ . Для выхода в область притяжения другой т.л.м. решаем уравнение (4) итерационным методом Ньютона, см. график функции  $F(x)$  на рис.2.

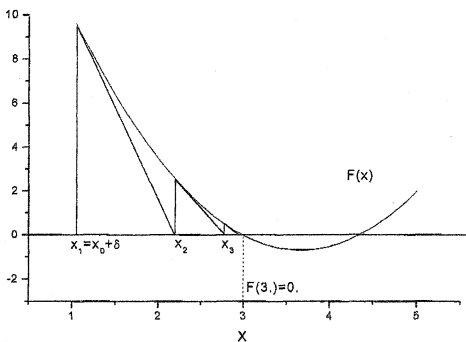


Рис.2. График функции  $F(x)$ , показаны шаги итерационного процесса Ньютона.

Итерационный процесс дает значение  $\tilde{x} = 3$ . и  $f(\tilde{x}) = 4.75 < f_0 = 6.75$ , т.е. найдена точка области притяжений т.л.м. с меньшим значением функции. Посредством алгоритма А находим т.л.м. и значение функции в ней:  $x_0 = 4$ ,  $f_0 = 0$ . Учитывая условие  $f^* = 0$ , принимаем  $x_0 = 4$ ,  $f_0 = 0$  за точку глобального минимума.

**Замечание 1.** Обратим внимание на условие (1\*) – при его выполнении мы обязательно придем к т.л.м. со значением  $f^*$ . Но, если условие (1\*) не дано, то при условии не сходимости итерационного процесса (т.е. мы не находим решение уравнения (4)) мы не можем гарантировать, что данное уравнение не имеет решения. Такие вычислительные схемы, которые диагностировали бы отсутствие решения нелинейного уравнения нам неизвестны (также и в многомерном случае). Поэтому, при решении тестовых примеров в случае, когда условие (1\*) отсутствовало, мы принимали за решение задачи последнюю найденную т.л.м. Тем не менее, как показала практика, во всех тестовых примерах были найдены глобальные минимумы.

**Замечание 2.** Практика счета показала, что вместо уравнения (2) эффективнее использовать эквивалентное уравнение

$$\frac{f(x) - f_0}{\left(\frac{\|x - x_0\|}{d}\right)^{2\alpha}} + 1 = 0 \text{ с вырезанной } \delta\text{-сферой вокруг точки } x_0.$$

### Тестовые примеры

1.  $F(x, y) = -(1 + 8x - 7x^2 + 7x^3/3 - x^4/4)y^2 \exp(-y)$ ,  $0 < x < 5$ ,  $0 < y < 5$ . [4]

Глобальный минимум достигается при  $x = 4$ ,  $y = 2$ .

Стартовая точка  $(x, y) = (0.01, 0.01)$ . Найденное значение функции и точка глобального минимума:  $(x^*, y^*) = (0.4000E+01, 0.2000E+01)$ ,

$F(x^*, y^*) = -0.3428E+01$ . Линии уровня показаны на рис.3.

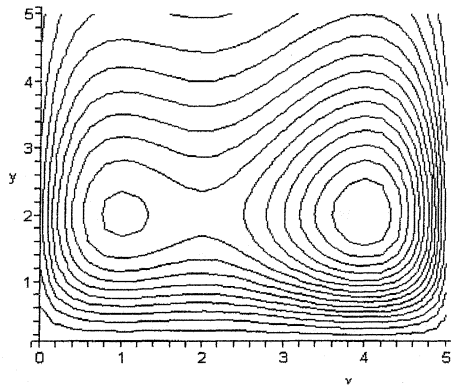


Рис.3. Линии уровня функции

$$F(x, y) = -(1 + 8x - 7x^2 + 7x^3/3 - x^4/4)y^2 \exp(-y), \quad 0 < x < 5, \quad 0 < y < 5.$$

$$2. F(x, y) = 1 - \frac{\sin x}{x} \frac{\sin y}{y}, \quad -1 \leq x, y \leq 8. \quad [3]$$

Глобальный минимум достигается при  $x = 0., y = 0., F^* = 0.$

Стартовая точка  $(x, y) = (8., 8.)$ . Найденное значение функции и точка глобального минимума:  $(x^*, y^*) = (0.3553E-07, -0.2985E-05), F(x^*, y^*) = 0.1485E-11.$  Линии уровня показаны на рис.4.

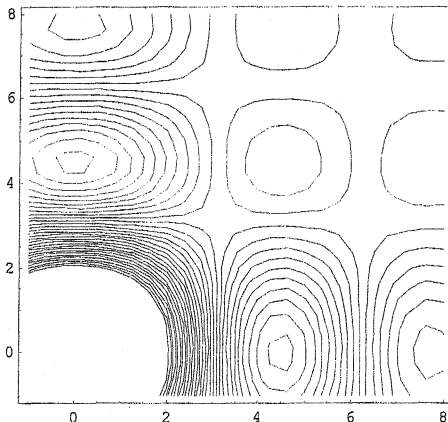


Рис.4. Линии уровня функции  $F(x, y) = 1 - \frac{\sin x}{x} \frac{\sin y}{y}, -1 \leq x, y \leq 8.$

$$3. F(x, y) = x^2 + y^2 - \cos 18x - \cos 18y, \quad -1 \leq x, y \leq 1. \quad [5]$$

Глобальный минимум достигается при  $x = 0., y = 0., F^* = -2.$

Стартовая точка  $(x, y) = (-1., -1.)$ . Найденное значение функции и точка глобального минимума:  $(x^*, y^*) = (-0.1165E-07, -0.2408E-09), F(x^*, y^*) = -0.2000E+01.$  Линии уровня показаны на рис.5. На рис.6. дан трехмерный вид функции.

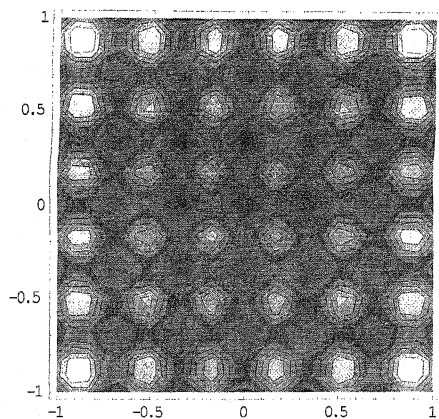


Рис.5. Линии уровня функции

$F(x, y) = x^2 + y^2 - \cos 18x - \cos 18y, -1 \leq x, y \leq 1$ . Точка глобального минимума окружена 24-мя точками локального минимума внутри области и 24-мя т.л.м. на границе области и 36-тью точками локального максимума (светлые области – точки локального максимума, темные – минимума).

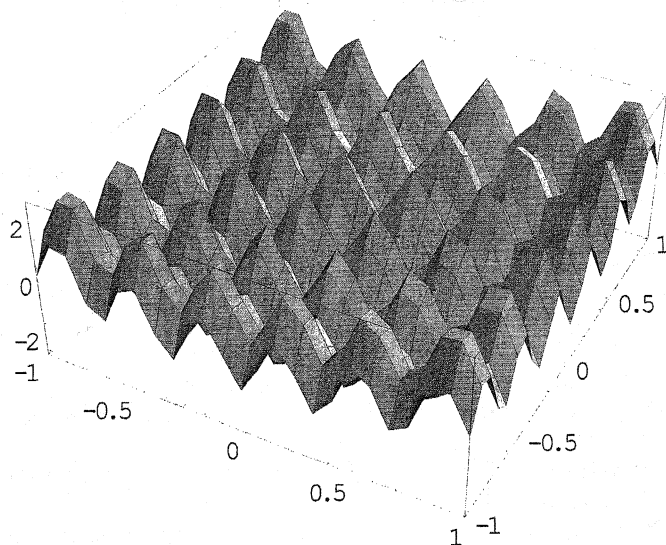


Рис.6. Трехмерный вид функции

$F(x, y) = x^2 + y^2 - \cos 18x - \cos 18y, -1 \leq x, y \leq 1$ .



$$4. F(x_1, x_2, \dots, x_{10}) = 0.1\rho + 100 \sqrt{\sum_{i=1}^{10} (x_i - R_i)^2}, \quad x_i \in [-10, 0], \quad [6]$$

где  $\rho = \sqrt{\sum_{i=1}^{10} (x_i + 5)^2}$ ,  $R_1 = -5 + \rho \cos 5\rho$ ,  $R_2 = -5 + \rho \sin 5\rho \cdot \cos 6\rho$ ,

$$R_3 = -5 + \rho \sin 5\rho \cdot \sin 6\rho \cdot \cos 7\rho,$$

$$R_{n-1} = -5 + \rho \sin 5\rho \cdot \sin 6\rho \cdot \dots \cdot \sin((n+2)\rho) \cdot \cos((n+3)\rho),$$

$$R_n = -5 + \rho \sin 5\rho \cdot \sin 6\rho \cdot \dots \cdot \sin((n+2)\rho) \cdot \sin((n+3)\rho), \quad n=10.$$

Глобальный минимум достигается при  $x_i = -5$ ,  $i=1, \dots, 10$ ;  $F^* = 0$ .

Стартовая точка:  $x_i = -10$ ,  $i=1, \dots, 10$ .

Результаты счета:  $x^* = (-0.4899E+01, -0.4949E+01, -0.4991E+01, -0.5031E+01, -0.5068E+01, -0.5096E+01, -0.5102E+01, -0.5082E+01, -0.5046E+01, -0.4985E+01)^T$ ,  $F(x^*) = 0.2273E-01$ .

**Заключение.** Для поиска глобального минимума функции многих переменных заданной на односвязном компактном множестве разработан алгоритм последовательного спуска по системе локальных минимумов. В случае конечного числа т.л.м. и знания оценки глобального минимума алгоритм за конечное число шагов находит точку глобального минимума.

## Литература

1. Щедрин Б.М., Белов Н.В., Жидков Н.П. Метод материальной точки в структурном анализе кристаллов. ДАН СССР, 1966, 170, №5, с. 1070-1072.
2. Вилков А.В., Жидков Н.П., Щедрин Б.М. Метод отыскания глобального минимума функции одного переменного. ЖВМиМФ, 1975, т.15, №4, с. 1040-1042.
3. Деянов Р.З., Щедрин Б.М. Поиск глобального минимума функции нескольких переменных, заданной на компакте. /Сб.: Библиотека программ по структурному анализу. – М.: изд-во Моск. Ун-та, 1984, с.133-140.
4. Батищев Д.И. Поисковые методы оптимального проектирования. М., "Сов.Радио", 1975.
5. Шалтянис В.Р. Об одном методе многоэкстремальной оптимизации. – Автоматика и вычисл. техн., 1971, №3, с. 33-38.
6. Букин А.Д. О кинематической реконструкции событий. Новосибирск: изд-во Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, ИЯФ 2003-27, 2003, с. 1-72.