

УДК 519.8

ОБ ОДНОМ АЛГОРИТМЕ ГЛОБАЛЬНОЙ МИНИМИЗАЦИИ

Р. Г. Стронгин

Предлагается простой алгоритм для поиска глобального минимума одномерной действительной функции, определенной на отрезке. Отмечается инвариантность поиска при умножении функции и аргумента на константу и при сложении их с константой. Исследуется динамика поиска в зависимости от значений параметра поиска, входящего в описание алгоритма. Приводятся результаты экспериментов.

Задача отыскания глобального минимума действительной функции методами поисковой оптимизации привлекает внимание многих авторов [10]. Один из таких методов для одномерной глобальной минимизации описывается в настоящей работе*.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И АЛГОРИТМ ПОИСКА

Пусть $\varphi(x)$, $x \in [a, b]$ есть неизвестная действительная функция одной переменной и ее значение в любой точке $x \in [a, b]$ может быть измерено или вычислено некоторым заданным способом (мы будем называть его испытанием). Дополнительную информацию о функции $\varphi(x)$, полученную в результате $k + 1$ испытаний, условимся записывать как множество пар

$$\omega_k = \{(x_s, z_s) : 0 \leq s \leq k\}, \quad (1)$$

где $z_s = \varphi(x_s)$ и нумерация точек x_s , в которых проводились испытания, удовлетворяет условию

$$x_0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_k. \quad (2)$$

Предлагаемый метод глобальной минимизации состоит в следующем. Первые два испытания осуществляются на концах отрезка $[a, b]$. Таким образом, как следует из (1) и (2), при любом $k > 0$ имеет место

$$x_0 = a, \quad x_k = b \quad \text{и} \quad z_0 = \varphi(a), \quad z_k = \varphi(b).$$

При выборе точки x^* , в которой будет проводиться очередное $k + 2$ -е испытание ($k > 0$), по данным ω_k для каждого интервала (x_{s-1}, x_s) ($1 \leq s \leq k$) вычисляется величина $R(s)$

$$R(s) = m(x_s - x_{s-1}) + \frac{(z_s - z_{s-1})^2}{m(x_s - x_{s-1})} - 2(z_s + z_{s-1}). \quad (3)$$

Новое испытание осуществляется в точке x^*

$$x^* = (x_{s^*} + x_{s^*-1})/2 - (z_{s^*} - z_{s^*-1})/2m, \quad (4)$$

лежащей в интервале (x_{s^*-1}, x_{s^*}) , где s^* — наименьшее целое число между 1 и k , удовлетворяющее условию

* Некоторые результаты настоящей работы докладывались на IV Всесоюзном симпозиуме по экстремальным задачам [10].

$$R(s^*) = \max_{1 \leq s \leq k} R(s). \quad (5)$$

Поиск прекращается, если после выбора интервала (x_{s^*-1}, x_{s^*}) выполняется условие

$$x_{s^*} - x_{s^*-1} \leq \varepsilon, \quad (6)$$

где ε — заданная точность поиска. При этом в качестве оценки для точки глобального минимума выбирается точка x_{s^*} , для которой $z_{s^*} \leq z_s$ ($0 \leq s \leq k$). Параметр m , входящий в (3) и (4), представляет собой верхнюю оценку на относительную первую разность минимизируемой функции $\varphi(x)$. Эта оценка подсчитывается в процессе поиска на основе ω_k по следующей формуле

$$m = \begin{cases} rM & (M > 0) \\ 1 & (M = 0) \end{cases}, \quad (7)$$

где

$$M = \max_{1 \leq s \leq k} \frac{|z_s - z_{s-1}|}{x_s - x_{s-1}}, \quad (8)$$

а величина r (предполагается, что $r > 1$) является параметром поиска.

Предложенный алгоритм минимизации связан с решением следующей задачи. По заданной точности $\varepsilon > 0$ построим множество узлов

$$x_0 = a, x_1 = a + \gamma, \dots, x_i = a + i\gamma, \dots, x_n = b,$$

где n есть наименьшее целое число, удовлетворяющее условию $\gamma \leq \varepsilon$. и рассмотрим функцию $\varphi(i) = \varphi(x_i)$ ($0 \leq i \leq n$). Предположим, что минимизируемая функция $\varphi(i)$ является неизвестной реализацией случайной функции, порождаемой разностным уравнением

$$\varphi(i) - \varphi(i-1) = \beta_i \quad (1 \leq i \leq n),$$

где β_i — независимые нормальные случайные величины со стандартами $\sigma_i = ct$ ($c > 0, t > 0$) и математическими ожиданиями

$$m_i(a) = \begin{cases} -m & (i \leq a) \\ m & (i > a) \end{cases},$$

где a ($0 \leq a \leq n$) — целочисленная случайная величина с равномерным априорным распределением вероятностей. Тогда можно показать, что при малых значениях c алгоритм поиска, согласно которому каждое испытание (кроме первых двух, проводимых при $i=0$ и $i=n$) осуществляется в наименее вероятном узле расположения глобального минимума, совпадает с предложенным выше методом с точностью до ε (при выборе точки x^*), т. е. предложенный метод близок к пошагово оптимальному, если за критерий оптимальности принять принцип максимума правдоподобия [1].

В заключение отметим сходство выбора точки $x^* \in (x_{s^*-1}, x_{s^*})$ по формуле (4) с определением точки очередного испытания в методе максимальной разности [12].

НЕКОТОРЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОИСКА

Рассмотренный алгоритм глобального поиска (АГП), как вытекает из (3) — (8), обладает инвариантностью, состоящей в том, что при минимизации функции $u_1 \varphi(x) + u_2$, где $u_1 > 0$ и u_2 — произвольные константы, для любого $k > 0$ точки x_s ($0 \leq s \leq k$) входящие в пары $(x_s, z_s) \in \omega_k$, не зависят от констант u_1, u_2 .

Поэтому для анализа динамики поиска минимума функций $\varphi(x) \equiv \text{const}$ достаточно рассмотреть случай $\varphi(x) \equiv 0$, $x \in [a, b]$. В этом случае, согласно (7), (8) и (3), (4), $R(s) = x_s - x_{s-1}$ ($1 \leq s \leq k$) и $x^* = (x_{s^*} + x_{s^*-1})/2$, т. е. каждое испытание при $k > 0$ осуществляется в центре самого большого интервала (x_{s^*-1}, x_{s^*}) , причем, если интервалов максимальной длины несколько, то очередное испытание проводится в самом левом из них. Согласно условию (6), поиск заканчивается равномерным разбиением интервала $[a, b]$ с точностью не хуже ε .

Для иллюстрации характера минимизации с использованием АГП в случае более сложных функций на рис. 1 приведена диаграмма поиска глобального минимума многоэкстремальной функции $\varphi(x)$, $x \in [0, 1]$, при $\varepsilon = 0,01$ и $r = 2$ (точки проведения испытаний обозначены штрихами, а номер испытания проставлен в кружке, связанном с соответствующим штрихом).

С целью получения средних оценок эффективности поиска АГП был применен для минимизации 20 функций, полученных случайным образом с помощью выражения

$$\varphi(x) = a_0 + \sum_{l=1}^N \left[a_l \sin\left(\frac{l\pi}{2} x\right) + b_l \cos\left(\frac{l\pi}{2} x\right) \right],$$

где

$$-1 \leq a_0, a_l, b_l \leq 1, \quad 1 \leq l \leq N, \quad 4 \leq N \leq 14,$$

причем коэффициенты и само число гармоник N — независимые равномерно распределенные случайные величины (N целочисленна).

При $\varepsilon = 0,002$ и $r = 2$ выборочное среднее число испытаний оказалось равным 29, а средний разброс — 6,3. При этом для одной из 20 функций был найден локальный минимум вместо глобального. Поиск при $r = 3$ на той же выборке потребовал в среднем 40 испытаний (разброс — 7,2), причем ошибок в обнаружении абсолютного минимума не было.

Другие эксперименты, проведенные по этой схеме при различных значениях r и ε , показали, что с ростом r повышается надежность поиска, но одновременно увеличивается и среднее число испытаний. При фиксированном r надежность возрастает с уменьшением ε (повышение точности).

Поведение АГП при оптимизации функций, имеющих несколько изолированных глобальных минимумов, иллюстрируется рис. 2, где изображены результаты поиска действительных корней уравнения $\varphi(x) = 0, 1x - \sin x = 0$, $x \in [-1,5, 10]$, при $\varepsilon = 0,023$ и $r = 2$ (эта задача сводится к отысканию глобальных минимумов функции $|\varphi(x)|$). После 39 поисковых испытаний (точки проведения испытаний отмечены штрихами на рис. 2, причем группы близких испытаний обозначены темными прямоугольниками, около которых проставлено число испытаний в группе) были получены следующие интервалы, содержащие корни уравне-

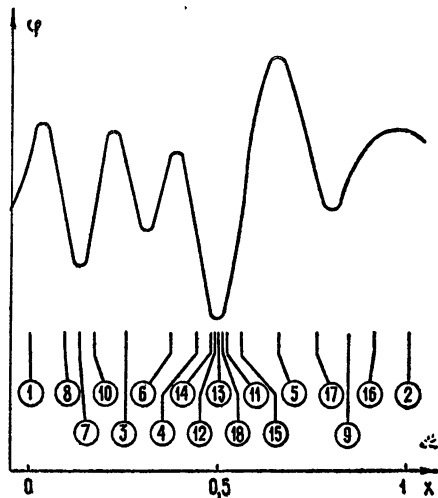


Рис. 1. Диаграмма поиска глобального минимума многоэкстремальной функции $\varphi(x)$, $x \in [0, 1]$, с помощью АГП при $\varepsilon = 0,01$ и $r = 2$.

ния $\varphi(x) = 0$: $(-0,005; 0,018)$, $(2,824; 2,939)$, $(7,056; 7,079)$, $(8,413; 8,436)$. Заметим, что при этом эксперименте испытания проводились не в самой точке x^* , а в ближайшем к ней узле ϵ -сети, в котором еще не было испытаний.

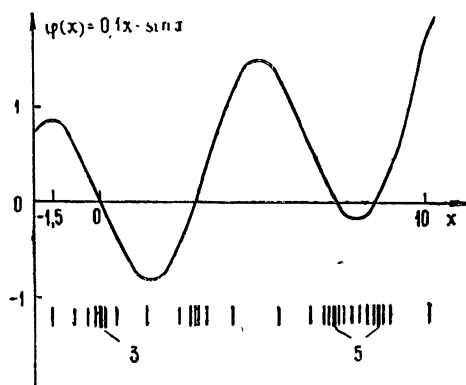


Рис. 2. Результаты поиска действительных корней уравнения $\varphi(x) = 0$ при $x \in [-1,5; 10]$, $\epsilon = 0,023$ и $r = 2$ (задача сводится к минимизации $|\varphi(x)|$ с помощью АГП).

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРА ПОИСКА

Для выяснения влияния параметра r на динамику поиска мы рассмотрим применение АГП для минимизации линейных функций при $\epsilon = 0$ (бесконечный поиск). Учитывая инвариантность АГП, достаточно рассмотреть случай $\varphi(x) = x$, $x \in [0, 1]$. Тогда из (7), (8) и (3), (4) вытекает, что при $k > 0$

$$R(s) = (x_s - x_{s-1})(r + r^{-1}) - 2(x_s + x_{s-1}), \quad (9)$$

$$x^* = 0,5[x_s^* + x_{s-1}^* - r^{-1}(x_s^* - x_{s-1}^*)]. \quad (10)$$

Интервал (x_{s-1}^*, x_s^*) , выбираемый на основе информации ω_k для проведения очередного испытания на $k + 1$ -ом шаге поиска (отсчет шагов начинается с нулевого), обозначим номером s_k^* (заметим, что в любом случае $s_1^* = 1$). Последовательность s_1^*, s_2^*, \dots интервалов, в которых осуществляются поисковые испытания, мы будем называть топологией поиска, а первые k членов этой последовательности — k -топологией.

Предположим, что при некотором значении r и $k > 1$ $k - 1$ -топология имеет вид $s_1^* = 1, s_2^* = 1, \dots, s_{k-1}^* = 1$, т. е. на каждом шаге очередное испытание осуществлялось в первом интервале. Тогда из (10) следует, что первые $k + 1$ испытаний проведены в точках

$$x_0 = 0, \quad x_1 = \lambda^{k-1}, \quad x_2 = \lambda^{k-2}, \quad \dots, \quad x_{k-1} = \lambda, \quad x_k = 1,$$

где $\lambda = 0,5(1 - r^{-1}) < 0,5$ и точки x_s ($0 \leq s \leq k$) пронумерованы в соответствии с (2), т. е.

$$\omega_k = \{(0, 0), (\lambda^{k-1}, \lambda^{k-1}), \dots, (1, 1)\}. \quad (11)$$

Для определения s_k^* необходимо найти s^* , являющееся решением (5) при ω_k из (11). Поскольку расположение точек x_s ($0 < s < k$) на интервале $[0, x_{k-1}]$ при увеличении масштаба в λ^{-1} раз совпадает с точками x_s , содержащимися в парах (x_s, x_s) , входящих в ω_{k-1} ,

$$\omega_{k-1} = \{(0, 0), (\lambda^{k-2}, \lambda^{k-2}), \dots, (1, 1)\},$$

то, как следует из инвариантности АГП и заданной $k - 1$ -топологии

$(s_{k-1}^* = 1)$, $R(1) > R(s)$, $1 < s < k$. Таким образом, $s_k^* = 1$, если $R(1) \geq R(k)$, и $s_k^* = k$, если $R(1) < R(k)$. Из (9) и (11) имеем

$$R(1) = \lambda^{k-1}(r + r^{-1} - 2), \quad (12)$$

$$R(k) = (r - 5 + 3r^{-1} + r^{-2})/2, \quad (13)$$

причем, согласно (12) и (13), $R(1) > 0$ при $r > 1$, а $R(k) < 0$ при $1 < r < r_1^{(\infty)}$, где $r_1^{(\infty)} = 2 + \sqrt{5}$ является корнем уравнения $R(k) = 0$.

Таким образом, если $r \leq r_1^{(\infty)}$, то $R(1) \geq R(k)$ при любом k , и, следовательно, топология поиска в этом случае имеет вид

$$s_1^* = 1, \quad s_2^* = 1, \dots, s_k^* = 1, \dots,$$

т. е. каждое новое испытание осуществляется в первом интервале.

Обозначим через $r_1^{(k)}$ единственный, превышающий единицу корень уравнения $R(1) = R(k)$ при заданном значении k . Поскольку $R(1) \rightarrow 0$ (монотонно) при $k \rightarrow \infty$, то $r_1^{(k)} > r_1^{(k+1)}$, причем, как показывают элементарные выкладки, $r_1^{(3)} = 3 + 2\sqrt{2}$, а корень $r_1^{(2)}$ не существует.

Предположим теперь, что при $l > 2$, $t > 0$ и некотором значении r $i + 2t$ -топология поиска имеет вид

$$s_1^* = 1, \quad s_2^* = 1, \dots, s_{l-1}^* = 1, \quad s_l^* = l, \quad s_{l+1}^* = 1,$$

$$s_{l+2}^* = l, \dots, s_{l+2t-1}^* = 1, \quad s_{l+2t}^* = l,$$

что возможно лишь в случае, когда l — наименьшее целое число, удовлетворяющее условию $r > r_1^{(l)}$. При $l + 2t$ -топологии указанного вида первые $l + 2(t + 1)$ испытаний, как следует из (10), осуществляются в точках

$$x_0 = 0, \quad x_1 = \lambda^{l+t-1}, \quad x_2 = \lambda^{l+t-2}, \dots, x_{l-1} = \lambda^{l+1},$$

$$x_l = \lambda^{l+1}(2 - \lambda), \quad x_{l+1} = \lambda^l, \dots,$$

$$x_{l+2t-2} = \lambda^2(2 - \lambda), \quad x_{l+2t-1} = \lambda, \quad x_{l+2t} = \lambda(2 - \lambda), \quad x_{l+2t+1} = 1.$$

Заметим, что расположение точек x_s ($0 \leq s < l + 2t$) на интервале $[0, x_{l+2t-1}]$ после увеличения масштаба в λ^{-1} раз совпадает с точками x_s из ω_{l+2t-1} . Вновь используя инвариантность АГП и $s_{l+2t-1}^* = 1$, $s_{l+2t}^* = l$, мы получаем, что $s_{l+2t+1}^* = 1$ и $s_{l+2t+2}^* = l$, если

$$R(1) \geq R(l + 2t) \quad \text{и} \quad R(l - 1) \geq R(l + 2t), \quad (14)$$

так как при любом $r > 1$ $R(l + 2t) > R(l + 2t + 1)$ (корень $r_1^{(2)}$ не существует).

Из (9) следует, что $R(l + 2t) = \lambda[r - 9 - r^{-1} + r^{-2}]/2$ и $R(l - 1) = \lambda^{l+1}R(k)$, где $R(k)$ из (13). При $r_1^{(\infty)} < r \leq r_2^{(\infty)}$, где $r_2^{(\infty)}$ есть единственный превышающий единицу корень уравнения $R(l + 2t) = 0$ ($r_2^{(\infty)} > r_1^{(3)}$), условия (14) выполняются, ибо в этом случае $R(l + 2t) < 0$, а $R(1)$ и $R(l - 1)$ положительны.

Тогда любому r из интервала $r_1^{(\infty)} < r \leq r_2^{(\infty)}$ соответствует топология

$$s_1^* = 1, \quad s_2^* = 1, \dots, s_{l-1}^* = 1, \quad s_l^* = l, \quad s_{l+1}^* = 1, \quad s_{l+2}^* = l, \dots,$$

где l — наименьшее целое число, удовлетворяющее условию $r > r_1^{(l)}$.

Рассмотрим теперь динамику поиска при $r \rightarrow \infty$. В этом случае, согласно (9) и (10) (то же следует и из (3), (4)), последовательность s_1^*, s_2^*, \dots совпадает с топологией поиска минимума для функций $\varphi(x) \equiv \text{const}$ при $\varepsilon = 0$, т. е. имеет вид

$$1, 1, 3, 1, 3, 5, 7, 1, 3, 5, 7, 11, 13, 15, 17, \dots$$

Проведенный анализ динамики поиска для случая, когда результаты проведенных испытаний удовлетворяют условию $\varphi(x_s) = x_s$, $0 \leq s \leq k$, позволяет сделать некоторые выводы.

При заданной точности $\varepsilon > 0$ с ростом r повышается надежность стыскания глобального минимума (одновременно возрастает и число поисковых испытаний), поскольку при этом новые испытания проводятся и в тех интервалах, на концах которых ранее были зафиксированы высокие значения минимизируемой функции. Далее, так как, например, при $r_1^{(l)} \geq r > r_1^{(l+1)}$, «обследование» сравнительно длинных интервалов с высокими значениями функции на концах начнется лишь после $l + 1$ -го шага, то при фиксированном r надежность возрастает с уменьшением величины ε (уменьшение ε , согласно (6), вызывает увеличение числа поисковых шагов).

Таким образом, полученные результаты согласуются с экспериментальными выводами, отмеченными в предыдущем разделе.

В заключение заметим, что критические значения для r (например, $r_1^{(l)}$), полученные в предположении $\varphi(x_s) = x_s$, являются также «бифуркационными» значениями, определяющими изменение топологии поиска, для функции $\varphi(x) = |x|$, $x \in [-1, 1]$.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. Н. Бочаров, А. А. Фельдбаум, Автоматика и телемеханика, 23, № 3, 289 (1962).
2. H. J. Kushner, Transactions of the ASME, Series D, Basic Engineering, 86 № 1, 97 (1964).
3. Д. Б. Юдин, Э. М. Хазен, Автоматика и вычислительная техника, 13, Рига, 1966.
4. Ю. И. Неймарк, Р. Г. Стронгин, Изв. АН СССР, Техническая кибернетика, № 1, 17 (1966).
5. Г. А. Медведев, В. П. Тарасенко, Вероятностные методы исследования экстремальных систем, изд. Наука, М., 1967.
6. И. Б. Моцкус, Многоэкстремальные задачи в проектировании, изд. Наука, М., 1967.
7. Л. А. Растринин, Статистические методы поиска, изд. Наука, М., 1968.
8. Э. М. Вайсборд, Д. Б. Юдин, Изв. АН СССР, Техническая кибернетика, № 5, 3 (1968).
9. Д. С. Хилл, Д. Н. Гибсон, Способ автоматической оптимизации многоэкстремальных функций, кн. Теория самонастраивающихся систем управления, изд. Наука, М., 1969.
10. Р. Г. Стронгин, Тезисы докладов IV Всесоюзного симпозиума по экстремальным задачам, Каунас, 1969.
11. Р. Г. Стронгин, Изв. АН СССР, Техническая кибернетика, № 6, 118 (1969).
12. Р. Г. Стронгин, Минимизация функций на основе гипотезы максимальной разности, кн. Проблемы статистической оптимизации, изд. Зинатне, Рига, 1968.

ON THE ABSOLUTE MINIMUM SEEKING ALGORITHM

R. G. Strongin

This paper presents a simple algorithm for locating the absolute minimum of a real one-variable function defined on the closed interval. The search invariance when function or variable are multiplied by constant or constant is added to them is pointed out. Dynamics of search process is investigated as dependant on search parameter appearing in the above algorithm. Some experimental results are given.
