1. *Пташник Б.И.* Некорректные граничные задачи для дифференциальных уравнений с частными производными. К., 1984. 2. *Ільків В.С., Пташник Б.Й.* Зображення та дослідження розв'язків нелокальної крайової задачі для системи диференціальних рівнянь з частинними похідними // Укр. мат. журн. 1996. Т.48. № 2. С.184–194. 3. *Гой Т.П., Пташник Б.Й.* Нелокальні крайові задачі для систем лінійних рівнянь із частинними похідними зі змінними коефіцієнтами // Укр. мат. журн. 1997. Т.49. № 11. С.1478–1487. 4. *Ільків В.С.* Задача з інтегральними умовами для системи диференціальних рівнянь з частинними похідними і змінними коефіцієнтами // Вісн. ДУ "Львівська політехніка". 1999. № 364. С.318–323. 5. *Ильин В.А., Шишмарев И.А.* Равномерные в замкнутой области оценки для собственных функций эллиптического оператора и их производных // Изв. АН СССР. Сер. мат. 1960. Т. 24. С. 883–896. 6. *Михайлов В.П.* Дифференциальные уравнения в частных производных. М., 1983.

УДК 519.6

Голуб Б.М., Оліярник Ю.П.
Львівський національний університет ім. І. Франка

АДАПТИВНИЙ ТУНЕЛЬНИЙ АЛГОРИТМ ПОШУКУ ГЛОБАЛЬНОГО МІНІМУМУ ФУНКЦІЇ ОДНІЄЇ ЗМІННОЇ

This article deals with the method of finding the global minimizer of the univariate differentiable function which is based on the step-by-step transition from the already found local minimizer to another one with the lower target function value. The transition is implemented by means of the tunneling function (filled function) with the variable parameters. The optimal parameters choice encreases the area of attraction of minimizer being searched for the local optimization methods and thus increases the efficiency of the global minimizer search.

Розглядається метод пошуку глобального мінімуму неперервно-диференційовної функції однієї змінної, який полягає у поетапному переході від деякого вже знайденого локального мінімуму до наступного з меншим значенням цільової функції. Для організації такого переходу використовується тунельна функція (функція наповнення) із змінними параметрами. Оптимальний вибір параметрів збільшує область збіжності алгоритмів локальної мінімізації до шуканого екстремуму, що збільшує ефективність пошуку глобального мінімуму.

1. Формулювання задачі та основні означення. Розглянемо задачу глобальної мінімізації

$$f(x) \to \min_X,\ X = \{x \in R^1 :\ -\infty < a \le x \le b < +\infty\},\ f(x) \in C^1(X). \tag{1}$$

Вважаємо, що функція $f(x)$ має скінченну кількість локальних мінімумів на X. Тоді усі локальні мінімуми будуть строгими. Очевидно, що у цьому випадку $f(x)$ задовольняє умову

Ліпшиця на X з константою $L = \max_X |f'(x)|$. Будемо вважати, що задача (1) розв'язана з точністю $\varepsilon > 0$ за значенням функції $f(x)$, якщо знайдена точка $\tilde{x} \in X$, така, що $f(\tilde{x}) < \min_{x \in X} f(x) + \varepsilon$.

Нехай $x^* \in X$ – деяка внутрішня точка локального мінімуму задачі (1). Розглянемо множини

$$A(f; x^*) = \{x \in X : f(x) \geq f(x^*)\}; \quad (2)$$

$$B(f; x^*) = \{x \in X : f(x) < f(x^*)\}; \quad (3)$$

$$B_\varepsilon(f; x^*) = \{x \in X : f(x) \leq f(x^*) - \varepsilon\}. \quad (4)$$

Позначимо $Y(f) = X' \setminus \{x^*\}$, де X' – множина внутрішніх стаціонарних точок функції $f(x)$.

Означення [1]. Функцію $R(x, x^*, \alpha)$ будемо називати функцією наповнення (тунельною функцією) для задачі (1) в точці x^* на множині X, якщо вона задовольняє такі умови:

1) $R(x, x^*, \alpha)$ – неперервна на $X \setminus B_\varepsilon(f; x^*)$;
2) $Y(R(x, x^*, \alpha)) \subset B(f; x^*)$;
3) $Y(R(x, x^*, \alpha)) \neq \varnothing$ при $B_\varepsilon(f; x^*) \neq \varnothing$;
4) x^* – точка екстремуму для функції $R(x, x^*, \alpha)$ на множині X.

У [1, 2, 3] розглянуто приклади функцій, які задовольняють умови цього означення. В [1] вказано деякі способи побудови нових тунельних функцій на основі вже відомих.

2. Функції наповнення із змінними параметрами. Істотною проблемою тунельних методів глобальної оптимізації є пошук стаціонарних точок функцій наповнення. Ця проблема зумовлена тим, що області притягання стаціонарних точок функції наповнення є значно меншими, ніж області притягання відповідних стаціонарних точок цільової функції. Для вирішення цієї проблеми у цій роботі пропонується використовувати функції наповнення із змінними параметрами. Запропонований підхід полягає у тому, що деякі параметри тунельної функції також вважаються функціями, визначеними на X. Відповідним чином змінюючи значення параметрів в різних підобластях множини X, можна досягти суттєвого збільшення області притягання стаціонарної точки тунельної функції порівняно з випадком, коли параметри тунельної функції є сталими на усій множині X. При цьому функція наповнення, звичайно, втрачає деякі свої властивості. Так, відсутність стаціонарних точок для такої функції гарантується тільки на деякій підмножині множини $A(f; x^*)$. Проте цей негативний аспект компенсується простотою знаходження локальних мінімумів функції наповнення.

Покажемо принцип побудови функцій наповнення із змінними параметрами на прикладі функції [3]

$$R(x, x^*, \alpha) = \frac{1}{\alpha} \cdot \frac{1}{1 + (x - x^*)^2} - \alpha \cdot exp\left(\frac{f(x^*) - f(x) - \varepsilon}{\alpha}\right). \quad (5)$$

Функція наповнення (5) має один числовий параметр – α. Її властивості визначаються такою теоремою.

Теорема 1 [3]. Якщо $x^* \in \operatorname{int} X$, то існує стала $\alpha_0 > 0$, така, що функція (5) є функцією наповнення для задачі (1) у точці x^* на множині X при довільному α з інтервалу $(0, \alpha_0)$.

Доведення для випадку $f(x) \in C^2(X)$ подано у [3]. Можна також довести цю теорему для випадку, коли функція $f(x) \in C^1(X)$.

Нехай $T \geq f(x^*)$ – деяка стала. Позначимо $\overline{F}(f, x^*, T) = \{x \in X : f(x) \geq T\} \setminus \{x^*\}$. Очевидно, $\overline{F}(f, x^*, T) \subset A(f, x^*)$.

Припустимо, що задано деякі константи $\alpha_M > 0$, $\Delta > 0$, $\delta > 0$, $\varepsilon_\delta > 0$, де $\Delta >> \delta$, $\alpha_M >> \varepsilon_\delta$. Нехай $\alpha(x)$ – функція, визначена на X і:

1) $\alpha(x) \in C^1(X)$; (6)

2) $\alpha(x)$ монотонно спадає при $x \leq x^*$ і монотонно зростає для $x \geq x^*$; (7)

3) $0 < \alpha(x) < \alpha_0$ для довільного $x \in O(x^*, \Delta - \delta) \cap X$; (8)

4) $\alpha_M - \varepsilon_\delta < \alpha(x) < \alpha_M$ для довільного $x \in X \setminus O(x^*, \Delta + \delta)$. (9)

Побудуємо функцію

$$R(x, x^*, \alpha(x)) = \frac{1}{\alpha(x)} \cdot \frac{1}{1 + \left(x - x^*\right)^2} - \alpha(x) \cdot exp(\frac{f(x^*) - f(x) - \varepsilon}{\alpha(x)}). \tag{10}$$

Лема. Якщо $\alpha(x)$ задовольняє умови (6) – (9), то функція (10) є функцією наповнення для задачі (1) у точці x^* на множині $x \in O(x^*, \Delta - \delta) \cap X$ і не має стаціонарних точок на множині $\overline{F}(f, x^*, T_1) \cap X \setminus O(x^*, \Delta + \delta)$, де

$$T_1 = f(x^*) - \varepsilon - (\alpha_M - \varepsilon_\delta) \ln \frac{2(\Delta + \delta)}{L(\alpha_M - \varepsilon_\delta)(1 + (b - a)^2)^2}. \tag{11}$$

Доведення. Для усіх $x \in O(x^*, \Delta - \delta) \cap X$ згідно з (8) виконується: $0 < \alpha(x) < \alpha_0$, тому в силу теореми 1 функція (10) є функцією наповнення для задачі (1) у точці x^* на множині $x \in O(x^*, \Delta - \delta) \cap X$. Покажемо, що $R'(x, x^*, \alpha(x)) \neq 0$ для довільного $x \in \overline{F}(f, x^*, T_1) \cap X \setminus O(x^*, \Delta + \delta)$. Для $R'(x, x^*, \alpha(x))$ одержимо:

$$\begin{aligned} R'(x, x^*, \alpha(x)) &= -\frac{\alpha'(x)}{\alpha^2(x)} \cdot \frac{1}{1 + (x - x^*)^2} - \frac{2}{\alpha(x)} \cdot \frac{(x - x^*)}{(1 + (x - x^*)^2)^2} - \\ &- \alpha'(x) \cdot exp(\frac{f(x^*) - f(x) - \varepsilon}{\alpha(x)}) + f'(x) \cdot exp(\frac{f(x^*) - f(x) - \varepsilon}{\alpha(x)}) + \\ &+ (f(x^*) - f(x) - \varepsilon) \cdot exp(\frac{f(x^*) - f(x) - \varepsilon}{\alpha(x)}) \cdot \frac{\alpha'(x)}{\alpha(x)}. \end{aligned} \tag{12}$$

Із (12), враховуючи (6)–(9) і обмеженість $f'(x)$, для $x \geq x^* + \Delta + \delta$, одержимо:

$$R'(x, x^*, \alpha(x)) < -\frac{2(\Delta + \delta)}{(\alpha_M - \varepsilon_\delta)(1 + (b - a)^2)^2} + L \cdot exp(\frac{f(x^*) - f(x) - \varepsilon}{\alpha_M - \varepsilon_\delta}). \tag{13}$$

Аналогічно для $x \leq x^* - \Delta - \delta$. отримаємо:

$$R'(x, x^*, \alpha(x)) > \frac{2(\Delta + \delta)}{(\alpha_M - \varepsilon_\delta)(1 + (b - a)^2)^2} - L \cdot exp(\frac{f(x^*) - f(x) - \varepsilon}{\alpha_M - \varepsilon_\delta}). \tag{14}$$

Оскільки $f(x^*)-f(x)-\varepsilon \le (\alpha_M-\varepsilon_\delta)\ln\dfrac{2(\Delta+\delta)}{L(\alpha_M-\varepsilon_\delta)(1+(b-a)^2)^2}$ згідно з означенням множини $\overline{F}(f,x^*,T_1)$, із (13) та (14) випливає, що $R'(x,x^*,\alpha(x))\ne 0.$ Лему доведено.

Розглянемо розклад

$$R(x,x^*,\alpha(x))=\frac{1}{\alpha(x)}\cdot\frac{1}{1+\left(x-x^*\right)^2}-\alpha(x)\cdot exp(\frac{f(x^*)-f(x)-\varepsilon}{\alpha(x)})=$$

$$=f(x)-f(x^*)+\varepsilon-\alpha(x)+O(\frac{1}{\alpha(x)}).$$

З останньої рівності, а також з (9) випливає, що при достатньо великому $\alpha_M>0$ для $x\in O(x^*,\Delta+\delta)$ області збіжності методів пошуку локального екстремуму відповідних локальних мінімумів функції $f(x)$ та функції (10) будуть практично збігатися.

Нехай $C\ge 0$ – деяка довільна стала. Розглянемо рівняння

$$\varepsilon+(\alpha_M-\varepsilon_\delta)\ln\frac{2(\Delta+\delta)}{L(\alpha_M-\varepsilon_\delta)(1+(b-a)^2)^2}=-C\ . \qquad (15)$$

Якщо α_M – розв'язок рівняння (15), то з (11) випливає, що функція (10) не має стаціонарних точок на множині $\overline{F}(f,x^*,f^*+C)$. Отже, при $C=0$ функція (10) не має стаціонарних точок на множині $\overline{F}(f,x^*,f^*)=A(f,x^*)$. Таким чином, константу α_0, про існування якої йдеться у теоремі 1, можна знайти з рівняння (15) при $C=0$.

3. Алгоритм глобальної мінімізації. Сформулюємо алгоритм глобальної мінімізації.

0. Задаємо константи: $C_0>0,\ \delta>0,\ \varepsilon_\delta>0;$ покладаємо $x_0=a,\ h=\varepsilon/L.$
1. Знаходимо найближчу до x_0 точку $x^*=\arg\min\limits_{x_0<x\le b} f(x)$. Обчислюємо $f^*=f(x^*)$.
2. Якщо $x^*\ge b-h,$ переходимо до кроку 9.
3. Покладаємо $a=x^*,\ x_0=a,\ \Delta=\delta.$
4. Шукаємо $\alpha_0,\ \alpha_M$ як розв'язки рівняння (15) при $C=C_0$ та $C=0$, відповідно.
5. Будуємо функцію $\alpha(x)$, що задовольняє умови (6) – (9) та $R(x,x^*,\alpha(x))$ згідно з (10).
6. Знаходимо найближчу до x_0 точку $\bar{x}=\arg\min\limits_{x_0<x\le b} R(x,x^*,\alpha(x))$. Обчислюємо $\bar{f}=f(\bar{x})$.
7. Якщо $\bar{f}<f^*-\varepsilon$, то приймемо, що $x_0=\bar{x}$ і переходимо до кроку 1.
8. Приймемо, що $\Delta=\bar{x}-x^*+\delta, x_0=\bar{x}$ і переходимо до кроку 5.
9. Вважаємо x^* точкою глобального мінімуму і зупиняємо роботу алгоритму.

Необхідно відзначити, що при $C_0=0$ сформульований алгоритм збігається з тунельним алгоритмом, описаним у [2, 3].

Теорема 2. За скінченну кількість локальних спусків запропонований тунельний алгоритм знаходить точку $x^*\in X$ таку, що $f(x^*)<\min\limits_{x\in X} f(x)+\varepsilon.$

Доведення теореми випливає з теореми 1, леми і скінченності кількості локальних мінімумів функції $f(x)$, а також побудови алгоритму.

4. Числовий експеримент. Одним із відомих ефективних методів розв'язування задачі (1) є метод Євтушенка [4], в основі якого лежить перебір значень функції у вузлах нерівномірної сітки. Для одномірного випадку цей метод описується такими формулами:

$$x_1 = a + h/2,\ x_{i+1} = x_i + h + (f(x_i) - F_i)/L,\ i = 1,\dots,n-2, \tag{16}$$

$$x_n = \min\{x_{n-1} + h + (f(x_{n-1}) - F_{n-1})/L;\ b\},$$

де $h = 2\varepsilon/L,\ F_i = \min\limits_{1\le j\le i} f(x_j),$ а число n визначається умовою

$$x_{n-1} < b - h/2 \le x_{n-1} + h + (f(x_{n-1}) - F_{n-1})/L.$$

При проведенні експерименту порівнювали запропонований тунельний алгоритм із алгоритмом (16).

Тестові задачі розв'язувались з точністю $\varepsilon = 10^{-2}$ та $\varepsilon = 10^{-4}$ за значенням цільової функції. Позначимо через N_f^1 та N_f^2 кількість обчислень функції мети запропонованим тунельним методом та методом (16), відповідно. Результати обчислень наведено у таблиці.

№ задачі	L	$\varepsilon = 10^{-2}$		$\varepsilon = 10^{-4}$	
		N_f^1	N_f^2	N_f^1	N_f^2
1	20.571	115	12961	231	1281280
2	8.533	234	1712	354	134973
3	800.913	318	28441	337	2733091
4	0.4362	148	107	258	3603

Як показують результати обчислень, запропонований метод вимагає значно меншого числа обчислень цільової функції порівняно з методом (16), який перетворюється у метод послідовного перебору на рівномірній сітці у випадку монотонно спадної функції.

Тестові задачі:

1. $f(x) = -\dfrac{1}{0.3 + (x-2)^2} - \dfrac{1}{0.5 + (x-5)^2} - \dfrac{1}{0.1 + (x-9)^2} + 10.12667,$

   $-10 \le x \le 10,\ x^* = 9.0,\ f(x^*) = 0.0457851607521338;$

2. $f(x) = \dfrac{(x-2)^2}{10} + 1 - \cos(2\pi(x-2)),$

   $-10 \le x \le 10,\ x^* = 2,\ f(x^*) = 0;$

3. $f(x) = (x^3 - 2x - 5)^2,$

   $0 \le x \le 3, x^* = 2.09458984, f(x^*) = 0;$

4. $f(x) = \sin x / x,$

   $-11 \le x \le 11, x^* = \pm 4.49341797, f(x^*) = -0.2172336.$

1. Голуб Б.М. Функції наповнення у глобальній оптимізації // Вісн. Львів. ун-ту. 1996. Вип.44. С.76–81. 2. Голуб Б.М., Оліярник Ю.П. Тунельний алгоритм пошуку глобального мінімуму неперервної функції // Вісн. Львів. ун-ту. 1995. Вип.41. С.35–39. 3. Оліярник Ю.П. Приклад функції наповнення для побудови тунельних алгоритмів глобальної оптимізації // Вісн. Львів.у-ту. 1996. Вип.52. С.107–110. 4. Евтушенко Ю.Г. Численный метод поиска глобального экстремума функций (перебор на неравномерной сетке) // Журн. вычисл. матем. и матем. физики. 1971. Т.11. № 6. С.1390–1703.