ГЛОБАЛЬНАЯ МИНИМИЗАЦИЯ МНОГОМЕРНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ С ПОМОЩЬЮ УРАВНЕНИЯ КОНВЕКТИВНОЙ ДИФФУЗИИ

В. В. Федоров

Тольяттинский государственный университет
vvfmail@mail.ru

О современных подходах к построению методов минимизации описано в работе [1]. Представляются интересными методы, основанные на решении дифференциальных уравнений.

Как известно, метод градиентов для многомерной минимизации, который можно интерпретировать как решение задачи Коши в конечных разностях, непригоден для глобальной минимизации. Применение метода DEM [2], [3] для функций с локальными минимумами затрудняется вычислением вторых производных целевого функционала, а применение методов, основанных на решении ОДУ второго порядка [4], например, метода тяжелого шарика – решением дополнительной оптимизационной задачи по выбору вспомогательных параметров: масса, начальная скорость и т.д.

В предлагаемом методе многомерная минимизация сводится к одномерной в результате решения нестационарной краевой задачи конвективной диффузии. В методе имитируется диффузионный перенос вещества с концентрацией в многокомпонентном потоке, движущемся в гравитационном поле по неровной поверхности (см. рис. 1). Распределение концентраций *i*-го вещества в движущемся потоке описывается уравнением конвективной диффузии:

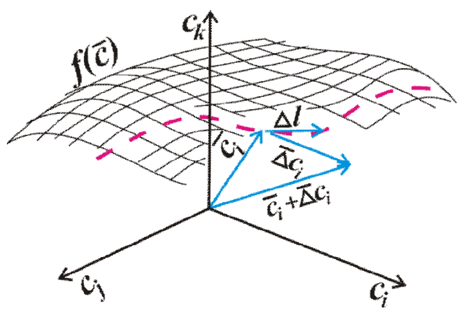

Рисунок 1. Физическая интерпретация метода

Так как величины с одной стороны являются концентрациями *i*-го вещества в потоке, а с другой – координатами многомерного пространства, то векторы и должны иметь вид:

Скорости же потоков зависят от направления и степени уклона поверхности:

Подставив выражения векторов в уравнение конвективной диффузии, получим дифференциальные уравнения для сведения многомерной минимизации к минимизации в одномерном пространстве:

На точность расчета влияет параметр *D*. Для наглядности на рисунках 2, 3 представлены результаты минимизации функции с двумя локальными экстремумами

$$f(x,y) = 3e^{-(x+1)^2-(y+1)^2} - 3e^{-(x+1)^2-(y-3)^2}$$

с глобальным минимумом -3 в точке (-1;3) в графическом виде.

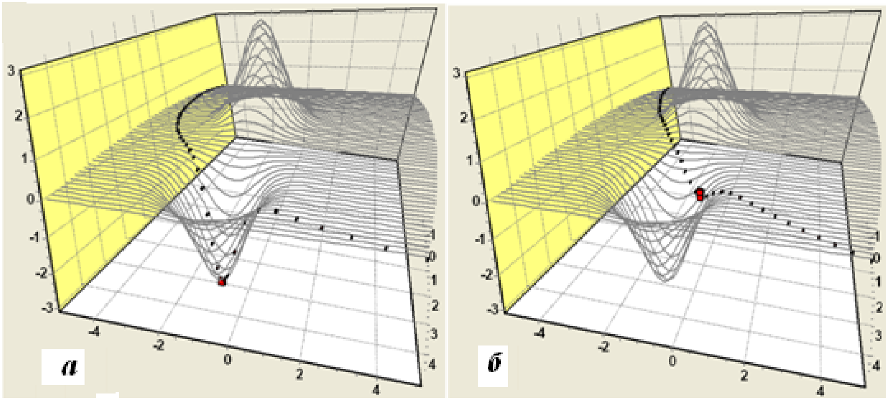

Рисунок 2. Рассчитанная траектория движения конвективно-диффузионного потока по поверхности: *а* – при *D*=0,1 и *б* – при *D*=0,5

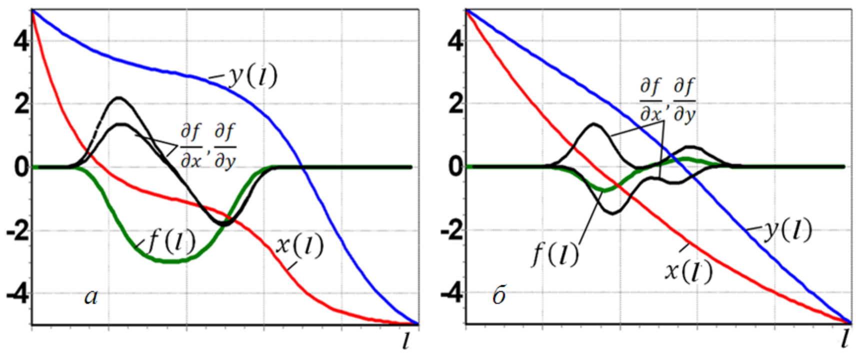

Рисунок 3. Распределение значений искомых переменных, функции и ее производных вдоль траектории *l*: *а* – при *D*=0,1 и *б* – при *D*=0,5

Примеры минимизации с помощью данного метода приведены в работах [5], [6].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Орлянская И.В. Современные подходы к построению методов глобальной оптимизации.* [http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2002/189.pdf] б.м. : Электронный журнал «ИССЛЕДОВАНО В РОССИИ», 2002 г.

2. *Lucjan Piela, Jaroslaw Kostrowicki, and Harold A. Scheraga.* The multiple-minima problem in the conformational analysis of molecules. Deformation of the potential energy hypersurface by the diffusion equation method. *Journal of Physical Chemistry* . 1989 г., 93:3339–3346.

3. *Hartman-Baker, Rebecca Jean.* The Diffusion Equation Method for Global Optimization and Its Application to Magnetotelluric Geoprospecting. *IDEALS.* [В Интернете] 2005 г. http://hdl.handle.net/2142/11055.

4. *SNYMAN A.J.* New and Dynamic Method for Unconstrained Optimization. *Applied Mathematical Modelling, Vol. 6, pp. 449-462.* 1982 г.

5. *Федоров В.В.* Метод конвективно-диффузионной глобальной минимизации для многопараметрической идентификации математических моделей. *Вектор науки ТГУ.* Тольятти, 2012 г., 3(21), с.46-48.

6. *Федоров В.В.* Новый конвективно-диффузионный метод глобальной минимизации для решения обратных задач химической кинетики. *Заочные электронные конференции.* [В Интернете] www.econf.rae.ru/pdf/2013/03/2260.pdf.