МАТЕМАТИКА

УДК 517.9, 519.7
MSC 90C25, 65K05, 68U05

МЕТОД ЗАРЯЖЕННЫХ ШАРИКОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГЕОМЕТРИИ*

М. Э. Аббасов

Санкт-Петербургский государственный университет,
Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

Концепция замены исходной стационарной оптимизационной задачи некоторой нестационарной механической системой, стремящейся с течением времени к положению равновесия, совпадающему с решением исходной задачи, позволяет строить эффективные численные алгоритмы. Сначала составляются дифференциальные уравнения движения, затем переходом к разностной схеме их решения описывается итерационный алгоритм. Методы, получаемые указанным способом, называют методами установления. Одним из наиболее известных представителей этого класса является метод тяжелого шарика. В такие алгоритмы, как правило, входят параметры, за счет выбора которых можно существенно влиять на скорость сходимости.

В настоящей заметке предлагается и исследуется представитель данного класса — метод заряженных шариков. Он является новым, эффективным оптимизационным методом, позволяющим решать некоторые задачи вычислительной геометрии. В работе подробно рассматривается задача ортогонального проектирования точки на выпуклое замкнутое множество с гладкой границей, а также задача поиска минимального расстояния между двумя такими множествами. Доказываются теоремы сходимости, получаются оценки для скорости сходимости. В заключении приводятся численные примеры, иллюстрирующие работу предложенных алгоритмов. Библиогр. 8 назв. Табл. 2.

Ключевые слова: метод заряженных шариков, математическое программирование, методы установления, вычислительная геометрия.

1. Введение. Идея получения оптимизационных методов на основе механических аналогий показала свою плодотворность, так как позволяет строить новые, эффективные численные алгоритмы [1]. Для построения алгоритма составляют дифференциальные уравнения движения, а далее переходят к разностной схеме их решения. Эта идея подробно рассмотрена в [2], где получаемые указанным способом методы называются *методами установления*.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-31-00056 мол_а).

2. Метод заряженных шариков. Одним из представителей данного класса является недавно предложенный метод заряженных шариков [3]. Он позволяет решать некоторые важные задачи вычислительной геометрии.

Пусть нужно найти ортогональную проекцию начала координат на множество $X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq 0\}$, где $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — выпуклая, непрерывно дифференцируемая до второго порядка включительно функция, а $\mathbb{0} \notin X$. Задача формализуется следующим образом:

$$\begin{cases} \|x\| \longrightarrow \min, \\ x \in X. \end{cases} \tag{1}$$

Можно считать, что $\nabla f(x) \neq \mathbb{0}$ при всех $x \in \operatorname{bd} X$, где $\operatorname{bd} X$ — граница множества X. Поместим в начало координат отрицательный заряд q и зафиксируем его. Выберем внутри множества X произвольную точку $\widehat{x}$, поместим в нее положительно заряженный шарик массой m и зарядом q. Предположим, что движение происходит только под действием силы Кулона и вязкого трения. Шарик начнет двигаться в направлении начала координат по прямой, соединяющей шарики, до тех пор пока не столкнется с границей множества X. Координату точки столкновения можно найти, решив систему

$$\begin{cases} f(x) = 0, \\ x = \lambda \widehat{x},\ \lambda \in (0, \infty), \end{cases} \tag{2}$$

и в случае, если решение неединственно, выбрать то, которое находится ближе к началу координат. В результате получим $x_0 \in X$. Далее шарик двигается по границе X, достигая положения равновесия, которое в данном случае совпадает с решением задачи (1), и начинает колебаться около этого положения. Действительно, именно в этой точке сила нормальной реакции границы множества уравновешивается силой Кулона. В любой же другой точке касательная составляющая силы Кулона отлична от нуля и направлена к положению равновесия. Для того чтобы колебания стали затухающими и процесс сошелся к искомому решению, можно ввести силу вязкого трения, пропорциональную скорости и направленную противоположно ей. Выписав дифференциальные уравнения движения и перейдя к разностной схеме их решения, получим итерационный алгоритм решения задачи (1).

Обозначим координаты шарика через $x(t)$, где t — время. Кулоновская сила и сила нормальной реакции представляются соответственно в виде

$$F(t) = -\frac{c_1 q^2}{\|x\|^3} x, \quad N(t) = -\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|^2} \langle F(t), \nabla f(x) \rangle - \frac{\langle H(x)\dot{x}, \dot{x} \rangle}{\|\nabla f(x)\|^2} \nabla f(x),$$

где c_1 — электрическая постоянная, $H(x)$ — матрица вторых производных функции f в точке x. Отметим, что первое слагаемое в выражении для N уравновешивает нормальную составляющую силы Кулона, второе — центробежную силу. Силу сопротивления определим формулой $R(t) = -c_2 \dot{x}$, где c_2 — коэффициент сопротивления.

По второму закону Ньютона имеем

$$m\ddot{x}(t) = F(t) + N(t) + R(t). \tag{3}$$

Перейдем от (3) к системе первого порядка с помощью введения n-мерного вектора фиктивных переменных $z(t)$:

$$\begin{cases} \dot{x} = z, \\ \dot{z} = p_1 \psi(x) - p_2 z - \chi(x, z), \end{cases} \tag{4}$$

где

$$\psi(x) = -\frac{1}{\|x\|^3}x + \frac{\langle x, \nabla f(x)\rangle}{\|x\|^3\|\nabla f(x)\|^2}\nabla f(x), \quad \chi(x,z) = \frac{\langle H(x)z, z\rangle}{\|\nabla f(x)\|^2}\nabla f(x)$$

и p_1, p_2 — параметры, зависящие от m, q, c_1, c_2.

Пусть траектория $x(t)$ является решением системы (4) при начальных условиях $[x(0), z(0)]$ таких, что $f(x(0)) = 0$, $\langle \nabla f(x(0)), z(0)\rangle = 0$. Из (4) очевидно, что при всех $t \geq 0$ выполняется равенство

$$\langle H(x)z, z\rangle + \langle \nabla f(x), \dot{z}\rangle = -p_2 \langle \nabla f(x), z\rangle,$$

левая часть которого является, очевидно, производной выражения $\langle \nabla f(x), z\rangle$ по времени. Таким образом, скалярное произведение $\langle \nabla f(x), z\rangle$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\dot{\zeta} = -p_2\zeta.$$

Решая его с начальным условием

$$\zeta(0) = \langle \nabla f(x(0)), z(0)\rangle = 0,$$

получаем $\langle \nabla f(x), z\rangle \equiv 0$. Интегрируя это тождество по t от 0 до t, заключаем, что $f(x(t)) = 0$ при всех $t \geq 0$. Отсюда следует, что $x(t)$ целиком лежит в $\operatorname{bd} X$.

Итак, описан непрерывный метод (4) для решения задачи (1). Исследуем его на сходимость, а также получим оценки для скорости сходимости. Для этого нам понадобятся вспомогательные результаты.

Рассмотрим автономную систему дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = X_i(x_1, \ldots, x_n), \quad i = 1, \ldots, n, \tag{5}$$

где функции $X_i(x)$ непрерывны и удовлетворяют условию Липшица в некоторой области D фазового пространства, содержащей точку $\mathbb{0}$. Пусть $X_i(\mathbb{0}) = 0$, тогда справедливы следующие теоремы (см. [4]).

Теорема 1 (Ляпунова об устойчивости)**.** *Если для системы (5) существует в D дифференцируемая функция V такая, что*

1) $V(x) \geq 0$ $\forall x \in D$, при этом $V(x) = 0$ тогда и только тогда, когда $x = \mathbb{0}$,

2) производная V в силу системы

$$\dot{V} = \frac{dV}{dt} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial v}{\partial x_i} X_i$$

неположительна для всех x из D,

то положение равновесия $\mathbb{0}$ устойчиво в смысле Ляпунова.

Теорема 2 (Барбашина—Красовского об асимптотической устойчивости)**.** *Если существует в D дифференцируемая функция V такая, что*

1) $V(x) \geq 0$ $\forall x \in D$, при этом $V(x) = 0$ тогда и только тогда, когда $x = \mathbb{0}$, *2) производная V в силу системы*

$$\dot{V} = \frac{dV}{dt} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial v}{\partial x_i} X_i$$

неположительна для всех x из D,

3) множество $\Lambda = \left\{ x \in D \mid \dot{V}(x) = 0 \right\}$ не содержит целых траекторий кроме нулевой,

то положение равновесия $\mathbb{0}$ асимптотически устойчиво в смысле Ляпунова.

Теперь перейдем к формулированию и доказательству теоремы сходимости для нашего алгоритма.

Теорема 3. *Пусть задача (1) имеет конечное число стационарных точек, а $\widetilde{x}$ — ее решение. Тогда найдется такое $\delta > 0$, что для любых $[x^0, z^0]$ из пересечения шара радиуса δ с центром в $[\widetilde{x}, \mathbb{0}]$,*

$$B_\delta\left([\widetilde{x}, \mathbb{0}]\right) = \left\{[x,z] \mid \|[x,z] - [\widetilde{x}, \mathbb{0}]\| \le \delta\right\},$$

с множеством $W = \left\{ w \in \mathbb{R}^{2n} \mid w = [x,z],\ x \in \operatorname{bd} X,\ \langle \nabla f(x), z\rangle = 0 \right\}$, метод (4) с начальными условиями $[x^0, z^0]$ сходится к $[\widetilde{x}, \mathbb{0}]$.

Через $[x,z]$ обозначим вектор из $\mathbb{R}^{2n}$, полученный конкатенацией (склеиванием) n-мерных векторов x, z.

Доказательство. Пусть $\widetilde{x}$ — точка минимума для задачи (1). В этой точке должно выполняться необходимое условие минимума $\widetilde{x} = -\lambda \nabla f(\widetilde{x})$ при некотором $\lambda > 0$, то есть векторы $\widetilde{x}$ и $\nabla f(\widetilde{x})$ коллинеарны, а значит $\psi(\widetilde{x}) = \mathbb{0}$. Таким образом, точка $[\widetilde{x}, \mathbb{0}]$ является положением равновесия системы (4). Верно и обратное — любое положение равновесия $[\widetilde{x}, \mathbb{0}]$ системы (4) соответствует стационарной точке $\widetilde{x}$ задачи (1). Так как по условию теоремы стационарных точек конечное число, а также в силу определения множества X и функции f, для любого положения равновесия найдется такая его окрестность $B_\varepsilon([\widetilde{x}, \mathbb{0}])$, в которой не будет других положений равновесия, а также точки $\mathbb{0}$ и точек, в которых градиент функции f обращается в ноль. Очевидно, правая часть системы (4) является непрерывно дифференцируемой на $B_\varepsilon([\widetilde{x}, \mathbb{0}])$, что гарантирует ее липшицевость на этом множестве. Кроме того, без уменьшения общности можно считать, что для любого $[x,z] \in B_\varepsilon([\widetilde{x}, \mathbb{0}]) \bigcap W$ выполняется неравенство $\|\widetilde{x}\| \le \|x\|$.

Пусть $\xi = x - \widetilde{x}$. Рассмотрим систему в отклонениях

$$\begin{cases} \dot{\xi} = z, \\ \dot{z} = p_1 \psi(\xi + \widetilde{x}) - p_2 z - \chi(\xi + \widetilde{x}, z). \end{cases}$$

Построим функцию Ляпунова

$$V(\xi, z) = \frac{1}{\|\widetilde{x}\|} - \frac{1}{\|\xi + \widetilde{x}\|} + \frac{1}{2}\|z\|^2.$$

Очевидно, что $V(\xi, z) \ge 0$ для любых $[\xi, z] \in D = B_\varepsilon(\mathbb{0}_{2n}) \bigcap W_{\widetilde{x}}$, $W_{\widetilde{x}} = W - [\widetilde{x}, \mathbb{0}]$, при этом $V(\xi, z) = 0$ тогда и только тогда, когда $\xi = 0$, $z = 0$. Имеем

$$\dot V(\xi,z)=\frac{\langle \xi+\widetilde{x},z\rangle}{\|\xi+\widetilde{x}\|^3}+\langle z,\dot z\rangle=\frac{\langle \xi+\widetilde{x},\nabla f(\xi+\widetilde{x})\rangle}{\|\nabla f(\xi+\widetilde{x})\|^2\|\xi+\widetilde{x}\|^3}\langle\nabla f(\xi+\widetilde{x}),z\rangle-$$
$$-\frac{\langle H(x)z,z\rangle}{\|\nabla f(x)\|^2}\langle\nabla f(\xi+\widetilde{x}),z\rangle-p_2\|z\|^2. \quad (6)$$

Так как $f(\xi(t)+\widetilde{x})=0$, то $\langle\nabla f(\xi+\widetilde{x}),z\rangle=0$. Значит, получим

$$\dot V(\xi,z)=-p_2\|z\|^2\le 0 \quad \forall[\xi,z]\in D.$$

Таким образом, выполнены условия теоремы 1 и, следовательно, точка $[\widetilde{x},\mathbb{0}]$ является устойчивой. Поэтому найдется такое $\delta>0$, что все траектории $[x(t),z(t)]$, начинающиеся из $B_\delta([\widetilde{x},\mathbb{0}])\bigcap W$, не покинут $B_\varepsilon([\widetilde{x},\mathbb{0}])\bigcap W$. Очевидно, любая такая целая траектория, принадлежащая множеству $\Lambda=\Big\{[x,z]\in D\mid \dot V(x,z)=0\Big\}$, является положением равновесия. Но в D нет иных положений равновесия, кроме $[\widetilde{x},\mathbb{0}]$. Отсюда следует, что выполнены условия теоремы 2 и все траектории системы (4) с начальными условиями из $B_\delta([\widetilde{x},\mathbb{0}])\bigcap W$ стремятся к положению равновесия $[\widetilde{x},\mathbb{0}]$. □

Из доказательства теоремы 3 ясно, что для того, чтобы x была стационарной точкой для задачи (4), необходимо и достаточно равенства $\psi(x)=0$. Это, по сути, означает равенство нулю касательной составляющей силы Кулона. Поэтому в качестве критерия остановки можно принять условие $\|\psi(x)\|\le\varepsilon$ при некотором малом $\varepsilon>0$. Прежде, чем перейти к вопросу о скорости сходимости, приведем вспомогательный результат из [5], который нам потребуется.

Теорема 4. *Пусть $V(x)$ — ограниченная снизу функция, т. е. $V(x)\ge v_*$, существует непрерывная $\Theta(x)$ такая, что $-\dot V(x)\ge\Theta(x)\ge 0$ при всех x. Тогда*

$$\min_{0\le t\le T}\Theta(x(t))\le\frac{V(x(0))-v_*}{T}.$$

Доказательство. При выполнении условий теоремы справедлива цепочка неравенств

$$T\min_{0\le t\le T}\Theta(x(t))\le\int\limits_0^T\Theta(x(t))dt\le V(x(0))-V(x(T))\le V(x(0))-v_*,$$

откуда и следует утверждение теоремы. □

Пусть выполнены условия теоремы 3, и $[\widetilde{x},\mathbb{0}]$ — положение равновесия системы (4), соответствующее решению $\widetilde{x}$ задачи (1). Тогда найдется такое малое $\varepsilon>0$, что $B_\varepsilon(\widetilde{x})$ не содержит других положений равновесия. По той же теореме существует $\delta>0$, для которого при любых начальных точках из $B_\delta([\widetilde{x},\mathbb{0}])\bigcap W$ траектории системы (4) не покидают $B_\epsilon([\widetilde{x},\mathbb{0}])\bigcap W$ и стремятся к $[\widetilde{x},\mathbb{0}]$. Используем идею, описанную в [5], для оценки того, насколько быстро траектории системы (4) с соответствующими начальными условиями, приводят к решению задачи.

Теорема 5. *Пусть p_1, p_2 — параметры метода, а матрица Якоби $\psi'(x)$ удовлетворяет неравенству*

$$\langle\psi'(x)z,z\rangle\ge\frac{p_2^2}{p_1}\|z\|^2$$

для всех $[x,z]\in B_\epsilon([\widetilde{x},\mathbb{0}])\bigcap W$. Тогда при любых начальных условиях $[x^0,z^0]\in B_\delta([\widetilde{x},\mathbb{0}])\bigcap W$ для метода (4) будет справедлива оценка

$$\min_{0\le t\le T}\|\psi(x(t))\|^2\le\frac{V(0)-v_*}{p_1T},$$

где
$$V(x,z) = -\langle \psi(x), z\rangle - \frac{p_2}{2p_1}\|z\|^2, \quad v_* = \min_{[x,z]\in B_\varepsilon([\widetilde{x},\mathbb{0}])\bigcap W} V(x,z).$$

Доказательство. Отметим, что V непрерывна на замкнутом, ограниченном множестве $B_\epsilon([\widetilde{x},\mathbb{0}])\bigcap W$, поэтому достигает на нем минимального значения v_*. Для производной функции V в силу системы (4) имеем

$$\dot{V}(x,z) = -\langle \psi'(x)z, z\rangle + \langle \psi(x), p_2 z - p_1\psi(x) + \chi(x,z)\rangle + \frac{p_2}{p_1}\langle z, p_2 z - p_1\psi(x) + \chi(x,z)\rangle.$$

Отсюда с учетом ортогональности $\chi(x,z)$ векторам $\psi(x)$ и z следует

$$0 \le p_1\|\psi(x)\|^2 \le -\dot{V}(x,z).$$

Воспользовавшись теоремой 4, получаем доказываемое утверждение. □

Систему (4) будем решать методом ломаных Эйлера. Выбираем некоторое малое положительное δ — длину шага. Отметим, что для поиска начального приближения $x_0 = x(0)$ можно воспользоваться довольно простыми эвристическими процедурами [6], а $z_0 = z(0)$ принять равным $\mathbb{0}$. Пусть у нас есть x_{k-1}, z_{k-1}, тогда

$$\begin{cases} x_k = x_{k-1} + \delta z_{k-1}, \\ z_k = z_{k-1} + \delta\left(\psi(x_{k-1}) - p_2 z_{k-1} - \chi(x, z_{k-1})\right). \end{cases} \tag{7}$$

Можно модифицировать алгоритм так, чтобы за счет контроля относительной погрешности на итерации обеспечивалась автоматическая регулировка шага [2]. Такой подход позволяет ускорить вычисления. Истинная траектория принадлежит множеству $\operatorname{bd} X$, поэтому вводя специальную процедуру локального проектирования точки x_k на границу множества X, получим «истинное» значение x_k, а с ним и возможность оценить погрешность.

Пусть из x_{k-1}, совершив итерацию по (7), попадаем в точку $\widetilde{x}_{k-1}$. Так как $\widetilde{x}_{k-1}$ при малом δ находится в малой окрестности границы множества X, можем считать, что прямая, проходящая через $\widetilde{x}_{k-1}$ параллельно $\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})$, пересекает поверхность множества X под прямым углом. Поэтому точку этого пересечения будем считать проекцией $\widetilde{x}_{k-1}$ на границу X и именно ее брать в качестве x_k. Таким образом,

$$x_k = \widetilde{x}_{k-1} + \frac{\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})}{\|\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})\|}\xi,$$

где ξ — некий скалярный параметр, определяемый из условия

$$f\left(\widetilde{x}_{k-1} + \frac{\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})}{\|\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})\|}\xi\right) = 0.$$

Разлагая эту функцию в окрестности $\xi = 0$ и учитывая близость $\widetilde{x}_{k-1}$ к границе X, отбрасываем все слагаемые выше первого порядка. Получаем уравнение

$$f(\widetilde{x}_{k-1}) + \left\langle \nabla f(\widetilde{x}_{k-1}), \frac{\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})}{\|\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})\|}\right\rangle \xi = 0.$$

Отсюда следует

$$x_k = \widetilde{x}_{k-1} - \frac{\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})}{\|\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})\|^2} f(\widetilde{x}_{k-1}). \tag{8}$$

Теперь можем описать модифицированный алгоритм, для которого в качестве критерия остановки, как уже обсуждалось, можно взять условие

$$\|\psi(x_k)\| \leq \varepsilon.$$

Выбираем некоторые малые $\delta_0 > 0$, $\varepsilon > 0$, $\varepsilon_2 > \varepsilon_1 > 0$. Принимаем $\delta = \delta_0$. Имея x_0, $z_0 \neq \mathbb{0}$, запускаем вычисления.

1. Строим

$$\widetilde{x}_{k-1} = x_{k-1} + \delta z_{k-1}, \quad x_k = \widetilde{x}_{k-1} - \frac{\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})}{\|\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})\|^2} f(\widetilde{x}_{k-1}).$$

2. Вычисляем

$$\frac{\|x^k - \widetilde{x}^{k-1}\|}{\|\widetilde{x}^{k-1}\|} = \frac{\left\| \frac{\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})}{\|\nabla f(\widetilde{x}_{k-1})\|^2} f(\widetilde{x}_{k-1}) \right\|}{\|\widetilde{x}^{k-1}\|}.$$

   - Если полученное значение меньше ε_1, принимаем $\delta = 2\delta$, возвращаемся к шагу 1.
   - Если полученное значение принадлежит отрезку $[\varepsilon_1, \varepsilon_2]$, переходим к шагу 3.
   - Если полученное значение больше ε_2 принимаем $\delta = \delta/2$, возвращаемся к шагу 1.

3. Строим

$$z_k = z_{k-1} + \delta(p_1\psi(x_{k-1}) - p_2 z_{k-1} - \chi(x_{k-1}, z_{k-1})).$$

4. Проверяем критерий остановки

$$\|\psi(x_k)\| < \varepsilon. \tag{9}$$

   - Если он выполнен, берем в качестве решения x_k, выходим из алгоритма.
   - Если не выполнен, увеличиваем k на единицу и переходим к шагу 1.

Та же идея может быть использована и для нахождения минимального расстояния между двумя множествами. Задача формализуется следующим образом:

$$\begin{cases} \|x - y\| \longrightarrow \inf, \\ x \in X, \\ y \in Y. \end{cases} \tag{10}$$

Здесь $X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \ f_1(x) \leq 0\}$, $Y = \{y \in \mathbb{R}^n \mid \ f_2(y) \leq 0\}$, $f_1, \ f_2 : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — выпуклые, дважды непрерывно дифференцируемые функции, причем $X \bigcap Y = \varnothing$, а $\nabla f_1(x) \neq \mathbb{0}$, $\nabla f_2(y) \neq \mathbb{0}$ при $x \in \operatorname{bd} X$, $y \in \operatorname{bd} Y$ соответственно. Поместим в указанные множества шарики разных зарядов, которые могут двигаться только в пределах соответствующих множеств и только под действием сил Кулона и вязкого трения. Составляем уравнения движения. Получаем непрерывный метод

$$\begin{cases} \dot{x} = z_1, \\ \dot{y} = z_2, \\ \dot{z_1} = p_1\psi_1(x, y) - p_2 z_1 - \chi_1(x, z_1), \\ \dot{z_2} = p_1\psi_2(x, y) - p_2 z_2 - \chi_2(y, z_2), \end{cases} \tag{11}$$

где

$$\psi_1(x,y) = \frac{1}{\|x-y\|^3}\left[y - x + \frac{\langle x-y, \nabla f_1(x)\rangle}{\|\nabla f_1(x)\|^2}\nabla f_1(x)\right],$$

$$\chi_1(x,z_1) = \frac{\langle H_1(x)z_1, z_1\rangle}{\|\nabla f_1(x)\|^2}\nabla f_1(x),$$

$$\psi_2(x,y) = \frac{1}{\|x-y\|^3}\left[x - y + \frac{\langle y-x, \nabla f_2(y)\rangle}{\|\nabla f_2(y)\|^2}\nabla f_2(y)\right],$$

$$\chi_2(y,z_2) = \frac{\langle H_2(y)z_2, z_2\rangle}{\|\nabla f_2(y)\|^2}\nabla f_2(y).$$

Здесь $H_1(x)$, $H_2(y)$ — матрицы вторых производных функций $f_1(x)$, $f_2(y)$ соответственно. Аналогично предыдущему получаем результаты о сходимости и скорости сходимости метода.

Теорема 6. *Пусть задача (10) имеет конечное число стационарных точек, а $[\widetilde{x},\widetilde{y}]$ — одно из ее решений. Тогда найдется такое $\delta > 0$, что для любых $[x_1^0, z_1^0] \in B_\delta\left([\widetilde{x}, \mathbb{0}]\right)\bigcap W_1$, $[y^0, z_2^0] \in B_\delta\left([\widetilde{y}, \mathbb{0}]\right)\bigcap W_2$, где*

$$W_1 = \left\{w \in \mathbb{R}^{2n} \mid w = [x,z],\ x \in \operatorname{bd} X,\ \langle \nabla f_1(x), z\rangle = 0\right\},$$

$$W_2 = \left\{w \in \mathbb{R}^{2n} \mid w = [y,z],\ y \in \operatorname{bd} Y,\ \langle \nabla f_2(y), z\rangle = 0\right\},$$

метод (11) с начальными условиями $[x^0, z_1^0, y^0, z_2^0]$ сходится к $[\widetilde{x}, \mathbb{0}, \widetilde{y}, \mathbb{0}]$.

Пусть выполнены условия теоремы 6, и $[\widetilde{x}, \mathbb{0}, \widetilde{y}, \mathbb{0}]$ — положение равновесия системы (11), соответствующее решению $[\widetilde{x},\widetilde{y}]$ задачи (10). Тогда найдется такое малое $\varepsilon > 0$, что окрестность $B_\varepsilon([\widetilde{x}, \mathbb{0}]) \times B_\varepsilon([\widetilde{y}, \mathbb{0}])$ не содержит других положений равновесия, кроме $[\widetilde{x}, \mathbb{0}, \widetilde{y}, \mathbb{0}]$. По теореме 6 существует $\delta > 0$, для которого при любых начальных точках $[x_1^0, z_1^0] \in B_\delta\left([\widetilde{x}, \mathbb{0}]\right)\bigcap W_1$, $[y^0, z_2^0] \in B_\delta\left([\widetilde{y}, \mathbb{0}]\right)\bigcap W_2$, траектории $[x(t), z_1(t)]$, $[y(t), z_2(t)]$ системы (11) не покидают множества $B_\epsilon([\widetilde{x}, \mathbb{0}])\bigcap W_1$, $B_\epsilon([\widetilde{y}, \mathbb{0}])\bigcap W_2$ и стремятся к $[\widetilde{x}, \mathbb{0}]$, $[\widetilde{y}, \mathbb{0}]$ соответственно.

Теорема 7. *Пусть p_1, p_2 — параметры метода, а матрицы Якоби $\psi_1'(x,y)$, $\psi_2'(x,y)$ удовлетворяют неравенству*

$$\langle \psi_1'(x,y)[z_1,z_2], z_1\rangle + \langle \psi_2'(x,y)[z_1,z_2], z_2\rangle \geq \frac{p_2^2}{p_1}\left(\|z_1\|^2 + \|z_2\|^2\right)$$

для всех $[x, z_1, y, z_2] \in (B_\epsilon([\widetilde{x}, \mathbb{0}])\bigcap W_1)\times(B_\epsilon([\widetilde{y}, \mathbb{0}])\bigcap W_2)$. Тогда при любых начальных условиях $[x^0, z_1^0, y^0, z_2^0] \in (B_\delta([\widetilde{x}, \mathbb{0}])\bigcap W_1) \times (B_\delta([\widetilde{y}, \mathbb{0}])\bigcap W_2)$ для метода (11) будет справедлива оценка

$$\min_{0\leq t\leq T}\left(\|\psi_1(x(t),y(t))\|^2 + \|\psi_2(x(t),y(t))\|^2\right) \leq \frac{V(x^0, z_1^0, y^0, z_2^0) - v_*}{p_1 T},$$

где

$$V(x,z_1,y,z_2) = -\langle \psi_1(x,y), z_1\rangle - \langle \psi_2(x,y), z_2\rangle - \frac{p_2}{2p_1}\left(\|z_1\|^2 + \|z_2\|^2\right),$$

$$v_* = \min_{[x,z_1]\in B_\varepsilon([\widetilde{x},\mathbb{0}])\bigcap W_1;\ [y,z_2]\in B_\varepsilon([\widetilde{y},\mathbb{0}])\bigcap W_2} V(x,z_1,y,z_2).$$

Переходя теперь к разностной схеме решения системы (11), получаем алгоритм

$$\begin{cases} x_{k-1} = x_{k-1} + \delta z_{1,k-1}, \\ y_{k-1} = y_{k-1} + \delta z_{2,k-1}, \\ z_{1,k} = z_{1,k-1} + \delta(p_1\psi_1(x_{k-1}, y_{k-1}) - p_2 z_{1,k-1} - \chi_1(x, z_{1,k-1})), \\ z_{2,k} = z_{2,k-1} + \delta(p_1\psi_2(x_{k-1}, y_{k-1}) - p_2 z_{2,k-1} - \chi_2(y, z_{2,k-1})), \end{cases} \tag{12}$$

где p_1, p_2, δ — некоторые положительные числа (параметры метода).

В качестве критерия остановки можно использовать условие

$$\|\psi_1(x_k, y_k)\|^2 + \|\psi_2(x_k, y_k)\|^2 \le \varepsilon, \tag{13}$$

где $\varepsilon > 0$ — малое положительное число. Это условие основано на том, что касательные составляющие сил Кулона в положении равновесия должны равняться нулю.

Электромагнитное взаимодействие в методе заряженных шариков, как и гравитационное в методе тяжелого шарика, подчиняются одному из важнейших экстремальных принципов в физике — принципу наименьшего действия. Это дает основания полагать, что построенные с их использованием алгоритмы будут обладать некоторыми свойствами оптимальности.

Построенные выше алгоритмы сравнивались на большом количестве задач с другими методами, как специально разработанными для решения рассматриваемых задач [7], так и общими, основанными на идеях точных штрафов [8]. Во всех случаях при заданной точности предлагаемые алгоритмы приводили к решению быстрее конкурентов. В настоящее время готовится отдельная подробная работа по такому сравнительному анализу.

3. Примеры. Найдем ортогональную проекцию нуля на эллипсоид

$$\langle A(x-c), (x-c)\rangle - 1 = 0,$$

где

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & -2 \\ 0 & -2 & 5 \end{pmatrix}, \quad c = \begin{pmatrix} 11 \\ -9 \\ 13 \end{pmatrix}.$$

В таблице 1 приведены результаты расчетов по методу заряженных шариков с автоматической регулировкой шага в математическом пакете MATLAB. Здесь p_1, p_2 — параметры метода, k — количество итераций, $\|x - x_*\|$ — расстояние до истинного решения, t — время расчетов в секундах. Расчеты велись до выполнения критерия остановки (9) при $\varepsilon = 10^{-6}$ и при значениях $\varepsilon_1 = 10^{-8}$, $\varepsilon_2 = 10^{-2}$, $\delta_0 = 1$. Начальная точка была найдена как точка пересечения эллипсоида с отрезком, соединяющим начало координат и центр эллипсоида c.

Таблица 1. **Результаты расчетов**

p_1	p_2	k	$\|x - x_*\|$	t
100	1	227	$6.6 \cdot 10^{-5}$	0.01
100	2	30	$17.2 \cdot 10^{-5}$	0.002
400	2	27	$5.7 \cdot 10^{-5}$	0.002

Теперь найдем с помощью алгоритма (12) минимальное расстояние между двумя эллипсами $\langle A_1x, x\rangle + \langle b_1, x\rangle + c_1 = 0$, $\langle A_2y, y\rangle + \langle b_2, y\rangle + c_2 = 0$, где

$$A_1 = \begin{pmatrix} 4 & 5/2 \\ 5/2 & 2 \end{pmatrix}, \; b_1 = \begin{pmatrix} -30 \\ -21 \end{pmatrix}, \; c_1 = 47, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}, \; b_2 = \begin{pmatrix} -20 \\ -48 \end{pmatrix}, \; c_2 = 220.$$

Будем использовать критерий остановки (13), пологая $\varepsilon = 10^{-8}$. В качестве начальных точек возьмем точки пересечения соответствующих эллипсов с отрезком, соединяющим центры эллипсов. В таблице 2 приведены результаты расчетов в математическом пакете MATLAB. Здесь p_1, p_2 — параметры метода, δ — шаг метода, k — количество итераций, $\|x-x_*\|$, $\|y-y_*\|$ — расстояния до истинного решения, t — время расчетов в секундах.

Таблица 2. **Результаты расчетов**

p_1	p_2	δ	k	$\|x - x_*\|$	$\|y - y_*\|$	t
10	10	0.1	2077	$3.3 \cdot 10^{-3}$	$2.1 \cdot 10^{-3}$	0.085
10	5	0.1	1032	$4.6 \cdot 10^{-3}$	$5.6 \cdot 10^{-3}$	0.043
10	5	0.2	515	$4.2 \cdot 10^{-3}$	$4.2 \cdot 10^{-3}$	0.023
10	1	0.2	80	$6.73 \cdot 10^{-2}$	$18.03 \cdot 10^{-2}$	0.006

Благодарность. Автор выражает глубокую признательность доктору физико-математических наук, профессору В. Н. Малоземову, доктору технических наук, профессору Б. Т. Поляку за поддержку данной работы, а также за полезные обсуждения и ценные замечания, позволившие ее улучшить.

Литература

1. *Diener I.* Trajectory Methods in Global Optimization. In: Handbook of Global Optimization. Vol. 2. In Ser. Nonconvex Optimization and Its Applications, 1995. P. 649–668.

2. *Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М.* Численные методы. М.: Наука, 1987. 600 с.

3. *Аббасов М. Э.* Метод заряженных шариков // Труды семинара по конструктивному негладкому анализу и недифференцируемой оптимизации «CNSA & NDO». 2015. URL: http://www.apmath.spbu.ru/cnsa/pdf/2015/Charged_balls.pdf (дата обращения: 28.04.2017).

4. *Барбашин Е. А.* Введение в теорию устойчивости. М.: Наука, 1967. 223 с.

5. *Polyak B. T., Shcherbakov P. S.* Optimization and Asymptotic Stability // International Journal of Control. 2016. DOI: 10.1080/00207179.2016.1257154.

6. *Аббасов М. Э.* Эвристические вероятностные алгоритмы ортогонального проектирования точки на множество // Труды семинара по конструктивному негладкому анализу и недифференцируемой оптимизации «CNSA & NDO». 2015. URL: http://www.apmath.spbu.ru/cnsa/pdf/2015/heuristic_algorithms.pdf (дата обращения: 28.04.2017).

7. *Lin A., Han S. P.* On the distance between two ellipsoids // SIAM J. Optim. 2002. Vol. 13. P. 298–308.

8. *Тамасян Г. Ш., Чумаков А. А.* Нахождение расстояния между эллипсоидами // Дискретн. анализ и исслед. опер. 2014. Т. 21, № 3. С. 87–102.

Статья поступила в редакцию 19 февраля 2017 г.; рекомендована в печать 30 марта 2017 г.

Сведения об авторе

Аббасов Меджид Эльхан оглы — кандидат физико-математических наук, доцент; m.abbasov@spbu.ru

CHARGED BALLS METHOD FOR SOLVING SOME COMPUTATIONAL GEOMETRY PROBLEMS

Majid E. Abbasov

St. Petersburg State University, Universitetskaya nab., 7–9, St. Petersburg, 199034, Russian Federation; m.abbasov@spbu.ru

The concept of replacing the original stationary optimization problem with a nonstationary mechanical system that tends to the position of equilibrium, which coincides with the solution of the initial problem, allows us to build effective numerical algorithms. First, differential equations of movement should be derived. After that we can get to the difference scheme and thus define iterative computational algorithm.

There is a wide class of optimization methods built that way. One of the most known representatives of this class is heavy ball method. Such type of algorithms always have parameters which highly affect the rate of convergence.

In this paper we propose and investigate charged balls method which is the other representative of this class. It is a new effective optimization method, that allows to solve some computational geometry problems. We consider the problem of orthogonal projection of a point onto a convex closed set with smooth boundary, and the problem of finding the minimum distance between two such sets. Theorems of convergence and estimates for the rate of convergence are obtained. Numerical examples illustrating the work of the proposed algorithms are given. Refs 8. Tables 2.

Keywords: convex optimization, computational geometry, minimal distance, charged balls method.

References

1. Diener I., *Trajectory Methods in Global Optimization*, in Ser. *Nonconvex Optimization and Its Applications* (1995, **2**, *Handbook of Global Optimization*, 649–668).

2. Bahvalov N. S., Zhidkov N. P., Kobelkov G. M., *Numerical methods* (Nauka, Moscow, 1987, 600 p.) [in Russian].

3. Abbasov M. E., "Charged balls method", *Proceeding of seminar on Constructive Nonsmooth Analysis and Nondifferentiable Optimization "CNSA & NDO"* (2015) [in Russian]. Available at http://www.apmath.spbu.ru/cnsa/pdf/2015/Charged_balls.pdf (accessed 28.04.2017).

4. Barbashin E. A., *Introduction to the theory of stability* (Wolters-Noordhoff, 1970, 223 p.).

5. Polyak B. T., Shcherbakov P. S., "Optimization and Asymptotic Stability", *International Journal of Control* (2016) DOI: 10.1080/00207179.2016.1257154.

6. Abbasov M. E., "Эвристические вероятностные алгоритмы ортогонального проектирования точки на множество", *Proceeding of seminar on Constructive Nonsmooth Analysis and Nondifferentiable Optimization "CNSA & NDO"* (2015) [in Russian]. Available at http://www.apmath.spbu.ru/cnsa/pdf/2015/heuristic_algorithms.pdf (accessed 28.04.2017).

7. Lin A., Han S. P., "On the distance between two ellipsoids", *SIAM J. Optim.* **13**, 298–308 (2002).

8. Tamasyan G. Sh., Chumakov A. A., "Finding the distance between the ellipsoids", *Discrete Analysis and Operations Research* **21**(3), 87–102 (2014).

Для цитирования: Аббасов М. Э. Метод заряженных шариков для решения некоторых задач вычислительной геометрии // Вестник СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия. 2017. Т. 4 (62). Вып. 3. С. 359–369. DOI: 10.21638/11701/spbu01.2017.301

For citation: Abbasov M. E. Charged balls method for solving some computational geometry problems. *Vestnik SPbSU. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2017, vol. 4 (62), issue 3, pp. 359–369. DOI: 10.21638/11701/spbu01.2017.301