# 球隙迁移算法实现全局优化

胡劲松 郑启伦
（华南理工大学计算机科学与工程学院 广州 510006）

**摘 要** 给出一种新的优化算法：球隙迁移法. 该方法不是已有方法的融合或改进，它利用搜索过程中积累的极小点分布信息形成球隙，以此启发、指导后来的搜索区域，不但逃离了当前局部极小，还能有效地避免重复历史上的多个局部极小. 目前的智能算法中，勘探和开采行为相耦合，球隙法实现了勘探与开采的分离，避免了相互干扰，减小了代价，对变量耦合对象的优化效果好. 文中证明了球隙法能在有限计算次数内确定地找到连续函数的全局最优.

**关键词** 优化；全局极小；局部极小；连续函数
**中图法分类号** TP301 **DOI号**：10.3724/SP.J.1016.2012.00193

# Sphere-Gap Transferring Algorithm to Realize Global Optimization

HU Jin-Song ZHENG Qi-Lun
(*School of Computer Science and Engineering, South China University of Technology, Guangzhou* 510006)

**Abstract** This paper presents a new optimization algorithm called sphere-gap transferring algorithm. The algorithm, which is not made by improving or combining existing methods, uses the collected information of the distribution of the minima found by searching to construct sphere-gaps to illumine and guide later searching range. The sphere-gap transferring algorithm can not only escape the current local minimum but also avoid the found local minima. In current intelligent algorithms, exploration couples exploitation. The sphere-gap transferring algorithm separates exploration from exploitation to avoid interference and to reduce cost. The algorithm is good at coupling objects. This paper proves that the sphere-gap transferring algorithm can determinately find the globally optimal solution of a continuous function in the limited number of computation.

**Keywords** optimization; global minimum; local minimum; continuous function

## 1 引 言

优化问题涉及几乎所有的领域. 一方面有新算法提出，比较新的有量子退火、蚂蚁（蚁群）算法、匀场致退火、微粒（粒子）群、差（微）分进化（DE）、文化算法（Cultural Algorithms）、协同、免疫克隆算法等，另一方面绝大部分工作集中在对已有算法进行改进和融合，如吸引与排除粒子群算法（arPSO）[1]、多编码GA[2]等. 国内学者在这方面的研究也相当活跃，如填充函数法、拟人退火[3]、混合差分[4]、单亲遗传算法、人工鱼群算法等.

以上各种优化算法（包括其改进型），各有优点，且有不少成功的应用，但优化算法的最重要指标——全局能力，仍然有待提高. 目前的算法在实际运行中都难以避免地、时不时地陷入局部极值，这是

收稿日期：2011-03-11；最终修改稿收到日期：2011-07-28. 本课题得到国家自然科学基金（60574078）、广东省自然科学基金（31454）、广州市科技计划应用基础项目（2006J1-C0321）资助. **胡劲松**，男，1969年生，博士，副教授，主要研究方向为智能优化算法及应用. E-mail：cshjs@scut.edu.cn. **郑启伦**，男，1938年生，教授，博士生导师，主要研究领域为计算智能和优化算法.

多年来学者们一直试图解决的最大难题；其次，目前的优化算法只考虑了克服当前局部极小，而缺乏有效的机制防止重复或再次陷入已经发现的多个局部极小.

### 1.1 优化机制导致的矛盾

优化搜索过程可以看作一个或多个搜索者在一个有众多山峰山谷的区域，搜寻最低的谷底（山谷的最低点）. 克服局部极小的过程就是搜索者试图从一个山谷中爬出来，去寻找下一个山谷的谷底. 对模拟退火而言，当搜索者进入一个山谷的范围，每走一步他都有两种选择：他可以向下走——这种行为称为“开采”（exploitation），可以找到该山谷的谷底，即发现局部极小（包括全局极小）；他也可以向上爬——这种行为称为“勘探”（exploration），可以使得他爬出这个山谷，去搜索其它山谷，这个过程称为克服局部极小. 在模拟退火中，勘探和开采是交织在一起的：即从当前状态到下一状态时，既可以选一个好解（开采），也可以选一个劣化解（勘探）. 于是带来了一系列矛盾：

(1) 按退火概率机制，搜索者连续向上或向下的概率是极小的，他向上爬一步，向下退几步，很多时候相互抵消，白白增加代价.

(2) 如果加强开采，他一直下降到谷底，一般从山谷底部爬出来的概率是很小的，尤其是范围较大、底部较平的山谷，于是陷入该局部极小.

(3) 如果加强勘探，他可能搜索到某山谷的上部就转而爬出该山谷了，由于他没到过该山谷的谷底，因此不清楚谷底的具体深度，而该谷底有可能就是全局最小，就因此而错失，即所谓“浅尝辄止”. 勘探虽然使得搜索逃离了局部极小，却也可能导致错失全局极小. 克服某个或某些局部极小并不意味着一定能得到全局极小.

(4) 设搜索者已搜索过 $A$、$B$ 两个山谷并到达了 $C$ 山谷，搜索完 $C$ 后，他从 $C$ 爬出，有可能又进入到 $A$ 或 $B$ 山谷重新搜索，显然这是不必要的浪费，还导致重陷局部极小，因此不但要能逃离当前局部极小 $C$，还要能有效地避免重复历史上的多个局部极小 $A$、$B$.

目前的启发式算法克服局部极小的机理本质上都是按某种概率接受“劣化”解，如遗传算法以轮盘选择后代，蚁群算法按信息素概率选择路径，这点和模拟退火的勘探行为相似，勘探和开采也是交织在一起的，同样存在以上的矛盾和问题[5]. 勘探和开采的矛盾一直是研究热点[6]，主要方法是调整参数[5]，但这不能从根本上解决问题，因为实际问题是复杂多样的，参数也是多样的；其次要增加克服局部极小的成功率，就得加大接受差解的概率，导致代价剧增. 调整参数的结果往往顾此失彼. 例如将模拟退火的初始温度设高一些，退火系数小一些，全局能力就强，但是代价也增大. 将遗传算法的群体规模设大些，也同样如此. 在仿真实验中，如果某次找不到全局极值，下次加大群体规模，或延长迭代次数，一般会有所改进，或者采用随机重启策略. 通常是这样反复实验，选取不同的参数，直到在某个“最佳参数”下以较小的代价获得全局极值. 但对实际优化工程而言，每一次实验都要花费金钱、时间，因此衡量算法的代价应该是在各种参数情况下的、全部实验次数的代价总和，而不仅仅只在最佳参数下统计.

### 1.2 全局性证明的局限性

遗传算法（包括各种混合和变种）研究时间相对较长，成功应用的例子多，相关的收敛性理论研究也更深入. 徐宗本等人[7]指出 Eiben 所给出的收敛性结果只适用于满足特定条件，且不易找出具体所对应的参数化函数描述，所得结果也很难直接用于实际. 连续变量 GA（实数编码）的全局性更复杂，文献[8]在群体无限大的假设下，讨论了分别单独使用交叉和变异算子时的收敛性，文献[7]认为其证明强加了许多不自然的假设. 林丹、李敏强等人[9]给出了特殊条件下群体充分大且迭代次数趋向于无限时的收敛性判断法则. 当种群规模趋于无穷时，用于分析连续优化问题的框架与方法均不完善，存在着这样或那样的限制与不足，目前还没有一个好的方法可用于准确描述连续的动态行为，并在不强加任何严格的或人为的条件下给出相关的收敛性结果[7].

Gutjahr[10]基于图建立了蚁群算法解决组合优化问题的一般框架，在特定的条件下——选择充分大的蚂蚁数量或足够小的信息素挥发系数来获得任意小的值，证明了基于图的蚁群算法（GBAS）可以保证接近于 1 的概率收敛于给定问题的最优解；Stutzle 和 Dorigo[11]证明了当迭代次数趋向于无穷时，针对一类蚁群算法，可以保证找到全局最优解；文献[10-13]对不同的蚁群算法进行了收敛性分析，朱庆保[14]认为以上证明都不同程度地存在一定的局限性，有较多的条件约束.

Van den Bergh[15]对基本微粒群（PSO）算法和保证收敛的 PSO 算法（GCPSO）进行了研究，指出基本 PSO 算法不能保证全局或局部收敛，而 GCPSO 则属于局部收敛. 目前对粒子群算法收敛性的证明

都仅局限于证明算法是收敛的,还没有证明纯粹的粒子群算法能收敛到最优解[16].

总之,目前关于智能优化算法的全局性证明绝大多数建立在运算时间(次数)无限长的前提之上,多数证明都强加了一些不自然的约束条件,如群体无限大、已接近最优等,尤其对解空间无限的连续优化问题,鲜有关于有限步的全局收敛证明(不强加特殊条件).大量的实验和应用表明目前的优化算法在运行中不时陷入局部极值.

本文给出一种新的优化方法.它不但能逃离当前局部极小,还能有效地回避历史上已经发现的多个局部极小.同时,由于实现了勘探与开采的分离,它减小了代价,提高了成功率.本文证明了它能在有限计算次数内确定地找到连续函数的全局最优.

## 2 球隙迁移原理

**定义 1.** 界内间断点:函数 $f(x)$在点 $e$ 有定义,左极限 $\lim\limits_{x\to e-0} f(x)$与右极限 $\lim\limits_{x\to e+0} f(x)$均存在但不相等,且$f(e)$介于左右极限之间,即满足 $\lim\limits_{x\to e-0} f(x)\geq f(e)\geq \lim\limits_{x\to e+0} f(x)$ 或者 $\lim\limits_{x\to e+0} f(x)\geq f(e)\geq \lim\limits_{x\to e-0} f(x)$,则称 $e$ 为函数 $f(x)$的界内间断点.多元函数依此类推.

本文目标:非随机的连续变量优化问题(随机性问题与随机型算法是不同的概念),数学描述如下:

$n$ 维连续变量 $\boldsymbol{X}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)\in\Omega$,函数 $y=f(\boldsymbol{X})$在闭区域 $\Omega$ 内除界内间断点外无其它类型的间断点,$f$ 的数学表达式未知,求 $f$ 的最小值.

本文不要求目标函数可导,不要求全域连续,非随机的连续或分段连续函数均满足以上要求.文献[17]附录中的 18 个测试函数中 16 个是该类型(另有 2 个随机型),应该说实际应用中的非离散优化问题绝大多数是这类问题.

**定义 2.** 孤立极小点:设函数 $f$ 在点 $A$ 的邻域 $\delta$ 有唯一极小值 $f(A)$,称该邻域为 $A$ 的极值域.

**定义 3.** 从极值域 $\delta$ 中一点 $B$ 出发,做贪心搜索,轨迹必趋向极点 $A$.称 $B$-$A$ 为起-极对.

我们可以把局部极小点 $A$ 看做一个吸引子,极值域 $\delta$ 是吸引子 $A$ 的吸引域.克服局部极小的目的在于获取新的局部极值,所以其实质就是:使得搜索得到极小点 $A$ 之后,再摆脱它.其难点在于:当勘探和开采交织在一起时(见上节),任何试图取得好解(比当前解好)的行为都将被吸引子吸引住,从而难以摆脱.我们的想法是首先将勘探与开采分为 2 个相互独立的过程,从而避免了相互影响,之后分而治之.

**定义 4.** 球隙:设 $n$ 维空间中有 $k$ 个点围成的一个唯一确定的超球$G$,这 $k$ 个点都在球面上,则称球 $G$ 为一个球型的空隙(空心球),简称球隙.如图 1 中,点 5、6、7 围成球隙 3.

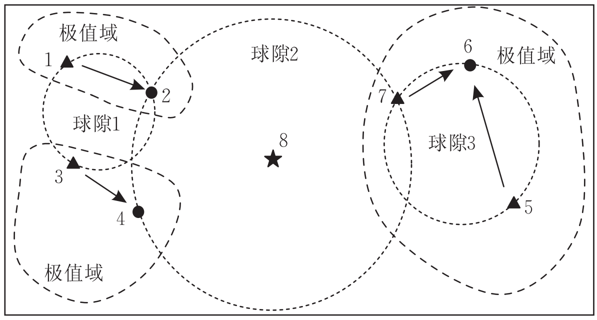



图 1 球隙、极值域示意图

图 1 中小圆点 2、4、6 表示局部极小点,每个极小点有一个包围其的极值域,即图中的不规则的虚线框.图中用虚点线画出了 3 个圆,即球隙.图中点 1 至 2 的箭头表示从点 1 出发做贪心搜索,找到极小点 2,因贪心法无法摆脱局部极小,我们设想以某种方式(见下文)将搜索从 2 直接转移到点 3,从 3 进行局部搜索,发现极小点 4.图中三角形状的点 1、3、5、7 称为"转移点".因为从点 5 已经找到点 6,所以转移到点 7 再到 6 是重复搜索,如果一直在点 6 的极值域搜索下去,将是不断重复,于是陷入局部极小点 6.

我们的想法是在找到点 6 后将搜索转移到 6 的极值域之外,于是自然摆脱了局部极小,同时不应转移到"老"极小点 2、4 的极值域,那样又是重复(即上节的多局部极小),而应该转移到一个新的极值域进行贪心搜索,发现新的极值,如此不断转移,不断找到新极值,当所有极值都发现了,从中取最好则为全局极值.我们给出以下启发式策略以形成新转移点.

**启发式策略 1.** 离已找到的极小点越远,越不容易落入其极值域.

**启发式策略 2.** 离已使用过的转移点越远,越不容易落入老极值域,老转移点表明该区域已被开采过.

这种"远离"策略无需知道极值域范围.因为存在多个点,不能远离一个却接近另一个,所以各点相互牵制,其次还有边界的限制.注意到球隙的中心恰

符合以上要求.图 1 中绘出了 3 个球隙(实际不止 3 个),一般情况下选最大球隙的中心为佳,即以球隙 2 中心的星型点 8 为下一个转移点,从该点出发搜索未知的新极小点,之后由于点 8 和新极小点的加入,当前最大球隙 2 分裂成若干小球隙,刷新球隙的大小排序,下一次搜索将迁移到其它较大球隙,称之为球隙迁移法.

起-极对(定义 3)之间的区域存在其它极小点的概率较小(见下节定理 17).注意到点 6、7 和点 5 都是起-极对,所以球隙 3 虽然大于球隙 1,但从其发现新极点的概率一般不大.

**启发式策略 3.** 如果形成球隙 $G$ 的点都是起-极对,则 $G$ 的大小应当减半考虑.

球隙迁移法包括贪心搜索和球隙转移两个过程.贪心搜索为单一的开采,球隙转移为纯粹的勘探,互不干扰,不但减少了代价,而且提高了克服局部极小的能力,其次,球隙转移能减少多局部极小的重复.

## 3 球隙迁移法的全局性证明

从整个优化过程来看,球隙迁移法可以一直迁移,而不会只收敛于一点,这和多数智能算法都不同,然而它却能在有限次内发现全局解,下面证明.

**定理 1.** $n$ 维空间中的 $n+1$ 个线性无关的点能确定一个唯一的球隙.

证明. 设 $n$ 维空间有 $n+1$ 个点,所有点坐标已知.令其中第 $k$ 个点 $P(k)$ 的第 $i$ 坐标分量为 $p_i(k)$,于是可写出该点所在的 $n$ 维超球面方程:

$$(p_1(k)-r_1)^2+\cdots+(p_n(k)-r_n)^2=R^2 \tag{1}$$

其中 $r_i$ 为球心的第 $i$ 坐标分量,$R$ 为球的半径,均为待求的球参数,注意到其中共 $n+1$ 个参数待定.将 $n+1$ 个点分别代入方程 1 得到一个方程组:

$$\begin{cases}(p_1(1)-r_1)^2+\cdots+(p_n(1)-r_n)^2=R^2\\ \qquad\vdots\\ (p_1(n+1)-r_1)^2+\cdots+(p_n(n+1)-r_n)^2=R^2\end{cases}.$$

以方程组中的第 $i$ 个方程减去第 $i+1$ 个方程有

$$2(p_1(i)-p_1(i+1))\cdot r_1+\cdots+2(p_n(i)-p_n(i+1))\cdot r_n=p_1(i)^2-p_1(i+1)^2+\cdots+p_n(i)^2-p_n(i+1)^2.$$

由以上方式共可得到 $n$ 个关于 $r_1\sim r_n$ 的一次线性方程.如果这 $n$ 个方程线性无关,则能得到唯一的一组 $r_1\sim r_n$,将它们代入第 $n+1$ 个方程,因 $R$ 为正数,得到唯一的 $R$. 证毕.

当 $k<n+1$ 点,也可和边界组成球隙,即由 $k$ 个点构成、球心不超出边界的最大球.

**定义 5.** $n$ 维欧氏空间的广义体积为

$$\int\cdots\int\overset{n}{\underset{\Omega}{\cdots}}\int dx_1dx_2\cdots dx_n,$$

其中 $\Omega$ 为闭区域.显然闭区域的广义体积是有限的.

**定理 2.** 闭区域 $\Omega$ 内的孤立极小点的个数是有限的.

证明. 设 $\Omega$ 内任意孤立极小点 $A$ 的极值域 $\delta$ 的广义体积为 $V_A$,$V_A$ 不能为无穷小.设 $\Omega$ 的广义体积为 $V_\Omega$,$V_\Omega$ 不能为无穷大,所以 $V_\Omega/V_A$ 为有限数,即只能包含有限个 $\delta$,又因为所有极值域相互不包含且都在 $\Omega$ 内,所以孤立极小点的个数是有限的. 证毕.

**引理 1.** 如果将连续相等的非孤立极小点看做一个,则定理 2 对所有极小点都成立.

**定理 3.** $\forall B\in\delta$ 且 $B\neq$ 极小点 $A$,则过点 $B$ 的等高线的切线夹角 $\alpha$ 不为无穷小.如图 2.

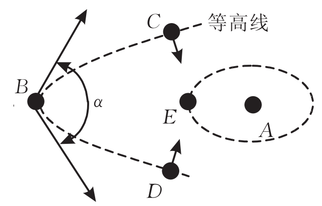



图 2 $\alpha$ 不为无穷小

证明. 反证法.设 $\alpha$ 为无穷小,则等高线变成图 3 所示,点 $C$、$D$、$E$ 合为一点,注意到图 2 中等高线右侧为下降方向 $f(C)=f(D)>f(E)$.则图 3 中,$\lim\limits_{C\to E}f(X)=f(C)=\lim\limits_{D\to E}f(X)=f(D)>f(E)$,即在 $E$ 点不连续.如 $\delta$ 为连续区域,则假设不成立.若 $\delta$ 内有间断点 $E$,由上述极限式知 $E$ 不是界内间断点,与目标函数的条件矛盾,假设也不成立.证毕.

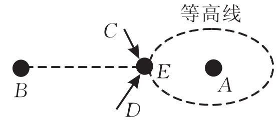



图 3 $\alpha$ 为无穷小

上述结论可以推广到 $n$ 维.

**定理 4.** 从极值域 $\delta$ 内任意一点 $B$ 出发,通过均匀分割角度,贪心法能在有限步数内以给定精度逼近极小点 $A$.

证明.

(1) 在图 4 中,贪心法欲从 $B$ 点寻找下降方向.它先在图 4 中的 4 个相互垂直的实箭头方向做探测,均失败,之后对角度进行 45°均分,沿着 4 个虚箭头进行探测,在正右方成功获得下降方向.称这种探

测为均匀分割角度. 由定理 3，$\alpha$ 不为无穷小，因此通过不断对角度均匀划分，总能通过有限次试探找到下降方向.

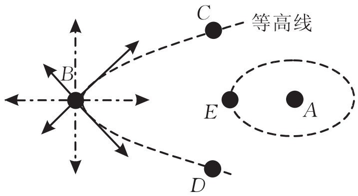



图 4　均匀分割角度

(2) 设第 $i$ 次成功搜索后函数值下降 $\Delta f_i$，有 $\min\{\Delta f_1,\cdots,\Delta f_i,\cdots,\Delta f_k\}>\varepsilon$，$\varepsilon$ 为某个小正数，$k$ 为到达指定精度的步数，$k\le(f(B)-f(A))/\min\{\Delta f_1,\cdots,\Delta f_i,\cdots,\Delta f_k\}<\infty$，即 $k$ 为有限值.

综合(1)、(2)，该贪心法能在有限步数内以给定精度接近极小点 $A$.　　证毕.

上述贪心法是“笨办法”，仅用于证明. Rosenbrock 法能沿着“狭窄”山谷快速前进[18].

**定义 6.**　如孤立极小点 $A$ 不在定义域 $\Omega$ 的边界上，从 $A$ 到极值域 $\delta$ 边界的最小距离称为极值域半径. 如 $A$ 在 $\Omega$ 的边界上，则 $\delta$ 的边界和 $\Omega$ 的边界有部分重合，极值域半径改为从 $A$ 到 $\delta$ 的不重合边界的最小距离. 对非孤立极小点为从 $\delta$ 边界到任意一处极小的最小距离.

**定理 5.**　极值域半径不为无穷小.

由 $f$ 的性质和极小点的定义可证.

**定理 6.**　如转移点 $B$ 到极小点 $A$ 的距离小于其极值域半径，则贪心法可在有限步数找到 $A$.

证明.　由已知条件和定义 6 可知 $B\in\delta$，根据定理 4，即证.

**定理 7.**　如 $f$ 在极小点 $A$ 处二阶连续可微，则在 $A$ 附近 $f$ 可近似为半正定二次型函数.

证明.　由已知得 $\nabla f(A)=0$，$\nabla^2 f(A)$ 半正定[18]，其泰勒展开式

$$f(X)=f(A)+\nabla^T f(A)(X-A)+0.5(X-A)^T\nabla^2 f(A)(X-A)+\circ(\|X-A\|^2).$$

证毕.

**定理 8.**　如果对一个二次函数依次沿着一组 $n$ 个线性无关的、共轭的方向极小化，则其极小将在 $n$ 步或 $n$ 步以前到达，且与初始点无关，称之为二次收敛性[18].

**定理 9.**　Powell 法具有二次收敛性[18].

定理 8 和 9 告诉我们，在局部极小点附近用 Powell 法能快速精确地找到局部极值. 可以将 Powell 与 Rosenbrock 相结合，Rosenbrock 法可以用来做粗搜索.

**定理 10.**　$\Omega$ 内的任意未发现的极小点必包含在现有的某一个球隙中.

证明.　所谓现有球隙是指：已找到的极小点和已有的转移点及边界所形成的全部球隙. 设图 5 中 $X$ 为某个未发现的极小点，点 1、2、3 为已有极小点或转移点. 点 1 为离 $X$ 最近的已有点. 以 1 指向 $X$ 的射线(箭头)方向扩展圆 1，即圆心在该射线上向箭头方向运动，且保持点 1 在圆上. 当圆 1 遇到点 2 时停止扩展. 以点 2 和点 1 的中垂线向 $X$ 一侧(箭头)扩展圆 2，遇到点 3 停止，即得到包含 $X$ 的球隙，如点 3 不存在，则一直扩展到圆心不超出边界. 以上为 2 维，上述过程可以扩展到高维，只要保证圆心所在的射线过几何垂心，向 $X$ 一侧扩展，且垂直于已扩展的各点所在的面. 对于 3 维，以过点 1，2，3 形成的三角形的垂心且垂直于该三角形所在平面，向 $X$ 一侧扩展. 上述扩展总是可以包含 $X$.　　证毕.

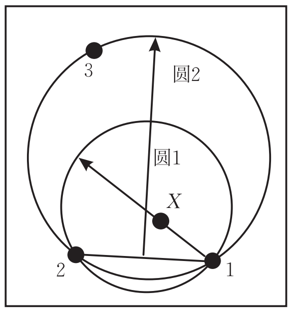



图 5　球的扩展

补充：虽然 $X$ 是未知的，但该证明并非是构造包含 $X$ 的球隙，而是证明存在一个球隙. 定理 10 说明在已有点形成的球隙内进行搜索就能不断找到新极小点，且不会遗漏任何极小点.

**定理 11.**　球隙内接多边形(体)相互不穿越. 内接多边形由同一球隙上已有点连线构成.

证明.　反证法. 假设图 6 中球隙 4 的内接三角(多边)形被球隙 5 的内接三角(多边)形的一条边穿

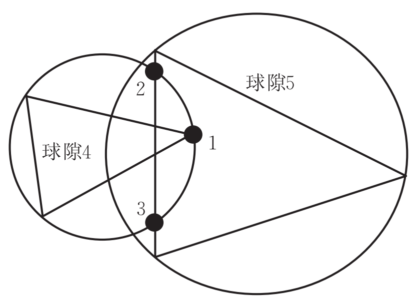



图 6　多边形(体)相互不穿越

越⇒球隙 4 上过点 2、1、3 的弧段被球隙 5 包含⇒点 1 必在球隙 5 中⇒与球隙的定义矛盾，因为点 1 为球隙构成点(点 2、3 不是)，它不应在任何一个球隙内部⇒假设不成立. 上述证明可以推广到 $n$ 维空间.

证毕.

**定理 12.** 定义域 $\Omega$ 内的球隙数量有限.

证明. 球隙的内接多边形的广义体积不为无穷小，且相互不穿越，因此数量有限. 证毕.

**定理 13.** 球隙迁移法能在有限步数内发现函数 $f$ 的全局极小. 调用一次评估函数为一步.

证明. 设当前由 $k$ 个转移点用 $k$ 次贪心搜索发现了 $m$ 个局部极小点($k\geq m$，因有重复)，假设全局极小并不包含其中，并设全局极小的极值域半径为 $\eta$. 将这 $k+m$ 个已有点形成的球隙按大小排序：$G_1, G_2, \cdots$，以当前最大球隙 $G_1$ 的球心为新转移点进行贪心搜索，找到一个极小点(新的或重复老的)，所以至少有一个新点加入，该最大球隙被破坏，相关邻近点重组为若干小球隙，如此不断进行，当前最大球隙不断减小，根据定理 12 和 2，必可以使用有限次贪心搜索将当前最大球隙减小到 $\eta$. 由定理 10 和 6，必在这之前发现全局极小. 根据定理 4，每次贪心搜索的步数有限，因此总的步数为有限值. 证毕.

**定理 14.** 采用启发策略 3，算法仍可以有限步发现全局极值.

证明. 设当前球隙序列由大到小排列：$G_1$，$G_2, \cdots, G_i, \cdots$. 设形成球隙 $G_1$ 的点是起-极对，按启发策略 3，$G_1$ 的大小应减半计算，于是重新排列球隙序列：$G_2, \cdots, G_i, G_1, \cdots$. 当 $G_2, \cdots, G_i$ 被分裂减小之后，必轮到 $G_1$，所以即使按照重新排列的序列，通过分裂总可以使得序列的最大球隙小于 $\delta$. 证毕.

**定理 15.** 某次贪心搜索中途退出，算法仍可以有限步发现全局极值.

证明. 贪心搜索从点 $B$ 出发，但中途因为某种原因在点 $C$ 退出，未能达到极小点 $A$. 设距离 $|CA|=\gamma<\eta$，则可将极值域半径视为 $\gamma$. 通过球隙序列不断减小，可使得当前最大球隙$<\gamma$，根据定理 6，必可发现 $A$. 因 $A$ 为任意极小点，所以算法仍可以有限步发现全局极值. 证毕.

实际应用中，计算机步长有限，考虑到代价，不可能将精度每次都设为最小，其次曲面的某处特别平坦，可能导致搜索提前退出，由上述定理保证了不会遗漏全局极小，同时启示我们先以低精度搜索，以节省代价.

**定理 16.** 对于二阶连续可微函数 $f$，在其任意极小点 $A$ 的极值域 $\delta$ 内必存在一个凸集 $S$，$f$ 为 $S$ 上的凸函数.

证明. 由已知得 $\nabla f(A)=0$，$\nabla^2 f(A)$ 半正定[18]⇒当 $\forall X\in S\subseteq\delta$，$f$ 为 $S$ 上的凸函数[18].

**定理 17.** $f$ 为 $S$ 上的凸函数，如转移点 $B\in S$，则 $B$ 与 $A$ 之间连线上不存在其它极小点.

证明. 因为 $S$ 为凸集，所以 $S$ 内任意两点的连线必在 $S$ 内.

因为 $A\in S$，$B\in S$，所以 $A$ 与 $B$ 连线落在 $S$ 内.

因为 $A$ 为 $S$ 内唯一的极小点，所以 $A$ 与 $B$ 连线上的其它点必不为极小点. 证毕.

定理 17 是启发策略 3 的理论依据.

注意到大多数情况下，自然界的山越高，山脚的范围越大；湖越深，湖面越广. 对于函数，初始值相同，下降梯度相同的情况下，极小值越小，“坑口”越大，于是有以下策略.

**启发式策略 4.** 大多数情况下，极小点的值越小，其极值域半径越大.

由该策略和定理 6，全局极小点及其附近极小点更有可能先被发现.

## 4 算法实现

第 2 节已给出球隙法的基本步骤，其关键是如何刷新球隙序列以求得下一个转移点. 可以采用增量 Voronoi 法[19]求得新的球隙序列：设已知当前 $k$ 个点形成球隙序列，新增加第 $k+1$ 个点，判断新点落入的那个 Voronoi 多边形(体)内，同时修改该 Voronoi 多边形(体)及相应 Voronoi 多边形(体)的边与顶点. 如新球隙符合启发式策略 3，还需对新球隙的大小进行修正，于是得到新的球隙序列. 此处 Voronoi 法不是用于逼近目标函数 $f$ 的极小点，反而是远离之.

目前智能算法通常以收敛来判断是否停机，而球隙迁移法可以一直迁移，不会最终收敛到某个点，但当所有的极小点都被发现后，继续运行将只能重复已有的极小点，因此我们给出以下停机法则：连续若干次没有发现新极小点就可停机. 在已找到的极小值中选最小的那个. 如果要更高的精度，以最小的极小点为起点，再用贪心法以更小的步距求精.

由启发式策略 4，一般情况下全局最优会在这之前被发现.

用 float 精度保存一个数，一个 $n$ 维的点要 $4n$ 个字节，有 1000 个点的 50 维函数也不过占 200 KB

内存，因此球隙法的空间代价不太大. 当极小点很多时，上述转移点算法比较复杂，虽然求 Voronoi 多边形无需调用 $f$，不增加实际优化代价，但会增加 CPU 计算时间. 可以考虑新转移点只远离当前局部极小点及重复次数较多的极小点，得到以下简化的转移点算法.

设：第 $k$ 次贪心搜索通过转移点 $B_1$ 发现了局部极小点 $A_1$，欲求下一个转移点 $C$.

令函数

$$G(X)=\|X-A_1\|_2 \wedge \|X-B_1\|_2 \wedge \|X-A_2\|_2 \wedge \min|X-\Omega| \tag{2}$$

其中 $\wedge$ 表示取小，$A_2$ 为前 $k-1$ 次搜索中重复次数最多的局部极小点. $\min|X-\Omega|$ 为 $X$ 到最近边界的距离，该项是为了防止 $X$ 太靠近边界.

可以用贪心算法求该函数的极大值即得到 $C$：$C=\arg\max(G(X))$.

$G(X)$可能有多个极大值，根据启发式策略 3，只需 $C$ 不在起-极对的连线上. 式(2)要取得极大值，每一项都不能小，也即 $X$ 必须远离 $A_1$、$A_2$、$B_1$ 和边界. 显然，该简化算法克服当前局部极小的能力与原算法是相同的，但克服多局部极小的能力有所减弱，因此代价有所增加. 注意到 $G(X)$不含目标函数 $f$，因此求其极大值不增加实际优化代价，所以 $G(X)$本质上不同于隧道函数法、填充函数法中的辅助函数.

## 5　仿真实验结果

目前使用的很多测试函数是可分离的，如 Rastrigin、Quadric 等，虽然维数高但难度低，而实际应用中，可分离这种特殊形式不多，因此选了 3 个不可分离的、变量间耦合的测试函数，难度较大. 为公平起见，对比算法的结果全部来自文献.

(1) Goldstein-Price 多峰值函数. $-2\le x_i\le 2$，$[1+(x_1+x_2+1)^2(19-14x_1+3x_1^2-14x_2+6x_1x_2+3x_2^2)]\cdot[30+(2x_1-3x_2)^2(18-32x_1+12x_1^2+48x_2-36x_1x_2+27x_2^2)]$. 将球隙法在不同的初始点运行，100 次结果取均值，与文献[1-2]的 7 种方法及其结果对比，如表 1. 球隙法的代价仅为 PSO 的万分之八，正如启发策略 4 所述，全局极值在 197 次(不到停机代价的一半)就可以发现. 虽然该函数维数低，但变量耦合，难度较高，3 种 GA 成功率较低.

**表 1　Goldstein-Price 多峰值函数平均优化结果**

| 算法 | 代价(函数评估次数) | 最小值 | 成功率/% |
|---|---|---|---|
| 差分进化(DE) | 500 000 | **3.000** | **100** |
| 微粒群(PSO) | 500 000 | **3.000** | **100** |
| Attractive and Repulsive PSO | 500 000 | 3.516 | —(<100) |
| Simple EA (SEA) | 500 000 | **3.000** | **100** |
| Multiple encoding GA (MGA) | 50 000 | 4.17 | 2 |
| Binary encoding GA (BGA) | 50 000 | 5.64 | 0 |
| Gray encoding GA (GGA) | 50 000 | 5.57 | 2 |
| 球隙迁移法 | **411**(**197** 初次发现) | **3.000** | **100** |

图 7 是优化过程曲线，记录每次贪心搜索的当前最好值，而非全局最好值，这与大多数论文不同. 因为球隙法不断迁移，在切换到新迁移点时会有大幅度的跳跃式上升，所以曲线是“非减幅振荡式”，而不是“收敛式”(其它算法是减幅振荡收敛)，这正是本方法的独特之处. 第一次贪心搜索找到局部极小点 1，继续努力若干次找不到比 1 更好之后，转移到新点，该点的值太大，超出图的显示范围(若加大 $Y$ 轴刻度则看不到曲线底部细节). 第二次搜索在 $x=237$ 处找到了全局极值. 极小点 3 之后的转移点值较好，上升不大. 点 4 与点 2、点 5 与点 1 同值，意味着两个极小点被重复发现，此时已经发现了全部极小点，在点 4 就可以停机.

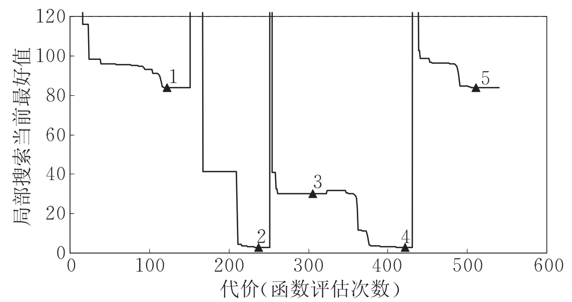



图 7　球隙法的优化过程图

(2) 六驼峰函数. $4x_1^2-2.1x_1^4+\frac{1}{3}x_1^6+x_1x_2-4x_2^2+4x_2^4$，其中 $-5\le x_i\le 5$. 将球隙法与文献[1]的差分进化(DE)、微粒群(PSO)对比，如表 2. 本文算法代价仅为微粒群算法、差分进化的 0.1924%.

**表 2　六驼峰多峰值函数平均优化结果**

| 算法 | 代价(函数评估次数) | 最小值 | 成功率/% |
|---|---|---|---|
| 差分进化(DE) | 500 000 | −1.0316 | 100 |
| 微粒群(PSO) | 500 000 | −1.0316 | 100 |
| 球隙迁移法 | **962**(**247** 初次) | −1.0316 | 100 |

(3) Colville 函数. $100(x_2-x_1^2)^2+(1-x_1)^2+90(x_4-x_3^2)^2+(1-x_3)^2+10.1((x_2-1)^2+(x_4-$

$1)^2+19.8(x_2-1)(x_4-1)$，其中$-10\le x_i\le 10$，全局极小值 0. 将球隙法与文献[16]的模糊文化进化程序(FCAEP)、文献[15]的多编码 GA(MGA)对比，如表 3. 表中本文算法的代价仅为 FCAEP 算法的 0.673%. 表中的 MGA 的成功率为 0.

**表 3 Colville 函数优化结果**

| 算法 | 代价(函数评估次数) | 最小值 | 成功率% |
|---|---|---|---|
| FCAEP | 500000 | **0** | **100** |
| MGA | 50000 | 204 | 0 |
| 球隙迁移法 | **3365(1625 初次)** | **0** | **100** |

# 6 结论与展望

球隙迁移法基于新的优化原理，不但能避免当前局部极小，还能有效地避免重复历史上的多个局部极小，它实现了勘探与开采的分离，避免了相互干扰，对耦合对象的优化效果好. 本文证明了球隙法能在有限计算次数内确定地找到连续函数的全局最优. 当然，根据 No Free Lunch 定理，对于全部的优化问题集，任意两种算法的平均性能是相同的. 对于可分离函数，球隙法不如 GA 高效，其次球隙法目前还仅限于连续优化.

相比当前成熟的智能算法，还有很多工作要做，不少地方还需完善，目前我们的主要工作内容还是无约束优化，下一步将其扩展到约束优. 文献[17]给出了 6 种罚函数方法，这些方法将约束问题转化为无约束问题，球隙法可以直接采用. 对于非凸定义域，可以将其分割成若干凸区域，分别求每个子区域的最小值，再求总的最小值.

**致 谢** 衷心感谢华南理工大学李桂清教授及匿名审稿专家，他们对本文提出了宝贵建议！

## 参 考 文 献

[1] Vesterstrom J, Thomsen R. A comparative study of differential evolution, particle swarm optimization, and evolutionary algorithms on numerical benchmark problems//Proceedings of the 2004 Congress on Evolutionary Computation. Portland, OR, 2004: 1980-1987

[2] Zhao Xin-Chao, Long Hong-Liang. Multiple bit encoding-based search algorithms//Proceedings of the 2005 IEEE Congress on Evolutionary Computation. Edinburgh, Scotland, UK, 2005: 1996-2001

[3] Huang Wen-Qi, He Kun. A pure quasi-human algorithm for solving cuboid Packing problem. Science in China (Series F: Information Sciences), 2009, 39(6): 617-622(in Chinese)
(黄文奇，何琨. 求解长方体 Packing 问题的纯粹拟人算法. 中国科学(F 辑：信息科学)，2009，39(6)：617-622)

[4] Liu San-Yang, Zhang Xiao-Wei. A hybrid strategy for differential variation. CAAI Transactions on Intelligent Systems, 2008, 3(6): 487-491(in Chinese)
(刘三阳，张晓伟. 混合差分变异策略. 智能系统学报，2008，3(6)：487-491)

[5] Alba E, Dorronsoro B. The exploration/exploitation tradeoff in dynamic cellular genetic algorithms. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2005, 9(2): 126-142

[6] Chen Jie, Xin Bin, Peng Zhi-Hong et al. Optimal contraction theorem for exploration—Exploitation tradeoff in search and optimization. IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics, Part A: Systems and Humans, 2009, 39(3): 680-691

[7] Xu Zong-Ben, Chen Zhi-Ping, Zhang Xiang-Sun. Theoretical development on genetic algorithms: A review. Advances in Mathematics, 2000, 29(2): 97-114(in Chinese)
(徐宗本，陈志平，章祥荪. 遗传算法基础理论研究的新近发展. 数学进展，2000，29(2)：97-114)

[8] Liang Yan-Chun, Wang Zai-Shen, Zhou Chun-Guang. A study of convergence of genetic algorithms with selection and mutation alone. Journal of Computer Research and Development, 1998, 35(7): 657-662(in Chinese)
(梁艳春，王在申，周春光. 选择和变异操作下遗传算法的收敛性研究. 计算机研究与发展，1998，35(7)：657-662)

[9] Lin Dan, Li Min-Qiang, Kou Ji-Song. On the convergence of real coded genetic algorithms. Journal of Computer Research and Development, 2000, 37(11): 1321-1327(in Chinese)
(林丹，李敏强，寇纪淞. 基于实数编码的遗传算法的收敛性研究. 计算机研究与发展，2000，37(11)：1321-1327)

[10] Gutjahr W J. A graph-based ant system and its convergence. Future Generation Computer Systems, 2000, 16(8): 873-888

[11] Stutzle T, Dorigo M. A short convergence proof for a class of ant colony optimization algorithms. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2002, 6(4): 358-365

[12] Badr A, Fahmy A. A proof of convergence for ant algorithms. Information Sciences, 2004, 160: 267-279

[13] Gutjahr W J. ACO algorithms with guaranteed convergence to the optimal solution. Information Processing Letters, 2002, 82(3): 145-153

[14] Zhu Qing-Bao. Analysis of convergence of ant colony optimization algorithms. Control and Decision, 2006, 21(7): 763-766(in Chinese)
(朱庆保. 蚁群优化算法的收敛性分析. 控制与决策，2006，21(7)：763-766)

[15] Van den Bergh F. An analysis of particle swarm optimizers [Ph. D. dissertation]. University of Pretoria, Pretoria, 2001

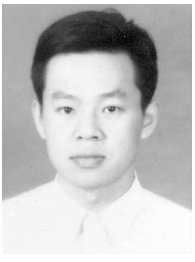
[16] Mo Yuan-Bin, Liu He-Tong, Chen De-Zhao. The developing trend of particle swarm optimization algorithm. Computers and Applied Chemistry, 2009, (4): 430-434 (in Chinese)

（莫愿斌，刘贺同，陈德钊．粒子群优化算法的发展趋势．计算机与应用化学，2009，(4)：430-434）

[17] Michalewicz Z. Translated by Zhou Jia-Ju et al. Genetic Algorithm＋Data Structure＝Evolution Programs. Beijing：Science Press，2000(in Chinese)
（Z・米凯利维茨．周家驹等译．演化程序——遗传算法和数据编码的结合．北京：科学出版社，2000）

[18] Su Ta-Shan et al. Optimization Computation Principle and Program Design of Algorithm. Changsha：National University of Defense Technology Press，2001(in Chinese)
（粟塔山等．最优化计算原理与算法程序设计．长沙：国防科技大学出版社，2001）

[19] de Berg M，van Kreveld M et al. Translated by Deng Jun-Hui. Computational Geometry Algorithms and Applications. 2nd Edition. Beijing：Tsinghua University Press，2005(in Chinese)
（de Berg M，van Kreveld M 等．邓俊辉译．计算几何-算法与应用．第 2 版，北京：清华大学出版社，2005）



**HU Jing-Song**，born in 1969，Ph.D.，associate professor. His research interests include intelligent optimization algorithms and its application.

**ZHENG Qi-Lun**，born in 1938，professor，Ph. D. supervisor. His research interests include optimization and computational intelligence.

**Background**

Optimization algorithms are widely used in most science or technology fields. Solving a problem is selecting a better，or the best solution from some candidates. When the expression of a multi-modal function is not known，finding the global optimum of the function is difficult for traditional mathematic analytic method. Therefore，some intelligent optimization methods，such as genetic algorithms，simulated annealing and taboo search have been widely applied. Afterwards，more and more intelligent optimization methods，such as ant colony algorithm，particle swarm optimization，differential evolution，immunity clone and so on，were presented. However，the local minimum problem，the most famous problem in optimization field，still exists and sometimes occurs.

This paper presents a new optimization algorithm called sphere-gap transferring algorithm. The algorithm can not only escape the current local minimum but also avoid the found local minima. This paper proves that the sphere-gap transferring algorithm can determinately find the globally optimal solution in the limited number of computation.

Our group has been working on the research of optimization algorithms. Many papers have been published in respectable international conferences and journals. This research was partially supported by the National Natural Science Foundation of China under grant No. 60574078，Guangdong Natural Science Foundation under grant No. 031454，and Guangzhou science and technology project under grant No. 2006J1-C0321.