УДК 519.676

ОБ ОДНОМ АЛГОРИТМЕ ОДНОРОДНОГО МАРКОВСКОГО МОНОТОННОГО ПОИСКА ЭКСТРЕМУМА

А.С.Тихомиров

Институт электронных и информационных систем НовГУ, Alexey.Tikhomirov@novsu.ru

Представлены численные исследования скорости сходимости однородного марковского монотонного алгоритма случайного поиска экстремума.

Ключевые слова: случайный поиск, глобальная оптимизация, стохастическая оптимизация

Numerical investigations of the convergence rate of the homogeneous Markov monotone random search optimization method are given.

Keywords: random search, global optimization, stochastic optimization

1. Введение

Пусть *целевая функция* $f : X \mapsto \mathbf{R}$ (где, например, $X = \mathbf{R}^d$) принимает минимальное значение в единственной точке x_*. Рассмотрим задачу поиска точки глобального минимума x_* с заданной точностью ε. Один из способов решения этой задачи состоит в применении алгоритмов случайного поиска экстремума функции (см. [1-14]). Такие методы давно и успешно используются при решении сложных задач оптимизации. Тем не менее, существует мало теоретических результатов о скорости сходимости этих алгоритмов (см. [3,4,5]). Теоретическое исследование скорости сходимости некоторых алгоритмов марковского монотонного поиска экстремума выполнено в работах [7-14]. Данная работа является их продолжением и посвящена численному исследованию скорости сходимости однородного марковского монотонного случайного поиска.

В качестве *пространства оптимизации* будем рассматривать пространства $X = \mathbf{R}^d$ и $X = [a,b]^d$ с d-мерной мерой Лебега μ и метрикой

$$\rho_\infty(x,y) = \max_{1 \le n \le d} |x_n - y_n|,$$

где $x = (x_1,...,x_d)$ и $y = (y_1,...,y_d)$. Замкнутый шар радиуса r с центром в точке x обозначим как $B_r(x) = \{y \in X : \rho_\infty(x,y) \le r\}$. Метрика ρ_∞ выбрана по соображениям простоты моделирования рассматриваемого случайного поиска.

Для поиска точки минимума x_* воспользуемся *однородным марковским монотонным* случайным поиском (см. [3, 7-14]), описанным далее с помощью алгоритма моделирования. Обозначение «$\zeta \leftarrow P(\,\cdot\,)$» читается так: «получить реализацию случайного вектора ζ с распределением *P*».

Алгоритм 1

Шаг 1. $\xi_0 \leftarrow x$, $k \leftarrow 1$.

Шаг 2. $\zeta_k \leftarrow P(\xi_{k-1}, \cdot)$.

Шаг 3. Если $f(\zeta_k) \le f(\xi_{k-1})$, то $\xi_k \leftarrow \zeta_k$, иначе $\xi_k \leftarrow \xi_{k-1}$.

Шаг 4. $k \leftarrow k+1$ и перейти к шагу 2.

Здесь x — начальная точка поиска, а $P(x,\cdot)$ — марковские переходные функции (см. [3]), называемые *пробными переходными функциями*. Отметим, что введенный случайный поиск является *монотонным*, в том смысле, что неравенства $f(\xi_k) \le f(\xi_{k-1})$ выполняются при всех $k \ge 1$.

Отметим два уровня теоретических результатов, касающихся глобального случайного поиска. Наиболее простыми являются утверждения о *сходимости* случайного поиска. Это результаты типа $\xi_k \to x_*$ почти всюду (по вероятности). Доказательство подобных утверждений, как правило, не вызывает затруднений (см. [3,4]), но сами результаты не имеют большого смысла с практической точки зрения. Такие результаты естественно назвать результатами первого уровня. Следующий уровень результатов составляют утверждения, касающиеся *скорости сходимости* случайного поиска. Теоретическое исследование скорости сходимости случайного поиска оказалось сложной задачей (см. [3,4,5]). В теории стохастической глобальной оптимизации точные оценки скорости сходимости получены, как правило, только для очень простых методов вроде «чистого случайного поиска» (т.е. простейшего алгоритма случайного бросания точек в множество оптимизации — (см. [3, с.38] или [4, с.37]). В частности в [4] отмечено, что точные результаты, полученные для «чистого случайного поиска», практически неслыханны при анализе других стохастических алгоритмов. Оценки скорости сходимости методов стохастической глобальной оптимизации часто или отсутствуют вообще, или носят асимптотический характер, или являются очень неточными, или показывают медленную скорость сходимости (см. [3,4,5]). В работах [7-14] получены теоретические оценки скорости сходимости марковского монотонного случайного поиска, показывающие (при оптимизации *невырожденных* целевых функций) высокую скорость сходимости. Тем не менее, эти оценки менее точны, чем оценки для «чистого случайного поиска». Поэтому большое значение имеет численное исследование скорости сходимости. В этой работе выполнено численное сравнение одного из полученных алгоритмов марковского монотонного случайного поиска с результатами книги [4].

2. Моделирование случайного поиска

Воспользуемся однородным марковским монотонным случайным поиском, обладающим двумя достоинствами. С одной стороны, этот поиск (для *невырожденных* целевых функций) обеспечивает хороший порядок зависимости полученных оценок скорости сходимости от ε (см. [3,7-14]). С другой стороны, этот поиск легко моделируются.

Рассмотрим случайный поиск алгоритма 1, пробные переходные функции $P(x,\cdot)$ которого обладают *симметричными* плотностями вида $p(x,y)=g(\rho_\infty(x,y))$, где ρ_∞ — метрика, а g — невозрастающая неотрицательная функция, определенная на полуоси $(0,+\infty)$. Функцию g назовем *формой поиска*. Пусть при $0<\nu<\theta\le\Theta$ (ν, θ, Θ — параметры поиска) форма поиска g задается следующей формулой:

$$g(r)=\frac{1}{2^d\lambda}\begin{cases}\nu^{-d} & \text{при } 0<r\le\nu,\\ r^{-d} & \text{при } \nu<r\le\theta,\\ \theta^{-d} & \text{при } \theta<r\le\Theta,\\ 0, & \text{если иначе},\end{cases} \qquad (*)$$

где $\lambda=d\ln(\theta/\nu)+\Theta^d/\theta^d$ — нормирующая константа (обеспечивающая необходимое для плотности условие нормировки).

Через $U_r(x,\cdot)$ обозначим равномерное распределение в шаре $B_r(x)$, т.е. положим $U_r(x,\cdot)=$ $=\mu(\cdot\cap B_r(x))/\mu(B_r(x))$. Пусть α — равномерно распределенная на отрезке $[0,1]$ случайная величина. Используя результаты [15], получим следующий алгоритм моделирования случайного вектора ζ, имеющего распределение $P(x,\cdot)$ с формой (1).

Алгоритм моделирования 1

Шаг 1. Получить α.

Шаг 2. Если $\alpha\ge d\ln(\theta/\nu)/\lambda$, то $r\leftarrow\Theta$, иначе $r\leftarrow\nu\exp(\lambda\alpha/d)$.

Шаг 3. $\zeta\leftarrow U_r(x,\cdot)$, завершить работу алгоритма.

Поскольку в случае метрики ρ_∞ моделировать распределение $U_r(x,\cdot)$ очень просто, то и в целом алгоритм моделирования 1 очень легко программируются.

3. Числовые примеры

В книге [4] приведены три числовых примера использования трех видов марковских монотонных поисков (алгоритмы A, B и C) при оптимизации целевых функций, вычисляемых без случайной ошибки. Рассмотрим эти примеры. Алгоритм A является «чистым случайным поиском». Алгоритм B соответствует поиску алгоритма 1 при использовании нормального распределения вероятностей в качестве пробной переходной функции. Алгоритм C представляет собой более сложный вариант поиска, в котором при построении новой точки поиска учитывается перемещение, выполненное на предыдущем шаге алгоритма.

В нижеследующих таблицах приведены оценки минимального значения целевых функций, полученные после применения N шагов исследуемых поисков. Точнее, в таблицах даны средние значения целевых функций, полученные при M повторениях рассматриваемых алгоритмов. В [4] использовалось значение $M=40$. В данной работе используется значение $M=500$ (значение M увеличено для повышения точности оценок).

Пример 1. Здесь пространство $X=[-8,8]^2$, $x=(x_1,x_2)$,

$$f(x)=f(x_1,x_2)=\frac{1}{2}\Big((x_1^4-16x_1^2+5x_1)+(x_2^4-16x_2^2+5x_2)\Big),$$

Функция f имеет четыре локальных минимума, один из которых является глобальным, $x_*=(-2{,}9035,\,-2{,}9035)$ и $f(x_*)=-78{,}33$. Начальной точкой поиска выбрана $x=(4{,}0,\ 6{,}4)$ и $f(x)=537{,}18$. Число шагов поиска (число вычислений целевой функции) $N=500$. Для наглядности в таблице приведены оценки разности $f(\xi_{N-1})-f(x_*)$.

Таблица 1

Оценки $f(\xi_{N-1})-f(x_*)$ для алгоритмов A, B, C и 1

A	B	C	1
2,51	0,78	0,49	0,47

Пример 2. Здесь пространство $X=[-4,4]^{10}$, $x=(x_1,x_2,\ldots,x_{10})$,

$$f(x)=f(x_1,x_2,\ldots,x_{10})=\sum_{n=1}^{5}\left(100(x_{2n}-x_{2n-1}^2)^2+(1-x_{2n-1})^2\right).$$

Функция f является известной тестовой функцией Розенброка, используемой для методов локальной оптимизации. Функция f принимает минимальное значение $f(x_*)=0$ в точке $x_*=(1,1,\ldots,1)$. Начальной точкой поиска выбрана $x=(-1{,}2,\ 1,\ -1{,}2,\ 1,\ldots,1)$ и $f(x)=121$. Число шагов поиска (число вычислений целевой функции) $N=1000$.

Таблица 2

Оценки $f(\xi_{N-1})$ для алгоритмов A, B, C и 1

A	B	C	1
121	20,07	19,80	19,80

Пример 3. Здесь пространство $X=\mathbf{R}^2$, $x=(x_1,x_2)$,

$$f(x)=f(x_1,x_2)=x_1^4+x_1^2+x_1x_2+x_2^2.$$

Функция f принимает минимальное значение в единственной точке $x_*=(0,0)$ и $f(x_*)=0$. Начальной точкой поиска выбрана $x=(1,1)$ и $f(x)=4$. Число шагов поиска (число вычислений целевой функции) N здесь принимает три значения 100, 1000 и 10000.

Таблица 3

Оценки $f(\xi_{N-1})$ для алгоритмов B, C и 1

N	B	C	1
100	0,00053	0,328	0,00022
1000	$2{,}8\times10^{-5}$	$1{,}1\times10^{-5}$	$3{,}9\times10^{-14}$
10000	$2{,}7\times10^{-6}$	$2{,}5\times10^{-7}$	$9{,}9\times10^{-49}$

В качестве параметров формы поиска алгоритма 1 в примере 3 были выбраны значения $\Theta=0{,}7$ и $\theta=\Theta/\sqrt{2}$ (соотношение $\theta=\Theta/\sqrt{2}$ получено в [10] при оптимизации оценки скорости сходимости). Значение ν выбиралось близким к ожидаемой точности поиска при аппроксимации по аргументу. В данном примере при трех значениях N использовались значения $\nu_1=0{,}02$, $\nu_2=10^{-7}$, $\nu_3=2\times10^{-24}$.

В примерах 1 и 2 поиск алгоритма A оказался хуже всех остальных вариантов поиска, а поиски алгоритмов B, C и 1 показали примерно одинаковые результаты. Выбранное в [4] число шагов поиска оказалось явно недостаточным для получения высокой точности решения задач этих примеров. А для получения грубого приближения особенности выбора параметров алгоритмов B, C и 1 оказались несущественны.

Выбранные в примере 3 числа шагов поиска достаточны для получения высокой точности решения задачи. Хорошо видно, что поиск алгоритма 1 с формой (∗) оказался значительно точнее алгоритмов B и C работы [4]. Причем при больших значениях N преимущество становиться огромным. При $N=10000$ алгоритм 1 с полученными параметрами в 10^{41} раз точнее алгоритма C работы [4] и в 10^{42} раз точнее алгоритма B.

Представленные примеры показывают, что выбор параметров поиска очень важен для получения высокой точности решения задачи, а пример 3 демонстрирует существенное превосходство поиска алгоритма 1 с предложенными параметрами над поисками с параметрами работы [4].

Отметим в заключение, что процедура моделирования поиска алгоритма 1 с формой (∗) очень проста. Эта процедура проще процедур моделирования поисков алгоритмов B и C работы [4], основанных на моделировании многомерного нормального распределения, и лишь немного сложнее процедуры моделирования «чистого случайного поиска».

1. Ермаков С.М., Жиглявский А.А. // Теория вероятностей и ее применения. 1983. №1. С.129-136.
2. Ермаков С.М., Жиглявский А.А., Кондратович М.В. // Журнал вычисл. математики и мат. физики. 1989. Т.29. №2. С.163-170.
3. Zhigljavsky A., Zilinskas A. Stochastic Global Optimization. Berlin: Springer-Verlag, 2008. 262 p.
4. Spall J.C. Introduction to stochastic search and optimization: estimation, simulation, and control. Wiley, New Jersey, 2003. 618 p.
5. Spall J.C., Hill S.D., Stark D.R. Theoretical framework for comparing several stochastic optimization approaches // Probabilistic and randomized methods for design under uncertainty. L.: Springer, 2006. P.99-117.
6. Абакаров А.Ш., Сушков Ю.А. Статистическое исследование случайного поиска // Математические модели. Теория и приложения / Под ред. М.К.Чиркова Вып.2. СПб.: Изд-во НИИХ СПбГУ, 2002. С.70-86.
7. Тихомиров А.С., Некруткин В.В., Марковский монотонный поиск экстремума. Обзор некоторых теоретических результатов // Математические модели. Теория и приложения. Вып.4. СПб.: ВВМ, 2004. С.3-47.
8. Тихомиров А.С. // Вестник НовГУ. Сер.: Техн. науки. 2005. №34. С.90-95.
9. Тихомиров А.С. // Вестник НовГУ. 2006. №39. С.34-37.
10. Тихомиров А.С. // Журнал вычисл. математики и мат. физики. 2006. Т.46. №3. С.379-394.
11. Тихомиров А.С. // Журнал вычисл. математики и мат. физики. 2007. Т.47. №5. С.817-828.
12. Tikhomirov A., Stojunina T., Nekrutkin V. // J. of Statistical Planning and Inference. 2007. Vol.137. Issue 12. P.4031-4047.
13. Тихомиров А.С. // Вестник НовГУ. 2007. №44. С.51-54.
14. Тихомиров А.С. // Физика и механика материалов: Приложение к Вестнику НовГУ. 2009. №50. С.41-44.
15. Тихомиров А.С. // Вестник НовГУ. Сер.: Техн. науки. 2004. №28. С.111-113.