УДК 517.977.56

ПОИСК ГЛОБАЛЬНОГО ЭКСТРЕМУМА ФУНКЦИИ, ЗАДАННОЙ ИМИТАЦИОННОЙ МОДЕЛЬЮ

И.В. Коплык, *канд.физ.-мат.наук;* ***П.В. Поленица*,*** *канд.техн.наук;* ***О.П. Остапова****

Сумский государственный университет, г. Сумы

**Научный центр боевого применения РВиА Сумского государственного университета, г. Сумы*

Изложен метод поиска глобального экстремума для функций, значения которых вычисляются при помощи имитационного моделирования. Рассмотрен вопрос о величине ошибки определения значений функции для вычисления положения точки экстремума с заданной точностью.

Викладений метод пошуку глобального екстремуму для функцій, значення яких обчислюються за допомогою імітаційного моделювання. Розглянуто питання про величину похибки визначення значень функції для обчислення положення точки екстремуму із заданою точністю.

ВВЕДЕНИЕ

При решении множества современных научных и инженерных задач возникает проблема отыскания глобального экстремума недифференцируемых функций, так же оптимизируемые функции могут содержать помехи. Кроме того, часто возникают задачи, в которых целевая функция и ограничения задаются посредством сложных алгоритмов для ЭВМ. В связи с этим приобретает актуальность разработка алгоритмов для решения различных задач глобальной оптимизации. В случае нахождения глобального экстремума функции, значения которой вычисляются при помощи имитационных моделей, возникает задача согласования ошибки моделирования с требуемой точностью вычисления положения искомого экстремума.

Приведем наиболее общую постановку задачи оптимизации [1]. Пусть X – некоторое множество оптимизации; f – заданная целевая функция. Требуется найти приближение к

$$f^* = \inf_{x\in X} \quad f(x) \tag{1}$$

и точку из множества X, в котором это приближение реализуется.

Задача (1) является задачей минимизации. Для её решения строится последовательность точек из X, сходящаяся к некоторой точке, в которой значение (1) точно или приближенно достигается. Типы сходимости указанной последовательности могут быть различными – от сходимости по значению функции f до сходимости с некоторой вероятностью. Последний случай наблюдается при использовании стохастических функций в качестве моделей реальных систем.

На практике далеко не все случайные процессы удается описать аналитическими зависимостями. В тех случаях, когда построение аналитической модели явления или процесса трудно осуществимо, применяется метод статистических испытаний, в котором неопределенность физической величины включается в процесс моделирования и представляет собой его существенный элемент. Отыскание положения глобального экстремума многоэкстремальной функции, заданной при помощи имитационной модели, требует использования алгоритмов, не требующих вычисления её производных.

Кроме того, становится актуальным вопрос о величине ошибки определения значений целевой функции для вычисления положения точки экстремума с заданной точностью. Решению этой задачи и посвящена данная работа.

1 ОПИСАНИЕ МЕТОДА ПОИСКА ЭКСТРЕМУМА

Задачу глобальной оптимизации сформулируем таким образом [1], что точка x^*, в которой достигается минимальное значение (1) функции f, существует (но, возможно, не единственна). Любую точку, такую, что $f\left(x^*\right) = f^*$, будем понимать в смысле

$$x^* = \arg \min_{x \in X} f(x), \qquad (2)$$

т.е. любая точка глобального минимума функции f на множестве X такая, что $x^* \in X$, что $f\left(x^*\right) = \min_{x \in X} f(x)$. Приближенное отыскание точки (2) сводится к нахождению какой-либо точки из множества

$$B(\varepsilon) = B_\varepsilon\left(x^*, \rho\right) = \left\{x \in X \;\middle|\; \rho\left(x, x^*\right) \le \varepsilon\right\}, \qquad (3)$$

где ρ – некоторая метрика на X; $\varepsilon > 0$ – погрешность по аргументу.

Постановка задачи оптимизации, когда требуется найти точку из множества (3), не является хорошо определенной, поскольку малые изменения в целевой функции могут привести к сколь угодно большим изменениям в местоположении точки x^* [2].

В случае, когда целевая функция f задана алгоритмически стохастической моделью, вычисление ее производных либо не представляется возможным, либо приводит к большим вычислительным трудностям, используются алгоритмы глобального случайного поиска. При поиске глобального экстремума необходимо «просматривать» все множество оптимизации X. Простейшим методом глобального случайного поиска является алгоритм, основанный на том, что точки, в которых вычисляются значения функции f, являются независимыми реализациями случайного вектора с равномерным на X распределением [3]. Он сводится к следующему:

1 Полагается $k = 1$, $f_0^* = \infty$.

2 В качестве точки x_k выбирается независимая реализация случайного вектора с равномерным на множестве X распределением.

3 Вычисляется $f\ (x_k)$ и принимается: $f_k^* = \min\left\{ f_{k-1}^*,\ f\left(x_k\right)\right\}$.

4 В качестве приближения к точке $x^* = \arg\min_{x \in X} f\left(x\right)$ выбирается такая точка x_k^*, в которой $f(x_k^*) = f_k^*$.

5 Если $k = \aleph$, то останов. В противном случае принимается $k = k + 1$ и осуществляется переход к шагу 2.

Алгоритм обладает теоретическим свойством сходимости. Он малочувствителен к нерегулярностям поведения целевой функции, структуры множества оптимизации, наличию случайных ошибок при вычислении функции. Для алгоритма достаточно, чтобы множество X было односвязным и являлось замыканием своей внутренности. Последнее свойство для $X \subset R^n$ гарантирует, что мера Лебега этого множества положительна и что оно не имеет «отростков» (т.е. не существует таких $x \in X$ и $\varepsilon > 0$, что мера Лебега $B_\varepsilon\ (x)$ равна нулю).

В алгоритме используется правило останова по числу $\aleph$ вычислений целевой функции. Рассмотрим теоретические свойства приведенного метода [3]. Пусть x^* – точка глобального минимума функции f. Для множества $B(\varepsilon) = B_\varepsilon\left(x^*\right)$ имеем

$$\mu_n\left\{B(\varepsilon)\right\} \le \mu_n\left\{x \in R^n \;\middle|\; \|x\| \le \varepsilon\right\} = \frac{\pi^{n/2}\varepsilon^n}{\Gamma(n/2+1)}, \tag{4}$$

где $\Gamma(\alpha)$ – гамма-функция; μ_n – мера Лебега; $\|x\|$ – евклидова норма в R^n. Равенство в (4) если шар $\left\{x \in R^n \;\middle|\; \left\|x - x^*\right\| \le \varepsilon\right\}$ целиком лежит в множестве X, т.е. расстояние от точки x^* до границы множества X не меньше, чем ε. Из (4), для всех $\varepsilon > 0$ и $k = 1, 2, \ldots$ получается:

$$\mathrm{P}\ \left\{\ \left\|x_k - x^*\right\| \le \varepsilon\right\} = \mathrm{P}\ \left\{x_k \in B(\varepsilon)\right\} = \frac{\mu_n\left\{B(\varepsilon)\right\}}{\mu_n\left\{X\right\}} \le \frac{\pi^{n/2}\varepsilon^n}{\mu_n\left\{X\right\}\Gamma(n/2+1)}, \tag{5}$$

$$\begin{aligned} &\mathrm{P}\left\{\min_{1\le i\le k}\ \left\|x_i - x^*\right\| \le \varepsilon\right\} = \\ &= 1 - \left(1 - \frac{\mu_n\left\{B\ \ (\varepsilon)\right\}}{\mu_n\left\{X\right\}}\right)^k \le 1 - \left[1 - \frac{\pi^{n/2}\varepsilon^n}{\mu_n\left\{X\right\}\Gamma(n/2+1)}\right]^k \xrightarrow[k\to\infty]{} 1. \end{aligned} \tag{6}$$

В последнем соотношении содержится утверждение о том, что последовательность $\min\limits_{1\le i\le k}\left\|x_i - x^*\right\|$ сходится при $k \to \infty$ к нулю по вероятности, т.е. алгоритм сходится в вероятностном смысле. Кроме того, в (6) содержится оценка скорости этой сходимости. Оценка среднего числа шагов до попадания в множество $B(\varepsilon\ )$ легко получается из (5):

$$M\left[\tau_{B(\varepsilon)}\right] = \frac{\mu_n\left\{X\right\}}{\mu_n\left\{B(\varepsilon)\right\}} \ge \frac{\mu_n\left\{X\right\}\Gamma(n/2+1)}{\pi^{n/2}\varepsilon^n}, \tag{7}$$

где $\tau_{B(\varepsilon)}$ – момент первого попадания последовательности точек x_1 , x_2 , ... в множество $B(\varepsilon) \subset X$. Приведенные выражения оценивают скорость сходимости алгоритма по значениям аргумента.

Из (4) – (7) видно, что сходимость алгоритма существенно зависит от размерности n множества X. Подсчитаем, сколько в алгоритме нужно провести вычислений $\aleph$ функции f, чтобы с вероятностью, не меньшей 1-γ (где $\gamma > 0$ – малое число), попасть в $B(\varepsilon)$. Предполагая, что в (4) имеет место равенство, приравняем правую часть (6) к 1-γ и решим полученное уравнение относительно $k = \aleph$. Легко получить [1]:

$$\aleph = Ent\ \left(\ln\gamma \Big/ \ln\ \left[1 - \frac{\pi^{n/2}\varepsilon^n}{\mu_n(X)\Gamma(n/2+1)}\right]\right) \approx Ent\ \left(-\frac{\ln\gamma\ \ \mu_n(X)\ \ \Gamma(n/2+1)}{\pi^{n/2}\varepsilon^n}\right).$$

После останова алгоритма по прошествии $\aleph$ итераций получается рекордная точка x_k^*, которая с вероятностью (6) попадает в область «притяжения» глобального экстремума. Далее для уточнения положения этого экстремума производится отыскание локального экстремума с начальной точкой поиска x_k^*.

Постановка задачи отыскания локального экстремума аналогична (1) с той лишь разницей, что предполагается существование только одного минимума функции f на множестве X. Дополнительно накладывается ограничение на выпуклость исследуемой функции в области X.

Если вычисления производных целевой функции требуют больших затрат или не представляется возможным, то как вариант можно использовать симплекс-квадрат метод (S^2-метод) [4, 5]. Он базируется на том, что экспериментальным образцом, содержащим наименьшее количество точек, в которых вычисляется значение целевой функции, является регулярный симплекс. В n-мерном пространстве он представляет собой многогранник, образованный $n+1$ равноотстоящими друг от друга вершинами.

Алгоритм S^2-метода начинается с построения регулярного симплекса в пространстве независимых переменных. При заданных начальной точке $x^0=(x_1, ..., x_n)$ и масштабном множителе l координаты остальных n вершин симплекса в n-мерном пространстве вычисляются из выражения [6]:

$$x^i = \begin{cases} x_j^0 + \Delta_1 & \text{при} \quad j \neq i, \\ x_j^0 + \Delta_2 & \text{при} \quad j = i \end{cases}$$

для i и $j = 1, 2, 3, ..., n$. Приращения Δ_1 и Δ_2, зависящие только от n и выбранного масштабного множителя l, определяются следующим образом:

$$\Delta_1 = \frac{(n+1)^{1/2} - 1 + n}{n\sqrt{2}} l, \qquad \Delta_2 = \frac{(n+1)^{1/2} - 1}{n\sqrt{2}} l.$$

Рассмотрим более подробно работу алгоритма S^2-метода [7]. Пусть заданы три параметра: коэффициент отражения $\alpha>0$, коэффициент растяжения $\beta>1$ и коэффициент сжатия $\xi \in \left]0;1\right[$, а также вершины начального симплекса $x^0(0)$, $x^1(0)$,..., $x^n(0)$ в виде векторов n-мерного пространства (индекс в скобках возле вершины указывает номер итерации). На k–й итерации заданы вершины текущего симплекса $x^0(k)$, $x^1(k)$,..., $x^n(k)$, причем их нумерация такова, что

$$f\left(x^0(k)\right) \leq f\left(x^1(k)\right) \leq \ldots \leq f\left(x^n(k)\right).$$

Положим центр тяжести «наилучших» вершин $x^0(k)$, $x^1(k)$,..., $x^{n-1}(k)$ равным

$$c(k) = \frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} x^i(k).$$

Основная идея метода состоит в том, чтобы заменить вершину $x^n(k)$ с «наихудшим» (максимальным) значением целевой функции на новую вершину, в которой значение целевой функции как можно меньше. Это осуществляется с помощью операций отражения, растяжения и сжатия.

Итерация начинается с выполнения операции отражения, результатом которой является точка

$$u(k) = c(k) + \alpha\left(c(k) - x^n(k)\right).$$

После вычисления в этой точке значения целевой функции f может представиться один из трех случаев, определяемых следующими условиями:

$$f\left(x^0(k)\right) \le f\left(u(k)\right) \le f\left(x^{n-1}(k)\right), \tag{8}$$

$$f\left(u(k)\right) < f\left(x^0(k)\right), \tag{9}$$

$$f\left(x^{n-1}(k)\right) < f\left(u(k)\right). \tag{10}$$

В случае (8) вершина $x^n(k)$ заменяется на $u(k)$, чем определяется набор вершин симплекса $(k+1)$–й итерации, и k–я итерация заканчивается.

В случае (9) результатом отражения является новая точка с наилучшим (минимальным) значением целевой функции. Поэтому направление отражения является перспективным, и можно попытаться осуществить растяжение симплекса в этом направлении. Для этого значение f вычисляется в точке

$$\upsilon(k) = c(k) + \beta\left(u(k) - c(k)\right).$$

Если

$$f\left(\upsilon(k)\right) < f\left(u(k)\right),$$

то вершина $x^n(k)$ заменяется на $\upsilon(k)$, в противном случае – на $u(k)$, и k–я итерация заканчивается.

В случае (10) результатом отражения является новая точка, которая, если ею заменить наихудшую вершину $x^n(k)$, сама станет наихудшей вершиной. В этом случае производится сжатие симплекса. Для этого значение вычисляется в точке

$$w(k) = \begin{cases} c(k) + \xi\left(x^n(k) - c(k),\right) & \text{если } f\left(x^n(k)\right) \le f\left(u(k)\right), \\ c(k) + \xi\left(u(k) - c(k),\right) & \text{если } f\left(x^n(k)\right) > f\left(u(k)\right). \end{cases}$$

Если

$$f\left(w(k)\right) < \min\left\{f\left(x^n(k)\right), f\left(u(k)\right)\right\},$$

то вершина $x^n(k)$ заменяется на $w(k)$. В противном случае каждая вершина $x^i(k)$ заменяется на

$$\hat{x}^i(k) = x^i(k) + \frac{1}{2}\left(x^0(k) - x^i(k)\right), \quad i = 1, \ \ldots \ , \ n,$$

т.е. происходит сжатие симплекса. Полученные n точек вместе с точкой $x^0(k)$ составляют набор вершин симплекса $(k+1)$-й итерации.

Остановка алгоритма производится, если после завершения k-й итерации выполняется неравенство

$$\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left[f\left(x^{i}(k+1)\right)-f\left(x^{0}(k+1)\right)\right]^{2}\right\}^{1/2}\leq\delta\,, \qquad (12)$$

где δ – заранее заданное малое положительное число.

2 УЧЕТ ОШИБКИ ВЫЧИСЛЕНИЯ ЦЕЛЕВОЙ ФУНКЦИИ

Поскольку вычисление положения точки экстремума проводятся как с погрешностью δ по значению функции, так и с погрешностью ε по значению аргумента, возникает вопрос: с какой допустимой ошибкой η должна вычисляться целевая функция, чтобы алгоритм оптимизации увенчался успехом. В случае, если целевая функция задана при помощи имитационной модели, особый интерес представляет допустимая ошибка вычисления значения этой функции.

Ответ на этот вопрос можно получить следующим образом. Для обеспечения заранее заданной точности значения функции в рекордной точке необходимо, чтобы удовлетворялось условие $\eta\leq\delta/2$ при поиске области притяжения глобального экстремума. После нахождения методом глобального поиска области $B(\varepsilon)$ притяжения экстремума $f^{*}=\inf\limits_{x\in X} f(x)$ из некоторой рекордной точки x_{k}^{*}, принадлежащей этой области, проводится локальный спуск при помощи S^2-метода, остановка которого производится при выполнении условия (12). Если ошибка η вычисления целевой функции будет больше δ, то останов не произойдёт, т.е. алгоритм S^2 зациклится. Так, при $\delta/2<\eta$ вершины симплекса вблизи точки экстремума будут принимать значения $f=f^{*}+\eta/2>f^{*}+\delta/2$ и $f=f^{*}-\eta/2<f^{*}-\delta/2$. В этом случае выполнение условия (12) становится невозможным. При $\eta\leq\delta/2$ достигается выполнение условие останова S^2-метода.

Необходимо сделать некоторые замечания по поводу реализации S^2-метода для функций, значение которых вычисляется со случайной ошибкой.

Ошибка η реализуется с некоторой заранее заданной вероятностью Q (уровнем доверия), соответственно с вероятностью $\frac{1}{2}(1-Q)$ могут развиваться флуктуации $f>f^{*}+\eta$. При возникновении такой флуктуации возможен «вылет» симплекса за область притяжения экстремума. Во избежание этой ситуации необходимо оградить область $B(\varepsilon)$ бесконечно высоким потенциальным барьером. Тогда при выходе одной из вершин симплекса из области аттрактора на следующей итерации центр тяжести симплекса «свалится» обратно в $B(\varepsilon)$.

С вероятностью $\frac{1}{2}(1-Q)$ могут присутствовать флуктуации $f<f^{*}-\eta$. В этом случае симплекс начнет «стягиваться» к точке x, далёкой от x^*. На последних шагах S^2-метода произойдёт разворот точек симплекса (11) и алгоритм выйдет из «ложного» экстремума, после чего начнется новый

спуск.

Несмотря на присутствие флуктуаций при вычислении значения целевой функции, при контролируемой величине ошибки ($\eta \le \delta/2$) на основании центральной предельной теоремы теории вероятностей можно утверждать, что за конечное число шагов итерационного процесса произойдёт останов S^2-метода в области точки x^*.

Остается выяснить вопрос, как в случае использования целевой функции, заданной при помощи имитационной модели, контролировать величину ошибки η, с которой производится её вычисление.

При использовании метода статистических испытаний эта задача формулируется следующим образом. Производится ряд независимых реализаций случайной величины f. Сколько надо сделать испытаний, чтобы с заданной вероятностью (уровнем доверия) Q ожидать, что среднее арифметическое $\bar{f}$ наблюдаемых значений случайной величины отклонится от её математического ожидания не больше чем на η ?

Ответ на поставленный вопрос может быть следующим [9]. На основании центральной предельной теоремы, считая число опытов большим, можно утверждать, что случайная величина $\bar{f}$ распределена нормально, с математическим ожиданием

$$M\left[\bar{f}\right] = M\left[f\right]$$

и средним квадратическим отклонением

$$\sigma\left[\bar{f}\right] = \frac{\sigma\left[f\right]}{\sqrt{N}}, \tag{13}$$

где $M\left[f\right]$, $\sigma\left[f\right]$ – математическое ожидание и среднее квадратическое отклонение случайной величины f. Тогда

$$\mathrm{P}\left\{ \left|\bar{f} - M\left[f\right]\right| < \eta \right\} = 2\Phi\left(\frac{\eta}{\sigma\left[\bar{f}\right]}\right) = 2\Phi\left(\frac{\eta\sqrt{N}}{\sigma\left[f\right]}\right), \tag{14}$$

где $\Phi(x)$ – функция Лапласа.

Полагая правую часть (14) равной уровню доверия Q:

$$2\Phi\left(\frac{\eta\sqrt{N}}{\sigma\left[f\right]}\right) = Q\ ,$$

разрешим полученное уравнение относительно N:

$$N = Ent\left\{\left(\frac{\sigma\left[f\right]}{\eta}\right)^2 \left[\Phi^{-1}\left(\frac{Q}{2}\right)\right]^2\right\},$$

где Φ^{-1} - функция, обратная функции Лапласа.

Обычно на практике, приступая к моделированию случайного процесса методом Монте-Карло, не известно средне квадратическое отклонение интересующей нас случайной величины. Однако для приближенной оценки точности моделирования можно в первом приближении вместо $\sigma\left[f\right]$ воспользоваться её статистической оценкой, полученной в самой серии из n-реализаций:

$$\sigma\left[f\right] \approx \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f_i^2 - \bar{f}^2} \ .$$

SUMMARY

SEARCH OF THE GLOBAL EXTREMUM OF FUNCTION DETERMINED BY THE SIMULATION MODEL

I.V. Koplyk, P.V. Polenitsa*, O.P. Ostapova*

Sumy State University

**Scientific Centre of Battle Application of Missile Force and Artillery of Sumy State University*

We describe a method of finding of global extremum for the functions which values are calculated by means of simulation model. Under consideration is the question on error extent at definition of function values for calculation of a point of an extremum positioning with the prescribed accuracy.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жиглявский А.А., Жилинскас А.Г. Методы поиска глобального экстремума. – М.: Наука, 1991. – 248с.
2. Brent R.P. Algorithms for minimization without derivatives. – New Jersey: Prentice-Hall,– 1973. – 195 p.
3. Anderssen R.S., Bloomfield P. Properties of the random search in global optimization // J. Optimiz. Theory and Applic. – 1975. – V.16, No. 5/6. – P.383-398.
4. Реклейтис Г., Рейвиндран А., Рэгсдел К. Оптимизация в технике: В 2 кн.: Пер. с англ. – М.: Мир, 1986. - Кн.1. – 349с.
5. Spendley W., Hext G. R., Himsworth F. R. Sequential Application of Simplex Designs in Optimization and Evolutionary Operation // Technometrics. - 1962. - №4. – P. 441–461.
6. Дубровин Б.А., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия: Методы и приложения. – 2-е изд., перераб. – М.: Наука, 1986. – 760 с.
7. А.Г. Сухарев, А.В. Тимохов, В.В. Федоров. Курс методов оптимизации. – М.: Наука, 1986. – 328с.
8. Nelder J.A., Mead R. A Simplex Method for Function Minimization // Computer J. – 1965. - № 7. – P. 308–313.
9. Вентцель Е.С. Исследование операций. – М.: Советское радио, 1972. - 552 с.

Поступила в редакцию 28 апреля 2009 г.