

关于空间复盖方法

严仲德

总体最优化中的空间复盖方法⁽¹⁾, (Space covering techniques) 例如 Evtushenko (Евтушенко) 方法⁽²⁾、Shubert方法⁽³⁾等从71年开始出现以来, 得到不少人的关注。

这里将从两个方面对空间复盖方法进一步深入探讨。

(1) 在空间复盖方法中, 对 Lipschitz 条件的常数 L , 假设为已知的, 而实际上要知道 L 将是一个同等困难的问题, 这里将给出一个 L 的统计估计法, 这方法基于“总体最优化的熵理论”⁽⁴⁾一文中 $T(x)$ 分布的一个深入结果。

(2) 指出空间复盖方法中这二个方法实质上是熵理论⁽⁴⁾中渐进收缩方法的一个特例, 就是⁽⁴⁾中 ϵ 熵界, $\epsilon = 0$ 的特殊情况, 注意到空间复盖方法在高维时是有缺点的, 而使用 ϵ 熵界将克服这一缺点, 使之在高维时能行之有效。

§1

用空间复盖方法求 S 维空间上有界闭区域 Ω 上函数 $y = f(X)$ 的总极小值, 需已知关于 X 的 Lipschitz 条件中的常数 L , 才能实施, 而实际上要知道 $y = f(X)$ 在 Ω 上的 L 常数是十分困难的问题。

注意到当 $y = f(X)$ 存在各偏导数时, 偏导数数值的上界, 就可作为 Lipschitz 条件中的 L 。

故可运用⁽⁴⁾中 Ω 上 $f(X)$ 方向导数统计分布(或绝对值)的 $T_0(x)$ (或 $T(x)$), 其随机变量 $\xi (= f'_i(X))$ 的上界来代替 Lipschitz 条件中的 L 。

运用 $T(x)$ 的经验分布函数 $T_n(x)$ 的最大子样作为 ξ 的上界的近似, 进而可用来估计 L 。

$T_n(x)$ 的第 k 项子样分位数为 $\xi_k^{(n)}$, $\xi_k^{(n)}$ 最大项为 $\xi_n^{(n)}$, 这时 $k = n = n - l + 1$, 有 $l = 1$ 。

这样就可用子样边序项的极限分布来统计估计常数 L 。

利用斯米尔诺夫的结果^{[5][6]}。

设随机变量

$$U_k^{(n)} = 2n \left[1 - F \left(\xi_k^{(n)} \right) \right]$$

$k = n - l + 1$ 渐近地服从一个具有自由度 $2l$ 的 χ^2 一分布

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(c < U_k^{(n)} < d) = \int_0^d \frac{u^{l-1} e^{-\frac{u}{2}}}{2^l \Gamma(l)} du$$

本文1980年6月13日收到

这里 $\xi_k^{(n)}$ 是将子样中的数值由大到小排列后的第 l 个值, $F(x)$ 是随机变量 ξ 的分布函数, 在这里 $F(x)$ 就是 $T_o(x)$ 。

特别是最大值 $k=n$, $l=1$ 时, 有

$$T_o(\xi_n^{(n)}) = F(\xi_n^{(n)}) = 1 - \frac{1}{2n} U_n^{(n)}$$

$U_n^{(n)}$ 的渐近分布是自由度为 2 的 χ^2 -分布, n 充分大时有

$$P(U_n^{(n)} \leq \chi_\alpha^2) \geq 1 - \alpha$$

$$\left(\text{这里 } P(\chi^2 > \chi_\alpha^2) = \frac{1}{2^{\frac{i}{2}} \Gamma\left(\frac{i}{2}\right)} \int_{\chi_\alpha^2}^{+\infty} e^{-\frac{u}{2}} u^{\frac{i}{2}-1} du = \alpha, \quad i \text{ 是自由度} \right)$$

$$T_o(\xi_n^{(n)}) = F(\xi_n^{(n)}) \geq 1 - \frac{1}{2n} \chi_\alpha^2$$

约有 $1 - \alpha$ 的把握判定

$$T_o(\xi_n^{(n)}) \geq 1 - \frac{1}{2n} \chi_\alpha^2$$

注意到 ξ 的样本空间是 Ω 上任取点、任取方向的方向导数值, Ω 是 S 维闭区域, 而任一方向由一个 S 维单位球面决定, (即为一 $S-1$ 维闭有界区域)。故实际是在 $-\Omega \times \Omega_{S-1}$ 的 $2S-1$ 维有界闭区域中取点, 设其测度为 $\mu(\Omega \times \Omega_{S-1})$ 。

由于 $T_o(\xi_n^{(n)}) = P(\xi < \xi_n^{(n)})$, 是 $\xi < \xi_n^{(n)}$ 出现的概率, 而这里是在 $\Omega \times \Omega_{S-1}$ 上随机抽取, 故在 $P(\xi < \xi_n^{(n)}) \mu(\Omega \times \Omega_{S-1})$ 的测度上有 $\xi = f_l'(X) \leq \xi_n^{(n)}$ 即在这些测度上 $L \leq \xi_n^{(n)}$ 。即在 $T_o(\xi_n^{(n)}) \mu(\Omega \times \Omega_{S-1})$ 的测度范围上 Lipschitz 条件常数 L 有 $L \leq \xi_n^{(n)}$ 。

由于 $T_o(\xi_n^{(n)}) \geq 1 - \frac{1}{2n} \chi_\alpha^2$ 故有 $1 - \alpha$ 的把握判定, 在大于 $\left(1 - \frac{1}{2n} \chi_\alpha^2\right) \mu(\Omega \times \Omega_{S-1})$ 的测度上有 $L \leq \xi_n^{(n)}$ 。这样就得定理:

定理 1.1: Ω 上 $f(X)$ 的方向导数统计分布 $T_o(x)$ 进行 n 次抽样, 其最大子样为 $\xi_n^{(n)}$, 把 $\xi_n^{(n)}$ 作为 $f(X)$ 关于 X 的 Lipschitz 条件常数 L 的近似, 则有 $1 - \alpha$ 的把握判定在大于 $\left(1 - \frac{1}{2n} \chi_\alpha^2\right) \mu(\Omega \times \Omega_{S-1})$ 的测度上 $L \leq \xi_n^{(n)}$, (即在原区域 $1 - \frac{1}{2n} \chi_\alpha^2$ 范围上) 当 n 越大时越正确。(这里 α, χ_α^2 是从自由度为 2 的 χ^2 -分布表上查得)

例如 $\alpha = 0.01$ 时 $\chi_\alpha^2 = 9.210$, 若取 500 个子样 $T_o(\xi_n^{(n)}) \geq 1 - \frac{1}{2n} \chi_\alpha^2 = 0.99079$ 。就得到约有 99% 的把握判定在原区域的 99.079% 范围上有 $L \leq \xi_n^{(n)} = \xi_{500}^{(500)}$

这样就给出了一个可实现的Lipschitz条件常数 L 的统计估计法,一个求近似值的易于实施的方法,而且有统计的依据。

§2

容易看出空间复盖方法中Evtushenko方法及Shubert方法一定意义下是熵理论中渐进收缩方法的一个特例,是其中 ε 熵界在 $\varepsilon=0$ 时的特例。

记 $A(X) = |\text{grad}f(X)|$,其上界 $A_0 = \sup_{X \in \Omega} A(X)$ 就是 Ω 上 $f(X)$ 的最大方向导数,偏导数的上界 A_0 就可作为Lipschitz条件常数 L 。

由[4]引理3.1、系2:若 Ω 上一点 X_j ,有 $f(X_j) > \bar{f}_{\min}$,且 $A(X)$ 几乎处处存在,在 Ω 上有上界 A_0 ,则必存在 r ,在邻域 $|X - X_j| < r$ 上, $H(X) = 0$ 。 $(\bar{f}_{\min}$ 是目前已知最小值)。

具体定量化有:由[4]中定义4.1,一般地 ε 熵界 $G_\varepsilon = T^{-1}(1 - 2H^{-1}(\varepsilon))$ 。

由引理4.1:对 ε 熵界 G_ε ,若 $|X - X_j| < R = \frac{f(X_j) - \bar{f}_{\min}}{G_\varepsilon}$,则有 $H(X) \leq \varepsilon$ 。

特别当 $\varepsilon = 0$, $G_\varepsilon = T^{-1}(1) = A_0$

$$\begin{aligned} |X - X_j| < R &= \frac{f(X_j) - \bar{f}_{\min}}{A_0} \\ A_0 |X - X_j| &< f(X_j) - \bar{f}_{\min} \\ f(X_j) - A_0 |X - X_j| &> \bar{f}_{\min} \end{aligned}$$

又Lipschitz条件中 $L = A_0$

$|f(X_j) - f(X)| \leq L |X_j - X| = A_0 |X_j - X|$,由于考虑总极小值,所以仅注意 $f(X)$ 变小的情况。

$$f(X_j) - f(X) \leq A_0 |X_j - X|$$

就有 $f(X) \geq f(X_j) - A_0 |X - X_j| > \bar{f}_{\min}$

在 $|X - X_j| < R$ 范围内的点总有 $f(X) > \bar{f}_{\min}$,在 X 点完全排除了小于目前已知最小值的可能性,所以可以不再考虑这些点。

这样就将 X_j 点的一个邻域,以至 Ω 中所有这样的邻域排除出去,使搜索总极小值的区域缩小。例如Shubert方法也可逐渐缩小区域,就是将不可能的区域排除,实际上就是[4]中将0熵的区域排除(就是把没有总极小值信息的区域排除)。

我曾用最大方向导数 A_0 来进行试算(即用0熵界试算)发现在高维时有很大的计算量(这一实践得来的结论与[1]中对Evtushenko及Shubert方法评论是相一致的)它们仅适用于低维,若不强调0熵来渐进收缩,而用 ε 熵界来代替强调完全不可能小于总极小值的0熵界,就留下了余地,可以大大减少计算工作量,而最后的总极小值还能用熵科学地数量地进行衡量,这也从一个侧面说明 ε 熵界引入的必要性和合理性。

参 考 文 献

- [1] Dixon L. C. W, Szegö G. P. (eds), Towards Global Optimisation(1975), 2(1978)
- [2] Евтушенко Ю. Г., Вычисл. матем. и матем. физ, 11, 6, (1971), 1390—1403.
- [3] Shubert B. O., SIAM J. Numer, Anal. 9, 3. pp. 379—388(1972)
- [4] 严仲德, 总体最优化的熵理论, 《自然杂志》12(1979)[上海师范学院论文选编(1978)]。
- [5] М. 费史, 概率论与数理统计。
- [6] Смирнов Н. В. Предельные законы распределения для членов вариационного ряда. москва(1949).

www.cnki.net