

基于低偏差序列 Halton 的函数极值搜索方法*

The Extreme Value Search Method based on Low Discrepancy Sequence Halton

熊李军, 武 昱, 钱克昌, 赵乐至

XIONG Li-jun, WU Yu, QIAN Ke-chang, ZHAO Le-zhi

(西北核技术研究所, 陕西西安 710024)

(Northwest Institute of Nuclear Technology, Shaanxi, Xi'an, 710024, China)

摘要: 研究序列的偏差与函数极值的关系, 并针对不可微优化问题, 提出基于低偏差序列 Halton 的函数极值搜索算法. 该算法按 Halton 序列采样, 以 λ_k 为步长, 沿各个方向(如坐标轴方向)同时搜索, 直到满足要求或达到迭代上限才退出搜索.

关键词: Halton 序列 低偏差序列 局部搜索 蒙特卡罗方法

中图分类号: O224, TP391 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-9164(2013)01-0009-03

Abstract: The relationship between the discrepancy of sequences and the extreme value of functions is studied. A extreme value search algorithm is proposed in order to overcome non-differentiable optimization problems. This algorithm samples with Halton sequence, and then searches by step λ_k in different directions (such as directions of axes), and terminates when requirements reach or iteration limit meets.

Key words: Halton sequence, low discrepancy sequence, local search, Monte Carlo method

蒙特卡罗搜索在不可微优化中的作用较大, 然而直接使用伪随机序列或拟随机序列来搜索函数极值, 收敛速度较慢. 为了加快搜索速度, Niederreiter 等^[1]提出一种局部搜索技术, 将 N 个拟随机点映射到以 x_M (搜索中的极值点) 为中心, ε_k 为半径的超立方体内. 这种方法只有在拟随机点的散度 $d_N < \varepsilon$ 时, 才能保证搜索到极值点. Christian^[2]设计了全局自适应搜索方法, 将 I_k 中满足条件的立方体分成 2^s 个子立方体, 然后在这些立方体的顶点上进行搜索, 但是在极端情况下, I_k 中的立方体数目会呈指数增加.

我们知道, 当目标函数 $f(x)$ 的一阶偏导数不存在或者计算困难时, 共轭梯度法、牛顿-高斯法等将不能用于搜索 $f(x)$ 的极值. 本文借鉴牛顿-高斯法, 设计不需要一阶偏导数的局部搜索方法(记为 UPLS), 以 λ_k 为步长, 沿各个方向(如坐标轴方向)同时搜索, 直到搜索到更好的点或达到迭代上限才退出搜索. 又

考虑到低偏差^[3]序列新产生的点, 会散布在前面的点留下的空隙中, 比伪随机序列分布得更均匀. 虽然统计学者已提出过多种偏差序列, 如 Van der Vorput 序列^[2], Halton 序列^[4,5], Faure 序列^[6]等. 但是 Halton 序列构造相对简单, 应用也较广泛. 因此, 我们选择低偏差序列 Halton 进行采样, 然后再利用 UPLS 进行局部搜索, 提出一种基于 Halton 的 UPLS 算法, 简称 HQMC 算法.

不失一般性, 仅考虑 s 维单位立方体 $D^s = [0, 1]^s$. $f(x)$ 为定义在 D^s 上的函数, 满足条件

$$|f(x) - f(y)| \leq L \|x - y\|^\eta, \forall x, y \in D^s,$$

式中, $L, \eta > 0$.

记 $M = \max_{x \in D^s} f(x)$, $f(x)$ 的最大值问题就是寻找 \hat{x} , 使得 $\hat{x} = \arg \max_{x \in D^s} f(x)$.

1 低偏差序列与函数极值的关系

记 $P_n = \{x_1, \dots, x_n\}$ 为 D^s 上的点集, 为说明点集 P_n 的均匀性, 引入偏差的概念. 点集 P_n 的偏差^[3]定义为

收稿日期: 2012-07-17

作者简介: 熊李军(1985-), 男, 工程师, 硕士, 主要从事概率论与数理统计的研究.

* 国家 863 项目(项目编号: 2010AA8060017)资助.

$$D(P_n) = \sup_{J \in E} \left| \frac{A(J; P_n)}{n} - \mu(J) \right|,$$

其中 E 是 D^s 上具有形式 $\prod_{i=1}^s [u_i, v_i]$ 的所有子区间的集合, μ 是 D^s 上勒贝格测度, $A(J; P_n) = \sum_{i=1}^n \chi_J(x_i), \forall J \in D^s$.

对于序列 $\{x_i\}_{i=1}^\infty$ 前 n 项组成的点集 P_n , 如果偏差满足 $D(P_n) = o(n^{-1}(\ln n)^n)$, 则称序列 $\{x_i\}_{i=1}^\infty$ 为低偏差序列.

定理 记 $M_n = \max_{x \in P_n} f(x)$, 则有下式成立

$$M - M_n \leq L (2D(P_n))^{\frac{1}{s}}.$$

证明 记 $D_{x_{n_0}}^* = \|x_{n_0} - \hat{x}\| = \min_{x \in P_n} \|x - \hat{x}\|$,

如果 $f(x)$ 有多个最大值点, 只需取诸多 $D_{x_{n_0}}^*$ 中最小的即可. 对 $\forall \epsilon > 0$, 记

$$I_{x_{n_0}} = \prod_{i=1}^s \left[(\hat{x})_i - \frac{D_{x_{n_0}}^*}{2} + \epsilon, (\hat{x})_i + \frac{D_{x_{n_0}}^*}{2} - \epsilon \right],$$

则有

$$I_{x_{n_0}} \subset B(\hat{x}, D_{x_{n_0}}^*) = \{y \mid \|y - \hat{x}\| \leq D_{x_{n_0}}^*\},$$

且 $A(I_{x_{n_0}}; P_n) = 0$. 由偏差的定义可知

$$\left[\frac{D_{x_{n_0}}^*}{2} - \epsilon \right]^s \leq D(P_n).$$

因此, $D_{x_{n_0}}^* \leq 2(D(P_n))^{\frac{1}{s}}, M - M_n = |f(\hat{x}) - f(x_{n_0})| \leq L \| \hat{x} - x_{n_0} \| \leq L (D_{x_{n_0}}^*) \leq$

$L(2D(P_n))^{\frac{1}{s}}$, 所以定理成立.

2 基于 Halton 序列的函数极值搜索方法

2.1 低偏差序列的选取

Halton 序列产生过程如下:

(1) 令 b 是一个素数, 那么任意一个非负整数 n , 可以唯一的分解成与数基 b 有关的式子

$$n = \sum_{j=0}^m a_j b^j,$$

其中 $a_j \in \{0, 1, \dots, b-1\}, j = 0, 1, \dots, m$.

(2) 以 b 为数基的数, 作反射变换, 如二进制 1101 变为 0.1011.

(3) 用十进制表示上一步以 b 为数基的那个数的值, 即

$$\phi_b(n) = \sum_{j=0}^m a_j b^{-j-1}.$$

$\phi_b(\cdot)$ 称为数基 b 的根式逆函数. 若要生成 s 维的 Halton 序列, 则取前 s 个素数 b_1, \dots, b_s , 并令

$$x_n = (\phi_{b_1}(n), \dots, \phi_{b_s}(n)).$$

那么称序列 $\{x_n\}_{n=0}^\infty$ 为 Halton 序列.

分别用伪随机序列和 Halton 序列抽取了二维单位正方形上的 1000 个点. 从图 1 和图 2 结果可以看出, Halton 序列比伪随机序列散布均匀得多, 改善了采样点的质量, 所以选择 Halton 序列进行采样.

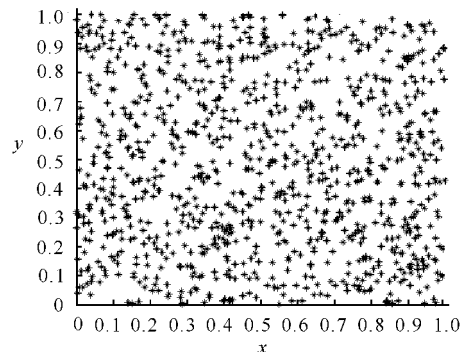


图 1 伪随机点集

Fig. 1 Pseudo-random point set

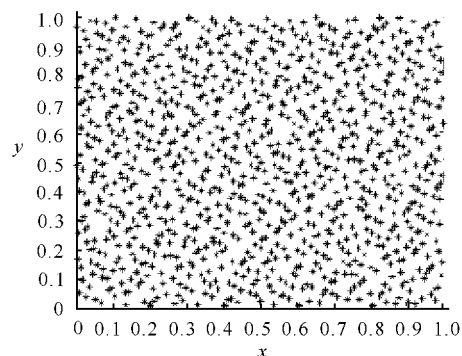


图 2 Halton 点集

Fig. 2 Halton point set

2.2 函数极值搜索方法

给定 $\lambda_0 > 0$ 和初值 $x_0 \in D^s$.

2.2.1 UPLS 算法

步骤 0 $k \leftarrow 0, \lambda \leftarrow \lambda_0$;

步骤 1 计算 $f(x_k)$ 和 $f_{\max} = \max_{1 \leq i \leq s} \{f((x_k)_i \pm \lambda)\}$;

步骤 2 如果 $f(x_k)^3 \geq f_{\max}$, 则 $\lambda \leftarrow \frac{\lambda}{2}$, 转步骤 3; 否则 $x_{k+1} \leftarrow \arg \max_{1 \leq i \leq s} \{f((x_k)_i \pm \lambda)\}, \lambda \leftarrow \lambda_0, k \leftarrow k+1$, 转步骤 3;

步骤 3 如果 λ, k 满足停止规则, 停止; 否则, 转步骤 1.

算法中 $(x_k)_i \pm \lambda$ 表示 x_k 的第 i 个分量 $\pm \lambda$. 显然, 序列 $\{f(x_k)\}_{k=0}^\infty$ 是递增且有界的, 容易证明 UPLS 算法所产生的序列 $\{f(x_k)\}_{k=0}^\infty$ 收敛于某一极大值点.

2.2.2 HQMC 算法

在 UPLS 算法的基础上, 首先生成 Halton 点集

P_N , 然后对 $\forall x_k \in P_N$, 进行局部搜索, 得 HQMC 算法. 步骤如下:

- 步骤 0 产生 Halton 点集 $P_N = \{x_1, \dots, x_N\}$;
 $k \leftarrow 0, \forall x_0 \in D^s; \hat{x} \leftarrow x_0, \hat{M} \leftarrow f(x_0)$;
 步骤 1 $k \leftarrow k + 1$;
 步骤 2 如果 $f(x_k) > \hat{M}$, 则 $\hat{x} \leftarrow x_k, \hat{M} \leftarrow f(x_k)$, 转步骤 3; 否则转步骤 3
 步骤 3 按 UPLS 算法寻找出局部最大值点 \tilde{x} , 转步骤 4;
 步骤 4 如果 $f(\tilde{x}) > \hat{M}$, 则 $\hat{x} \leftarrow \tilde{x}, \hat{M} \leftarrow f(\tilde{x})$, 转步骤 5; 否则转步骤 5;
 步骤 5 如果 $k > N$, 则停止; 否则, 转步骤 1.
 在 HQMC 中, \hat{x} 记录了所找到的最大值点, \hat{M} 为相应的值.

3 算例

考虑如下的极值问题

$$\begin{cases} \max f(x, y) = (x - 0.43)^2 + (y - 0.87)^2, \\ (x, y) \in [0, 1]^2. \end{cases}$$

显然, 问题的最大值为 $f(1, 0) = 1.0818$, UPLS 的迭代次数上限设为 100 次, $x_0 = (0.1, 0.1), \lambda_0 = 1$, 而且利用 HQMC 搜索 $f(x, y)$ 的最大值, 只用了 3 次循环. 而计算分析表明, UPLS 迭代上限的设定对搜索性能的影响较大, 迭代次数上限设为 10 次时,

HQMC 循环 10000 次后, 搜索到的最大值为 1.0797, 误差比较大. 因此, UPLS 的迭代次数应足够多, 尽可能搜索到局部极值, 才能提高 HQMC 算法搜索的可靠性.

参考文献:

- [1] Niederreiter H, Peart P. Localization of search in quasi-monte carlo methods for global optimization[J]. SIAM J Sci Comput, 1986, 7(2): 660-664.
- [2] Christian B. Adaptive search in Quasi-monte carlo optimization[J]. Mathematics of Computation, 1995, 64, (210): 807-818.
- [3] Niederreiter H. Random number generation and quasi-monte carlo methods[M]. Philadelphia: SIAM, 1992.
- [4] Owen A B. Variance with alternative scramblings of digital nets[J]. ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation, 2003, 13(4): 363-378.
- [5] Wang X, Hickmell F. Randomized halton sequences[J]. Mathematical and Computer Modelling, 2000, 32(7~8): 887-899.
- [6] Halton J H. On the efficiency of certain quasi-random sequences of points in evaluating multi-dimensional integrals[J]. Number Math, 1960, 2: 84-90.

(责任编辑: 尹 闯)

新研究解决核孔复合物调控亚端粒基因沉默

端粒是真核生物染色体中基因调控的一个特殊的位点, 位于端粒附近的基因其转录活性往往受到抑制, 但细胞如何精确地调控端粒末端基因转录沉默的作用机理尚不清楚。我国科研人员应用系统生物学手段分析, 发现核孔复合物 Nup170 的缺失能导致端粒位置效应的消失, Nup170 与组蛋白泛素化、组蛋白乙酰化、染色质重塑分子等众多参与染色质结构的基因存在着遗传互作, 并发现其与染色质重塑分子 Sth1 之间存在着物理相互作用。研究人员还系统地绘制了 Nup170 在基因组的结合草图, 发现了 Nup170 与亚端粒的结合依赖于端粒沉默信息分子 Sir4 途径。这项研究成果首次揭示出核孔复合物通过与染色质重塑分子作用调控亚端粒区域染色质的结构, 解决了长期以来人们对核孔复合物调控亚端粒基因沉默作用机制这一科学难题。由于亚端粒区的基因转录沉默与细胞衰老、人类疾病密切相关, 该成果将为探索细胞衰老及相关疾病提供科学依据。

(据科学网)