doi:10.16055/j.issn.1672-058X.2015.0012.006

# 黑箱函数优化问题中的响应面优化方法*

齐 静

(重庆师范大学 数学学院,重庆 401331))

**摘 要**:在实际科研领域和工程应用中经常会遇到一类问题,就是高价黑箱函数问题,针对高价黑箱函数的全局最优化问题,开展了径向基函数和响应面相结合的研究;针对径向基函数中响应面模型及目标值 $f_n^*$ 的选取进行了理论分析;提出了一种新的选取策略,不同的选取策略必然会导致不同的搜索模式,从而影响优化效果。

**关键词**:高价黑箱函数;全局优化;径向基函数;响应面模型;对称拉丁超立方设计

**中图分类号**:O241.3 **文献标志码**:A **文章编号**:1672-058X(2015)12-0027-04

在实际科研领域和工业应用中,经常会遇到一类问题,这类问题的函数值计算代价高昂,计算一次函数值就需要几个小时甚至更长的时间,而且这类函数通常没有显式表达式,导数也不可用,称这一类问题为高价黑箱函数(Expensive Black Box Function)[1]。将采用函数逼近的方法来解决其全局最优化问题。径向基函数插值是处理散乱数据的一种新的有效的方法,它具有计算格式简单、计算工作量小[2]等特点。近年来,国内外的一些学者对高价黑箱函数的优化问题进行了一系列的研究,研究表明:径向基函数插值是解决高价黑箱函数优化问题的一种新的有效的方法。

## 1 高价黑箱优化问题

高价黑箱函数的全局最优化问题[1]为

$$\min_{x \in S} f(x) \tag{1}$$

如果存在一个点 $x^* \in S$ 使得对任意的 $x \in S$ 都有不等式 $f(x^*) \leqslant f(x)$ 成立,就称 $x^*$ 是问题(1)的全局最优解,$f(x^*)$ 称为 $f(x)$ 在 $S$ 上的全局最优值;如果存在 $x' \in S$,在 $x'$ 的一个 $\delta$ 邻域 $B(x',\delta)$ 内,对任意的 $x \in S \cap B(x',\delta)$ 内都有不等式 $f(x') \leqslant f(x)$ 成立,就称 $x'$ 是问题(1)的一个局部最优解,$f(x')$ 称为 $f(x)$ 在 $S$ 上的局部最优值。

### 1.1 径向基函数插值模型

给定 $n$ 个不同的点 $x_1, x_2, \cdots, x_n \in R^d$,并且它们的函数值 $f(x_1), f(x_2), \cdots, f(x_n)$ 也是已知的,取定径向函数 $\varphi$,寻找具有如下形式的函数:

**收稿日期**:2015-05-15;**修回日期**:2015-06-18.

* **基金项目**:国家自然科学基金(10871217).

**作者简介**:齐静(1990-),女,河南南阳人,硕士研究生,从事全局最优化方法研究.

$$S_n(x) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \varphi(\| x - x_i \|)$$[2]

其中:$f$ 是一个确定性的连续函数,$\|x-x_i\|$表示 $x$ 与中心点 $x_i$ 之间的欧氏距离,$\lambda_i \in \mathbf{R}$,$i=1,2,\cdots,n$,$\varphi$ 就是径向基函数,选定一个径向基函数 $\varphi$ 之后,定义矩阵 $\boldsymbol{\Phi}_{ij}:=\varphi(\|x_i-x_j\|)$,$i,j=1,2,\cdots,n$。

### 1.2 径向基函数插值的基本思想[3]

(1) 生成初始点,对初始点进行函数值计算;

(2) 选定径向基函数,构造径向基函数插值模型;

(3) 使用模型函数预测目标值 $f_n^*$;

(4) 求解下一个迭代点 $x_{n+1}$,并对 $x_{n+1}$进行函数计算;

(5) 使用新的数据点更新径向基函数插值模型;

(6) 重复(3)-(5),直到收敛。

### 1.3 SLHD 方法选取初始点

设黑箱优化问题初始点的个数为 $n$、维数为 $d$,则选取的对称的拉丁超立方设计[4]是一个 $n\times d$ 的矩阵,矩阵的每一列是由$\{1,2,\cdots,n\}$随机生成的。对称的拉丁超立方具有下列性质:在一个 $n\times d$ 的对称拉丁超立方矩阵中,如果$(a_1,a_2,\cdots,a_l)$是其中的某一行,必有$(n+1-a_1,n+1-a_2,\cdots,n+1-a_l)$是这个矩阵的另外一行。对称的拉丁超立方具有良好的空间填充性质,因此将采用 SLHD 方法选取初始点,令 $r_{ij}$是对称拉丁超立方的第 $i$ 行第 $j$ 列元素,则第 $i$ 个初始点的第 $j$ 个坐标为 $x_{ij}$,则 $x_{ij}=r_{ij}\times\dfrac{b_i-a_i}{n}$。

### 1.4 响应面模型的构建

根据已选好的初始点 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 及其函数值 $f(x_1),f(x_2),\cdots,f(x_n)$,构建响应面模型,但是发现 $f(x_1),f(x_2),\cdots,f(x_n)$中,有些函数值可能非常小而有些函数值就可能非常大,这些极端的函数值会对响应面的构建造成较大的影响,从而造成较大的误差。为了解决这个问题,试图构建一种新的函数 $g(f)$来替换 $f$,从而优化这些极端的函数值,构建一个良好的响应面模型。所构建的 $g(x)$需满足 3 个条件:

(1) $g(x)$关于原点对称;

(2) $g(x)$严格增;

(3) $g(x)<x,x>0$[5]。

构建 $g(x)$为

$$g(x) = \begin{cases} \dfrac{x^2}{x+1}, x \geqslant 0 \\ \dfrac{x^2}{x-1}, x < 0 \end{cases}$$

**证明**:(1) ① $\forall x>0, g(-x)=\dfrac{(-x)^2}{(-x)-1}=-\dfrac{x^2}{x+1}=-g(x)$;

② $\forall x\leqslant 0, g(-x)=\dfrac{(-x)^2}{(-x)+1}=-\dfrac{x^2}{x-1}=-g(x)$。

因此$g(x)$关于原点对称。

(2) $g'(x)=\begin{cases} \dfrac{x^2+2x}{(x+1)^2}, x\geqslant 0; \\ \dfrac{x^2-2x}{(x-1)^2}, x<0。\end{cases}$

$g'_+(0)=g'_-(0)=0$,因此 $g'(0)=0$。当 $x>0$ 时,$g'(x)>0$,从而 $g(x)>g(0)=0$;当 $x<0$ 时,$g'(x)>0$,从而 $g(x)<g(0)=0$。因此对 $\forall x\in R$,$g(x)$ 是严格增的。

(3) 令 $h(x)=x-g(x)$,对 $\forall x>0$,$h(x)=x-\frac{x^2}{x+1}$,$h'(x)=1-\frac{2x(x+1)-x^2}{(x+1)^2}=1-\frac{x^2+2x}{(x+1)^2}=\frac{1}{(x+1)^2}>0$,对 $\forall x>0$,$h(x)=x-g(x)=x-\frac{x^2}{x+1}>h(0)=0$,因此 $\forall x>0$,$g(x)=\frac{x^2}{x+1}<x$。

### 1.5　目标值 $f_n^*$ 的选取

目标值 $f_n^*$ 的选取就是执行下面的循环迭代,每一次循环迭代都是从一个较小的目标值开始,结束于一个较大的目标值,从而进行全局搜索和局部搜索。

$$f_n^* = S_n^* - W_n(\max_{1\leqslant i\leqslant n} f(x_i) - S_n^*)$$

$$W_n = \left[\frac{\mathrm{mod}(N-(n-n_0)),N+1}{N}\right]^2$$

其中:循环长度 $N=5$,$n_0$ 表示初始迭代点的个数,$n\geqslant n_0$。

当 $W_n=0$ 时,有 $f_n^*=S_n^*$,只有当 $S_n(x)$ 在 $S$ 上的全局极小点不是太接近于先前的点时才是可以接受的;否则,需要重新设置 $f_n^*$ 的值,使其略小于 $S_n^*$。

令循环长度 $N=5$,$W_n$ 在 $1,\left(\frac{4}{5}\right)^2,\left(\frac{3}{5}\right)^2,\left(\frac{2}{5}\right)^2\left(\frac{1}{5}\right)^2$,0 之间进行循环,让 $W_n$ 循环下降的目的就是为了让目标值 $f_n^*$ 能够逐渐地接近 $S_n^*$,更进一步地说,$W_n$ 平方地减小,从而更有效地进行搜索。

### 1.6　下一个迭代点 $x_{n+1}$ 的选取

径向基函数所要满足的插值条件为:$\begin{cases} s_y(x_i)=f(x_i),i=1,\cdots,n \\ s_y(y)=f_n^* \end{cases}$

令 $s_y(x)=s_n(x)+[f_n^*-s_n^y]l_n(y,x)$,$x\in R^d$,其中 $l_n(y,x_i)=0$,$i=1,\cdots,n$,$l_n(y,y)=1$。根据文献[1]所定义的半内积:$<s,s>:=(-1)^{m_0+1}\sum_{i=1}^{n}\lambda_i s(x_i)$,则 $g_n(y):=<s_y,s_y>-<s_n,s_n>=(-1)^{m_0+1}\mu_n(y)[f_n^*-s_n(y)]^2$,径向基函数的下一个迭代点 $x_{n+1}$ 取自于 $g_n(y)$ 的极小值。

## 2　重启动策略

采用 SLHD 方法生成初始点是因为它对高维低维问题都比较实用,基于 SLHD 的使用,有一些测试问题的 CPU 时间要短一些,而有一些测试问题的 CPU 时间就要长一些了,花费较长时间的原因可能是算法在一个错误的局部极小点处进行了较长时间的局部搜索,也就是说,采用的这种径向基插值算法在进行全局搜索时,由于局部搜索有可能失败,从而导致算法不能准确定位全局极小点。

为了解决这个问题,提出了一种重启动策略[2],当算法连续多次迭代都没有取得明显进展,当没有改进的函数值的数量超过一个临界值之后,将使用一种新的 SLHD 重新开始搜索,通常将这个临界值设定为 30,使用这种新的 SLHD 方法,可以使算法及时跳出局部最小值,加快收敛速度。

## 3 结束语

径向基函数具有良好的逼近能力及较快的收敛速度;SLHD方法的对称性也提高了算法收敛的速度;使用 $g(f)$ 来替换 $f$ 使得构建的响应面更加准确;$f_n^*$ 的循环下降迭代可以使其能够逐渐接近 $S_n^*$,更有效地进行搜索;重启动策略有效地防止了算法陷入某个局部极小值[6]。因此,径向基函数插值非常适合求解高价黑箱函数的全局最优化问题

**参考文献:**

[1] BJÖRKMAN M, HOLMSTRÖM K. Global Optimization of Costly Nonconvex Functions Using Radial Basis Functions[J]. Optimization and Engineering,2000,1(4):373-397

[2] ROMMEL G.Improved Strategies for Radial Basis Function Methods for Global Optimization[J].Journal of Global Optimization ,2007,37:113-135

[3] REGIS G, CHRISTINE A. Shoemaker. Constrained Global Optimization of Expensive Black Box Function Using Radial Basis Function[J].Journal of Global Optimization,2005,31:153-171

[4] YE K Q, LI W, SUDJIANTO A. Algorithmic Construction of Optimal Symmetric Latin Hypercube Designs[J].Joumal of Statistial Planning and Inference,2000,90(1):145-159

[5] REGIS G, CHRISTINE A.Shoemaker.A Quasi-multistart Framework for Global Optimization of Expensive Function Using Response Surface Models[J].Journal of Globa Optimization,2013,56: 1719-1753

[6] 林玉锋,陈璟,陈少飞,等.一种新颖的混合响应面优化方法[J].计算机应用研究,2012,29(6):2180-2183

# An Optimization Method of Response Surface for Expensive Black Box Function Optimization

**QI Jing**

(School of Mathematical Sciences, Chongqing Normal University, Chongqing 401331, Chongqing)

**Abstract**: In real scientific and engineering applications, problems on the expensive black box function often appear. In view of the expensive black box function global optimization, this paper researches the radial basis function and the response surface. Based on the radial basis of selection of target value, $f_n^*$ is analyzed in theory, this paper proposes a new selection strategy. Different strategy selection leads to different search patterns, which affects the optimization effect.

**Key words**: expensive black box function; global optimization; radial basis function; response surface model; symmetric Latin hypercube design