

Математическое моделирование
Mathematical modeling

УДК 004.023, 519.677

<https://doi.org/10.32362/2500-316X-2025-13-2-121-131>

EDN EWCRYQ



НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

Метод оценки выпуклости рельефа целевых функций в процессе поиска экстремума

А.В. Смирнов[@]

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, 119454 Россия

[@] Автор для переписки, e-mail: av_smirnov@mirea.ru

Резюме

Цели. Целью работы является разработка метода оценки выпуклости рельефа целевой функции (ЦФ) в окрестностях экстремума, не требующего выполнения дополнительных расчетов ЦФ и сложной математической обработки, а использующего только данные, собираемые в процессе поиска экстремума.

Методы. Выпуклость рельефа характеризуется показателем степени степенной аппроксимации ЦФ в окрестностях экстремума. Оценка этого показателя осуществляется по парам пробных точек с учетом их расстояний до найденного экстремума и значений ЦФ в них. На основе анализа погрешностей такой оценки в методе предусмотрены отбор пробных точек по их расстояниям от найденного экстремума и отбор пар пробных точек по углу между направлениями на них из найденного экстремума. Для экспериментальной проверки метода использовались тестовые функции с различной выпуклостью, как выпуклые, так и вогнутые. В качестве метода поиска экстремума применялся алгоритм роя частиц (particle swarm optimization, PSO). Результаты экспериментов представлялись в виде статистических характеристик и гистограмм распределений значений оценки показателя степени степенной аппроксимации ЦФ.

Результаты. Эксперименты показали, что при соответствующем выборе параметров отбора пробных точек и их пар метод дает достоверные значения границ диапазона, в который попадают оценки показателя степени степенной аппроксимации.

Выводы. Предложенный метод может стать частью методики анализа свойств рельефа ЦФ. Для этого необходимо дополнить его алгоритмами автоматической настройки параметров отбора пробных точек и их пар. Повышение информативности метода может быть достигнуто путем анализа распределения оценок показателя степени по расстояниям пробных точек от экстремума и направлениям на них.

Ключевые слова: рельеф целевой функции, выпуклая функция, вогнутая функция, степенная аппроксимация, показатель степени, гистограмма

• Поступила: 28.05.2024 • Доработана: 26.07.2024 • Принята к опубликованию: 12.02.2025

Для цитирования: Смирнов А.В. Метод оценки выпуклости рельефа целевых функций в процессе поиска экстремума. *Russian Technological Journal*. 2025;13(2):121–131. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2025-13-2-121-131>, <https://elibrary.ru/EWCYQ>

Прозрачность финансовой деятельности: Автор не имеет финансовой заинтересованности в представленных материалах или методах.

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

RESEARCH ARTICLE

Method for estimating objective function landscape convexity during extremum search

Alexander V. Smirnov [@]

MIREA – Russian Technological University, Moscow, 119454 Russia

[@] Corresponding author, e-mail: av_smirnov@mirea.ru

Abstract

Objectives. The work set out to develop a method for estimating the objective function (OF) landscape convexity in the extremum neighborhood. The proposed method, which requires no additional OF calculations or complicated mathematical processing, relies on the data accumulated during extremum search.

Methods. Landscape convexity is characterized by the index of power approximation of the OF in the vicinity of the extremum. The estimation of this index is carried out for pairs of test points taking into account their distances to the found extremum and OF values in them. Based on the analysis of estimation errors, the method includes the selection of test points by their distances from the found extremum and the selection of pairs of test points by the angle between the directions to them from the found extremum. Test functions having different convexities, including concave, were used to experimentally validate the method. The particle swarm optimization algorithm was used as an extremum search method. The experimental results were presented in the form of statistical characteristics and histograms of distributions of the estimation values of the degree of the OF approximation index.

Results. The conductive experiments confirm that the proposed method provides a reliable estimation of power index range bounds upon condition of appropriate definition of trial points and trial point pair selection parameters.

Conclusions. The proposed method may be a part of OF landscape analysis. It is necessary to complement it with the algorithms for automatic adjustment of trial points and pairs of trial points selection parameters. Additional information may be provided by analyzing the dependencies of power index estimations and trial point distances from extrema.

Keywords: objective function landscape, convex function, concave function, power approximation, power index, histogram

• Submitted: 28.05.2024 • Revised: 26.07.2024 • Accepted: 12.02.2025

For citation: Smirnov A.V. Method for estimating objective function landscape convexity during extremum search. *Russian Technological Journal*. 2025;13(2):121–131. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2025-13-2-121-131>, <https://elibrary.ru/EWCYQ>

Financial disclosure: The author has no financial or proprietary interest in any material or method mentioned.

The author declares no conflicts of interest.

ВВЕДЕНИЕ

Одним из направлений развития и совершенствования методов поиска оптимальных решений является исследование свойств рельефа оптимизируемых целевых функций (ЦФ) и учет этих свойств при выборе алгоритма поиска или/и настройке его параметров [1]. Это направление обычно называют Exploratory Landscape Analysis (ELA). Методы ELA основаны на определении и классификации свойств рельефов ЦФ и разработке алгоритмов их количественной оценки путем обработки результатов расчетов ЦФ в пробных точках [2–5].

Из свойств рельефа в данной работе нас будут интересовать характеристики его выпуклости, по которым участки рельефа ЦФ могут быть разделены на выпуклые и вогнутые.

Приведем определения [6, 7]. Функция $f(\mathbf{x})$ называется выпуклой на множестве X , если для $\forall(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \in X$ и $\forall \lambda \in [0, 1]$ выполняется условие:

$$f(\mathbf{x}_\lambda) \leq \lambda f(\mathbf{x}_1) + (1 - \lambda)f(\mathbf{x}_2), \quad (1)$$

где $\mathbf{x}_\lambda = \lambda \mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\mathbf{x}_2$.

Функция $f(\mathbf{x})$ называется строго выпуклой, если в условии (1) выполняется строгое неравенство.

Функция $f(\mathbf{x})$ называется вогнутой, если функция $-f(\mathbf{x})$ является выпуклой. Аналогично определяется строго вогнутая функция. Характеристики выпуклости имеют большое значение для понимания свойств ЦФ. В частности, если в окрестностях точки минимума функция вогнутая, то такой минимум будет неустойчивым в том смысле, что незначительное смещение из этой точки может приводить к значительному увеличению значения ЦФ [6, 8].

В набор свойств ELA входят характеристики выпуклости. Методика их оценки следующая [2, 3]. В области поиска формируется множество пробных точек $\{\mathbf{x}_i\}$, в которых определяются значения ЦФ $f(\mathbf{x}_i)$. Из этого множества случайным образом выбираются пары точек $\{\mathbf{x}_{j1}, \mathbf{x}_{j2}\}$, для которых определяется значение $f(\mathbf{x}_{j\lambda})$ при $\lambda = 0.5$, после чего рассчитывается разность Δ левой и правой частей (1). Далее определяется вероятность выпуклости ЦФ как доля пар точек, для которых $\Delta < \Delta_{\text{conv}}$, где $\Delta_{\text{conv}} < 0$ – задаваемый порог. Такое свойство характеризует ЦФ в среднем по всей области поиска, а не отдельные участки рельефа, в частности, окрестности локальных экстремумов, которые представляют наибольший интерес. Кроме того, для получения каждого значения $f(\mathbf{x}_{j\lambda})$ требуется выполнить дополнительный расчет ЦФ, что в случаях, когда такой расчет осуществляется путем моделирования объекта, как во многих задачах оптимизации характеристик радиотехнических устройств [9], может требовать значительных затрат времени.

В случае, если выполняется расчет градиента ЦФ, выпуклость ЦФ может проверяться на каждой итерации по выполнению неравенства [7]:

$$(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)^T \cdot (\nabla f(\mathbf{x}_2) - \nabla f(\mathbf{x}_1)) > \varepsilon, \quad (2)$$

где $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ – векторы координат начальной и конечной точек итерации, T – операция транспонирования, $\nabla f(\mathbf{x})$ – градиент ЦФ в точке $\mathbf{x}$, ε – малое положительное число. Расчет градиента требует наличия аналитических выражений для частных производных ЦФ по координатам или применения метода конечных разностей. В последнем случае количество выполняемых расчетов ЦФ существенно увеличивается.

Также выпуклость рельефа ЦФ характеризуется собственными значениями гессиана $\nabla^2 f(\mathbf{x})$ – матрицы вторых частных производных. Функция является выпуклой, если все собственные значения гессиана неотрицательные. Абсолютные величины собственных значений характеризуют выпуклость рельефа по соответствующим направлениям. В [3] введен набор свойств, определяемых по статистике значений отношения максимального и минимального собственных значений гессиана.

В [10] предлагается мера степени выпуклости в виде количества неотрицательных собственных чисел. Однако для вычисления гессиана требуется значительное количество дополнительных расчетов значений ЦФ.

В последние годы при решении задач оптимизации большое внимание привлекает применение так называемых *суррогатных* моделей ЦФ. Такая модель должна сохранять наиболее важные для работы алгоритма поиска экстремума свойства ЦФ, но расчет значений моделирующей функции должен требовать существенно меньших затрат времени, чем определение значения самой ЦФ [11, 12]. Достаточно точная модель ЦФ будет правильно воспроизводить и выпуклость рельефа. Такой подход имеет большие перспективы, но построение моделей связано с большим объемом вычислений.

Задачей данной работы является разработка метода оценки выпуклости рельефа ЦФ в процессе поиска экстремумов, не требующего расчета производных ЦФ и выполнения дополнительных расчетов значений ЦФ помимо тех, которые выполняются самим алгоритмом поиска, а также не требующего построения суррогатных моделей ЦФ.

АНАЛИЗ МЕТОДА ОЦЕНКИ ВЫПУКЛОСТИ РЕЛЬЕФА ЦФ

Рассмотрим задачу оценки характеристик выпуклости рельефа ЦФ $f(\mathbf{x})$ в окрестности $\Omega_{\mathbf{x}}$ локального минимума $\mathbf{x}^*$, в которой выполняется условие:

$$f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{x}^*), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_{\mathbf{x}}. \quad (3)$$

Будем искать степенную аппроксимацию изменений ЦФ в окрестности $\mathbf{x}^*$ в виде:

$$f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^*) \approx \hat{f}(\mathbf{x}) = k \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|^\alpha, \quad (4)$$

где $\|\mathbf{x}\|$ – евклидова норма вектора $\mathbf{x}$. Показатель степени α является объективной характеристикой выпуклости рельефа ЦФ. При $\alpha > 1$ ЦФ выпуклая, а при $\alpha < 1$ – вогнутая. Показатель α не зависит от значения ЦФ $f(\mathbf{x}^*)$ в точке экстремума, т.к. при изменении этого значения на такую же величину сместятся и значения ЦФ в других точках. Поэтому в дальнейшем с целью упрощения записи будем без потери общности полагать $f(\mathbf{x}^*) = 0$ и рассматривать (4) как аппроксимацию самой ЦФ.

Предположим, что точка $\mathbf{x}^*$ известна, ЦФ действительно является степенной функцией вида (4), а значения α и k одинаковы во всех точках $\Omega_{\mathbf{x}}$. Пусть имеются две пробные точки $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{x}_2$ и значения ЦФ

в них равны $f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2)$ соответственно. Тогда из системы уравнений

$$\begin{cases} f(\mathbf{x}_1) = k \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|^\alpha, \\ f(\mathbf{x}_2) = k \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|^\alpha \end{cases} \quad (5)$$

находим:

$$\alpha = \frac{\ln(f(\mathbf{x}_1)) - \ln(f(\mathbf{x}_2))}{\ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|) - \ln(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|)}. \quad (6)$$

При невыполнении приведенных выше предположений эта оценка окажется приближенной. Оценим возникающие при этом погрешности.

Допустим, что найденное в процессе поиска положение локального минимума $\mathbf{x}'$ отличается от истинного положения $\mathbf{x}^*$ (рис. 1):

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x}^* + \Delta\mathbf{x}. \quad (7)$$

В этом случае имеем оценку:

$$\hat{\alpha} = \frac{\ln(f(\mathbf{x}_1)) - \ln(f(\mathbf{x}_2))}{\ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'\|) - \ln(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'\|)}. \quad (8)$$

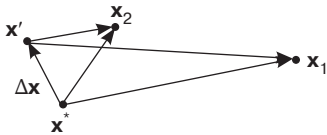


Рис. 1. К анализу погрешностей при неточном определении положения минимума ЦФ

Поделив (8) на (6) и выразив с помощью теоремы косинусов расстояния от пробных точек $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ до истинного минимума $\mathbf{x}^*$ через известные расстояния до $\mathbf{x}'$, получаем:

$$\begin{aligned} K_\alpha = \frac{\hat{\alpha}}{\alpha} &= \frac{\ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|) - \ln(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|)}{\ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'\|) - \ln(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'\|)} = \\ &= \frac{0.5 \ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'\|^2 + \|\Delta\mathbf{x}\|^2 - 2\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'\| \cdot \|\Delta\mathbf{x}\| \cdot \cos \psi_1)}{\ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'\|)} - \\ &- \frac{0.5 \ln(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'\|^2 + \|\Delta\mathbf{x}\|^2 - 2\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'\| \cdot \|\Delta\mathbf{x}\| \cdot \cos \psi_2)}{\ln(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'\|)}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь ψ_1 и ψ_2 – углы между векторами $(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}')$, $(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}')$ и вектором $\Delta\mathbf{x}$ соответственно.

Значение K_α не зависит от значений ЦФ в пробных точках и инвариантно к изменению масштаба измерения расстояний, что делает его удобной характеристикой погрешности оценки $\hat{\alpha}$. Будем полагать, что $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'\| > \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'\|$ и нормировать все расстояния к $\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'\|$. На рис. 2 приведены результаты расчета по (9) зависимостей значения K_α от расстояния $\|\Delta\mathbf{x}\|$ от истинного до найденного положения минимума для нескольких комбинаций параметров, приведенных в табл. 1. Углы ψ_1 и ψ_2 полагаются или равными друг другу, или отличающимися незначительно. Это предположение основано на том, что, как будет видно из приведенного далее анализа, для получения достоверных оценок $\hat{\alpha}$ углы между направлениями на пробные точки должны быть достаточно малыми.

Таблица 1. Параметры примеров расчета зависимости K_α от расстояния $\|\Delta\mathbf{x}\|$

Примеры	$\ \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'\ $	$\ \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'\ $	ψ_1	ψ_2
Пример 1	10	1	90	90
Пример 2	10	1	100	80
Пример 3	10	1	80	100
Пример 4	10	1	30	30
Пример 5	10	1	150	150
Пример 6	3	1	90	90
Пример 7	30	1	90	90

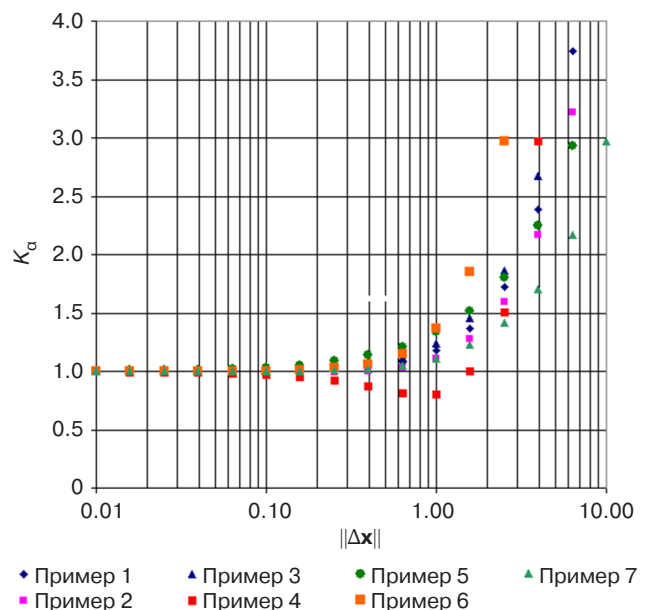


Рис. 2. Зависимости отношения K_α оценки $\hat{\alpha}$ к истинному значению α от расстояния $\|\Delta\mathbf{x}\|$ от истинного до найденного положения минимума

Приведенные результаты позволяют сделать вывод, что погрешность оценки показателя мала в случаях, когда расстояния до обеих пробных точек существенно больше, чем расстояние от истинного до найденного положения минимума. Конкретнее, при выполнении неравенства $\|\Delta \mathbf{x}\| \leq 0.1 \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|$ отклонение K_α от единицы не превышает 0.1, что можно считать приемлемым для приблизительной оценки выпуклости рельефа ЦФ.

Далее рассмотрим погрешность оценки $\hat{\alpha}$, обусловленную различиями значений α_1 и α_2 , а также k_1 и k_2 по направлениям от точки минимума $\mathbf{x}^*$ на точки $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{x}_2$. Из (6) получаем:

$$\begin{aligned} \hat{\alpha} &= \frac{\ln(f(\mathbf{x}_1)) - \ln(f(\mathbf{x}_2))}{\ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|) - \ln(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|)} = \\ &= \frac{\ln(k_1 \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|^{\alpha_1}) - \ln(k_2 \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|^{\alpha_2})}{\ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|) - \ln(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|)} = \\ &= \bar{\alpha} + \frac{\ln(k_1/k_2)}{\ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|/\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|)} - \\ &\quad - \frac{\Delta\alpha \ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\| \cdot \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|)}{\ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|/\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|)}, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\bar{\alpha} = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2}$, $\Delta\alpha = \frac{\alpha_2 - \alpha_1}{2}$.

Примем среднее арифметическое показателей для двух пробных точек $\bar{\alpha}$ за правильную оценку показателя α . Из (10) получаем соотношение для расчета абсолютной погрешности этой оценки.

$$\begin{aligned} E_\alpha &= \hat{\alpha} - \bar{\alpha} = \frac{\ln(k_1/k_2)}{\ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|/\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|)} - \\ &\quad - \frac{\Delta\alpha \ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\| \cdot \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|)}{\ln(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|/\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|)}. \end{aligned} \quad (11)$$

Первое слагаемое показывает вклад в погрешность оценки $\hat{\alpha}$ различия коэффициентов k в двух пробных точках, а второе слагаемое – вклад различия показателей α .

На рис. 3 приведены примеры зависимостей величины погрешности E_α от расстояния второй пробной точки от минимума $\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|$. Параметрами являются расстояние первой пробной точки от минимума $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|$, а также отношение k_1/k_2 и введенная выше величина $\Delta\alpha$, характеризующие различия параметров степенной аппроксимации в двух точках. Значения этих параметров для каждого примера приведены в табл. 2.

Таблица 2. Параметры примеров расчета зависимости E_α от значений $\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|$

Примеры	$\ \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\ $	k_1/k_2	$\Delta\alpha$
Пример 1	1	2	0
Пример 2	1	1	0.2
Пример 3	10	1	0.2
Пример 4	100	1	0.2
Пример 5	10	2	0.2
Пример 6	10	0.5	0.2

Пример 1 отображает случай, когда показатель α постоянен по всем направлениям, а коэффициент k изменяется. Погрешность растет с увеличением расстояния $\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|$, т.к. уменьшается знаменатель первого слагаемого. В следующих трех примерах меняется только показатель α . Вид зависимостей различный для разных значений $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|$, т.к. второе слагаемое в (11) не инвариантно к изменению масштаба расстояний. Абсолютное значение E_α с ростом $\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|$ может как увеличиваться, так и уменьшаться, и даже обращаться в 0, если выполняется равенство $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\| \cdot \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\| = 1$. В примерах, представленных в рядах 5 и 6, присутствуют обе составляющие погрешности. Направление изменения и знак суммарной погрешности в зависимости от соотношения параметров могут быть различными.

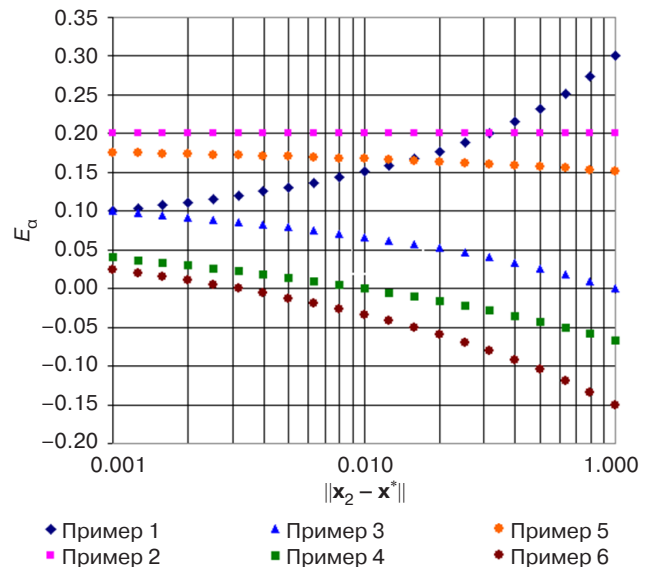


Рис. 3. Зависимости разности E_α оценки показателя степени $\hat{\alpha}$ и принятого за истинное значение $\bar{\alpha}$ от расстояния ближней пробной точки до точки минимума

Таким образом, на величину погрешности E_α влияют величины различий параметров k и α в двух пробных точках, а эти различия в большинстве

случаев будут тем меньше, чем меньше угол между направлениями на пробные точки из точки минимума.

Реальная ЦФ аппроксимируется степенной функцией вида (4) лишь приближенно. В общем случае аппроксимация будет иметь вид степенного ряда. Рассмотрим вопрос, какую информацию о выпуклости рельефа может дать при этом оценка $\hat{\alpha}$ по двум пробным точкам. Пусть ЦФ является суммой двух степенных функций:

$$f(\mathbf{x}) = k_1 \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|^{\alpha_1} + k_2 \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|^{\alpha_2}. \quad (12)$$

Соотношение (8) принимает вид:

$$\hat{\alpha} = \frac{\ln \left(k_1 \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|^{\alpha_1} + k_2 \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|^{\alpha_2} \right)}{\ln \left(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\| \right)} - \frac{\ln \left(k_1 \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|^{\alpha_1} + k_2 \|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\|^{\alpha_2} \right)}{\ln \left(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\| \right)}. \quad (13)$$

На рис. 4 представлены примеры зависимостей $\hat{\alpha}$ от расстояния между первой пробной точкой и экстремумом $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|$ при сочетаниях параметров, приведенных в табл. 3.

Таблица 3. Параметры примеров расчета зависимости $\hat{\alpha}$ от значений $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|$

Примеры	α_1	α_2	k_1	k_2	$\ \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\ /\ \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^*\ $
Пример 1	1	2	0.5	0.5	10
Пример 2	1	2	0.2	0.8	10
Пример 3	1	2	0.8	0.2	10
Пример 4	1	2	0.5	0.5	3

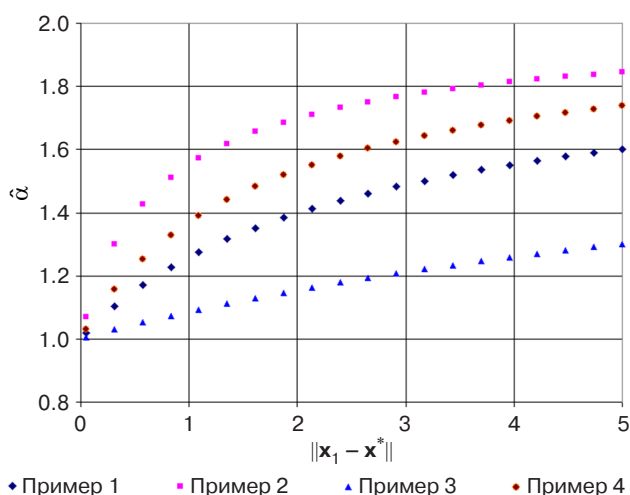


Рис. 4. Зависимости оценки показателя степени $\hat{\alpha}$ от расстояния $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|$ при разных сочетаниях параметров в соотношении (13)

Во всех примерах оценка показателя степени $\hat{\alpha}$ при увеличении расстояний опорных точек до точки минимума изменяется по направлению от меньшего значения α_1 к большему значению α_2 . Скорость этого изменения зависит от соотношений весовых коэффициентов k_1, k_2 в (12) (примеры 2 и 3) и от отношения расстояний двух опорных точек до точки минимума (пример 4). Сходные закономерности будут иметь место и при большем числе слагаемых степенного ряда. Эти результаты надо учитывать при анализе выпуклости реальных ЦФ.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДА

Целью экспериментов была проверка возможностей получения достоверных оценок $\hat{\alpha}$ с применением описанного метода. Методика экспериментов включала получение наборов пробных точек в процессе поиска минимума ЦФ и последующую обработку собранных данных для получения оценок $\hat{\alpha}$ при различных параметрах отбора пар пробных точек. Эксперименты выполнялись с помощью программ в среде *MATLAB*¹.

В качестве метода поиска минимума применялся хорошо известный и широко применяемый алгоритм роя частиц (particle swarm optimization, PSO) [13], который, как показывает опыт его использования, позволяет находить экстремумы как выпуклых, так и невыпуклых ЦФ [14]. С помощью этого алгоритма осуществлялся поиск минимума тестовых функций из часто используемого в подобных исследованиях набора [15], а также специально разработанных тестовых функций. Сведения о тестовых функциях будут приведены ниже вместе с результатами экспериментов. Функция *MATLAB*, реализующая алгоритм PSO, была доработана, чтобы возвращать в вызывающую ее программу массив данных, содержащий координаты всех частиц роя во всех итерациях, и соответствующие значения ЦФ. Последующая обработка этих данных включала следующие действия:

1. Определение координат найденного минимума $\mathbf{x}'$ и значения ЦФ в этой точке $f(\mathbf{x}')$.
2. Расчет расстояний всех пробных точек $\mathbf{x}$ от найденного минимума $\mathbf{x}'$ и отбор по выполнению неравенств $d_{\min} \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\| \leq d_{\max}$, где $d_{\min}, d_{\max}$ — задаваемые пороги. Значение $d_{\min}$ влияет на погрешность оценки $\hat{\alpha}$, определяемую соотношением (9). Значение $d_{\max}$ определяет размеры окрестности $\mathbf{x}'$, в пределах которой вычисляется оценка α .

¹ <https://www.mathworks.com/products/matlab.html>. Дата обращения 14.02.2025. / Accessed February 14, 2025.

3. Расчет энтропии распределения пробных точек по ортантам системы координат с центром в точке найденного минимума $\mathbf{x}'$. Значение энтропии определяется по формуле:

$$H = - \sum_{i=1}^{N_{\text{орт}}} P_i \log_2 P_i, \quad (14)$$

где P_i – вероятность попадания точки в i -й ортант; $N_{\text{орт}}$ – число ортантов, равное 2^{ND} ; ND – размерность пространства поиска. Это значение дает оценку равномерности распределения пробных точек по разным направлениям от найденного минимума.

4. Расчет углов ϕ_{ij} между направлениями на пробные точки $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$, входящие во все возможные пары из ранее отобранных пробных точек.
5. Отбор пар точек $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$ для оценки параметров степенной аппроксимации. Условия отбора сформулированы на основе приведенного выше анализа погрешностей метода.

$$\phi_{ij} \leq \phi_{\max}, \quad \ln \frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}'\|}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}'\|} \geq C_1, \quad (15)$$

где $\phi_{\max}$ и C_1 – задаваемые параметры, причем предполагается, что точка $\mathbf{x}_i$ дальше от найденного минимума, чем точка $\mathbf{x}_j$. Значение C_1 определяет минимум знаменателя в (11). Значение $\phi_{\max}$ определяет максимальный угол между направлениями на точки пары.

6. Расчет аналогично п. 3 энтропии распределения отобранных пар по ортантам, что дает оценку полноты информации о показателе α по разным направлениям.
7. Расчет по соотношению (8) оценок показателя степенной аппроксимации $\hat{\alpha}$ для отобранных пар точек. Формирование гистограммы значений этих оценок. Расчет статистических характеристик их распределения.

Далее приведены примеры результатов применения описанного метода. В случаях изотропных ЦФ, у которых по всем направлениям от минимума параметры степенной функции (4) одинаковы, предложенный метод находит значения этих параметров с высокой точностью. Такие примеры здесь не рассматриваются, а внимание уделено анизотропным ЦФ, для которых ожидается наличие погрешностей, обусловленных различиями параметров степенной функции по разным направлениям. Для всех использованных ЦФ выполняется равенство $f(\mathbf{x}^*) = 0$, что, как пояснялось ранее, не приводит к потере общности результатов.

Данные разделены на две таблицы. В табл. 4 приведены исходные параметры 12 опытов. Размерность пространства поиска во всех опытах равна 4. В столбце « $N_{\text{точ}}$ » указано полное число пробных точек, собранных в процессе поиска минимума. В следующем столбце дано расстояние между найденным минимумом $\mathbf{x}'$ и истинным положением минимума $\mathbf{x}^*$. Это значение приводится для справки и не используется алгоритмом, т.к. истинное положение минимума предполагается неизвестным. В последующих столбцах приведены значения параметров, по которым выполняется отбор пробных точек и их пар.

Таблица 4. Исходные параметры опытов

Опыт	Функция	$N_{\text{точ}}$	$\ \mathbf{x}' - \mathbf{x}^*\ $	$d_{\min}$	$d_{\max}$	$\phi_{\max}$	C_1
1	ellips	1980	$7.11 \cdot 10^{-5}$	$1.00 \cdot 10^{-8}$	10	10	2
2	ellips	1980	$7.11 \cdot 10^{-5}$	0.001	10	10	2
3	ellips	1980	$7.11 \cdot 10^{-5}$	0.001	10	2	2
4	ellips	1980	$7.11 \cdot 10^{-5}$	0.001	10	10	6
5	ellips	1980	$7.11 \cdot 10^{-5}$	0.001	10	2	6
6	diffpowers	1120	$1.03 \cdot 10^{-2}$	$1.00 \cdot 10^{-8}$	10	10	2
7	diffpowers	1120	$1.03 \cdot 10^{-2}$	0.001	10	10	2
8	diffpowers	1120	$1.03 \cdot 10^{-2}$	0.1	10	10	2
9	diffpowers	1120	$1.03 \cdot 10^{-2}$	0.1	10	30	2
10	TestLE4	1420	$1.20 \cdot 10^{-3}$	$1.00 \cdot 10^{-8}$	10	10	2
11	TestLE4	1420	$1.20 \cdot 10^{-3}$	0.01	10	10	2
12	TestLE4	1420	$1.20 \cdot 10^{-3}$	0.1	10	10	2

В табл. 5 приведены результаты этих опытов. Здесь $N_{\text{выб. точ}}$, $H_{\text{выб. точ}}$ – количество отобранных по п. 2 точек и энтропия их распределения по ортантам, $N_{\text{пар}}$, $H_{\text{пар}}$ – такие же показатели для отобранных по п. 5 пар точек. В следующих столбцах даны параметры распределения оценок $\hat{\alpha}$ по отобранным парам: минимум (min), среднее (mean), медиана (med), максимум (max), стандартное отклонение (std), асимметрия (skew) и эксцесс (kurt). Гистограммы значений оценок $\hat{\alpha}$ для опытов 5, 9 и 12 показаны на рис. 5.

Перейдем к анализу результатов экспериментов.

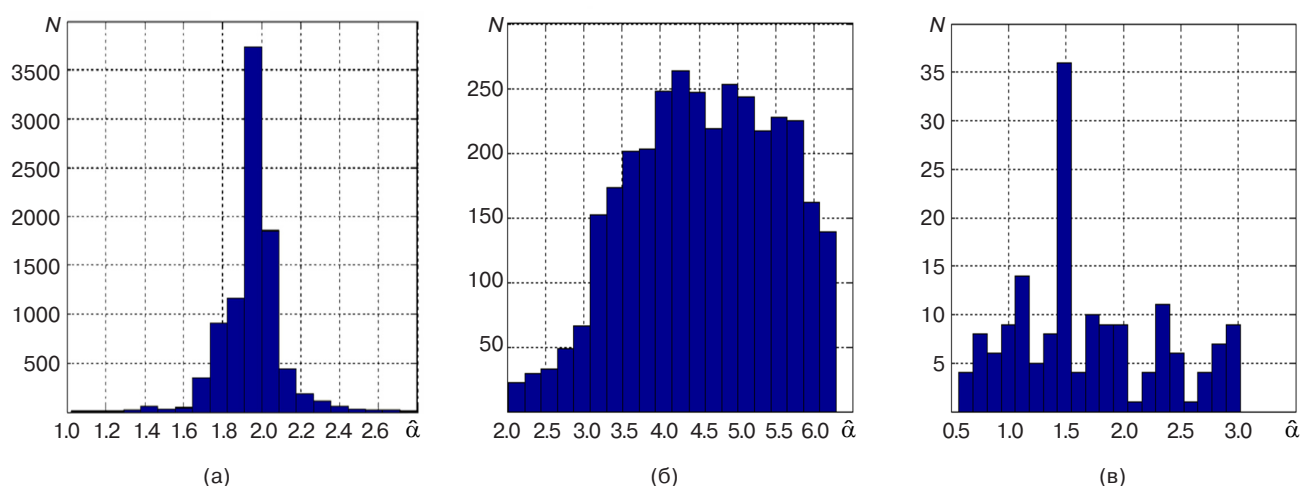
В опытах 1–5 исследовалась функция $\text{ellips}(\mathbf{x})$ [15], формируемая в соответствии с равенством:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{ND} (x_n - x_n^*)^2 \cdot 10^{(6(n-1)/(ND-1))}, \quad (16)$$

где $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_{ND})$ – координаты точки, $\mathbf{x}^* = (x_1^*, \dots, x_{ND}^*)$ – координаты минимума. Для данной ЦФ показатель степени $\alpha = 2$ по всем направлениям, а коэффициент k меняется по разным направлениям в диапазоне от 1 до 10^6 .

Таблица 5. Результаты опытов

Опыт	$N_{\text{выб. точ}}$	$H_{\text{выб. точ}}$	$N_{\text{пар}}$	$H_{\text{пар}}$	min	mean	med	max	std	skew	kurt
1	1978	3.845	202413	3.659	0.0003	1.916	1.926	6.545	0.414	0.590	9.351
2	1698	3.775	148938	3.515	0.0003	1.943	1.951	6.545	0.432	0.702	9.199
3	1698	3.775	41786	3.499	0.052	1.951	1.972	4.517	0.301	-0.045	9.988
4	1698	3.775	33095	3.263	0.929	1.940	1.947	3.523	0.231	0.658	7.901
5	1698	3.775	8982	3.222	1.025	1.953	1.969	2.799	0.142	-0.038	7.830
6	1118	3.766	506	3.367	2.447	4.803	4.769	6.564	0.937	-0.381	2.319
7	1118	3.766	506	3.367	2.447	4.803	4.769	6.564	0.937	-0.381	2.319
8	744	3.668	123	3.305	2.755	4.924	4.941	6.249	0.877	-0.382	2.277
9	744	3.668	3373	3.329	2.015	4.562	4.578	6.287	0.954	-0.222	2.271
10	1419	3.706	2448	3.012	0.568	2.615	2.763	3.561	0.435	-2.237	7.655
11	1196	3.710	1078	3.155	0.568	2.534	2.823	3.033	0.578	-1.482	3.981
12	805	3.654	165	2.707	0.568	1.685	1.494	3.016	0.635	0.467	2.355

Рис. 5. Гистограммы значений оценок $\hat{\alpha}$: (а) опыт 5, (б) опыт 9, (в) опыт 12

Во всех опытах с этой функцией среднее и медианное значения оценки $\hat{\alpha}$ близки к правильному значению 2. Диапазон оценок от минимума до максимума сужается по мере усиления ограничений при отборе пар, а стандартное отклонение уменьшается и достигает в опыте 5 величины порядка 7% от среднего значения, что можно признать вполне удовлетворительным. При этом форма функции распределения оценок оказывается симметричной и с острым пиком (рис. 5а). Энтропия распределения отобранных точек по органтам близка к максимальному значению 4. Энтропия распределения отобранных пар меньше, но из гистограммы этого распределения (здесь не приводится) видно, что в опытах 1–5 представлены все органты, т.е. в первом приближении учтены все направления. Это выполняется и для других рассматриваемых ниже функций.

В опытах 6–9 исследовалась функция $\text{diffpowers}(\mathbf{x})$ [15], определяемая соотношением:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{ND} (x_n - x_n^*)^{(2+4(n-1)/(ND-1))}, \quad (17)$$

где обозначения такие же, как в (16). Эта функция является суммой степенных функций от разных составляющих вектора координат точки. Показатели степени меняются в диапазоне от 2 до 6.

В опытах 6–8 последовательно увеличивается параметр $d_{\min}$, и количество отобранных пар точек уменьшается. В опыте 7 это приводит к сужению границ диапазона оценок $\hat{\alpha}$, но в опыте 8 отобранных пар точек становится слишком мало, и нижняя граница этого диапазона смещается вниз. В опыте 9 увеличен допуск $\varphi_{\max}$ на угол между точками

пары. В результате число отобранных пар существенно увеличилось, а границы диапазона оценок $\hat{\alpha}$ (от 2 до 6) определены с приемлемыми погрешностями. При этом гистограмма значений $\hat{\alpha}$ для этого опыта значимо отлична от нуля во всем диапазоне от 2 до 6 (рис. 5б), что является признаком различия показателя в степенной аппроксимации по разным направлениям.

В стандартном наборе испытательных функций [15] нет функции, рельеф которой в области минимума можно было бы делать как выпуклым, так и вогнутым. Для получения таких свойств были разработаны несколько дополнительных испытательных функций. Далее приведены результаты экспериментов с одной из них – TestLE4(x), вычисляемой по следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= k \|\mathbf{z}\|^\alpha, \\ \mathbf{z} &= \mathbf{x} - \mathbf{x}^*, \\ k &= \frac{1}{\|\mathbf{z}\|^2} \sum_{n=1}^{ND} (K_{1n} z_n^2 h(z_n) + K_{2n} z_n^2 h(-z_n)), \\ \alpha &= \frac{1}{\|\mathbf{z}\|^2} \sum_{n=1}^{ND} (W_{1n} z_n^2 h(z_n) + W_{2n} z_n^2 h(-z_n)), \\ h(y) &= \begin{cases} 1, & y > 0, \\ 0, & y \leq 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (18)$$

Переменные K_{ij} и W_{ij} являются элементами матриц $\mathbf{K}$ и $\mathbf{W}$, имеющих размеры $2 \times ND$, и представляют значения, соответственно, коэффициентов и показателей степени по положительным и отрицательным направлениям всех координат пространства поиска. Результирующие значения показателя степени k и коэффициента α по направлению на пробную точку получают интерполяцией между значениями этих величин по координатным осям. Таким образом, обеспечивается возможность произвольного задания параметров степенной функции по разным координатам и плавных изменений этих параметров по промежуточным направлениям.

В опытах 10–12 задавались следующие матрицы параметров:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 3 & 1.5 & 0.5 & 1 \\ 1.5 & 2 & 1 & 0.7 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 5 \\ 3 & 1 & 0.5 & 1 \end{pmatrix}.$$

По части направлений функция выпуклая, а по другим – вогнутая, и скорость изменения функции также разная по разным направлениям. Диапазон значений показателя степени – от 0.5 до 3.

В опытах 10–12 последовательно увеличивался порог отбора точек $d_{\min}$. В результате количества отобранных точек и пар уменьшались. При этом максимальное значение оценки $\hat{\alpha}$ уменьшилось незначительно, минимальное значение осталось без изменений, а значение эксцесса распределения уменьшилось существенно, т.е. распределение стало более равномерным. Точность оценки границ диапазона $\hat{\alpha}$ можно считать приемлемой. Гистограмма значений оценок отлична от нуля во всем диапазоне от нижней до верхней границ.

Приведенные примеры представляют часть экспериментальных данных, полученных при использовании различных тестовых функций. Кроме того, помимо алгоритма PSO применялись алгоритмы «Дифференциальная эволюция» (differential evolution, DE) [13] и «Эволюционная стратегия с адаптацией ковариационной матрицы» (covariance matrix adaptation evolution strategy, CMA-ES) [16].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты экспериментов показывают, что при соответствующем задании параметров отбора пробных точек и их пар описанный метод позволяет получить объективную информацию о выпуклости ЦФ в окрестностях найденного минимума.

Ответ на вопрос о том, как осуществить задание параметров отбора, требует дальнейшей работы. Одним из возможных вариантов является автоматизация процесса последовательного изменения этих параметров, как это проделывалось вручную при получении описанных выше результатов. Критериями выбора параметров могут быть статистические характеристики и форма гистограммы распределения оценок $\hat{\alpha}$. Для получения большей информации о выпуклости рельефа, помимо указанной гистограммы, следует анализировать распределение значений $\hat{\alpha}$ по расстояниям от точки найденного минимума, а также многомерное распределение по расстояниям и направлениям.

Описанный метод оценки выпуклости может стать составной частью методики анализа свойств рельефа ЦФ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Malan K.M. A Survey of Advances in Landscape Analysis for Optimisation. *Algorithms*. 2021;14(2):40. <https://doi.org/10.3390/a14020040>
2. Mersmann O., Bischl B., Trautmann H., Preuss M., Weihs C., Rudolf G. Exploratory Landscape Analysis. In: *GECCO'11: Proceedings of the 13th Annual Genetic and Evolutionary Computation*. 2011. P. 829–836. <https://doi.org/10.1145/2001576.2001690>
3. Kerschke P., Trautmann H. Comprehensive Feature-Based Landscape Analysis of Continuous and Constrained Optimization Problems Using the R-package flacco. In: Bauer N., Ickstadt K., Lübke K., Szepannek G., Trautmann H., Vichi M. (Eds.). *Applications in Statistical Computing. Book Series: Studies in Classification, Data Analysis, and Knowledge Organization*. Berlin/Heidelberg, Germany: Springer; 2019. P. 93–123. https://doi.org/10.1007/978-3-030-25147-5_7
4. Trajanov R., Dimeski S., Popovski M., Korosec P., Efimov T. *Explainable Landscape-Aware Optimization Performance Prediction*. Preprint. 2021. <http://arxiv.org/pdf/2110.11633v1>, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2110.11633>
5. Van Stein B., Long F.X., Frenzel M., Krause P., Gitterle M., Back T. *DoE2Vec: Deep-learning Based Features for Exploratory Landscape Analysis*. Preprint. 2023. <https://arxiv.org/pdf/2304.01219v1>
6. Поляк Б.Т. *Введение в оптимизацию*. М.: Наука; 1983. 384 с.
7. Nocedal J., Wright S. *Numerical Optimization*: 2nd ed. Springer; 2006. 684 p.
8. Bertsimas D., ten Eikelder S.C.M., den Hertog D., Trichakis N. Pareto Adaptive Robust Optimality via a Fourier-Motzkin Elimination Lens. *Math. Program.* 2024;205(9):485–538. <https://doi.org/10.1007/s10107-023-01983-z>
9. Смирнов А.В. Сравнение алгоритмов многокритериальной оптимизации характеристик радиотехнических устройств. *Russian Technological Journal*. 2022;10(6):42–51. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2022-10-6-42-51>
10. Doikov N., Stich S.U., Jaggi M. *Spectral Preconditioning for Gradient Methods on Graded Non-convex Functions*. Preprint. 2024. <https://arxiv.org/pdf/2402.04843v1>
11. Yaochu J. A Comprehensive Survey of Fitness Approximation in Evolutionary Computation. *Soft Computing*. 2005;9(1): 3–12. <https://doi.org/10.1007/s00500-003-0328-5>
12. Hong L.J., Zhang X. *Surrogate-Based Simulation Optimization*. Preprint. 2021. <https://arxiv.org/pdf/2105.03893v1>
13. Карпенко А.П. *Современные алгоритмы поисковой оптимизации. Алгоритмы, вдохновленные природой*: 3-е изд. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана; 2021. 448 с.
14. Смирнов А.В. Свойства целевых функций и алгоритмов поиска в задачах многокритериальной оптимизации. *Russian Technological Journal*. 2022;10(4):75–85. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2022-10-4-75-85>
15. Hansen N., Finck S., Ros R., Auger A. *Real-Parameter Black-Box Optimization Benchmarking 2009: Noiseless Functions Definitions*. [Research Report] RR-6829. INRIA; 2009. URL: <https://hal.inria.fr/inria-00362633v2>
16. Hansen N. *The CMA Evolution Strategy: A Tutorial*. Preprint. 2016. <https://arxiv.org/abs/1604.00772v2>

REFERENCES

1. Malan K.M. A Survey of Advances in Landscape Analysis for Optimisation. *Algorithms*. 2021;14(2):40. <https://doi.org/10.3390/a14020040>
2. Mersmann O., Bischl B., Trautmann H., Preuss M., Weihs C., Rudolf G. Exploratory Landscape Analysis. In: *GECCO'11: Proceedings of the 13th Annual Genetic and Evolutionary Computation*. 2011. P. 829–836. <https://doi.org/10.1145/2001576.2001690>
3. Kerschke P., Trautmann H. Comprehensive Feature-Based Landscape Analysis of Continuous and Constrained Optimization Problems Using the R-package flacco. In: Bauer N., Ickstadt K., Lübke K., Szepannek G., Trautmann H., Vichi M. (Eds.). *Applications in Statistical Computing. Book Series: Studies in Classification, Data Analysis, and Knowledge Organization*. Berlin/Heidelberg, Germany: Springer; 2019. P. 93–123. https://doi.org/10.1007/978-3-030-25147-5_7
4. Trajanov R., Dimeski S., Popovski M., Korosec P., Efimov T. *Explainable Landscape-Aware Optimization Performance Prediction*. Preprint. 2021. <http://arxiv.org/pdf/2110.11633v1>, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2110.11633>
5. van Stein B., Long F.X., Frenzel M., Krause P., Gitterle M., Back T. *DoE2Vec: Deep-learning Based Features for Exploratory Landscape Analysis*. Preprint. 2023. <https://arxiv.org/pdf/2304.01219v1>
6. Polyak B.T. *Vvedenie v optimizatsiyu (Introduction into Optimization)*. Moscow: Nauka; 1983. 384 p. (in Russ.).
7. Nocedal J., Wright S. *Numerical Optimization*: 2nd ed. Springer; 2006. 684 p.
8. Bertsimas D., ten Eikelder S.C.M., den Hertog D., Trichakis N. Pareto Adaptive Robust Optimality via a Fourier-Motzkin Elimination Lens. *Math. Program.* 2024;205(9):485–538. <https://doi.org/10.1007/s10107-023-01983-z>
9. Smirnov A.V. Comparison of algorithms for multi-objective optimization of radio technical device characteristics. *Russian Technological Journal*. 2022;10(6):42–51. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2022-10-6-42-51>
10. Doikov N., Stich S.U., Jaggi M. *Spectral Preconditioning for Gradient Methods on Graded Non-convex Functions*. Preprint. 2024. <https://arxiv.org/pdf/2402.04843v1>
11. Yaochu J. A Comprehensive Survey of Fitness Approximation in Evolutionary Computation. *Soft Computing*. 2005;9(1): 3–12. <https://doi.org/10.1007/s00500-003-0328-5>
12. Hong L.J., Zhang X. *Surrogate-Based Simulation Optimization*. Preprint. 2021. <https://arxiv.org/pdf/2105.03893v1>

13. Karpenko A.P. *Sovremennye algoritmy poiskovoi optimizatsii. Algoritmy, vdokhnovlennye prirodoi (Modern Search Optimization Algorithms. Nature-Inspired Optimization Algorithms)*: 3rd ed. Moscow: Baumann Press; 2021. 448 p. (in Russ.).
14. Smirnov A.V. Properties of objective functions and search algorithms in multi-objective optimization problems. *Russian Technological Journal*. 2022;10(4):75–85. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2022-10-4-75-85>
15. Hansen N., Finck S., Ros R., Auger A. *Real-Parameter Black-Box Optimization Benchmarking 2009: Noiseless Functions Definitions*. [Research Report] RR-6829. INRIA; 2009. Available from URL: <https://hal.inria.fr/inria-00362633v2>
16. Hansen N. *The CMA Evolution Strategy: A Tutorial*. Preprint. 2016. <https://arxiv.org/abs/1604.00772v2>

Об авторе

Смирнов Александр Витальевич, к.т.н., доцент, профессор кафедры телекоммуникаций, Институт радиоэлектроники и информатики, ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78). E-mail: av_smirnov@mirea.ru. Scopus Author ID 56380930700, <https://orcid.org/0000-0002-2696-8592>

About the author

Alexander V. Smirnov, Cand. Sci. (Eng.), Professor, Department of Telecommunications, Institute of Radio Electronics and Informatics, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454 Russia). E-mail: av_smirnov@mirea.ru. Scopus Author ID 56380930700, <https://orcid.org/0000-0002-2696-8592>