

Санкт–Петербургский государственный университет

РЫЧКОВ Андрей Сергеевич

Выпускная квалификационная работа

Методы случайного поиска и машинного обучения для получения оптимальной по стоимости траектории дороги на рельефе местности

Уровень образования: бакалавриат

Направление 01.03.02 «Прикладная математика и информатика»

Основная образовательная программа СВ.5005.2015 «Прикладная математика, фундаментальная информатика и программирование»

Научный руководитель:

профессор, кафедра математической теории моделирования систем управления, д.ф. - м.н.
Аббасов Меджид Эльхан оглы

Рецензент:

доцент, кафедра механики управляемого движения, к.ф. - м.н. Шиманчук Дмитрий Викторович

Санкт-Петербург

2024 г.

Содержание

Введение	3
Постановка задачи	4
Обзор литературы	6
Глава 1. Теоретическое описание применяемых методов . . .	8
1.1. Сведение к интегро-дифференциальному уравнению . . .	8
1.2. Метод случайных блужданий	9
1.3. Метод муравьиной колонии	11
1.4. Модификации метода муравьиной колонии	13
1.5. Метод имитации отжига	15
1.6. Квантовый отжиг	18
1.7. Стохастическое туннелирование	20
Глава 2. Результаты численных экспериментов	21
2.1. Технические детали реализации	21
2.2. Реализация метода случайных блужданий	22
2.3. Реализация метода муравьиной колонии	23
2.4. Реализация метода симуляции отжига	25
2.5. Реализация квантового отжига	27
2.6. Сравнение результатов	29
2.7. Итоговые результаты	31
Заключение	32
Список литературы	33

Введение

Задача поиска оптимальной в смысле затрат на строительство траектории дороги на рельефе местности естественным образом возникает при планировании транспортной сети и является предметом многочисленных исследований.

Основным подходом к ее решению является сведение к аналогичной задаче на графе путем построения сетки, покрывающей рельеф местности, и последующего вычисления стоимости перехода между её узлами. К полученной таким образом постановке можно применить известные алгоритмы поиска оптимального пути.

Однако, в случае, если изначально стоимость представляется значением некоторого интегрального функционала и тем самым задача поиска оптимальной траектории представляет из себя простейшую основную задачу вариационного исчисления, такие методы требуют доработки.

Данная работа посвящена исследованию, сравнению и адаптации к случаю задачи вариационного исчисления различных методов глобальной оптимизации, основанных на эвристиках или применении искусственного (роевого) интеллекта.

Результаты, полученные при выполнении данной работы, были представлены на конференциях РСІ 2023 и ИТТА 2024.

Постановка задачи

Пусть на местности заданы точки A и B , выступающие в качестве начальной и конечной точек соответственно. Требуется соединить их дорогой таким образом, чтобы затраты на её построение были минимальными.

Будем предполагать, что цена строительства в фиксированной точке складывается из затрат на доставку материалов и непосредственно стоимости укладки полотна, причем первая зависит только от длины уже проложенной части дороги и объёма перевозимых материалов, тогда как вторая некоторым образом зависит и от рельефа. Также предполагается, что транспортировка материалов к месту укладки ведётся от начальной точки исключительно по уже построенной части дороги и что для построения единицы длины пути требуется одно и то же количество материалов, вне зависимости от рельефа. Тогда величину стоимости доставки материалов, требуемых для укладки единицы длины дорожного полотна, можно считать прямо пропорциональной длине уже готового полотна. Обозначим через α коэффициент пропорциональности указанных величин.

В то же время стоимость укладки будет своя в каждой точке, пусть она задается непрерывно дифференцируемой функцией $\beta : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, имеющей непрерывные частные производные. В качестве математической модели дороги естественно рассматривать отрезок произвольной кривой класса регулярности C^2 с фиксированными концами в точках A и B . Введём на плоскости карты рельефа местности ДПСК таким образом, чтобы точка A была совмещена с началом координат. Таким образом, будем рассматривать функции $y(x) \in C^2(\mathbb{R})$, такие, что $y(0) = 0$ и $y(x_b) = y_b$, где (x_b, y_b) - координаты точки B . Тогда задача сведётся к хорошо известной задаче вариационного исчисления, а именно, к минимизации функционала

$$J(y) = \int_0^{x_b} \alpha \sqrt{1 + y'^2(x)} \int_0^x \sqrt{1 + y'^2(\xi)} d\xi dx + \int_0^{x_b} \beta(x, y) \sqrt{1 + y'^2(x)} dx$$

с начальными условиями

$$y(0) = 0, y(x_b) = y_b. \quad (1)$$

Как было показано в [1], данный функционал может быть переписан в виде

$$J(y) = \frac{\alpha}{2} \left(\int_0^{x_b} \sqrt{1 + y'^2(x)} dx \right)^2 + \int_0^{x_b} \beta(x, y) \sqrt{1 + y'^2(x)} dx. \quad (2)$$

В дальнейшем будем использовать функционал стоимости именно в форме 2, так как это позволит быстрее вычислять значения $J(y)$.

Обзор литературы

Основная модель, используемая в данной работе, предложена в статье [1]. Там же выведена исследуемая в данной работе форма функционала стоимости. Там же описано сведение задачи к интегро-дифференциальному уравнению, приведён модельный пример постановки задачи и получен некоторый результат, используемый в данной работе для сравнения.

При подготовке к проведению работы был изучен ряд статей, посвящённых исследованию методов муравьиной колонии, случайного блуждания, симуляции отжига, а также их модификаций.

Так, в статье [2] введена идея роевого интеллекта – набора методов глобальной оптимизации, основанных на взаимодействии множества агентов, каждый из которых, взаимодействуя с остальными, участвует в формировании оптимального ответа, а в статье [3] приведен пример использования метода муравьиной колонии для решения транспортной задачи.

В статье [4] представлена модификация метода муравьиной колонии, основанная на введении иерархии агентов, позволяющая с большей вероятностью избегать построения субоптимального решения.

В статье [5] представлено описание метода симуляции отжига, который решает задачу глобальной оптимизации в дискретном пространстве состояний, строя модель, аналогичную той, которая описывает процесс остывания металлов, и используя усовершенствованный аналог метода случайного блуждания. При применении данного подхода интенсивность блужданий затухает при увеличении номера итерации таким образом, что в начале работы метод симуляции отжига представляет из себя случайное блуждание, а на итерациях с большими номерами становится аналогичен жадному алгоритму.

В статьях [6, 7] описывается модификация метода симуляции отжига, называемая квантовым отжигом, основанная на совершении более резких переходов («скачков») из состояния в состояние, позволяющих избегать попадания в локальный минимум. В статье [8] доказывается целесообразность применения данной модификации при выполнении некоторых условий.

В статье [9] вводится преобразование, названное стохастическим тун-

нелированием, основанное на той же математической модели, что и квантовое туннелирование и призванное сделать локальные минимумы более глубокими для того, чтобы метод отжига (в классической или квантовой версии) мог избегать попадания в них.

В книге [10] описываются методы эволюционного моделирования (в частности, генетический алгоритм), основная идея которого (создание некоторого набора кандидатов в решение и последующее их изменение и отбор) может быть с некоторыми модификациями использована для решения рассматриваемой задачи.

В статье [11] исследуется алгоритм A^* , взятый как один из базовых методов для сравнения с использованными в данной работе.

Глава 1. Теоретическое описание применяемых методов

1.1 Сведение к интегро-дифференциальному уравнению

Будем предполагать, что дважды непрерывно дифференцируемая функция $y_*(x)$ является решением задачи 2 – 1. Тогда эта функция будет задавать в рассматриваемой системе координат кривую, представляющую из себя оптимальную в смысле введённого функционала дорогу.

По утверждению теоремы, доказанной в [1], необходимым условием минимума функционала 2 является выполнение равенства

$$\frac{y_*''(x)}{1 + y_*'^2(x)} \left(\alpha \int_0^{x_b} \sqrt{1 + y_*'^2(x)} dx + \beta(x, y_*(x)) \right) + y_*'(x) \frac{\partial \beta(x, y_*(x))}{\partial x} - \frac{\partial \beta(x, y_*(x))}{\partial y} = 0.$$

Таким образом, для отыскания решения исходной задачи необходимо разрешить интегро-дифференциальное уравнение

$$\frac{y''(x)}{1 + y'^2(x)} \left(\alpha \int_0^{x_b} \sqrt{1 + y'^2(x)} dx + \beta(x, y(x)) \right) + y'(x) \beta_x(x, y) - \beta_y(x, y) = 0.$$

Для этого можно использовать метод, представленный в [1], а именно введение равномерной сетки на отрезке $[0, x_b]$ с последующим построением интерполирующего $y''(x)$ полинома степени $N - 1$, где N - число узлов сетки. После двукратного интегрирования можно получить также интерполяционные полиномы для $y'(x)$ и $y(x)$ степени N и $N + 1$ соответственно. Вычисляя с помощью формул численного интегрирования значение $\int_0^{x_b} \sqrt{1 + y'^2(x)} dx$, получим систему нелинейных алгебраических уравнений относительно значений $y''(x)$ в узлах сетки, для разрешения которой известны различные численные методы.

Главной проблемой рассмотренного подхода является высокая вычислительная сложность всех известных способов поиска решения нелинейных систем.

1.2 Метод случайных блужданий

Покроем область $[0, x_b] \times [0, y_b]$ равномерной сеткой с числом узлов, равным $(n + 1)^2$. Тогда в качестве приближений к искомой кривой можем рассматривать кусочно-линейные функции (ломаные) с вершинами в узлах сетки. Назначим каждому узлу вес $a_{ij} = 1$, который будет определять вероятность выбора данного узла при построении траектории. Будем повторять некоторый итеративный процесс, на каждом шаге обновляющий значения весов таким образом, чтобы у тех узлов, которые лежат на путях, доставляющих наименьшее на момент текущей итерации значение рассматриваемому функционалу, вес был больше.

Для этого в течение очередного шага выбираем k путей, каждый из которых строится по следующему правилу. Начальным узлом полагается $(0, 0)$, вероятность из узла (i, j) перейти в узел (i', j') вычисляется по формуле

$$p_{i,j \rightarrow i',j'} = \begin{cases} 0, & (i', j') \notin I \\ \frac{a_{i'j'}}{\sum_{(i',j') \in I} a_{i',j'}}, & (i', j') \in I \end{cases}$$

где с помощью символа I обозначено множество смежных с (i, j) по вертикали, диагонали или горизонтали узлов.

Затем по полученным значениям вероятностей с помощью генератора случайных чисел, равномерно распределённых на отрезке $[0, 1]$, строится путь, выходящий из начального узла и заканчивающийся в конечном узле (n, n) . После чего из k сгенерированных таким образом путей выбираются $m < k$ наилучших в смысле значения функционала, а затем веса всех узлов, входящих в выбранный путь, увеличиваются на 1. Далее алгоритм повторяется на следующем шаге. Итерирование можно прекращать, если в течение некоторого последовательного количества шагов улучшение значения функционала не превышало некоторого заранее заданного $\varepsilon > 0$.

Предложенный алгоритм представляет собой упрощённую вариацию генетического алгоритма, описанного в [10]. В отличие от оригинальной версии, поддерживающей операции изменения имеющихся решений и объединения двух решений в одно путём комбинации признаков, рассматрива-

емая в данной работе модификация опирается исключительно на создание новых решений на основе результатов, полученных решениями с предыдущих итераций.

Данный подход может показывать хорошую скорость сходимости для небольших n , но при росте числа узлов сетки могут наблюдаться как проблемы сходимости, так и закливание алгоритма, возникающее в силу того, что на некоторых шагах будут выбираться субоптимальные решения, которые, в силу специфики метода построения путей, будут с высокой вероятностью попадать в множество кандидатов в решение для последующих итераций.

1.3 Метод муравьиной колонии

Алгоритм муравьиной колонии (или муравьиный алгоритм), описанный в [2, 3], применяется для быстрого поиска приближенного решения задачи поиска кратчайшего пути, к аналогу которой была сведена исследуемая задача. Основа алгоритма – эвристическая оптимизация, основанная на наблюдении за поведением муравьев, ищущих кратчайший путь к источнику пищи, а именно, маркировка наиболее удачных путей наибольшим количеством феромона.

Работа алгоритма начинается с размещения в случайно выбранных вершинах графа некоторого заранее фиксированного числа N агентов («муравьев»). Затем начинается симуляция вероятностного процесса обхода вершин выделенными агентами, причем вероятность выбора ребра (i, j) равна

$$P_{i,j} = \frac{\eta_{i,j}^q \tau_{i,j}^p}{\sum_{k,m} \eta_{k,m}^q \tau_{k,m}^p},$$

где (k, m) – ребра, смежные по вершине с (i, j) , $\eta_{i,j} = \rho_{i,j}^{-1}$, $\rho_{i,j}$ – длина ребра (i, j) , $\tau_{i,j}$ – количество феромона на ребре (i, j) , p – параметр, задающий «стадность» алгоритма, q – параметр, задающий «жадность» алгоритма, $p + q = 1$. При увеличении значения p повышается вероятность выбора путей с наибольшим количеством феромона, при увеличении значения q повышается вероятность выбора локально оптимальных путей (т. е. тех, чья длина на текущем шаге как можно меньше). При достижении конечной вершины путь считается построенным.

После того как вышеописанная симуляция была проведена N раз, на всех ребрах построенных путей проводится обновление значения количества феромона по формуле

$$\tau'_{i,j} = (1 - \xi)\tau_{i,j} + \sum_{k=0}^N \Delta\tau_{i,j}^k,$$

где $\tau_{i,j}$ – количество феромона на ребре (i, j) , ξ – скорость испарения феромона (с помощью подбора данного параметра можно сделать алгоритм

в большей или меньшей степени чувствительным к результатам прошлых итераций),

$$\Delta\tau_{i,j}^k = \begin{cases} \frac{1}{\rho_{i,j}}, & k \in K(i,j) \\ 0, & k \notin K(i,j) \end{cases}$$

– прибавка количества феромона, отложенного k -м муравьем на ребре (i, j) , где $K(i, j)$ – множество номеров муравьев, прошедших по ребру (i, j) .

После обновления запускается следующая итерация из N симуляций; действие алгоритма прекращается после фиксированного числа K итераций.

Данный подход можно адаптировать к рассматриваемой задаче, если в качестве вершин графа рассматривать узлы сетки, а в качестве ребер – связи между узлами, смежными по вертикали, горизонтали или диагонали. Пусть длина $\rho_{i,j}$ равна вкладу, который ребро (i, j) вносит в стоимость всего пути от начальной вершины до j -й при условии, что вершина i была пройдена непосредственно перед вершиной j .

1.4 Модификации метода муравьиной колонии

Для того, чтобы уменьшить вероятность попадания в локальный минимум, вводятся ([4]) модифицированные версии метода муравьиной колонии.

К нашей задаче применимы два из них:

- Min-Max метод муравьиной колонии;
- Метод муравьиной колонии с элитными агентами.

Min-Max метод муравьиной колонии. Введём для каждого ребра ограничение на максимальное и минимальное значения метки, а именно $\tau_{u,v} \in [\tau_{\min}, \tau_{\max}] \quad \forall (u, v) \in E$, где E – множество рёбер рассматриваемого графа.

Во время инициализации полагаем $\tau_{u,v} = \tau_{\min} \quad \forall (u, v) \in E$. Кроме того, потребуем, чтобы на каждой итерации обновлялись только метки на рёбрах, входящих в лучшие на данный момент решения, при этом формула для пересчёта значения метки остается той же.

Данная модификация позволяет уменьшить количество итераций, требуемых для получения достаточно точной аппроксимации решения, за счёт нового правила обновления, и при этом уменьшает вероятность попадания в локальный минимум благодаря ограничению на значения метки на рёбрах, которое не позволяет уменьшить их до нуля (и, следовательно, исключить потенциально участвующие в формировании решения рёбра из рассмотрения).

Метод муравьиной колонии с элитными агентами. Выберем среди всех N агентов множество из $M < N$ особых агентов, которых будем называть «элитными».

После того, как во время очередной итерации каждый агент построил свой путь, элитные агенты дополнительно проходят по M лучшим путям из построенных на текущей итерации, добавляя к значениям меток на всех рёбрах этих путей некоторую константу. То есть, в дополнение к формуле для пересчёта значений меток из базового алгоритма, добавляется ещё один

пересчёт, осуществляемый элитными агентами:

$$\eta''_{u,v} = (1 - \xi)\tau'_{u,v} + \sum_{k=1}^M \Delta\tau_{u,v}^k,$$

где

$$\Delta\tau_{u,v}^k = \begin{cases} \frac{C_k}{\rho_{u,v}}, & k \in K(u, v) \\ 0, & k \notin K(u, v) \end{cases},$$

$$C_1 \geq C_2 \geq \dots \geq C_M, \quad \sum_{k=1}^M C_k = 1,$$

и k -ый элитный агент модифицирует k -ый наилучший из найденных на текущей итерации путей, а $K(u, v)$ – множество элитных агентов, посетивших ребро (u, v) при построении траекторий на данной итерации.

При таком обновлении рёбра, входящие в наилучшие найденные на данный момент траектории, получают дополнительное увеличение метки, что позволяет методу сходиться быстрее. Тем не менее, при данном подходе увеличивается вероятность попадания в локальный минимум.

Чтобы этого избежать, можно либо развернуть порядок C_i , приняв $C_1 \leq C_2 \leq \dots \leq C_M$, либо положить $\xi = \xi(t)$, где t – номер текущей итерации, а $\xi(t+1) > \xi(t)$.

Данная модификация вводится, чтобы обеспечить баланс между жадностью алгоритма и скоростью его работы за счёт особого выделения наилучших найденных путей и одновременного постепенного увеличения скорости испарения феромона (отвечающей за уменьшение значения метки).

1.5 Метод имитации отжига

Метод имитации отжига (описанный в [5]) - один из вероятностных подходов к задаче глобальной оптимизации, который особенно хорошо применим к случаю наличия значительного числа локальных оптимумов. В нём используется особая эвристика, идея которой основана на реальном процессе отжига и предполагает представление целевой функции как аналога внутренней энергии некоторой физической системы с дальнейшей симуляцией процесса её контролируемого охлаждения путем перехода из состояния в состояние, осуществляемого таким образом, чтобы энергия уменьшалась.

Рассмотрим дискретное пространство состояний S и целевую функцию $f : S \rightarrow \mathbb{R}$. Нашей задачей является поиск состояния $s^* \in S$, для которого выполняется $f(s) \geq f(s^*) \forall s \in S$.

С этой целью мы будем менять текущее состояние в соответствии с некоторым правилом, которое будет обеспечивать переход из состояния в состояние таким образом, чтобы в каждом следующем состоянии либо улучшалось значение целевой функции, либо возрастала вероятность на следующих итерациях достичь его улучшения. Начнём в произвольном состоянии s_0 , получить которое можно либо случайным образом, либо как вывод некоторого другого алгоритма.

Введём функцию $P(s_i, \bar{s}_i, T_i)$ вероятности перехода между состояниями, где s_i - текущее состояние, \bar{s}_i - допустимый кандидат для следующего состояния, T_i - элемент вещественной монотонно убывающей к нулю последовательности чисел (называемых «значениями температуры»). Необходимо вводить данную функцию таким образом, чтобы вероятность перехода была отлична от нуля даже в случае, когда текущее состояние доставляет целевой функции лучшее значение, чем состояние-кандидат. Это необходимо для того, чтобы делать менее вероятным попадание в локальные оптимумы.

Упомянутая выше последовательность температур также является параметром алгоритма и используется для регулирования «разброса» при поиске оптимального состояния. Это достигается за счет того, что функ-

ция вероятностей перехода вводится таким образом, чтобы при большем значении температуры возрастали вероятности перейти в состояния, доставляющие целевой функции худшие значения, чем текущее состояние. Таким образом, при $T = 0$ алгоритм становится жадным.

В нашей задаче естественно в качестве состояний рассматривать целые траектории. Для того, чтобы для фиксированного текущего состояния иметь возможность строить множество допустимых для перехода состояний, введем бинарное отношение «примыкания». А именно, будем называть две траектории примыкающими, если и только если они отличаются друг от друга не более, чем двумя вертикальными или горизонтальными звеньями (иначе говоря, не более, чем одной вершиной). Такое определение кандидатов для перехода позволит избежать перебора всех допустимых траекторий на каждой итерации.

В случае нашей задачи $f(\cdot) = J(\cdot)$. Также будем использовать следующие последовательности $\{T_i\}$:

- $T_i^{(1)} = \frac{1}{i^2}$
- $T_i^{(2)} = e^{-i}$
- $T_i^{(3)} = \begin{cases} \frac{N-i}{k}, & i < N \\ 0 & \end{cases}$
- $T_i^{(3)} = \frac{1}{e^i + 1}$

Здесь и далее k и N – некоторые произвольные константы, рассматриваемые как гиперпараметры.

Для вычисления вероятностей перехода будем использовать следующие правила:

- $\tilde{P}^{(1)}(s_i, \bar{s}_i, T_i) = \begin{cases} 1, & f(\bar{s}_i) > f(s_i) \\ \exp\left(\frac{f(\bar{s}_i) - f(s_i)}{kT_i}\right), & f(\bar{s}_i) \leq f(s_i) \end{cases}$
- $\tilde{P}^{(2)}(s_i, \bar{s}_i, T_i) = \begin{cases} 1 - \frac{1}{kT_i}, & f(\bar{s}_i) > f(s_i) \\ \frac{1}{kT_i}, & f(\bar{s}_i) \leq f(s_i) \end{cases}$

Так как для каждого состояния количество соседей своё, для того, чтобы значения вероятностей перехода задавали корректное распределение при фиксированном текущем состоянии s_i , необходимо разделить значения $\tilde{P}^{(i)}(s_i, \bar{s}_i, T_i)$ на число состояний, соседних с s_i .

В качестве условий останова алгоритма можно использовать следующие:

- Достижение итерации с заданным номером;
- Неизменность лучшего найденного решения на протяжении m последовательных итераций.

1.6 Квантовый отжиг

Квантовый отжиг (описанный в [6, 7]) представляет из себя модификацию метода имитации отжига, созданную для того, чтобы избежать попадания в локальный оптимум. В данном подходе применяется модель, описывающая эволюцию системы с конечным числом состояний и основанная на аналогии с переходом элементарной частицы из состояния в состояние. Данный метод наиболее эффективен в случае, когда на поверхности целевой функции есть достаточно много локальных минимумов ([7]).

Базовая идея метода состоит в том, чтобы рассматривать целевую функцию как некоммутирующую часть гамильтониана квантовой системы, а вероятности перехода – как вероятности скачка с одного уровня энергии на другой. Как и в случае классического метода отжига, наша цель – достижение глобального минимума целевой функции за счёт использования случайных переходов между состояниями со специальным образом определёнными вероятностями.

Вместо последовательности $\{T_i\}$ из классического метода имитации отжига здесь мы будем использовать последовательность $\{\Gamma_i\}$ с аналогичными свойствами, но несколько другим смыслом: её элементы будут представлять из себя значения коэффициента прохождения. Как и в случае классического метода имитации отжига, большим значениям элементов данной последовательности будут соответствовать большие вероятности совершения перехода.

Главным отличием в определении функции вероятности перехода будет то, что окажется разрешён переход между состояниями, не являющимися соседними (т. е. «скачок»). Для того, чтобы описать новую функцию вероятностей перехода, введём сначала *расстояние между траекториями* следующим образом: $\rho(s, \bar{s})$ есть число рёбер, которые присутствуют в одной траектории и отсутствуют в другой.

Барьером назовём окрестность текущего состояния (траектории), значения целевой функции на элементах которой отличаются от значения целевой функции при текущем состоянии меньше, чем на заданную величину r .

Шириной барьера назовём наибольшее расстояние между элементами этой окрестности, а его *высотой* – наибольший модуль разности значений целевой функции при двух разных состояниях из окрестности.

Теперь мы можем определить функцию вероятности перехода следующим образом:

$$\tilde{P}(s_i, \bar{s}_i, \Gamma_i) = \begin{cases} 1, & f(\bar{s}_i) > f(s_i) \\ e^{-\frac{\sqrt{\Delta}w}{k\Gamma_i}}, & f(\bar{s}_i) \leq f(s_i) \end{cases}$$

Здесь w – ширина барьера, Δ – его высота, k – гиперпараметр, прочие обозначения имеют тот же смысл, что и в описании классического метода имитации отжига.

Для того, чтобы по значениям \tilde{P} получить непосредственно значения вероятностей перехода, требуется поделить значение \tilde{P} на число состояний, в которые возможен переход из текущего.

С одной стороны, данный подход вычислительно более сложен, так как требует перебор большего числа допустимых для перехода состояний. С другой стороны, как показано в [8], при выполнении условия $w \ll \sqrt{\Delta}$ он оказывается более эффективным, чем простой метод имитации отжига.

Также при реализации этого метода допустимо запускать поиск сразу из нескольких начальных состояний и параллельно выполнять все операции вычисления вероятностей перехода и непосредственного выполнения переходов.

1.7 Стохатическое туннелирование

Чтобы избежать попадания в локальные минимумы, можно применить описанный в [9] метод, получивший название *стохастического туннелирования*.

Идея метода основана на использовании нелинейного преобразования, которое делает локальные минимумы более глубокими, чтобы в дальнейшем увеличить вероятность перехода из них в соседние состояния при выполнении очередной итерации метода имитации отжига.

Необходимость его применения связана с тем, что с увеличением номера итерации возрастает вероятность попадания в окрестность локального оптимума, особенно в случае, если сама окрестность достаточно широкая. При использовании стохастического туннелирования окрестность становится уже, а сам локальный минимум становится более «острым», что вносит существенную корректировку в вычисление вероятностей перехода даже на поздних итерациях.

Чтобы применить это преобразование, необходимо случайным образом получить некоторый набор состояний \tilde{S} , найти среди них то, значение целевой функции в котором будет минимально (обозначим это значение через f_0):

$$f_0 = \min_{s \in \tilde{S}} f(s),$$

получить новую целевую функцию по формуле

$$f^*(\cdot) = 1 - e^{-\gamma(f(\cdot) - f_0)},$$

где $\gamma > 0$ – гиперпараметр, и далее при вычислении вероятностей перехода использовать $f^*(\cdot)$ вместо $f(\cdot)$.

Очевидно, что положение точек минимума не измениться, тогда как новая целевая функция будет быстрее изменяться в их окрестностях.

При решении нашей задачи будем применять данную трансформацию раз в K итераций, выбирая $10n$ состояний в набор \tilde{S} , где K – некоторое натуральное число, n – параметр размера сетки.

Глава 2. Результаты численных экспериментов

2.1 Технические детали реализации

При построении сетки будем использовать равноотстоящие узлы вида

$$x_i = i \frac{x_b}{n}, \quad y_j = j \frac{y_b}{n}, \quad i, j = \overline{0, n}.$$

Для выбора гиперпараметров k и γ будем использовать поиск по сетке $[-1, 1] \times [-1, 1]$, перебирая с шагом 10^{-2} все возможные пары элементов и запуская алгоритм для каждой из них.

Для получения искомой аппроксимации к решению задачи (2)–(1) выполним процедуру интерполяции с помощью метода наименьших квадратов по точкам, соответствующим узлам ломаной, полученной при работе алгоритма. При этом, чтобы избежать нарушения условий (1), будем искать итоговый ответ в классе полиномов, проходящих через точки A и B .

Так как все описанные алгоритмы основаны на случайном поиске, для точной оценки различных показателей качества (в частности, числа итераций и стоимости итоговой траектории) будем вычислять путём усреднения соответствующих величин, измеренных по 10 независимым запускам метода.

В качестве базовых методов для сравнения будем использовать метод сведения к интегро-дифференциальному уравнению и алгоритм A^* с вертикальными и горизонтальными связями (где в качестве эвристической оценки расстояния до конечной точки будет выбираться $\|\overrightarrow{XB}\|_1$, где X – некоторая точка, $\|\cdot\|_1$ – метрика L_1).

Для тестирования всех описанных методов будем использовать следующие значения параметров исходной задачи:

$$\begin{cases} n = 25 \\ x_a = y_a = 1 \\ \beta(x, y) = 1 + \sin(5x) \sin(5y) \\ \alpha = 1 \end{cases}$$

2.2 Реализация метода случайных блужданий

При реализации метода случайных блужданий примем

$$n = 25, \quad k = 25, \quad m = 10,$$

а в качестве условия остановки зададим неизменность лучшего найденного решения в течение трёх последовательных итераций.

Полученная кривая, являющаяся сглаженной версией результирующей ломаной, представлена на рис. 1. Итоговое значение стоимости составляет 1,45 и не превосходит полученного в [1] результата. Тем не менее, данный метод может быть использован для быстрого получения приближения к решению.

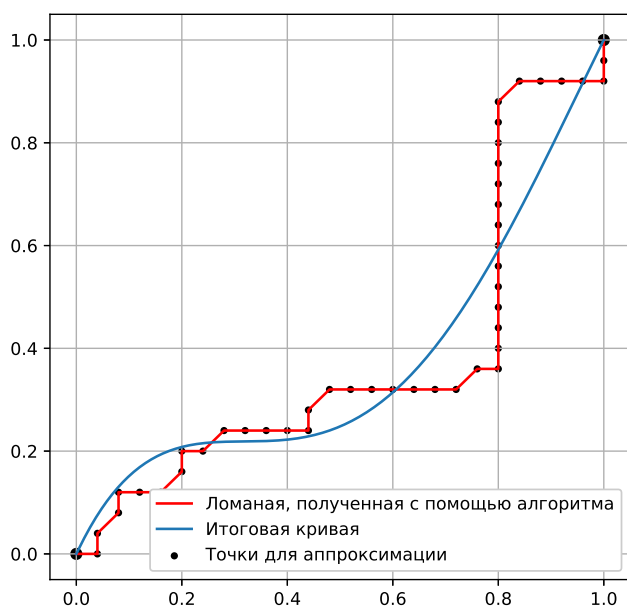


Рис. 1: Результирующая кривая, полученная при применении метода случайных блужданий

2.3 Реализация метода муравьиной колонии

Для параметров базовой версии метода муравьиной колонии будем использовать следующие значения:

$$N = 100; K = 50; \xi = 0,4$$
$$p = 0,6 \implies q = 1 - p = 0,4$$



Рис. 2: Сравнение результирующих кривых при применении стохастического туннелирования для классического отжига и квантового отжига

Результирующая кривая для классического метода муравьиной колонии представлена на рис. 2.

При реализации Min-Max метода муравьиной колонии положим

$$\eta_{\min} = 0,1; \eta_{\max} = 1,$$

а остальные значения параметров оставим такими же, как и в базовой версии.

При реализации метода муравьиной колонии с элитными агентами положим

$$M = \frac{N}{2}, \quad C_k = \left(\frac{1}{2}\right)^k, \quad k = \overline{1, M-1}, \quad C_M = C_{M-1}.$$

Для увеличения скорости испарения феромона в качестве $\xi(t)$ возьмём функцию

$$\xi(t) = \frac{1}{1 + e^{-t}},$$

остальные параметры оставим теми же.

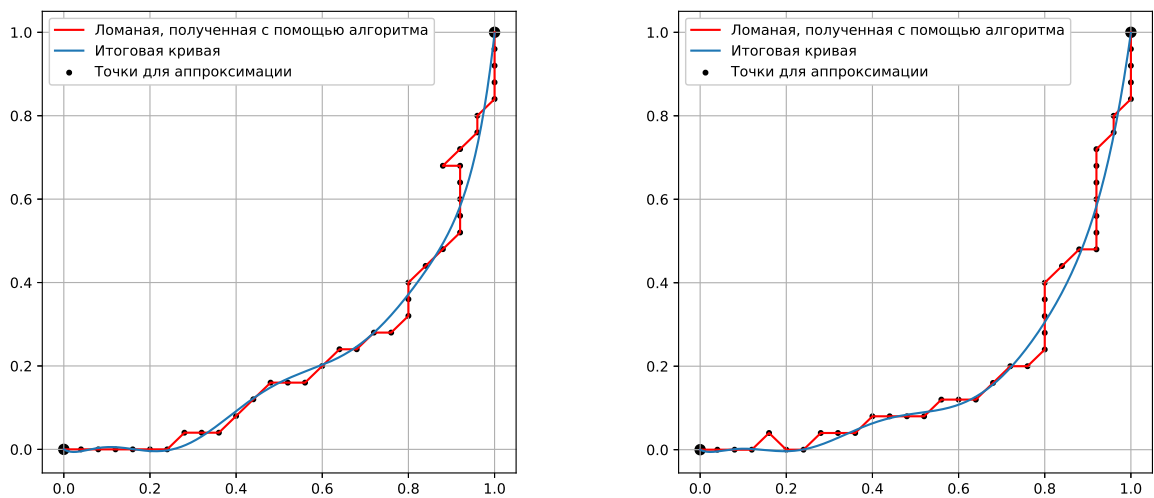


Рис. 3: Результаты работы Min-Max метода муравьиной колонии (слева) и метода муравьиной колонии с элитными агентами (справа)

Результирующие кривые для модификаций муравьиного алгоритма показаны на рис. 3. Итоговые значения представлены в таблице.

Таблица 1: Итоговые стоимости кривых, полученных разными версиями метода муравьиной колонии

Базовый метод	Min-Max метод	Метод с элитными агентами
1,45	1,41	1,38

2.4 Реализация метода симуляции отжига

Результирующие кривые, полученные при применении базовой версии метода имитации отжига с разными последовательностями температур $\{T_i^{(k)}\}$ и функциями вероятностей перехода $\tilde{P}^{(1)}, \tilde{P}^{(2)}$ представлены на рис. 4 - 5.

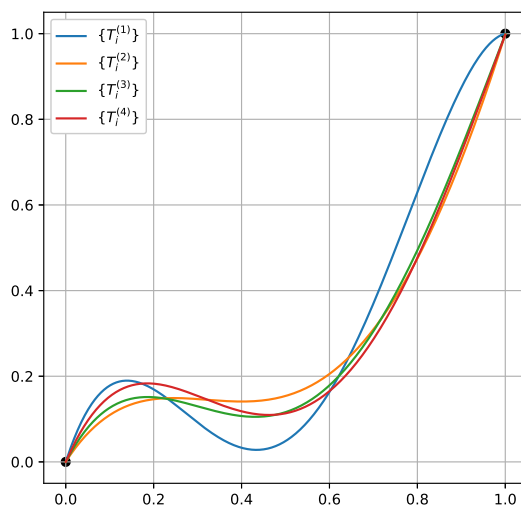


Рис. 4: Результаты работы базовой версии метода имитации отжига с функцией вероятностей перехода $\tilde{P}^{(1)}$

Оказалось, что независимо от функции вероятности перехода, наилучший в смысле итоговой стоимости результат показывает последовательность температур $\{T_i^{(3)}\}$. Согласно её определению, значение температуры равномерно убывает с увеличением номера итерации, пока не достигнет нуля на итерации с номером N . После того, как это происходит, алгоритм становится жадным: на каждой итерации выбирается лучшее на данный момент решение. Такой подход обеспечивает компромисс между поиском новых кандидатов в решение на начальных итерациях и постепенным улучшением наилучшего на данный момент решения на завершающих итерациях.

При этом использование функции вероятностей перехода $\tilde{P}^{(1)}$ обеспечивает лучшее итоговое значение функционала для всех последовательностей температур, кроме $\{T_i^{(2)}\}$. Это происходит в силу того, что в слу-

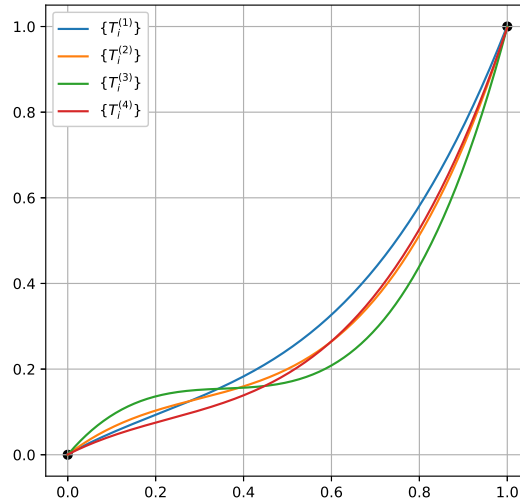


Рис. 5: Результаты работы базовой версии метода имитации отжига с функцией вероятностей перехода $\tilde{P}^{(2)}$

чае применения функции $\tilde{P}^{(1)}$, вероятности перехода в состояние, доставляющее исходному функционалу большее значение, будучи на начальных итерациях относительно высокой, быстро убывает к нулю с увеличением номера итерации.

Итоговые значения стоимости в зависимости от последовательности температур и функции вероятностей перехода представлены в таблице.

	$\tilde{P}^{(1)}$	$\tilde{P}^{(2)}$
$\{T_i^{(1)}\}$	1,43	1,45
$\{T_i^{(2)}\}$	1,45	1,44
$\{T_i^{(3)}\}$	1,41	1,42
$\{T_i^{(4)}\}$	1,44	1,45

2.5 Реализация квантового отжига

При реализации квантового отжига будем использовать следующую формулу для определения Γ_i :

$$\Gamma_i = \begin{cases} \frac{N-i}{k}, & i < N \\ 0, & i \geq N \end{cases}.$$

Результирующая кривая показана на рис. 6. Итоговое значение стоимости равно 13951.

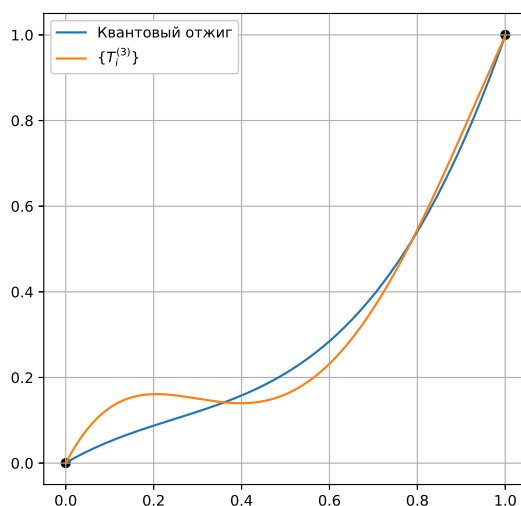


Рис. 6: Сравнение результирующих кривых для квантового отжига и классического метода отжига с наилучшими настройками параметров

При реализации стохастического туннелирования находим оптимальное значение $\gamma^* = 0,1$ путём перебора по сетке. Отдельно сравним результаты применения преобразования к простому методу имитации отжига и к методу квантового отжига. Итоговые кривые представлены на рис. 7. При этом наилучший результат (итоговое значение функционала, равное 1,3857) показал квантовый отжиг с применением стохастического туннелирования.

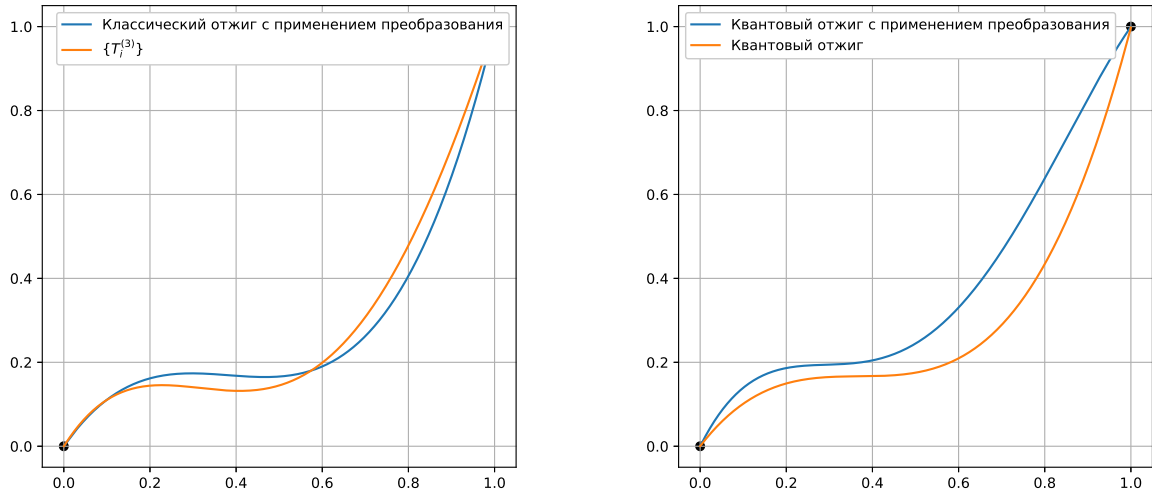


Рис. 7: Сравнение результатов, полученных без применения стохастического туннелирования с результатами, полученными с его применением, для классического (слева) и квантового (справа) методов имитации отжига

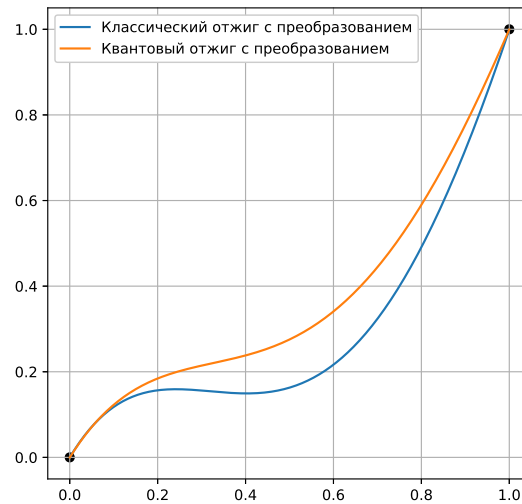


Рис. 8: Сравнение результирующих кривых при применении преобразования к классическому и квантовому методам имитации отжига

Отдельно интересно сравнить результаты применения стохастического туннелирования к квантовому и классическому методам имитации отжига. Соответствующие кривые представлены на рис. 8. При этом при использовании преобразованного классического отжига получена итоговая стоимость 1,412.

2.6 Сравнение результатов

Кроме сравнения результатов запуска квантового и классического метода отжига, интересно сравнить между собой кривые, полученные с помощью метода отжига с наилучшими из найденных настройками (квантовый отжиг со стохастическим туннелированием), с кривыми, полученными методом муравьиной колонии и с использованием алгоритма A^* (описанного в [11]).

Соответствующие результаты представлены на рис. 9.

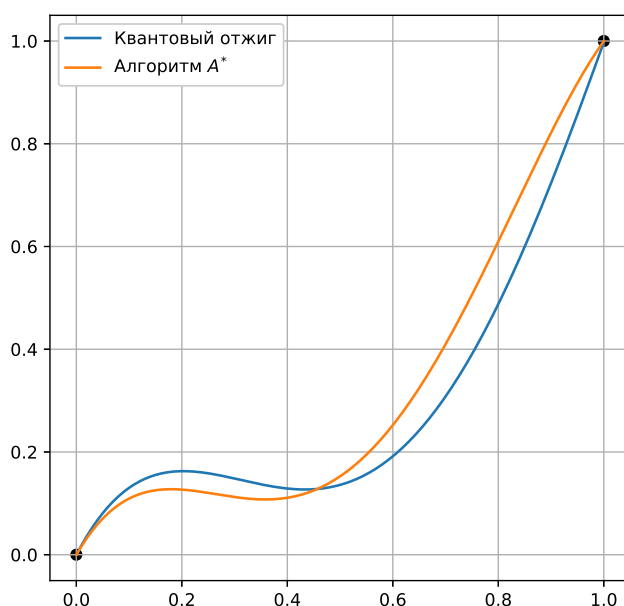


Рис. 9: Сравнение результирующих кривых, полученных при применении квантового отжига и алгоритма A^*

При этом квантовый отжиг позволяет достичь лучшего значения функционала стоимости, но требует значительно большего времени на итерацию.

Также сравним наилучший из полученных методом муравьиной колонии результат с тем, что был достигнут с помощью квантового отжига со стохастическим туннелированием. Соответствующие кривые показаны на рис. 10.

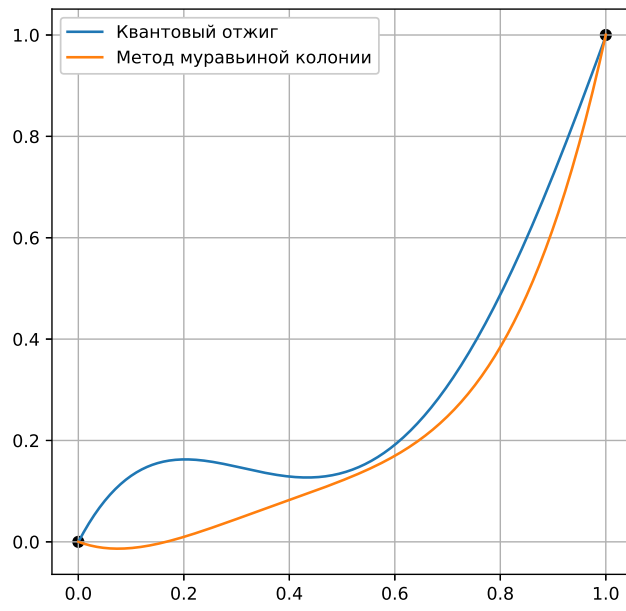


Рис. 10: Сравнение результирующих кривых, полученных при применении квантового отжига и метода муравьиной колонии с элитными агентами

2.7 Итоговые результаты

Все исследованные методы, кроме случайного блуждания, превзошли на тестовом примере базовый результат из [1], полученный с помощью сведения к интегро-дифференциальному уравнению.

Для дальнейшего сравнения был сгенерирован набор из 400 тестовых квадратичных функций вида

$$\beta(x, y) = Ax^2 + By^2 + Cxy + Dx + Ey,$$

где A, B, C, D, E выбирались с помощью генератора случайных равномерно распределённых на отрезке $[0, 1]$ чисел.

В 243 случаях лучший результат был показан при применении квантового отжига со стохастическим туннелированием, в 257 – при использовании метода муравьиной колонии с элитными агентами.

Таким образом, явного преимущества одного из двух описанных методов над другим выявить не удалось, решение о том, какой из методов применять для решения конкретной задачи, следует принимать исходя из специфики вида функции $\beta(\cdot, \cdot)$.

Заключение

В ходе выполнения работы получены следующие результаты:

- Проведено сведение исходной задачи к задаче поиска кратчайшего пути;
- Рассмотрены и модифицированы под конкретную задачу существующие методы поиска кратчайшего пути;
- Получены результаты применения всех рассмотренных методов к модельной тестовой функции;
- Проведён сравнительный анализ результатов;

Список литературы

- [1] Аббасов М. Э., Шарлай А. С. Поиск оптимальной по стоимости строительства траектории дороги на рельефе местности // Вестник Санкт-Петербургского университета. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2021. Т. 17. № 1. С. 4–12.
- [2] Dorigo M., Maniezzo V., Colomi A. The ant system: optimization by a colony of cooperating agents // IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics. Part B. 1996. Vol. 26. No 1. P. 29–41.
- [3] Кажаров А. А., Курейчик В. М. Муравьиные алгоритмы для решения транспортных задач // Известия РАН. Теория и системы управления. 2010. № 1. С. 32–45.
- [4] Bullnheimer B., Hartl R. F., Strauss C. A new rank based version of the ant system – a computational study // Central European Journal for Operations Research and Economics. 1997. No 1. P. 25–38.
- [5] Černý, V. Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: An efficient simulation algorithm. Journal of Optimization Theory and Applications. 1985. No 45. P. 41–51.
- [6] Apolloni, B., Carvalho, C., de Falco, D. Quantum stochastic optimization. Stochastic Processes and their Applications. 1989. Vol. 33, No 2. P. 233–244.
- [7] Das, A., Chakrabarti, B. K. Stinchcombe, R. B. Quantum annealing in a kinetically constrained system. Physical Review E. 2005. Vol. 72. No 2.
- [8] Yan, B., Sinitsyn, N. A. Analytical solution for nonadiabatic quantum annealing to arbitrary Ising spin Hamiltonian. Nature Communications. 2022. No 13.
- [9] Wenzel, W., Hamache, K. A Stochastic tunneling approach for global minimization. Physical Review Letters, 1999. Vol. 82, No 15, P. 3003–3007.

- [10] Емельянов В. В., Курейчик В. В., Курейчик В. М. Теория и практика эволюционного моделирования. М.: Физматлит, 2003. С. 432
- [11] Dechter, R., Pearl, J. Generalized best-first search strategies and the optimality of A*. Journal of the ACM. 1985 Vol. 32, No 3. P. 505 — 536.