

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Локтионова Оксана Геннадьевна

Должность: проректор по учебной работе

Дата подписания: 28.01.2021 15:44:26

Уникальный программный ключ:

0b817ca911e6668abb13a5d426d39e5f1c11eabbf73e943df4a4851fda56d089

1

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

Юго-Западный государственный университет
(ЮЗГУ)

Кафедра вычислительной техники

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе



Локтионова
2016 г.

РЕШЕНИЕ ДИСКРЕТНЫХ КОМБИНАТОРНЫХ ОПТИМИЗАЦИОННЫХ ЗАДАЧ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВРИСТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ

Методические указания по выполнению лабораторных и практических работ
для студентов специальности 090301.62

Курск 2016

УДК 621.3

Составитель: Э.И. Ватутин

Рецензент

Кандидат технических наук, доцент *А.Г. Сневаков*

Решение дискретных комбинаторных оптимизационных задач с использованием эвристических методов: методические указания по выполнению лабораторных и практических работ по дисциплине «Основы комбинаторной оптимизации» / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: Э.И. Ватутин; Курск, 2016. 30 с.

Методические рекомендации содержат сведения по разработке программ на современных языках программирования высокого уровня для решения задач дискретной комбинаторной оптимизации с использованием эвристических методов.

Предназначены для студентов специальности 090301.62 «Информатика и вычислительная техника».

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать _____ . Формат 60x84 1/16.

Усл. печ. л. Уч. – изд.л. Тираж 30 экз. Заказ . Бесплатно.

Юго-Западный государственный университет
305040, Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

Содержание

Введение.....	4
Метод полного перебора и его вариации.....	4
Жадные методы.....	5
Методы случайного перебора.....	6
Метод случайных блужданий.....	7
Метод взвешенного случайного перебора.....	8
Метод муравьиной колонии.....	10
Метод имитации отжига.....	14
Эволюционные (генетические) методы.....	16
Метод пчелиной колонии.....	18
Метод роя частиц.....	21
Сравнение качества решений.....	23
Задание.....	27
Индивидуальные варианты.....	28
Содержание отчета.....	29
Контрольные вопросы.....	30
Библиографический список.....	30

Введение

Существует класс задач, именуемых задачами дискретной комбинаторной оптимизации, целью которых является получение решения с минимальным или максимальным значением целевого показателя (группы показателей), причем решение по своей природе является дискретным, что обуславливает специфику методов, применяемых для его отыскания. Если метод не гарантирует получения оптимального решения, то он именуется эвристическим. На практике известны несколько десятков базовых эвристических методов, применяемых для решения задач дискретной комбинаторной оптимизации, которые обладают рядом особенностей и на практике приводят к получению решений различного качества с различными затратами вычислительного времени.

Целью работы является получение практических навыков при программировании эвристических методов для решения задач дискретной комбинаторной оптимизации и оценке эффективности методов и качества получаемых решений.

Метод полного перебора и его вариации

Методы полного перебора (англ. Brute Force, сокр. BF) основаны на построении множества всех возможных решений поставленной задачи, оценки их качества и выбора наилучшего. Как правило при этом производится построение дерева комбинаторного перебора, ветви которого соответствуют решениям, и его обход в глубину (англ. Depth First Search, DFS) или в ширину (англ. Breadth First Search, BFS). Число ветвей в дереве обычно стремительно растет с ростом размерности задачи N , поэтому на практике методы данного класса имеют весьма ограниченную сферу применения.

Если качество решения монотонно изменяется по мере его формирования и на одном из промежуточных шагов решение уже хуже текущего рекорда, то его построение можно прекратить, осуществить комбинаторный возврат и перейти к формированию следующего решения. Такая стратегия поиска решения называется методом ветвей и границ и позволяет сократить затраты времени на поиск решений. Решение, найденное с использованием метода ветвей и границ, является оптимальным.

Если построение решений методом полного перебора или методом ветвей и границ производится неприемлемо долго, можно ввести ряд дополнительных ограничений. Иногда ограничивается число анализируемых ветвей дерева комбинаторного перебора, а соответствующий метод называется методом ограниченного перебора (англ. Limited Brute Force, сокр. LBF). При ограничении глубины, на которую производится перебор, получается метода перебора с ограничением глубины (англ. Limited Depth First Search, сокр. LDFS). Метода LBF и LDFS относятся к эвристическим, т.к. не гарантируют получение оптимального решения. При этом они являются итерационными, т.к. производят перебор некоторого количества решений с выбором наилучшего.

Жадные методы

Жадные методы (англ. Greedy, сокр. G) как правило применяются при последовательном формировании решения. Свое название они получили не случайно, оно является прямым следствием особенности построения решения. Допустим, построение решения осуществляется итеративно, причем на каждом из шагов в его составе изменяется какой-либо элемент, что приводит к изменению качества решения. При выборе очередного элемента решения обычно существует несколько возможностей. Для формирования решения задачи необходим выбор одной из них (принятие одного из решений). В рассмотренных ранее методах полного перебора производится

анализ всех возможностей путем построения и обхода соответствующих поддеревьев, что в большинстве случаев на практике является неприемлемо длительным. При использовании жадных методов производится выбор такого допустимого компонента решения, который приводит к минимальному ухудшению качества формируемого решения. При этом какой-либо анализ дальнейшей возможности и оптимальности формируемого решения не производится, ввиду чего методам данного класса характерны высокая скорость формирования решения и в большинстве случаев их невысокое качество.

Методы случайного перебора

Еще одним достаточно большим и распространенным классом методов являются *стохастические методы*, также именуемые *методами Монте-Карло* (англ. Random Search, сокр. RS). Они базируются на использовании случайных чисел в процессе формирования решения. При использовании методов случайного перебора в задачах дискретной комбинаторной оптимизации с использованием генератора псевдослучайных чисел производится выбор случайного направления движения в дереве комбинаторного перебора, причем анализируемые ветви дерева и соответствующие им решения оказываются равномерно распределены по пространству признаков, в отличие от рассмотренной выше стратегии перебора в глубину с ограничением на число ветвей, при том же самом числе анализируемых ветвей. Ввиду отсутствия средств глубокого анализа при выборе очередного компонента решения методы случайного перебора требуют большого числа итераций и на практике в чистом виде не применяются. Вместо них зачастую используются более интеллектуальные методы, которые будут рассмотрены ниже.

Метод случайных блужданий

Метод случайных (англ. Random Walks, сокр. RW) блужданий является одной из разновидностей методов случайного перебора. Он базируется на аналогии, связанной с математическим описанием броуновского движения. В простейшем одномерном случае метод случайных блужданий может быть представлен в следующем виде

$$x_n = x_0 + \sum_{i=1}^n r_i, \quad (1)$$

где x_0 – начальное значение параметра, описывающего состояние системы; x_n – значение параметра в n -й дискретный момент времени; r_i – некоторый ряд случайных величин с заданным законом распределения. Для многомерного случая вместо одиночного значения параметра в рассмотрение вводится вектор параметров $X_t = [x_t^{(1)}, x_t^{(2)}, \dots, x_t^{(N)}]^T$, что не меняет в общем случае смысла формулы (1).

При решении задач непрерывной оптимизации вектор X_t задает значения аргументов целевой функции $f(X_t)$, которые меняются случайным образом по мере выполнения итерационного процесса, реализуя траекторию движения некоторой точки в N -мерном пространстве по аналогии, например, с броуновским движением частиц. При этом на каждой итерации $0 \leq t \leq C_{\max}$, где C_{\max} – заданное число итераций, определяется значение целевой функции $f(X_t)$ и запоминается рекорд $f^+ = f(X^+)$ – минимальное или максимальное (в зависимости от постановки задачи) значение целевой функции f^+ и соответствующие ему значения вектора параметров X^+ , полученные на одной из итераций. После выполнения заданного числа итераций C_{\max} указанный рекорд полагается результатом работы метода.

При решении задач дискретной оптимизации указанный подход, базирующийся на формуле (1), напрямую неприменим. Вместо этого при

переходе от решения X_t к решению X_{t+1} могут быть использованы модифицирующие операции, специфичные для решаемой задачи. При этом одна итерация метода случайных блужданий эквивалентна применению одной модифицирующей операции, выбранной случайным образом.

Данный метод требует выбора начального решения, которое может быть получено любым другим методом.

Метод взвешенного случайного перебора

Рассмотренные выше методы случайного перебора и случайных блужданий являются наиболее простыми примерами стохастических методов и основаны на псевдослучайном равновероятном выборе направления движения в дереве комбинаторного перебора. При их практическом использовании не предполагается какого-либо анализа качества формируемого решения по ходу его построения, оставляя все на волю случая.

Анализ качества решения и минимизация его приращения используется в составе жадных методов, однако данная стратегия формирования решения ввиду отсутствия средств глубокого анализа также является далеко не самой эффективной, т.к. какого-либо разнообразия в выборе ветвей дерева комбинаторного перебора не предусмотрено.

Рассмотренные методы можно скомбинировать путем попытки «взвешивания» направления движения в дереве комбинаторного перебора путем выбора различных вероятностей движения в узлы нижележащего яруса. Для этого можно воспользоваться жадным приращением качества решения, добавив к нему элемент случайности [106]. Следуя данной стратегии, именуемой в дальнейшем *взвешенным* или *направленным случайным перебором* (англ. Weighted Random Search, сокр. WRS), при выборе направления движения из текущей вершины дерева комбинаторного перебора используется критерий (эвристика)

$$F_i = \Delta Q_i \cdot (1 + 2d(r_k - 0,5)), \quad (2)$$

где ΔQ_i – оценка приращения качества решения для i -го направления движения, d – величина относительного разброса значений вблизи оценки приращения (настроечный параметр), r_k – очередное псевдослучайное число с равномерным распределением на отрезке $[0; 1]$. Минимальное значение критерия F_j будет соответствовать выбранному направлению движения:

$$j = \arg \min_{i=1, \overline{K}} F_i,$$

где K – число возможных способов модификации текущего решения (число направлений движения). В остальном формирование решения производится аналогично методу случайного перебора путем реализации S_{\max} попыток движения от корня к листьям дерева комбинаторного перебора с выбором наилучшего решения.

При $d = 0$ критерий (2) тождественно равен локальной оценке качества i -го направления движения ΔQ_i , т.е. соответствует жадной стратегии построения решения. При $d > 0$ в порядок выбора решения вмешивается случайная составляющая, причем диапазон изменения значения критерия F_i составляет случайную величину с равномерным распределением на отрезке $[\Delta Q_i - \Delta Q_i d; \Delta Q_i + \Delta Q_i d]$.

При использовании данной стратегии выбор меньших приращений ΔQ_i осуществляется чаще, чем выбор больших, однако, в отличие от жадного метода, сохраняется отличная от нуля вероятность выбора любого из них на одной из итераций при построении очередного решения.

При малых значениях d отрезки, соответствующие диапазонам изменения значения критерия (2) для различных направлений движения, не перекрываются и метод в большей степени соответствует жадной стратегии. С ростом d отрезки начинают перекрываться, что реализует возможность выбора другого, не жадного, направления движения с некоторой вероятностью. При значениях $d \gg 1$ жадные оценки приращений ΔQ_i не

играют решающей роли при выборе направления движения, определяемого случайной составляющей, что делает метод в большей степени похожим на случайный перебор.

Таким образом, метод, основанный на использовании локального критерия (2), представляет собой компромиссный вариант между жадным подходом и случайным перебором. В его состав входит настроечный параметр d , значение которого регулирует степень жадности или случайности метода. При решении поставленной задачи необходим выбор конкретного значения $d = d^*$, для которого ожидается получение решений максимального качества. Для этого необходимо решить задачу оптимизации вида

$$Q(d) \rightarrow \min, \\ d_{\min} \leq d \leq d_{\max},$$

где функция $Q(d)$ каким-либо образом характеризует качество решения поставленной задачи дискретной комбинаторной оптимизации в зависимости от настроечного параметра d (в общем случае настроечных параметров может быть несколько). Фактически при этом решается задача оптимизации параметров метода оптимизации (или, другими словами, *параметрической идентификации*), что называется *метаоптимизацией* (англ. *meta-optimization*). Как правило, функция $Q(d)$ является стохастической, что затрудняет использование градиентных методов для отыскания ее глобального экстремума и требует использования специальных приемов.

Метод муравьиной колонии

Использование комбинации случайного перебора и взвешивающих эвристик обеспечивает на практике ощутимую выгоду, заключающуюся в возможности быстрого получения решений неплохого качества, что не обеспечивается методами на базе случайной или жадной стратегий по

отдельности. Однако при итеративном повторении поиска решений опыт прошлых итераций не учитывается, плохие или хорошие решения фактически отбрасываются, запоминается лишь лучшее из них (рекорд). Исправить данную ситуацию можно с использованием *метода муравьиной колонии* (англ. Ant Colony optimization, сокр. AC), в котором старые решения запоминаются путем специальной пометки ветвей дерева комбинаторного перебора и соответствующих им элементов решения. Данная пометка выражается в использовании специальных дополнительных слагаемых или множителей в составе эвристики, на основе которой принимается решение о выборе направления движения.

Метод муравьиной колонии был предложен итальянским ученым Марко Дориго (M. Dorigo) в 1992 г. как результат наблюдения за поведением муравьев в природе, где их целью является нахождение кратчайшего пути между муравейником и источником пищи. При выборе направления движения в пространстве муравей выбирает конкретное решение, руководствуясь двумя факторами: длиной пути l_i в выбранном i -м направлении и количеством *феромона* τ_i , оставленном на i -м пути другими муравьями, прошедшими по нему ранее.

В природе муравей имеет ограниченный запас феромона и при достижении цели (обычно источника пищи) помечает понравившийся ему путь дополнительной порцией феромона, причем на более коротком пути остается большее количество феромона, что при итеративном повторении (движении группы муравьев по пути в различное время) обеспечивает отметку феромоном более перспективных путей, оставляя при этом небольшую возможность для отклонения от них в отличие от жадного метода. С течением времени по наиболее перспективным путям происходит перемещение большего числа муравьев, что дополнительно увеличивает общее количество феромона на них. С течением времени феромон испаряется, что приводит к уменьшению его количества на путях, оказавшихся неперспективными.

В результате колония из достаточно примитивных по отдельности агентов (муравьев) в совокупности получает способность решать непростые практические задачи, связанные с ориентированием на местности. Существование муравьиных колоний в природе на протяжении миллионов лет, достигающих с использованием группового интеллекта явных успехов в адаптации к условиям обитания, является неоспоримым эмпирическим доказательством правильности используемого муравьями подхода, что стимулирует попытки адаптации рассмотренного подхода к решению различных практически важных задач. При решении задач дискретной комбинаторной оптимизации данный принцип может быть использован путем отметки феромоном перспективных решений (путей в дереве комбинаторного перебора) и испарения феромона с неперспективных.

Направление движения электронного муравья в каждом конкретном случае выбирается пропорционально вероятности

$$p_i = \frac{\eta_i^\alpha \tau_i^\beta}{\sum_{j=1}^K \eta_j^\alpha \tau_j^\beta}, \quad i = \overline{1, K}, \quad (3)$$

где $\eta_i = \frac{1}{l_i}$ в рассматриваемой задаче поиска путей; α, β – настроечные параметры, определяющие реакцию муравья на длину участка пути (жадность) и количество феромона на нем. В предельных случаях при $\alpha = 1$ и $\beta = 0$ метод превращается в жадный, т.к. электронный муравей руководствуется только длиной пути, а при $\alpha = 0$ и $\beta = 1$ – только количеством феромона. На практике обычно используется компромиссный вариант, когда $(\alpha > 0) \wedge (\beta > 0)$.

При достижении цели, критерием чего в природе является нахождение маршрута к источнику пищи, а в рассматриваемой цифровой модели муравьиной колонии – нахождение решения, электронный муравей помечает пройденный путь, добавляя к имеющемуся количеству феромона на каждом из его участков приращение

$$\Delta\tau = \frac{Q}{L}, \quad (4)$$

где Q – количество феромона в распоряжении муравья (настроечный параметр),

$$L = \sum_i l_i$$

– длина найденного пути (оценка качества решения). При этом учитывается испарение феромона

$$\tau_i^{(t)} = \gamma\tau_i^{(t-1)} + \Delta\tau, \quad (6)$$

где t – дискретное время (номер итерации); $\gamma \in [0; 1]$ – настроечный параметр, влияющий на скорость испарения: при $\gamma = 0$ происходит полное испарение феромона прошлых итераций, при $\gamma = 1$ – сохранение значения феромона с «момента сотворения мира».

При реализации алгоритма на практике обычно рассматривается колония из Z муравьев, поведение каждого из которых в простейшем случае определяется рассмотренными выше правилами. В некоторых случаях при построении решений некоторые муравьи в составе колонии могут действовать по отличающимся правилам. Так, например, иногда вводится понятие элитарных муравьев, обладающих повышенной жадностью.

Для построения решений достаточно колонии из $Z = 1$ муравья. Если же $Z > 1$, то каждый из муравьев колонии производит нахождение своего решения, некоторые из которых могут совпадать, и его пометку феромоном, а затем выполняется испарение феромона со всех путей. По сравнению с единственным муравьем колонией производится локальная разведка признакового пространства в окрестности текущего неплохого решения, отмеченного максимальным количеством феромона.

Метод муравьиной колонии относится к эвристическим, т.к. не гарантирует получение оптимальных решений, стохастическим, т.к. базируется на вероятностных принципах выбора направления движения, и

итерационным, т.к. подразумевает перебор некоторого множества из C_{\max} решений.

Перед практической реализацией метода муравьиной колонии необходимо определиться со значениями настроечных параметров $\alpha, \beta, \gamma, Q, \tau^{(0)}, V, Z$, где $\tau^{(0)}$ – начальное значение феромона на дугах графа, т.е. выполнить метаоптимизацию. В отличие от рассмотренного выше метода взвешенного случайного перебора в данном случае число настроечных параметров 6, что требует больших вычислительных затрат при оптимизации стохастической функции, соответствующей усредненному качеству решений.

Метод имитации отжига

В отличие от рассмотренных ранее методов, производящих последовательное построение решения элемент за элементом, рассматриваемый в данном разделе *метод имитации отжига* (англ. Simulated Annealing, сокр. SA) основан на итеративных попытках модификации уже существующего решения с целью повышения его качества. Он был предложен Скоттом Киркпатриком (S. Kirkpatrick), С. Джелаттом (C. Gelatt) и Марио Векчи (M. Vecchi) в 1983 г. В его основе лежит имитация процесса отжига металла, в результате которого его атомы образуют кристаллическую решетку, стараясь минимизировать суммарную потенциальную энергию. При большой начальной температуре каждый из атомов может совершать колебания с большой амплитудой в пространстве, которые могут приводить в т.ч. и к локальному увеличению суммарной энергии. По мере планомерного снижения температуры амплитуда колебаний заметно уменьшается, и атомы производят все меньшие колебания около состояния с минимальной энергией, которая достигается при достаточно низком конечном значении температуры.

Аналогией описанного процесса можно воспользоваться при решении оптимизационных задач. При этом энергии сопоставляется минимизируемая

целевая функция $Q(X)$, прыжки атомов соответствуют случайным изменениям решения (вектора параметров X), приводящим к изменению значения целевой функции ΔQ . Если после внесения изменения $\Delta Q < 0$ (полученное решение лучше предыдущего), оно замещает текущее. Если же после внесенного случайного изменения качество решения ухудшилось ($\Delta Q > 0$), производится вычисление значения вероятности

$$p = e^{-\frac{\Delta Q}{T}}, \quad (7)$$

где T – текущая температура, и в случае, если $r_k > p$, где $r_k \in [0; 1]$ – очередное псевдослучайное число, решение замещает предыдущее. При этом от итерации к итерации производится уменьшение температуры. В простейшем случае темп ее изменения может быть задан как

$$T^{(i)} = \alpha T^{(i-1)}, \quad (8)$$

где $\alpha \in [0; 1)$ – настроечный параметр, регулирующий темп охлаждения, начиная с некоторого начального значения $T^{(0)}$, что приводит ко все меньшим разрешенным ухудшениям качества текущего решения ΔQ . В ходе итерационного процесса производится оценка качества всех промежуточных решений, наилучшее из которых является результатом работы алгоритма.

Модификации решения, для которых $\Delta Q < 0$, соответствуют рассмотренной выше жадной стратегии. Модификации, для которых $\Delta Q > 0$, вообще говоря, приводят к ухудшению качества решения и на первый взгляд являются бесполезными. Однако с их помощью становится возможным осуществление выхода за пределы бассейна притяжения текущего локального экстремума в надежде на попадание в бассейн другого экстремума с меньшим значением целевой функции. По мере уменьшения температуры вероятность принятия модификации с ухудшением качества решения снижается:

$$\lim_{T \rightarrow 0} e^{-\frac{\Delta Q}{T}} \rightarrow 0.$$

Темп охлаждения α должен быть достаточно медленным для того, чтобы обеспечить необходимое число модификаций решений до того момента, когда ухудшающие модификации будут практически запрещены. В то же время слишком медленный темп охлаждения будет приводить к слишком большому числу итераций, не улучшающих качество результирующего решения и расходующих вычислительное время впустую.

При больших значениях температуры метод имитации отжига эквивалентен методу случайных блужданий. По мере понижения температуры модификации, ухудшающие качество текущего решения, становятся все менее вероятными, и метод фактически производит уточнение текущего решения, приближая его к локальному экстремуму.

Эволюционные (генетические) методы

Представители флоры и фауны нашего мира обладают рядом интересных особенностей, позволяющих им занимать определенные биологические ниши путем приспособления (адаптации) к условиям обитания. При этом в условиях ограниченного количества ресурсов выживают самые приспособленные из них. Данный процесс был назван *естественным отбором* и впервые описан в работах Чарльза Дарвина (C. Darwin) в середине XIX века. К середине XX века обобщение идей Ч. Дарвина легло в основу *синтетической теории эволюции*, составляющей основу современного научного взгляда на эволюцию в целом. В 1944 г. в экспериментах Освальда Эвери (O. Awery), Колина Маклауда (C. MacLeod) и Маклина Маккарти (M. McCarty) было показано, что молекулы ДНК, представляющие собой пару линейных цепочек из 4 оснований, обеспечивают хранение генетической информации. Передача генетической информации происходит в процессе размножения, причем потомки получают от предков (родителей) часть генетической информации, кодирующей их *генотип*. С учетом того, что в процессе размножения участвуют только

наиболее приспособленные (англ. *fitness*) особи, при эволюции популяции особей происходит накопление генетического материала, кодирующего полезные признаки. В простейшем случае потомок получает часть ДНК от отца и часть от матери, что называется *кроссинговером*. В процессе скрещивания могут возникать *мутации*, действие которых заключается в случайном искажении фрагмента ДНК-последовательности. Мутации могут приводить к появлению новых полезных признаков, что оставляет их в ходе последующего естественного отбора, улучшая приспособленность особей к условиям обитания. Если мутация оказывается вредной и приспособленность особи к условиям обитания снижается, она будет отброшена в ходе естественного отбора с высокой долей вероятности.

На подобных принципах естественного отбора, наследования генетической информации и изменчивости в ходе эволюции основаны *эволюционные методы*, именуемые также *генетическими* (англ. Genetic Algorithms, сокр. GA). Они могут быть использованы для решения оптимизационных задач широкого класса. Методы данного направления были предложены во второй половине XX века в работах Нильса Баричелли (N. Barychelli), Алекса Фразера (A. Frazer), Ганса-Иоахима Бремерманна (G. Bremermann), Джона Холланда (J. Holland) и некоторых других ученых.

В основе рассматриваемой группы методов лежит применение *генетических операторов*, к которым обычно относят скрещивание (кроссинговер) и мутацию, с целью улучшения функции приспособленности у особей в составе популяции в ходе естественного отбора, обычно выражающегося в том, что в процессе размножения участвуют наиболее приспособленные особи. Иногда к ним добавляют операцию *инверсии*, выражаемую во включении некоторого родительского фрагмента ДНК в состав ДНК потомка в обратном (инверсном) порядке.

При решении задач дискретной комбинаторной оптимизации с ограничениями манипуляция с генотипами как, например, с битовыми строками приводит к высокой вероятности получения потомков, которым

соответствуют некорректные решения, не удовлетворяющие условиям задачи либо нарушающие ограничения. Данная особенность существенно снижает эффективность рассматриваемого метода направленной эволюции и вынуждает использовать иные, более интеллектуальные принципы выполнения скрещивания, в общем случае индивидуальные для каждой решаемой задачи (т.н. алгоритмическое скрещивание). Остальные операторы (например, мутация) также обычно реализуются с учетом алгоритмических особенностей задачи.

Метод пчелиной колонии

Еще одним методом, который был получен в результате наблюдения за природой, является *метод пчелиной колонии* (англ. Bee Colony optimization, сокр. BC). Вместе с методом муравьиной колонии, рассмотренным выше, данные методы образуют группу *биоинспирированных методов*. Метод пчелиной колонии был предложен Д. Карабога (D. Karaboga) в 2005 г. (по другим данным, Д. Фамом (D. Pham) с соавторами), однако его основная идея во многом напоминает мултистарт-алгоритмы, которые известны с середины XX века.

В основу данного метода положен опыт наблюдения за поведением колонии медоносных пчел, занимающихся в природе разведкой пространства, окружающего улей, на предмет поиска нектара с его последующим сбором. В природе пчелы в улье имеют четкое разделение ролей: рабочие пчелы (фуражиры) занимаются сбором нектара, пчелы-разведчики (скауты) – поиском наиболее перспективных областей с нектаром, трутни и матка задействованы в процессе размножения, часть пчел занимается охраной улья и поддержанием его температуры.

При решении оптимизационных задач обычно используют лишь два типа пчел: разведчиков и фуражиров, остальные в контексте рассматриваемых задач не находят применения. В природе разведчики ведут

исследование окружающего улей пространства и сообщают информацию о перспективных местах, в которых было обнаружено наибольшее количество нектара (для обмена информацией в улье существует специальный хитроумный механизм, именуемый танцем пчелы). Далее по наиболее перспективным из указанных разведчиками направлениям производится вылет рабочих пчел, которые занимаются сбором нектара и попутно проводят уточнение информации разведчиков о количестве нектара в некоторой окрестности от указанной разведчиком области. Между указанными типами пчел в улье поддерживается определенное соотношение (например, пять рабочих пчел на одного разведчика), оптимальное значение которого, по-видимому, было найдено в ходе эволюции, что обеспечивает организацию эффективной работы улья в целом.

Указанные социальные роли агентов могут быть использованы при решении задач дискретной оптимизации. При этом роль разведчика трансформируется в проведение разведки пространства допустимых решений \mathfrak{X} , с выбором одной из его точек $X_i \in \mathfrak{X}$, в которой целевая функция имеет некоторое значение $f(X_i)$. Данный выбор в простейшем случае может быть реализован с использованием метода случайного перебора. С учетом невозможности хранения информации о всех путях в электронном аналоге улья сохраняется информация о W лучших местах $S = \{X_1, X_2, \dots, X_W\} \subseteq \mathfrak{X}$, которые характеризуются наилучшими значениями целевой функции $f(X_1) \leq f(X_2) \leq \dots \leq f(X_W)$ (что в достаточной степени схоже с ограничением на объем популяции при использовании генетического метода, однако в данном случае величина W скорее характеризует информационную емкость «памяти» улья, нежели чем непосредственное число пчел). Рабочая пчела берет в качестве направления движения одно из значений $X_i \in S$, $i = \overline{1, W}$, при этом в ходе своей работы она осуществляет разведку «вокруг» начальной точки X_i . Для этого необходимо каким-либо образом модифицировать начальное решение X_i , для чего можно использовать

рассмотренные выше модифицирующие операции (см. разд. 2.9 и 2.10), применение каждой из которых приводит к однократному элементарному изменению решения $X_i \rightarrow X'_i$, а минимальное число подобных операций $d(X_i, X_j)$, необходимое для превращения решения X_i в X_j , можно рассматривать в качестве некоторой метрики, специфичной для данной задачи и являющейся аналогом широко известных расстояний Хэмминга или Левенштейна. Число R модифицирующих операций, последовательно применяемых к решению X_i с целью получения решения X_j , не превосходит значения метрики $d(X_i, X_j)$ и может характеризоваться как радиус окрестности разведки. Результатом работы пчелы-фуражира является решение X_j и соответствующая ему оценка целевой функции $f(X_j)$. В случае, если хотя бы одно решение $X_k \in S$, $k = \overline{1, W}$ среди найденных ранее W решений уступает по качеству вновь найденному, предыдущее решение заменяется на новое при их неизменном общем количестве в электронной модели улья: $S^{(t)} = S^{(t-1)} \setminus \{X_k\} \cup \{X_j\}$, где t – номер итерации. Комбинируя работу разведчиков и рабочих пчел в течение C итераций, следует ожидать монотонного увеличения качества решений в составе отобранного подмножества S . Выбор наилучшего среди них можно считать результатом работы алгоритма.

Метод роя частиц

Метод метод роя частиц (англ. Particle Swarm Optimization, сокр. PSO), предложен Эберхартом и Кеннеди в 1995 г. Он базируется на имитации группового поведения конечного множества агентов (например, комаров, рыб или птиц в живой природе). При решении оптимизационных задач вида $f(X) \rightarrow \min$, где f – целевая функция, $X = [x_1, x_2, \dots, x_N]$ – ее аргументы,

текущее положение каждого i -го агента (частицы), $i = \overline{1, Z}$, Z – размер колонии (роя), характеризуется вектором с координатами $X_i = [x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_N^{(i)}]$. При этом частица имеет текущую скорость $V_i = [v_1^{(i)}, v_2^{(i)}, \dots, v_N^{(i)}]$, а ее положение на t -м шаге алгоритма определяется как $X_i^{(t)} = X_i^{(t-1)} + V_i^{(t-1)}$. Скорость частицы на t -м шаге определяется как

$$V_i^{(t)} = \alpha V_i^{(t-1)} + \beta r_k \otimes (X_i^* - X_i) + \gamma r_{k+1} \otimes (X^{**} - X_i), \quad (9)$$

где « \otimes » – обозначение прямого (покомпонентного) произведения векторов:

$$X \otimes Y = [x_1, x_2, \dots, x_N] \otimes [y_1, y_2, \dots, y_N] = [x_1 y_1, x_2 y_2, \dots, x_N y_N];$$

$X_i^* = \arg \min_{\tau=0, t} f(X_i^{(\tau)})$ – наилучшее положение i -й частицы роя за время его

движения (локальный рекорд); $X^{**} = \arg \min_{i=\overline{1, Z}} f(X_i^*)$ – наилучшее положение

среди всех частиц роя (глобальный рекорд); α, β, γ – настроечные параметры, имеющие смысл движения частицы по инерции и притяжения к локальному и глобальному рекорду соответственно; $r_k \in [0; 1]$ – очередное псевдослучайное число.

Работа метода производится за заданное число итераций C_{\max} , результирующим решением считается глобальный рекорд X^{**} . Приведенное описание метода является базовым, в некоторых случаях применяются многороевая или мультистарт стратегии, различные топологии соседства частиц, механизмы локального (градиентного поиска) с целью улучшения текущего положения частиц и пр.

Указанная стратегия движения частиц в непрерывном пространстве параметров целевой функции с успехом применяется при решении ряда задач непрерывной оптимизации, однако в дискретных задачах она напрямую неприменима ввиду ряда сложностей с понятием скорости движения частицы в дискретном пространстве. Для их решения приведенные выше формулы не подходят и применяются специализированные подходы.

Первое направление подходов оперирует движением частиц роя в непрерывном пространстве \mathbb{R}_1 с последующим отображением координат частиц в дискретное пространство \mathbb{R}_2 параметров целевой функции ($\mathbb{R}_1 \rightarrow \mathbb{R}_2$). Указанное отображение может быть выполнено различными способами, например, с использованием сигмоидальной функции $\sigma(y) = \frac{1}{1+e^{-y}}$, $0 < \sigma(y) < 1$, $y \in \mathbb{R}_1$, где $\sigma(y)$ определяет вероятность принадлежности дискретного значения $x \in \mathbb{R}_2$ одному из бинарных значений

$$x = \begin{cases} 1, & r_k < \sigma(y); \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (10)$$

Если по условию задачи параметры целевой функции должны принимать дискретные значения из некоторого множества значений $\{v_1, v_2, \dots, v_Q\}$, то формула (2) может быть преобразована к виду

$$x = \begin{cases} v_1, & 0 < r_k \sigma(y) \leq \frac{1}{Q}; \\ v_2, & \frac{1}{Q} < r_k \sigma(y) \leq \frac{2}{Q}; \\ \dots & \\ v_Q, & \frac{Q-1}{Q} < r_k \sigma(y) \leq 1, \end{cases} \quad (11)$$

что эквивалентно выбору одного из значений с использованием правила «рулетки» пропорционально значению $\sigma(y)$.

Более простой в вычислительном плане является стратегия округления значения y или $\sigma(y)$ до ближайшего значения без рандомизации

$$i = \lfloor yQ \rfloor + 1 \quad (12)$$

или

$$i = \lfloor \sigma(y)Q \rfloor + 1, \quad (13)$$

где $\lfloor x \rfloor$ – обозначение операции округления вниз (усечения), $x = v_i$ (при использовании более простой формулы (12) необходимо следить, чтобы значение y не выходило за пределы отрезка $[0; 1]$).

Второе направление подходов отказывается от использования понятия скоростей и координат в непрерывном пространстве, оперируя конкретными решениями задачи с учетом ее специфики и производя модификацию решений X с целью получения решения X' , более похожего на требуемое Y (в методе роя частиц – на глобальный или локальный рекорд). При этом вместо координат частиц роя используются конкретные решения, закодированные в терминах решаемой задачи, а в качестве скоростей выступают вероятности p_i применения той или иной модифицирующей операции o_i , специфичной для решаемой задачи, с целью получения нового положения решения $X' = o_i(X)$ в дискретном пространстве. При этом, с целью сохранения общей идеи метода роя частиц, должно выполняться условие $d(X', Y) < d(X, Y)$, где d – «расстояние» между парой решений в дискретном пространстве (аналог расстояний Хэмминга или Левенштейна).

Сравнение качества решений

Обычно при сравнении методов формируют выборку $\Lambda = \{G_1, G_2, \dots, G_K\}$ из $K = |\Lambda|$ тестовых примеров, для каждого из которых производится построение решений с использованием выбранных эвристических методов $\Phi = \{m_1, m_2, \dots, m_T\}$, $T = |\Phi|$ и оценка их качества.

Существуют две стратегии формирования выборок Λ . Согласно первой из них выборка включает коллекцию тестовых примеров (англ. benchmarks), каждый из которых представляет собой практически важный случай в рассматриваемой предметной области. Вторая стратегия основана на использовании случайных исходных данных.

У каждой из стратегий есть достоинства и недостатки. Так коллекция тестовых примеров может не покрывать всех возможных практически важных ситуаций и обычно имеет ограниченный размер K , в то время как выборки на базе случайных исходных данных могут иметь произвольный объем, ограниченный лишь допустимым временем вычислительного эксперимента. В то же время выборки случайных исходных данных могут представлять собой некую абстракцию, далекую от практически важных примеров. При их использовании важным является исследование соответствия случайных данных и практически важных тестовых примеров. Коллекция тестовых примеров может быть выбрана субъективно в угоду одному из методов, в то время как случайная генерация тестовых примеров избавлена от этого недостатка.

Рассмотрим в качестве примера сравнение качества решений эвристических методов в задаче поиска кратчайшего пути в графе. Пусть качество решения, полученного методом m_i , $i = \overline{1, T}$ на тестовом примере G_j , $j = \overline{1, K}$ определяется как $Q_{m_i}(G_j)$. Тогда простейшим способом сравнения качества решений является сопоставление их средневывборочных значений:

$$\gamma_{m_i}(\Lambda) = \frac{\sum_{j=1}^K Q_{m_i}(G_j)}{K} \rightarrow \min . \quad (14)$$

Однако в случае, когда для некоторых тестовых примеров корректные решения не найдены (для них $Q_{m_i}(G_j) = \infty$), данная формула неприменима, и вместо нее правильнее использовать среднее арифметическое значение для элементов выборки (тестовых примеров) с корректными решениями:

$$\gamma_{m_i}(\Lambda) = \frac{\sum_{j=1}^K Q_{m_i}(G_j) \phi_{m_i}(G_j)}{K} \rightarrow \min , \text{ где} \quad (15)$$

$\phi_{m_i}(G_j) \in \{0, 1\}$ – функция, принимающая единичное значение в случае нахождения решения методом m_i для тестового примера G_j .

Использование критерия (15) для сравнения методов также далеко не всегда позволяет сделать объективный вывод о том, какой из методов лучше. При его использовании на практике может возникнуть ситуация, когда метод m_1 обеспечивает получение в большинстве случаев корректных решений, характеризующихся относительно большими значениями $Q_{m_1}(G_j)$, а метод m_2 формирует решения для малого числа элементов выборки Λ с относительно малыми значениями $Q_{m_2}(G_j)$. При использовании критерия (15) $\gamma_{m_1} > \gamma_{m_2}$, значит метод m_1 лучше метода m_2 , однако так ли это на самом деле? Разумеется нет, т.к. метод, обеспечивающий построение лишь простейших решений для малого количества тестовых примеров, на практике в большинстве случаев бесполезен, поэтому в подобных случаях вместо критерия (15) при сравнении методов необходимо использовать критерий

$$\Delta\gamma_{m_i}(\Lambda) = \frac{\sum_{j=1}^K (Q_{m_i}(G_j) - Q^*(G_j))\phi_{m_i}(G_j)}{K} \rightarrow \min, \quad (16)$$

где $Q^*(G_j)$ – качество наилучшего решения (суб- или квазиоптимального в зависимости от задачи). Критерий (16) представляет собой среднюю величину ухудшения решения по сравнению с известным оптимумом.

При этом для рассматриваемых эвристических методов возможно оценить вероятность получения решения

$$\rho_{m_i}(\Lambda) = \frac{\sum_{j=1}^K \phi_{m_i}(G_j)}{K} \rightarrow \max, \quad (17)$$

причем метод, для которого $\rho_{m_i} \rightarrow 1$, является предпочтительным. Таким образом, для объективного сравнения методов необходимо учитывать пару критериев, характеризующих среднее качество решений (или среднее отклонение от оптимума) и вероятность отыскания решения (3.4).

Еще одним возможным критерием сравнения эвристических методов является вероятность получения суб- или квазиоптимальных решений

$$\rho_{m_i}^*(\Lambda) = \frac{\sum_{j=1}^K \theta_{m_i}(G_j)}{K} \rightarrow \max, \quad (18)$$

где

$$\theta_{m_i}(G_j) = \begin{cases} 0, & Q_{m_i}(G_j) > Q^*(G_j), \\ 1, & Q_{m_i}(G_j) = Q^*(G_j) \end{cases} \quad (19)$$

– функция, принимающая единичное значение в случае совпадения качества текущего $Q_{m_i}(G_j)$ и наилучшего $Q^*(G_j)$ решений.

Отклонения качества решений $\Delta Q(G_j) = Q_{m_i}(G_j) - Q^*(G_j)$ имеют случайный характер, и для них может быть произведена оценка вероятности того, что найденное решение отличается от оптимума не более чем на заданную величину ΔQ :

$$\rho_{m_i}^\Delta(\Delta Q, \Lambda) = \frac{\sum_{j=1}^K \mu_\Delta(Q_{m_i}(G_j), Q^*(G_j), \Delta Q)}{K}, \quad (20)$$

где

$$\mu_\Delta(Q, Q^*, \Delta Q) = \begin{cases} 1, & Q - Q^* \leq \Delta Q, \\ 0, & Q - Q^* > \Delta Q \end{cases} \quad (21)$$

– функция, принимающая единичное значение в случае, если отклонение качества решения $\Delta Q(G_j) = Q(G_j) - Q^*(G_j)$ не превышает заданное пороговое значение ΔQ , и нулевое в противном случае. Обычно при сравнении эвристических методов используют графики зависимости $\rho_{m_i}^\Delta$ от ΔQ . Несложно показать, что при $\Delta Q = 0$ $\rho_{m_i}^\Delta = \rho_{m_i}^*$.

При работе с малыми выборками возможна ситуация, в которой разница в значениях сопоставляемых критериев вызвана статистической погрешностью, а не различием в поведении методов. Для того, чтобы статистически корректно доказать преимущество одного метода по

сравнению с другим, необходимо убедиться в том, что различие сопоставляемых средних оценок является *статистически значимым*. Для этого необходимо произвести расчет дисперсии средневывборочных оценок

$$D_{m_i}(\Lambda) = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K (Q_{m_i}(G_j) - \gamma_{m_i})^2, \quad (22)$$

оценить величину среднеквадратичного отклонения

$$\sigma_{m_i}(\Lambda) = \sqrt{D_{m_i}} \quad (23)$$

и рассчитать ширину доверительного интервала ΔQ для заданной доверительной вероятности. Например, для доверительной вероятности 0,95

$$\Delta Q_{m_i}(\Lambda) = \frac{1,96\sigma_{m_i}}{\sqrt{K}}, \quad (24)$$

где коэффициент 1,96 представляет собой квантиль распределения Стьюдента для заданной доверительной вероятности. Смысл указанных действий заключается в том, что при записи средневывборочного значения в виде $\gamma_{m_i}(\Lambda) \pm \Delta Q_{m_i}(\Lambda)$ можно утверждать, что истинное среднее значение математического ожидания (γ_{m_i} при $K \rightarrow \infty$) находится в пределах доверительного интервала $[\gamma_{m_i}(\Lambda) - \Delta Q_{m_i}(\Lambda); \gamma_{m_i}(\Lambda) + \Delta Q_{m_i}(\Lambda)]$ с заданной доверительной вероятностью.

Задание

Написать программу, реализующую решение указанной в индивидуальном варианте задачи четырьмя подходами (полный перебор, случайный перебор, жадный подход, стохастический итерационный алгоритм в соответствии с индивидуальным вариантом). Сравнить качество решений путем организации вычислительного эксперимента над выборкой из K псевдослучайных тестовых примеров, для каждого из методов вычислить:

- средневывборочные оценки качества решений;
- соответствующие им дисперсии;

- среднеквадратичные отклонения;
- границы доверительных интервалов (для доверительной вероятности 0,95);
- вероятности отыскания решений;
- вероятности отыскания оптимального (или условно оптимального, в зависимости от задачи) решения.

Построить графики зависимости вероятности получения решения с заданным отклонением от оптимума (или условного оптимума, в зависимости от задачи) от величины допустимого отклонения.

Если в состав метода входят настроечные параметры, произвести метаоптимизацию, результаты которой представить в виде графиков зависимостей средневыборочных величин от значений настроечных параметров.

Для указанных выше средневыборочных оценок произвести построение графиков их зависимостей от размерности задачи N и плотности графа d .

Произвести оценку времени отыскания решения, построить графики зависимости средневыборочного качества решений от числа итераций (для итерационных методов).

Индивидуальные варианты

1. Гамильтонов путь – это путь, однократно проходящий через все вершины графа. В заданном ориентированной графе найти кратчайший гамильтонов путь, соединяющий указанную пару вершин.
2. Гамильтонов цикл – это цикл, однократно проходящий через все вершины графа. В заданном неориентированном графе найти кратчайший гамильтонов цикл.
3. Хроматическим числом неориентированного графа называется минимальное число цветов, в которое можно раскрасить вершины графа

так, чтобы соединенные ребром вершины были раскрашены в разные цвета. Определить хроматическое число для заданного неориентированного графа.

4. Графы называются изоморфными, если из одного можно получить другой путем перенумерации его вершин. Найти такой способ перенумерации вершин (подстановку изоморфизма), который дает минимальное число расхождений между матрицами смежности рассматриваемых графов.
5. Для неориентированного графа заданы веса ребер. Найти такое разбиение графа на N подграфов, чтобы сумма ребер, связывающих полученные подграфы, была минимальна.
6. Максимальным независимым множеством называется такое максимальное по включению подмножество вершин графа, в котором ни одна пара вершин не соединена ребром. Для заданного графа оценить мощность максимального независимого множества.
7. Для заданного неориентированного графа найти мощность максимального по включению полносвязного подграфа.
8. Диаметр графа – это максимальное расстояние между вершинами графа. Для заданного графа определить его диаметр.
9. Компонентой сильной связности ориентированного графа называется максимальное по включению множество взаимно достижимых вершин. Для заданного ориентированного графа оценить мощность компоненты сильной связности.
10. Минимальным остовным деревом графа G называется дерево с минимальной суммарной длиной ребер, образованное из ребер графа G . Найти минимальное остовное дерево заданного неориентированного графа.

Содержание отчета

1. Титульный лист.

2. Вариант, индивидуальное задание.
3. Описание стратегии решения, алгоритмы решения задачи.
4. Листинги и скриншоты разработанной программы.
5. Тестовые примеры (не менее 3), подтверждающие правильность решения задачи.
6. Результаты вычислительного эксперимента.
7. Выводы.

Контрольные вопросы

1. Какое решение называется оптимальным?
2. Какие методы гарантируют получение оптимальных решений?
3. Какие методы называются эвристическими?
4. Какие методы называются итерационными?
5. Какие методы называются последовательными?
6. Какие методы называются стохастическими?

Библиографический список

1. Емельянов С.Г., Ватутин Э.И., Панищев В.С., Титов В.С. Процедурно-модульное программирование на Delphi: учебное пособие. М.: Аргамак-Медиа, 2014. 352 с.
2. Зотов И.В., Ватутин Э.И., Борзов Д.Б. Процедурно-ориентированное программирование на C++: учебное пособие. Курск: КурскГТУ, 2008. 211 с.
3. Ватутин Э.И., Титов В.С., Емельянов С.Г. Основы дискретной комбинаторной оптимизации. М.: Аргамак-Медиа, 2016. 270 с.