

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
Национальный исследовательский университет
«Высшая школа Экономики»

ФАКУЛЬТЕТ ЭКОНОМИЧЕСКИХ НАУК

ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПРОГРАММА «ЭКОНОМИКА»

КУРСОВАЯ РАБОТА

Стохастические методы оптимизации

Выполнил:
студент группы БЭК1812
Хайкин ГЛЕБ АЛЕКСЕЕВИЧ

Научный руководитель:
старший преподаватель
Борзых Дмитрий Александрович



МОСКВА — 2020

Оглавление

1. Введение	3
2. Методы и их применение	4
2.1. Имитация отжига	4
2.1.1. Алгоритм	4
2.1.2. N ферзей	5
2.1.3. Минимизация негладкой функции	10
2.1.4. Задача коммивояжера	12
2.1.5. Вывод	15
2.2. Метод роя частиц	15
2.2.1. Алгоритм	16
Заключение	18
Список литературы	19

1. Введение

jjj.

2. Методы и их применение

2.1. Имитация отжига

Имитация отжига (*Simulated Annealing*, SA) представляет собой алгоритм решения задачи поиску глобального оптимума некоторой функции $F: \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}$ через упорядоченный стохастический поиск, базирующийся на моделировании физического процесса кристаллизации вещества из жидкого состояния в твердое.

ДОБАВИТЬ ВВЕДНИЯ

2.1.1. Алгоритм

Для описания метода рассмотрим задачу нахождения глобального минимума:

$$F(x) \rightarrow \min_{x \in \mathbb{X}}$$

где $x = (x_1, \dots, x_m)$ — вектор всех состояний, \mathbb{X} — множество всех состояний.

Положим, что $k = 0$ и изначально температура зафиксирована на определенном уровне $T(k) = \text{const.}$

1. Из множества всех состояний выберем случайный элемент $\hat{x}(k) \equiv x_i$,

$i \in (1, \dots, m)$.

2. Понизим температуру одним из следующих способов:

а) Больцмановский отжиг

$$T(k) = \frac{T(0)}{\ln(1 + k)}, \quad k > 0 \tag{2.1}$$

б) Отжиг Коши

$$T(k) = \frac{T(0)}{k} \tag{2.2}$$

в) Метод тушения

$$T(k + 1) = \alpha T(k), \quad \alpha \in (0, 1) \tag{2.3}$$

3. Пусть следующий элемент зависит от функции из семейства симметричных вероятностных распределений $G: \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{X}$, порождающей новое состояние:

$$\tilde{x}(k) \sim G(\hat{x}(k), T(k)).$$

a) Часто G выбирается из семейства нормальных распределений:

$$G(\tilde{x}; \hat{x}, T) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^D T}} \exp \left\{ \frac{-|\tilde{x} - \hat{x}|^2}{2T} \right\}, \quad (2.4)$$

где \hat{x} — математическое ожидание, T — дисперсия, D — размерность пространства всех состояний.

b) Также для $D = 1$ используется распределение Коши с плотностью:

$$G(\tilde{x}; \hat{x}, T) = \frac{1}{\pi} \frac{T}{|\tilde{x} - \hat{x}|^2 + T^2}, \quad (2.5)$$

где \hat{x} — параметр сдвига, T — параметр масштаба.

4. Рассчитываем разницу двух функций:

$$\Delta F = F(\tilde{x}(k)) - F(\hat{x}(k)).$$

5. Принимаем $\tilde{x}(k)$ за новый элемент, то есть $\hat{x}(k+1) \equiv \tilde{x}(k)$, с вероятностью

$$\mathbb{P}(\{\hat{x}(k+1) = \tilde{x}(k)\}) = \begin{cases} 1, & \Delta F < 0 \\ \exp \left\{ -\frac{\Delta F}{T(k)} \right\}, & \Delta F \geq 0 \end{cases} \quad (2.6)$$

и отвергаем его, то есть $\hat{x}(k+1) \equiv \hat{x}(k)$, с вероятностью

$$q = 1 - \mathbb{P}(\{\hat{x}(k+1) = \tilde{x}(k)\}).$$

Заметим, чем выше температура, тем больше вероятность принять состояние хуже текущего ($\Delta F \geq 0$).

6. Возвращаемся к пункту 2, пока не достигнем глобального минимума.

2.1.2. N ферзей

Рассмотрим задачу, в которой необходимо расставить N ферзей на шахматной доске размера $N \times N$ так, чтобы ни один из них не «бил» другого.

В таком случае, множество всех состояний \mathbb{X} будет содержать всевозможные расстановки ферзей на шахматной доске. Общее число возможных расположений n ферзей на $N \times N$ -клеточной доске равно:

$$\binom{N \times N}{n} = \frac{N \times N!}{n!(N \times N - n)!}$$

Тогда функция $F : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}$ будет выдавать количество атак ферзей, и решением данной задачи будет нахождение такого расположения x^* , что $F(x^*) \equiv 0$.

Зафиксируем изначальное расположение ферзей на шахматной доске. Очевидно, что несколько ферзей не могут находиться на одной вертикали или горизонтали, ибо тогда они будут находиться под ударом друг-друга. Следовательно, наша задача сужается к поиску расположения:

$$x^* = (q_1, \dots, q_n) = \{(1, h_1), \dots, (n, h_n)\}, h_1 \neq \dots \neq h_n, \quad (2.7)$$

где (i, h_i) — расположение ферзя q_i на i -ой вертикали по горизонтали h_i .

Отметим, что такая задача имеет $N!$ решений.

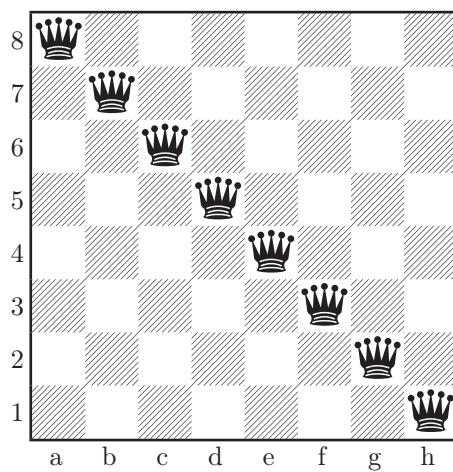


Рисунок 2.1 — Изначальное расположение.

Определим функцию, которая будет создавать изначальное неоптимальное расположение, в общем виде. Учтем, что несколько ферзей не могут находиться на одной вертикали или горизонтали.

```
In:   def queens(N):
        ver = np.arange(1, N + 1)
        hor = np.arange(1, N + 1)
        np.random.shuffle(hor)
        return np.column_stack((ver, hor)) # получаем массив
# размерности (N, 2), отображающий расположение ферзей
```

Выведем первоначальное расположение ферзей для стандартной доски 8×8 , где первый столбец массива — расположение по вертикали, второй столбец массива — расположение по горизонтали. Для наглядности — презентации оптимизационного процесса — выстроим изначальную расстановку на главной диагонали (рис. 2.1).

```
In:     matrix = queens(8)
        matrix
```

```
Out:    array([[1, 1],
             [2, 2],
             [3, 3],
             [4, 4],
             [5, 5],
             [6, 6],
             [7, 7],
             [8, 8]])
```

Функция F, которая выявляет количество атак ферзей, выглядит следующим образом:

```
In:     def F(Q, N):
        cnt = 0
        for i in range(N):
            for j in range(i + 1, N):
                if abs(Q[i, 0] - Q[j, 0]) == abs(Q[i, 1] - Q[j, 1]):
                    cnt += 1
        return cnt * 2 # учитываем взаимные атаки
```

Посмотрим, сколько у атак у исходной расстановки.

```
In:     F(matrix, 8)
```

```
Out:    56
```

В нашей задачи функция G будет случайной незначительной перестановкой номеров горизонтали в исходном наборе.

```
In:     def G(Q, N):
        pos = Q.copy()
        while True:
            i = np.random.randint(0, N - 1)
            j = np.random.randint(0, N - 1)
            if i != j:
                break
        pos[i, 1], pos[j, 1] = pos[j, 1], pos[i, 1]
        return pos # получаем новое расположение
```

Теперь выведем и сам метод имитации отжига.

```
In:     def SA(Q, T, schedule):
        N = np.shape(Q)[0]
        x_hat = Q.copy()
        while F(x_hat, N) != 0:
            x_tilda = G(x_hat, N)
            delta = F(x_tilda, N) - F(x_hat, N)
            prob = np.exp(-delta / T)
```

```

if (delta < 0) or (prob >= np.random.random()):
    x_hat = x_tilda
T *= schedule # используем метод тушения для понижения температуры
return x_hat

```

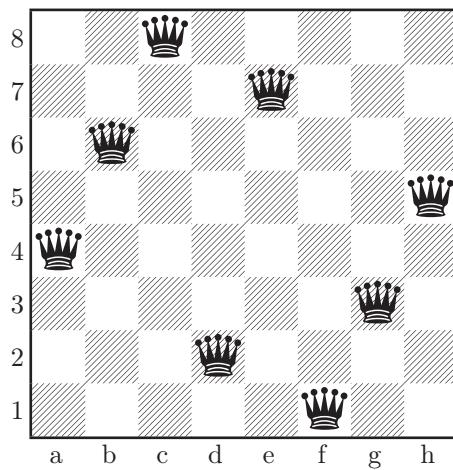


Рисунок 2.2 — Оптимальное расположение

Так для нашего примера с гиперпараметрами $T(0) = 100, \alpha = 0.9$ мы получаем следующее оптимальное решение (рис. 2.2):

In: SA(matrix, 100, 0.9)

Out:

```
array([[1, 4],
       [2, 6],
       [3, 8],
       [4, 2],
       [5, 7],
       [6, 1],
       [7, 3],
       [8, 5]])
```

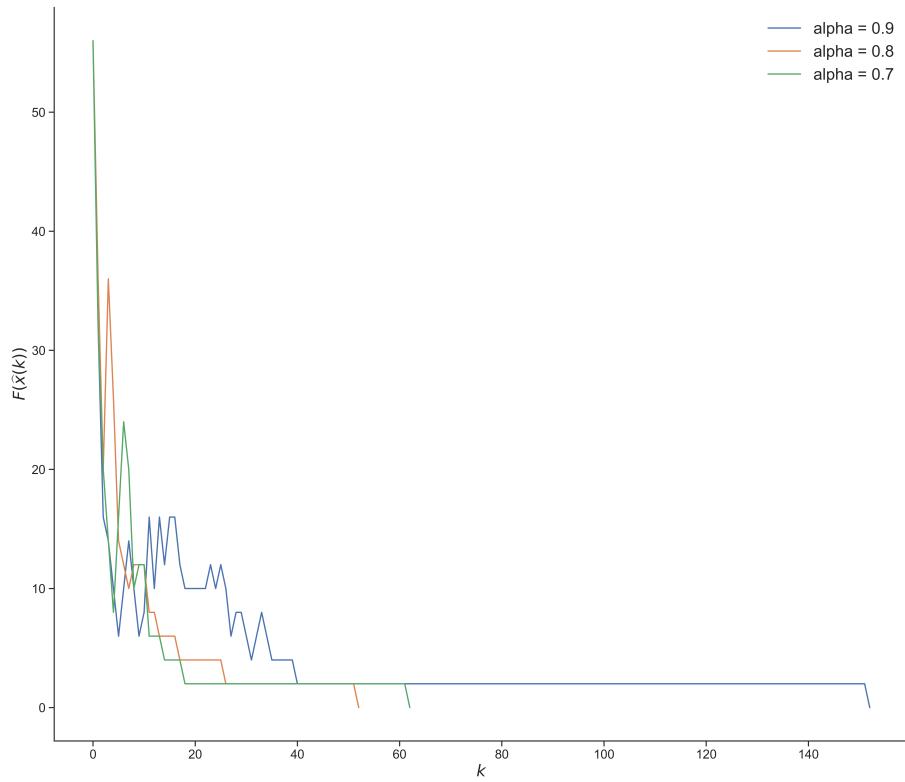


Рисунок 2.3 — Оптимизация расстановки 8 ферзей в зависимости от гиперпараметра α .

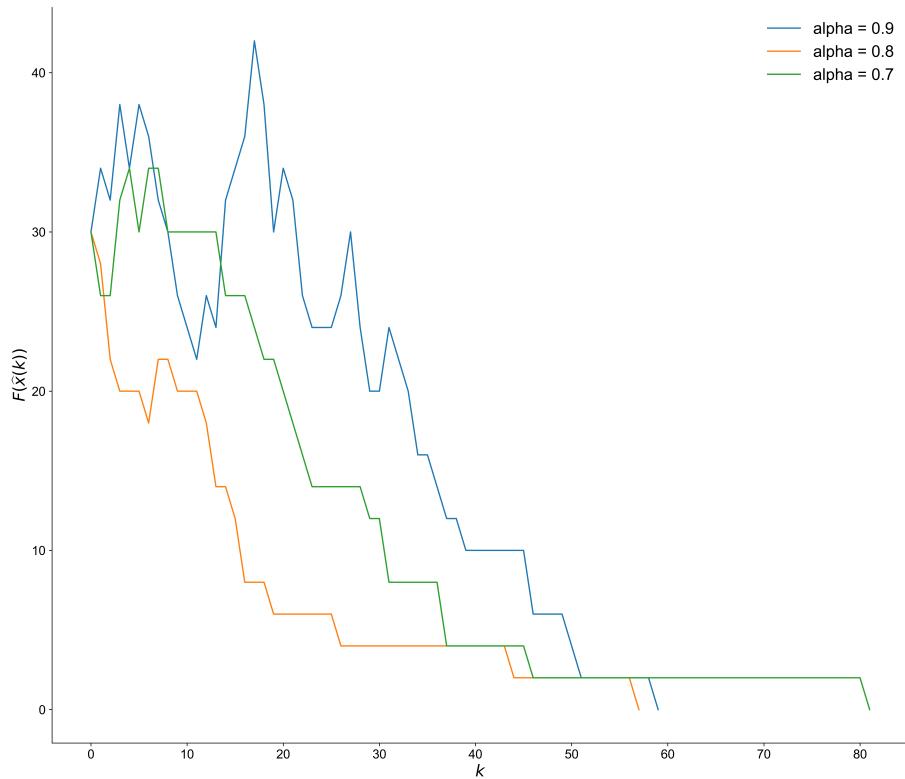


Рисунок 2.4 — Оптимизация расстановки 25 ферзей в зависимости от гиперпараметра α .

2.1.3. Минимизация негладкой функции

Воспользуемся алгоритмом имитации отжига для нахождения глобального минимума следующей функции:

$$f(x) = x^2(1 + |\sin 80x|).$$

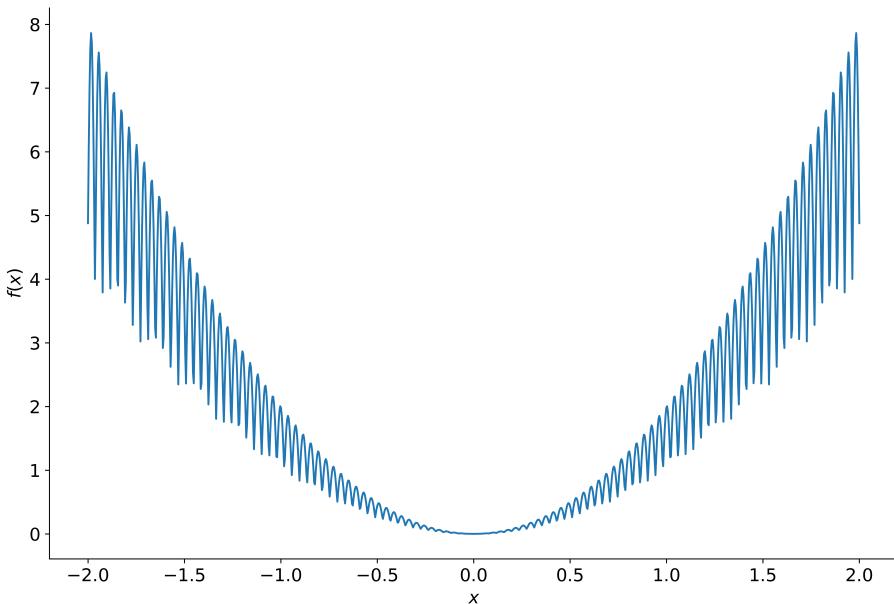


Рисунок 2.5

Стандартные методы оптимизации — к примеру, метод градиентного спуска — в данном случае не применимы. Вследствие наличия модуля эта функция не дифференцируема. Также она имеет очень большое количество локальных минимумов, что затрудняет, к примеру, мультистарт — запуск градиентного спуска из разных начальных направлений.

Применим наш алгоритм к данной задаче. Пусть $T(0) = 0.6$. Для понижения температуры будем использовать Больцмановский отжиг (2.1), а в качестве функции вероятностных распределений G — семейство нормальных распределений (2.4).

```
In: def SA(space, T, epsilon): # за space берется np.linspace(-2, 2, 1000)
    x_hat = np.random.choice(space)
    T_0 = T
    k = 1
    while True:
        x_tilda = np.random.normal(x_hat, T)
        delta = F(x_tilda) - F(x_hat)
        prob = np.exp(-delta / T)
        if (delta < 0) or (prob >= np.random.random()):
            x_hat = x_tilda
```

```

if (x_hat < epsilon) and (x_hat > 0):
    return x_hat
T = T_0 / np.log(1 + k)
k += 1

```

Остановка итерационного процесса и скорость метода зависят от того, насколько близко мы хотим приблизиться к глобальному минимуму. Так, при точности 10^{-1} , что довольно много, для 1000 повторений алгоритма метод отжига находит глобальный минимум в среднем за 1.97e-3 секунды со стандартным отклонением в 3.47e-5 секунды. Однако, увеличив точность до 10^{-6} , среднюю скорость занимает уже 1.27 секунды со стандартным отклонением в 2.1e-5 секунды. Это наглядно представлено на рисунке 2.6.

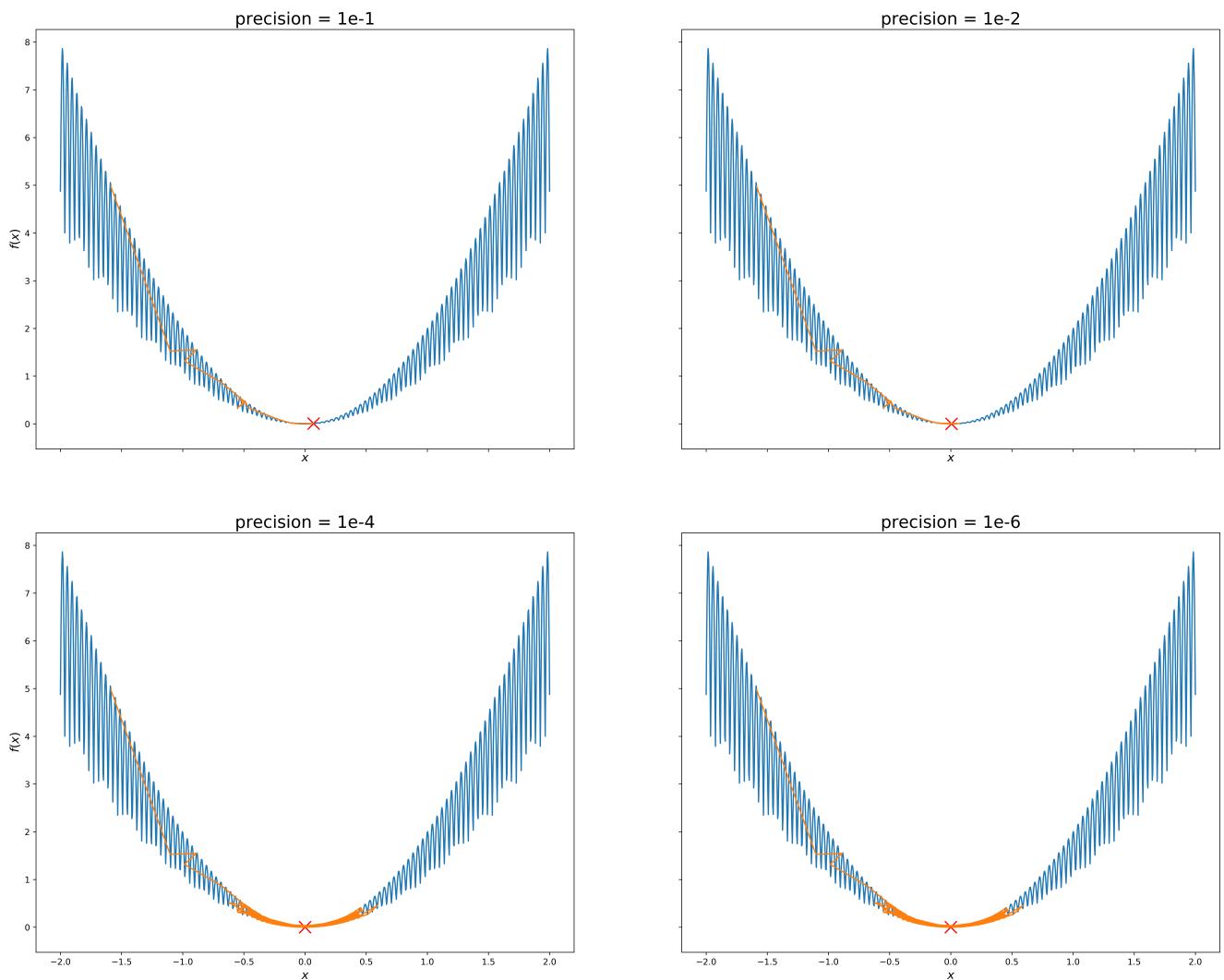


Рисунок 2.6 — Оптимизационный процесс в зависимости от точности.

2.1.4. Задача коммивояжера

Задача коммивояжера (*Traveling Salesman Problem*, TSP) является образцовым методом проверки многих оптимизационных алгоритмов и заключается в поиске кратчайшего маршрута между городами. Путь должен быть проложен так, чтобы маршрут единственно проходил через все города и его конечная точка совпадала с изначальной.

TSP имеет множество приложений в планировании и логистике, а также выступает в качестве подзадачи во многих других областях. В таком случае города могут представлять, к примеру, клиентов, а расстояние между городами — время или стоимость путешествия.

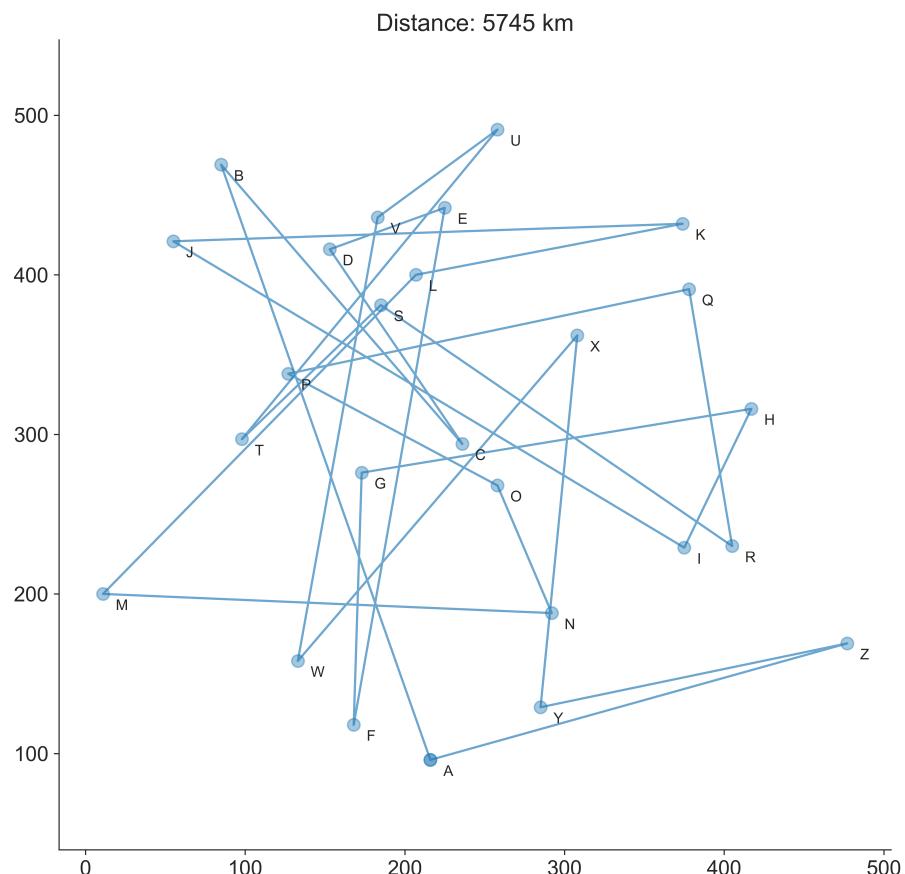


Рисунок 2.7 — Изначальный маршрут для 26-ти городов.

Для нашего примера создадим карту. Функция `map_city` будет принимать желаемое количество городов в качестве входных данных и выдавать два списка, из которых далее создается общий список кортежей. Первым элементом кортежа является наименование города, а вторым — его расположение в декартовой системе координат.

```
In: def map_city(cities_num):
    letters = [chr(i) for i in range(65, 65 + cities_num)]
    coord = np.random.randint(1, 500, size=(cities_num, 2))
    return letters, coord
```

Наш маршрут будет состоять из 26-ти городов.

```
In: names, cities = map_city(26)
store_val = list(zip(names, cities))
```

Определим расстояние от города i до всех остальных посредством функции `distance_dict`. Для измерения расстояния между городами будем использовать евклидову метрику. Напомним, что евклидово расстояние между точками $x = (x_1, \dots, x_d)$ и $u = (u_1, \dots, u_d)$ задается как:

$$d(x, u) = \sqrt{\sum_{i=1}^d (x_i - u_i)^2}$$

```
In: def distance_dict(cities, n):
    d = dict()
    for i in range(n):
        city = dict()
        for j in range(n):
            if i == j:
                continue
            c_a = cities[i][1]
            c_b = cities[j][1]
            dist = np.sqrt((c_a[0] - c_b[0]) ** 2 + (c_a[1] - c_b[1]) ** 2)
            city[cities[j][0]] = dist
        d[cities[i][0]] = city
    return d
```

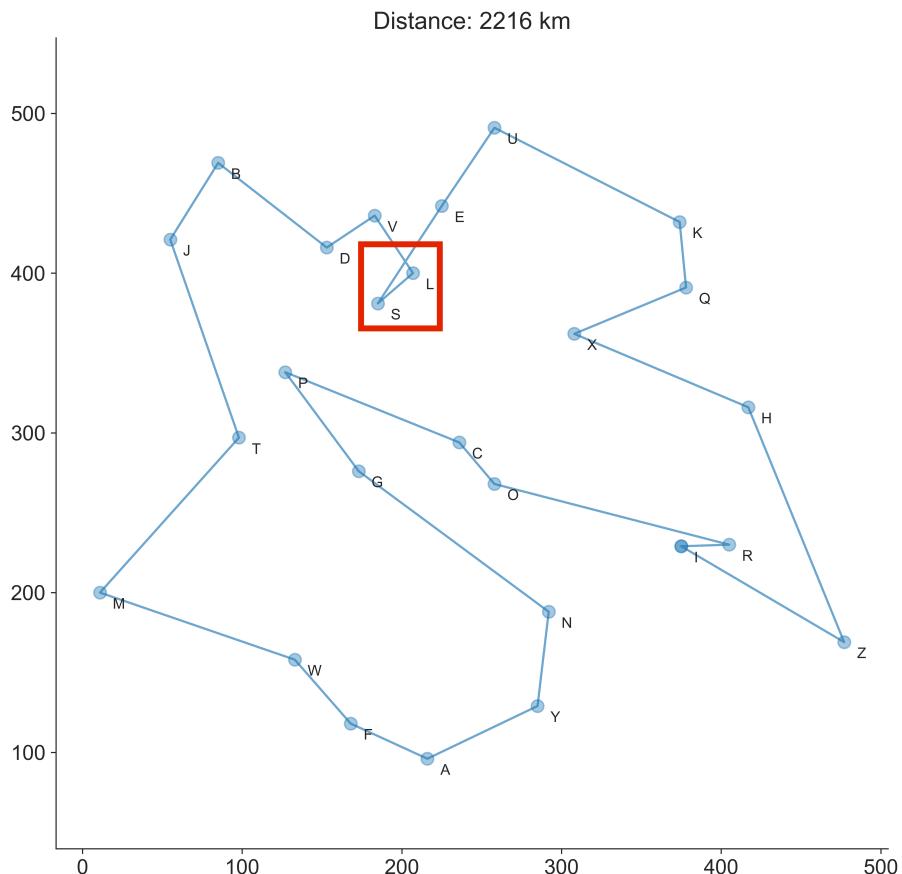
```
In: cities_d = distance_dict(store_val, len(store_val))
```

Функция `F` для подсчета общего расстояния путешествия:

```
In: def F(path, cities):
    dist = 0
    for i in range(len(path) - 1):
        dist += cities[path[i]][path[i + 1]]
    dist += cities[path[-1]][path[0]]
    return dist
```

За функцию `G` будет выступать простая перестановка как и в задаче о N ферзях.

```
In: def G(path, n):
    pos = path.copy()
    while True:
        i = np.random.randint(0, n - 1)
        j = np.random.randint(0, n - 1)
        if i != j:
            break
    pos[i], pos[j] = pos[j], pos[i]
return pos
```



Для понижения температуры используем Больцмановский отжиг (2.1).

```
In: def SA(path, T):
    path_hat = path
    n = len(path_hat)
    np.random.shuffle(path_hat)
    T_0 = T
    k = 1
    for i in range(100000):
        path_tilda = G(path_hat, n)
        delta = F(path_tilda, cities_d) - F(path_hat, cities_d)
        prob = np.exp(- delta / T)
```

Теперь построим оптимальный маршрут (рис. 2.8).

```
In: path_opt = SA(names, 100)
```

Несмотря на то, что метод отжига сократил преодолеваемую дистанцию, TSP была решена неидеально. К примеру, можно выделить соединение вершин E-S-L-V: очевидно, оно не оптимально, поскольку путь E-L-S-V имеет меньшее расстояние. Тем не менее, само расположение городов весьма удовлетворительно.

2.1.5. Вывод

Рассмотрев метод отжига, выявим его плюсы и минусы.

Преимущества

1. Оптимизационный процесс поставленной задачи не застревает в локальных минимумах.
2. Имитация отжига имеет достаточно простую реализацию.
3. Даже для сложных задач наподобие TSP алгоритм, как правило, дает вполне приемлемое решение.

Недостатки

1. Алгоритм достаточно трудоемок.
2. Не подходит для задач с небольшим количеством локальных минимумов. В таком случае градиентный спуск с мультистартом будет работать намного лучше.
3. Метод отжига не всегда сходится к решению.

2.2. Метод роя частиц

Метод роя частиц (*Particle Swarm Optimization*, PSO) является одним из алгоритмов коллективной оптимизации и основывается на имитации социального поведения в колонии живых организмов — к примеру, стаи птиц или колонии муравьев, — выполняющих коллективный поиск места с наилучшими условиями для существования. При поиске пищи каждая особь колонии передвигается по окружающей среде независимо от остальных организмов с некой долей случайности в своих движениях. Рано или поздно одна из особей находит пропитание

и, будучи социальным организмом, сообщает об этом остальным, что стягивает ее соседей к данной пище.

2.2.1. Алгоритм

Найдем глобальный экстремум функции $F: \mathbb{R}^{\ell \times n} \rightarrow \mathbb{R}$. Для определенности будем искать глобальный минимум:

$$F(x) \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^{\ell \times n}}$$

Пусть в нашем рое существует ℓ частиц $x = \{x_i\}_{i=1}^\ell$, $x_i \in U \subseteq \mathbb{R}^n$ и определен вектор скорости $v = \{v_i\}_{i=1}^\ell$, i -я компонента которого является скоростью i -й частицы, $v_i \in U \subseteq \mathbb{R}^n$.

1. Изначально случайным образом выбираем расположение роя $x(0)$ и скорость движения каждой частицы $v(0)$.
2. Определяем новое расположение роя:

$$x(t+1) \equiv x(t) + v(t)$$

3. Выбираем наилучшую точку для i -й частицы:

$$p_i(t) \equiv \begin{cases} x_i(t), & F(x_i(t+1)) \geq F(x_i(t)) \\ x_i(t+1), & F(x_i(t+1)) < F(x_i(t)) \end{cases}, \quad 1, \dots, \ell$$

Тогда вектор наилучших позиций для каждой частицы имеет вид:

$$p(t) = \{p_i(t)\}_{i=1}^\ell$$

4. Выбираем наилучшую точку для всего сообщества:

$$g(t) \equiv \underset{i \in (1, \dots, \ell)}{\operatorname{argmin}} F(p_i(t))$$

5. Обновляем скорость для i -й частицы посредством следующей формулы:

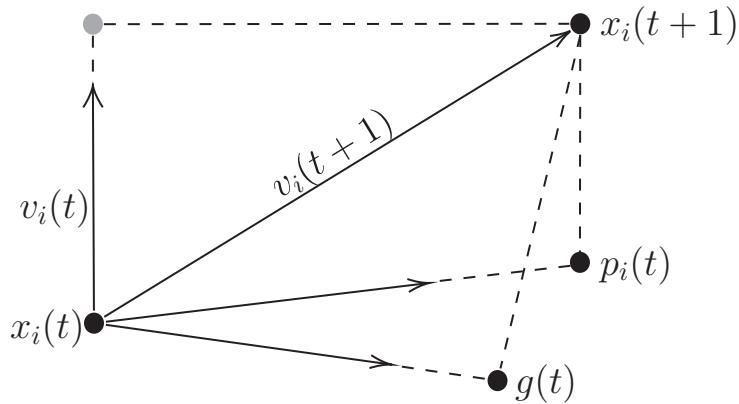
$$v_i(t+1) \equiv w v_i(t) + \gamma_p \xi_p(t)(p_i(t) - x_i(t)) + \gamma_g \xi_g(t)(g(t) - x_i(t)), \quad i = 1, \dots, \ell$$

где $w \in \mathbb{R}$ — инерционный вес, $\gamma_p, \gamma_g \in \mathbb{R}$ — коэффициенты ускорения, $\xi_p, \xi_g \sim U(0, 1)$.

Тогда вектор скорости имеет вид:

$$v(t+1) = \{v_i(t+1)\}_{i=1}^\ell$$

Три вектора влияют на частицу в положении $x_i(t)$. С одной стороны, когнитивное воздействие побуждает частицу двигаться к ее лучшей позиции $p_i(t)$, с другой стороны — социальное воздействие побуждает частицу продвигаться в сторону лучшей позиции роя $g(t)$. Кроме того, собственная скорость $v_i(t)$ обеспечивает движение по инерции, что позволяет частице преодолевать локальные минимумы и исследовать неизвестные области заданного пространства. Таким образом, происходит переход от точки $x_i(t)$ в точку $x_i(t+1)$, что представлено на следующем графике:



Алгоритм использует две последовательности равномерно распределенных случайных величин $\xi_p(0), \dots, \xi_p(t)$ и $\xi_g(0), \dots, \xi_g(t)$, которые масштабируются по константам γ_p, γ_g . Данные константы влияют на максимальный размер шага, который частица может сделать за одну итерацию. При $\gamma_p = 0$ метод роя частиц будет опираться только на наилучшую позицию сообщества — в таком случае алгоритм будет быстро сходиться, однако маловероятен факт нахождения глобального оптимума. При $\gamma_p > 0$ метод использует связь всего сообщества — скорость конвергенции падает, но глобальный оптимум оказывается более вероятным.

6. Возвращаемся к 2 шагу, пока не достигнем оптимума.

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. На основе анализа ...
2. Численные исследования показали, что ...
3. Математическое моделирование показало ...
4. Для выполнения поставленных задач был создан ...

И какая-нибудь заключающая фраза.

Последний параграф может включать благодарности. В заключение автор выражает благодарность и большую признательность научному руководителю Иванову И. И. за поддержку, помошь, обсуждение результатов и научное руководство. Также автор благодарит Сидорова А. А. и Петрова Б. Б. за помошь в работе с образцами, Рабиновича В. В. за предоставленные образцы и обсуждение результатов, Занудягину Г. Г. и авторов шаблона *Russian-Phd-LaTeX-Dissertation-Template* за помошь в оформлении диссертации. Автор также благодарит много разных людей и всех, кто сделал настоящую работу автора возможной.

Список литературы

- [1] *Лопатин А. С.* (2005) Стохастическая оптимизация в информатике. Метод отжига. // Сайт Math.spbu.ru. URL: <https://www.math.spbu.ru/user/gran/optstoch.htm> (дата обращения: 20.01.2020)
- [2] *Шамин Р. В.* (2019) Практическое руководство по машинному обучению. // Москва: Научный канал.
- [3] *Weise T.* (2009), Global Optimization Algorithms — Theory and Application. // Self-Published.
- [4] *Pedersen M. E. H.* (2010) Tuning and Simplifying Heuristical Optimization. Thesis for the degree of Doctor of Philosophy. // University of Southampton.
- [5] *Nedjah N. and Mourelle L.* (2006). Swarm Intelligent Systems. // Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.