МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н. Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра теории функций и стохастического анализа

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О КОНТАКТНОМ ЧИСЛЕ ШАРОВ С ПОМОЩЬЮ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 4 курса 412 группы
направления 01.03.02 — Прикладная математика и информатика

механико-математического факультета
Емельянова Тимофея Дмитриевича

Научный руководитель
доцент, к. ф.-м. н. ______________ М. Г. Плешаков

Заведующий кафедрой
д. ф.-м. н., доцент ______________ С. П. Сидоров

Саратов 2020

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа посвящена решению задачи оптимизации. Как известно, оптимизационные задачи заключаются в нахождении минимума или максимума заданной функции. Такую функцию называют целевой. Как правило, эта функция зависит от некоторых входных параметров. В оптимизационных задачах требуется найти значения входных параметров, при которых целевая функция достигает минимального (максимального) значения. В случае если функции имеет несколько экстремумов, то нахождение локального экстремума вместо глобального называется преждевременной сходимостью. Помимо проблемы преждевременной сходимости существует и другая проблема — время процесса вычислений. Зачастую более точные оптимизационные методы работают очень долго.

Задача оптимизации, с которой мы столкнёмся в работе, имеет более, чем трехсотлетнюю историю, но при этом первые результаты в её решении стали появляться относительно недавно. Данная задача носит название «задача о контактном числе шаров».

Формулируется задача следующим образом: какое максимальное число шаров одинакового радиуса с непересекающимися внутренностями можно расположить в пространстве размерности n так, чтобы все они касались одного центрального шара такого же радиуса?

Для пространства размерности $n = 2$ задача тривиальна, поскольку легко проверяется тот факт, что всего лишь 6 окружностей можно расположить вокруг одной такой же, причём это расположение возможно лишь тогда, когда каждая окружность касается двух других. Но уже для пространства размерности $n = 3$ задача оказалась намного сложнее. Двенадцать шаров могут располагаться в вершинах икосаэдра, причём в таком случае шары даже не касаются друг друга. Но возможно ли найти расположение тринадцати шаров или даже больше? Этот вопрос стал предметом одного знаменитого спора, который произошёл в 1694 году между шотландским ученым Дэвидом Грегори и Исааком Ньютоном. Именно Исаак Ньютон первый показал, как можно расположить 12 шаров в трёхмерном пространстве, он также утверждал, что больше шаров расположить нельзя, а Грегори возражал тем, что возможно расположение и тринадцати шаров. Дэвид Грегори произвёл вычисления и обобщил оценку сверху на количество шаров, посчитав площадь сферической шапочки, которую занимает один шар, а затем поделил площадь одного центрального шара на это значение. Ответ был почти 15, поэтому это дало верхнюю оценку в 14 шаров. Окончательно их спор разрешился лишь спустя 200 лет в 1953 году. И Ньютон оказался прав.

Решать данную задачу мы будем с помощью генетических алгоритмов, которые часто применяют для решения задач оптимизации, особенно в тех случаях, когда для задачи не существует алгоритмов поиска решений, либо же эти алгоритмы не являются эффективными.

Актуальность работы в первую очередь обеспечивается тем, что задача о контактном числе широко применяется в технике при передаче информации на расстояния. Даже сейчас, если вы читаете эту работу в электронном варианте, то, вероятнее всего, вы используете решение задачи в восьмимерном пространстве. Помимо этого, актуальность обеспечивается ещё и тем, что задача о контактном числе шаров плохо изучена. Как говорилось ранее, первые результаты в решении задачи начали появляться относительно недавно. Также, для решения задачи, мы будем использовать генетические алгоритмы, которые, на наш взгляд, являются очень мощным, но пока ещё недостаточно-изученным инструментом в решении задач оптимизации. Однако уже сейчас генетический алгоритм широко используется в оптимизации запросов баз данных, настройке и обучении искусственных нейронных сетей, биоинформатике и т.д.

Целью работы является решение задачи о контактном числе шаров в пространствах различных размерностей. А в качестве средства мы будем использовать генетический алгоритм, как эффективный метод.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

— изучить основные определения, применяемые в генетических алгоритмах;
— рассмотреть различные подходы в реализации алгоритма;
— исследовать задачу о контактном числе шаров;
— изучить последние методики оценивания количества шаров для различных пространств;

— научиться применять генетические алгоритмы для решения задачи о контактном числе шаров в пространствах различных размерностей.

Работа состоит из введения, трёх разделов, заключения и списка использованных источников.

Основное содержание работы

Во введении обосновывается актуальность темы работы, формулируется цель работы и методы достижения цели.

В первом разделе рассматриваются основные определения и обозначения, применяемые в генетических алгоритмах, а также изучаются разновидности операторов и их влияние на результат работы алгоритма.

Генетические алгоритмы — это методы поиска, которые применяют для решения задач оптимизации. Данные алгоритмы основаны на принципах естественного отбора Чарлза Дарвина. В них используются аналог механизма генетического наследования и аналог естественного отбора, а также сохраняется биологическая терминология в упрощенном виде и основные понятия линейной алгебры.

Пусть задача оптимизации имеет общий вид

$$\max\{f(x) : x \in X\},$$

где множество X — пространство решений.

Хромосома — вектор из каких-либо чисел. Каждый элемент хромосомы называется *геном*.

Особь (индивидуум, генетический код) — набор хромосом, который мы будем обозначать символом ξ. В задачах, где все особи состоят лишь из одной хромосомы, понятия особь и хромосома считают идентичными понятиями. Каждой особи сопоставляется элемент пространства X.

Популяция — конечное множество особей. Популяцию поколения $t \geq 0$, которая содержит N особей, будем обозначать $\Pi^t = (\xi^{1,t}, \xi^{2,t}, \ldots, \xi^{N,t})$.

Скрещивание (кроссовер) — операция, при которой две особи обмениваются частями своих хромосом.

Мутация — случайное изменение какого-то количества генов в хромосоме особи. К примеру из особи 100101 может получиться 100100 путём мутации последнего гена.

Селекция (отбор) — оператор выбора особей, которые будут участвовать в создании потомков для следующей популяции, то есть для очередного поколения.

Целевая функция (фитнесс-функция) — функция, экстремум которой следует найти в целях решения некоторой оптимизационной задачи. У такой функции могут быть как локальные, так и глобальные экстремумы.

Функция приспособленности — функция, которая используется в генетических алгоритмах вместо целевой функции f. Функция приспособленности определяется, как $\Phi(\xi) = \phi(f(x(\xi)))$, где x — функция, которая сопоставляет каждой особи элемент пространства X, ϕ — некоторая монотонно возрастающая функция, которая выбирается на основе специфики каждой конкретной задачи оптимизации. В качестве функции приспособленности может быть выбрана и целевая функция $f(x(\xi))$, если она неотрицательна.

Это основные понятия, с которыми мы столкнёмся в рамках построения генетического алгоритма.

Теперь рассмотрим классическую схему работы генетического алгоритма:

— 1. Генерируем начальную популяцию из N особей.
— 2. Вычисляем для каждой особи значение функции приспособленности.
— 3. Выбираем пару особей-родителей с помощью одного из методов отбора.
— 4. Выполняем скрещивание двух родителей с некоторой вероятностью p_c, вследствие чего получаем двух потомков.
— 5. Проводим мутацию особей с вероятностью p_m.
— 6. Повторяем шаги 3–5, пока не будет сгенерировано новое поколение популяции, содержащее нужное нам количество особей.
— 7. Повторяем шаги 2–6, пока не будет достигнут установленный критерий окончания процесса.

Существуют различные критерии окончания процесса. Таким критерием может являться достаточная точность для значения целевой функции, заданное количество поколений, либо *схождение* популяции. Под схождением обычно понимают состояние популяции, при котором все особи имеют почти одинаковые хромосомы и находятся в области экстремума целевой функции. В таком случае особь, полученная с помощью мутации, вероятнее всего не попадет в следующую популяцию, поскольку будет иметь значение функции приспособленности хуже, чем все остальные особи. Скрещивание особей в таком случае почти никак не изменит популяцию, поскольку потомки практически не будут отличаться от своих родителей. Таким образом, схождение обычно значит, что найденное решение является либо локальным, либо глобальным экстремумом.

Во втором разделе рассматривается задача о контактном числе и методы оценивания сверху для количества шаров.

Формулируется задача о контактном числе следующим образом: какое максимальное число шаров одинакового радиуса с непересекающимися внутренностями можно расположить в пространстве размерности n так, чтобы все они касались одного центрального шара такого же радиуса?

Для дальнейших вычислений удобно положить радиус шаров равным единице, что, очевидно, никак не повлияет на максимальное число шаров, поскольку отношение радиуса центрального шара к радиусу любого из касающихся его шаров остаётся одинаковым. Также, не нарушая условий задачи, будем считать, что наш центральный шар имеет центр в начале системы координат.

Рассмотрим задачу о контактном числе шаров для пространства R^n и единичной сферы $S = S^{n-1} \subset R^n$. В пространстве R^n рассмотрим множество шаров единичного радиуса с непересекающимися внутренностями и касающихся нашего центрального шара S, обозначим это пространство B. Пусть $P = P(B)$ есть множество точек (единичных векторов) S, которые являются проекциями на S центров шаров из B. Из того, что внутренности шаров не пересекаются, следует следующее свойство для векторов из P: угол между двумя любыми векторами $\vec{x}, \vec{y} \in P$ $(\vec{x} \neq \vec{y})$ не меньше 60° или $\dfrac{\pi}{3}$. Значит, что для скалярного произведения верно $\vec{x}\vec{y} \leq \dfrac{1}{2}$. Тогда контактное число шаров τ равно наибольшему значению мощности множества P при условии, что

$$-1 \leq \vec{x}\vec{y} \leq \frac{1}{2}, \quad \vec{x}, \vec{y} \in P, \vec{x} \neq \vec{y}.$$

Это основная часть, которая необходима для общего понимания того, исходя из чего мы будем строить функцию приспособленности для генетического алгоритма. Но также стоит отметить тот факт, что для задачи о контактном числе существует способ оценивания максимального количества шаров сверху — метод Дельсарта. Подробнее о нем мы расскажем уже в самой работе.

Третий раздел посвящён решению задачи о контактном числе шаров в пространствах различных размерностей с помощью генетических алгоритмов.

Поскольку задача о контактном числе уже решена в некоторых пространствах, то мы попытаемся также решить эту задачу в данных пространствах. И в случае успеха, мы применим наш алгоритм и в пространствах, где задача пока не имеет точного решения. Под точным решением тут понимается одинаковые верхняя и нижняя оценки для количества шаров.

Для решения задачи была написана программа на языке программирования *python*.

На вход программе подается размерность пространства: m.

Выходными данными программы являются: количество шаров, которое удалось расположить в пространстве заданной размерности; набор векторов, представляющий полученное решение.

Организовывать процесс построения модели можно различными способами, и в ходе решения задачи были построены как классические генетические алгоритмы, так и их модификации. В полной работе будут показаны различные подходы, но здесь же мы ограничимся описанием лишь того алгоритма, с помощью которого и были получены основные решения.

Организовывать процесс вычисления мы будем следующим образом:

— 1. Заполняем наш финальный массив первым вектором, который генерируется случайный образом либо задаётся пользователем вручную.

— 2. Используем генетический алгоритм для выбора лучшего решения относительно уже существующего финального массива. Полученное решение добавляем к нашему финальному массиву.

— 3. Повторяем шаг 2 до тех пор, пока наш финальный массив не будет содержать установленное количество шаров либо не будет достигнут критерий остановки.

— 4. Выводим полученное решение.

Хотелось бы остановиться более подробно на том, как определить целевую функцию f и функцию приспособленности Ф. Целевая функция f определяется исходя из задачи: это количество непересекающихся шаров для некоторого решения X (финального массива, если говорить в терминах нашего алгоритма). Важно отметить, что X, вообще говоря, может содержать и такие векторы, угол между которыми меньше 60°.

Функцию приспособленности мы определим следующим образом: для решения X она вернет нам пару элементов, где на первом месте будет идти значение целевой функции $f(X)$, а на втором — сумма углов между каждым вектором из X и его «ближайшим соседом» также из X, если только этот угол не меньше 60°. Под «ближайшим соседом» для $\vec{x} \in X$ будем понимать такой вектор $\vec{y} \in X (\vec{x} \neq \vec{y})$, с которым $\vec{x}$ образует наименьший угол среди всех других векторов из X. В основной работе мы чаще будем использовать некоторое количество таких «ближайших соседей», но принцип работы останется таким же.

Например, для пространства размерности $m = 2$ и массива $X = [[-1, 0], [0, 1], [1, 0]]$ значение функции приспособленности будет выглядеть так: $(3, 270)$. Первый элемент — 3. Значит, наше решение содержит 3 шара, которые не пересекаются внутренностями между собой. Второй элемент — 270. Значит, сумма углов между каждым вектором в X и его «ближайшим соседом» равен 270°. Для векторов $[-1, 0]$ и $[1, 0]$ «ближайшим соседом» является вектор $[0, 1]$, а для $[0, 1]$ «ближайшим соседом» может быть любой из двух других векторов, поскольку угол между ним и любым из них 90°.

Теперь необходимо установить правило, по которому будет происходить сравнение значений функции приспособленности для каждой особи, чтобы иметь возможность определять численно, насколько та или иная особь подходит к нашему уже имеющемуся массиву.

Мы установили следующее правило: сначала сравниваем первый элемент значения функции приспособленности для двух особей: лучшей считаем ту, у которой это значение больше (т.е. выбирается решение, в котором число шаров, которые имеют непересекающиеся внутренности, больше). В случае, если первое число одинаково у двух особей, то идёт сравнение по второму элементу значения функции приспособленности: лучшей является та особь, у которой это значение меньше (т.е. выбирается решение, в котором суммарное расстояние между ближайшими соседями меньше). Таким образом, алгоритм начинает искать решения, которые бы давали максимальное значение для целевой функции f, но при этом искали бы наиболее компактные расположения шаров.

В ходе написания работы, были реализованы генетические алгоритмы, которые решают задачу о контактном числе шаров в пространствах, где решения уже известны, а именно в пространствах размерности 3, 4. Полученные решения совпадают с уже известными верхнии границами. Также алгоритм был использован и для нахождения оценок снизу в пространствах, где точные решения ещё неизвестны.

В пространстве размерности **4** было найдено два решения:

1. Всевозможные перестановки $(\pm\frac{\sqrt{2}}{2}, \pm\frac{\sqrt{2}}{2}, 0, 0)$;
2. Всевозможные перестановки $(\pm 1, 0, 0, 0)$ и $(\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2})$.

В пространстве размерности **5**: всевозможные перестановки

$$(\pm\frac{\sqrt{2}}{2}, \pm\frac{\sqrt{2}}{2}, 0, 0, 0).$$

В пространстве размерности **6**: всевозможные перестановки с сохранением 0 в последней координате

$$(\pm\frac{\sqrt{2}}{2}, \pm\frac{\sqrt{2}}{2}, 0, 0, 0, 0)$$

и всевозможные перестановки с нечётным количеством знаков «плюс»

$$(\pm\frac{\sqrt{2}}{4}, \pm\frac{\sqrt{2}}{4}, \pm\frac{\sqrt{2}}{4}, \pm\frac{\sqrt{2}}{4}, \pm\frac{\sqrt{2}}{4}, \pm\frac{\sqrt{6}}{4}).$$

Решений в пространстве размерности **3** бесконечно много, причём углы между шарами могут быть больше 60°, что сильно упрощает процесс вычислений. В приложении вы сможете найти программу, с помощью которой можно довольно быстро получать различные решения в пространстве размерности 3.

Основные результаты

— определены основные понятия и обозначения, применяемые в генетических алгоритмах, а также изучены разновидности операторов и их влияние на результат работы алгоритма;
— изучены различные подходы в реализции генетического алгоритма;
— исследована задача о контактном числе шаров;
— изучены последние методики оценивания количества шаров для различных пространств;
— реализованы генетические алгоритмы, которые верно решают задачу о контактном числе в пространствах, где точные решения уже получены. Также, построенные модели можно использовать и для получения нижних оценок в пространствах таких размерностей, где точные решения ещё неизвестны.