ПРО ДВІ ДОСЛІДНИЦЬКІ ЗАДАЧІ ДЛЯ ІДЕАТОНУ ВІД ІНСТИТУТУ КІБЕРНЕТИКИ

Корабльов М.М.[1] m.m.korablov@gmail.com, **Стецюк П.І.**[1,2]

[1]*Київський академічний університет* (https://kau.org.ua)

[2]*Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України*

XXI Міжнародна науково-практична конференція
«Математичне та програмне забезпечення інтелектуальних систем»
22-24 листопада 2023 року, м. Дніпро

- Все більшої популярності набувають командні змагання у форматі хакатону.
  - Організатори таких заходів пропонують учасникам спробувати свої сили в розв’язанні промислових задач;
  - Студенти мають змогу отримати досвід роботи над реальними завданнями.
- Подібна практика розвивається і в академічній спільноті та набула вигляду ідеатонів – конкурсів, що мають на меті дати можливість студентам попрацювати із творчими прикладними задачами аби спробувати себе в ролі дослідників.

Цього року з 21.11.2023 по 13.01.2024 Київський академічний університет та Noosphere Engineering School спільно проводять Ідеатон «TRUE наука: знайомство та практика досліджень», для якого Інститут кібернетики підготував декілька дослідницьких задач.

- **Перша задача** стосується класичних моделей регресії – важливого виду задач навчання з учителем, що мають багато прикладних застосувань.

  $\left\{\left(x_1^{(j)},\dots,x_d^{(j)},y^{(j)}\right): j=\overline{1,n}\right\};\ \hat{y}^{(j)}=f\left(x^{(j)}\right)=\sum_{k=1}^{r} w_k\psi_k\left(x_1^{(j)},\dots,x_d^{(j)}\right)+\varepsilon^{(j)};\ \ w=(w_1,\dots,w_r)^T-?$

- На даний момент вони є одними з найбільш обґрунтованих із статистичної точки зору [1] і робота над їх узагальненнями та покращенням точності отриманих розв'язків активно ведеться.

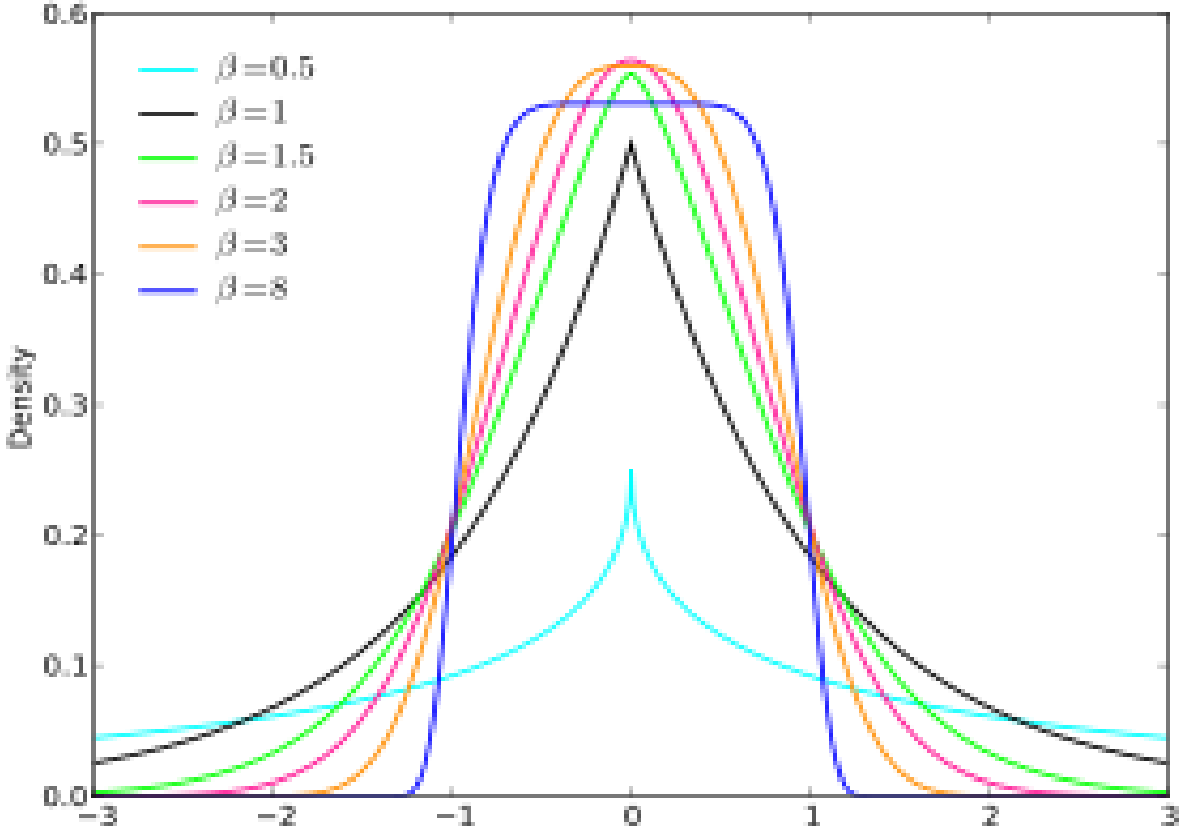
- Зокрема, одним з таких питань є дослідження сімейства методів тренування моделей регресії між методом найменших модулів (МНМ) та методом найменших квадратів (МНК).

- Як відомо МНМ дозволяє забезпечити робастність оцінки параметрів моделі, проте є складнішим у використанні, ніж МНК, через негладкість функції втрат.
- Ці методи виводяться з допомогою принципу правдоподібності з припущення про певний ймовірнісний розподіл похибок спостережень (Гауса – МНК, Лапласа - МНМ):
- $\vec{\varepsilon} = \left(\varepsilon^{(1)}, \dots, \varepsilon^{(n)}\right)^T \sim \mathcal{N}\left(\vec{0}, \sigma^2 \mathbb{I}_n\right);$
- $\max_{\vec{w}} \left(\mathcal{L}_{\vec{\eta}}\left(y^{(1)}, \dots, y^{(n)}, \vec{w}\right)\right) = \max_{\vec{w}} \left(\frac{1}{\left(\sqrt{2\pi}\sigma\right)^n} exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{j=1}^{n} \left(y^{(j)} - f\left(x^{(j)}\right)\right)^2\right\}\right)$
- $\min_{\vec{w}} \left(\sum_{j=1}^{n} \left(y^{(j)} - f\left(x^{(j)}\right)\right)^2\right) = \min_{\vec{w}} \left(\sum_{j=1}^{n} \left(\varepsilon^{(j)}\right)^2\right) = \min_{\vec{w}} \|\vec{\varepsilon}\|_2^2$

- Якщо припустити, що похибки вимірювань розподілені за узагальненим нормальним розподілом $Gen\mathcal{N}\left(\vec{0}, \alpha\mathbb{I}_n, \beta\right)$, то:
  - При $\beta = 2$ отримаємо $\mathcal{N}\left(\vec{0}, \frac{\alpha^2}{2}\mathbb{I}_n\right)$;
  - При $\beta = 1$ отримаємо $Lap\left(\vec{0}, \alpha\mathbb{I}_n\right)$;
- При $\beta \in (1; 2)$ отримаємо розподіли, що дозволяють статистично аргументувати використання функцій втрат вигляду $\sum_{j=1}^{n}\left|y^{(j)} - f\left(x^{(j)}\right)\right|^{\beta} = \sum_{j=1}^{n}\left|\varepsilon^{(j)}\right|^{\beta} = \|\vec{\varepsilon}\|_{\beta}^{\beta}$, що дає змогу гнучкіше підходити до навчання моделей регресії.

- Графік щільності узагальненого нормального розподілу $Gen\mathcal{N}(0,\alpha,\beta)$

$$f_{Gen\mathcal{N}(0,\alpha,\beta)}(x)=\frac{\beta}{2\alpha\Gamma\left(\frac{1}{\beta}\right)}exp\left\{-\left(\frac{|x|}{\alpha}\right)^{\beta}\right\}.$$



Джерело: en.wikipedia.org/wiki/Generalized_normal_distribution

- **Друга задача** стосується дослідження класичної задачі комівояжера (пошуку найкоротшого гамільтонового циклу в графі).
  - Класичною її постановкою вважається модель з обмеженнями С. Міллера, А. Таккера та Р. Земліна.
  - Менш відомим є формулювання на основі моделювання задачі про потік.
- Обидва підходи добре зарекомендували себе на практиці та при побудові узагальнених моделей пошуку найкоротших k-вершинних циклів та шляхів [2].

- Задача пошуку найкоротшого k-вершинного циклу є узагальненням задачі комівояжера.
- Нехай $D_{n,n}$ – повний граф, де n – кількість вершин, а $d_{ij} > 0$ – довжина дуги між вершинами i та j, де $i \neq j$. Зафіксуємо вершину s в графі, яка буде початковою.
- Цикл, який починається і закінчується в даній вершині та проходить через деякі k вершин рівно один раз будемо називати k-вершинним циклом у графі $D_{n,n}$.
- Позначення:
  - x_{ij} позначає наявність дуги, що з’єднує вершини i та j;
  - y_i позначає, чи цикл проходить через вершину i.

- Модель на основі обмежень Міллера, Таккера та Земліна:

$$d_k^* = \min_{x_{ij}, y_i} \left\{ \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1, j \neq i}^{n} d_{ij} \cdot x_{ij} \right\}$$

$$\sum_{j=1, j \neq s}^{n} x_{sj} = 1, \sum_{j=1, j \neq i}^{n} x_{ij} = y_i; i \in \{1, \dots, n\}, i \neq s$$

$$\sum_{j=1, j \neq s}^{n} x_{js} = 1, \sum_{j=1, j \neq i}^{n} x_{ji} = y_i; i \in \{1, \dots, n\}, i \neq s$$

$$\sum_{i=1, i \neq s}^{n} y_i = k$$

$$u_i - u_j + k x_{ij} \leq k - 1;\ i, j \in \{1, \dots, n\}, i \neq j, i \neq s, j \neq s$$

$$x_{ij} = 0 \vee 1;\ i, j \in \{1, \dots, n\}, i \neq j$$

$$y_i = 0 \vee 1;\ i \in \{1, \dots, n\}, i \neq s$$

$$u_i \in \{1, \dots, k\};\ i \in \{1, \dots, n\}, i \neq s$$

змінні u_i задають порядок відвідування вершин та забезпечують зв’язність циклу

- Модель на основі ідеї моделювання задачі про потік:

$$d_k^* = \min_{x_{ij}, y_i} \left\{ \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} d_{ij} \cdot x_{ij} \right\}$$

$$\sum_{j=1, j\neq s}^{n} x_{sj} = 1, \sum_{j=1, j\neq i}^{n} x_{ij} = y_i; i \in \{1, \dots, n\}, i \neq s$$

$$\sum_{j=1, j\neq s}^{n} x_{js} = 1, \sum_{j=1, j\neq i}^{n} x_{ji} = y_i; i \in \{1, \dots, n\}, i \neq s$$

$$\sum_{i=1, i\neq s}^{n} y_i = k$$

$$z_{ij} - kx_{ij} \leq 0;\ i, j \in \{1, \dots, n\}, i \neq j$$

$$\sum_{j=1, j\neq s}^{n} z_{sj} = k, \sum_{j=1, j\neq s}^{n} z_{js} = 0$$

$$\sum_{j=1, j\neq i}^{n} z_{ij} - \sum_{j=1, j\neq i}^{n} z_{ji} = -y_i;\ i \in \{1, \dots, n\}, i \neq s$$

$$x_{ij} = 0 \vee 1;\ i, j \in \{1, \dots, n\}, i \neq j$$

$$y_i = 0 \vee 1;\ i \in \{1, \dots, n\}, i \neq s$$

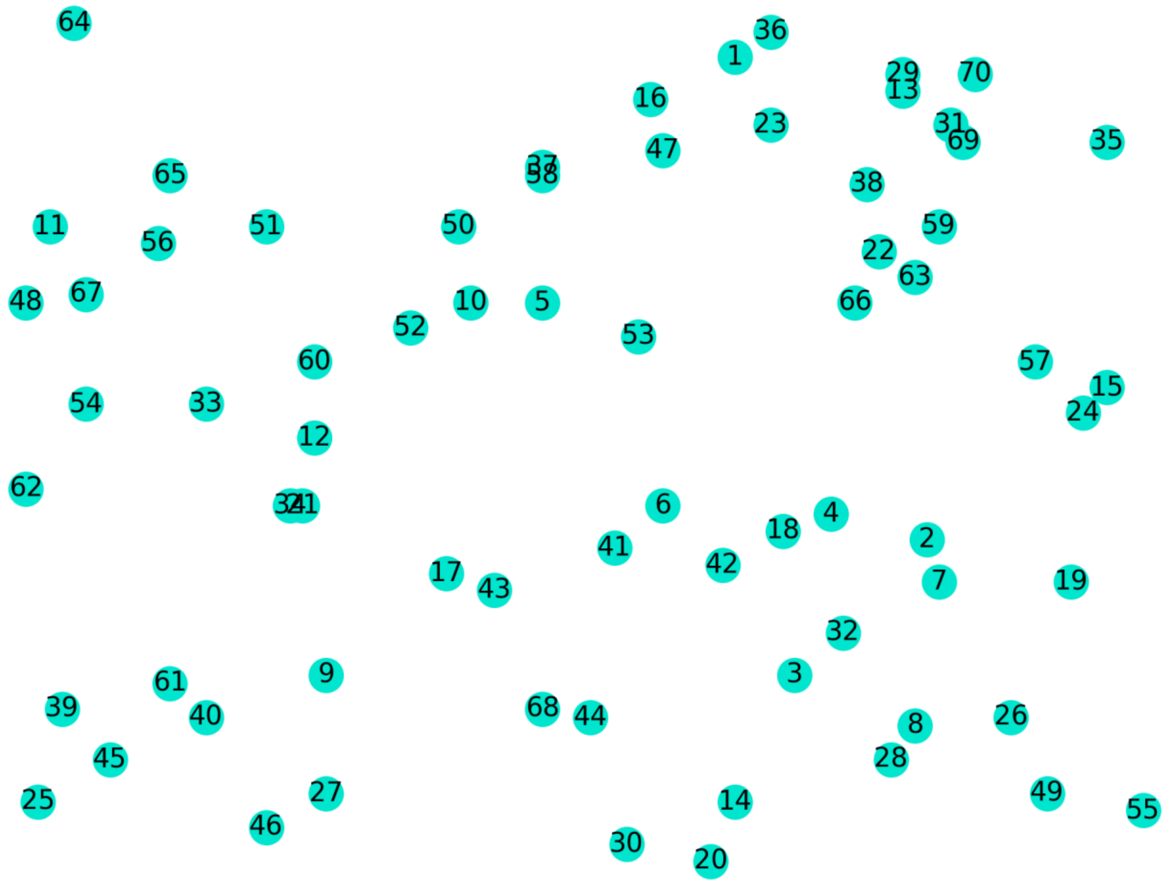
$$z_{ij} \geq 0;\ i, j \in \{1, \dots, n\}, i \neq j$$

змінні z_{ij} задають величину потоку певного продукту від вершини i до вершини j

- Дві наведені вище моделі можна об’єднати, використовуючи одразу обидва типи обмежень що забезпечують зв’язність циклу.
- Також можна використати додаткові обмеження, які дозволяють прискорити роботу методу гілок та меж, на основі якого працюють відомі солвери CPLEX та Gurobi:
  - Обмеження виду
    $$x_{ij} + x_{ji} \leq 1;\ i, j \in \{1, \dots, n\}, i \neq j$$
    задають, що по кожній дузі $i \to j$ потік можна пересилати тільки в одному напрямку;
  - Обмеження виду
    $$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1, j \neq i}^{n} x_{ij} \leq k + 1$$
    задають, що цикл має містити не більше $k + 1$ дуг.

Приклад пошуку k-вершинного циклу

- Граф st70.tsp з бібліотеки TSPLib (Travelling Salesman Problems, Heidelberg university)



- Будемо шукати 10-вершинний цикл найменшої довжини, що починається у вершині s=1.

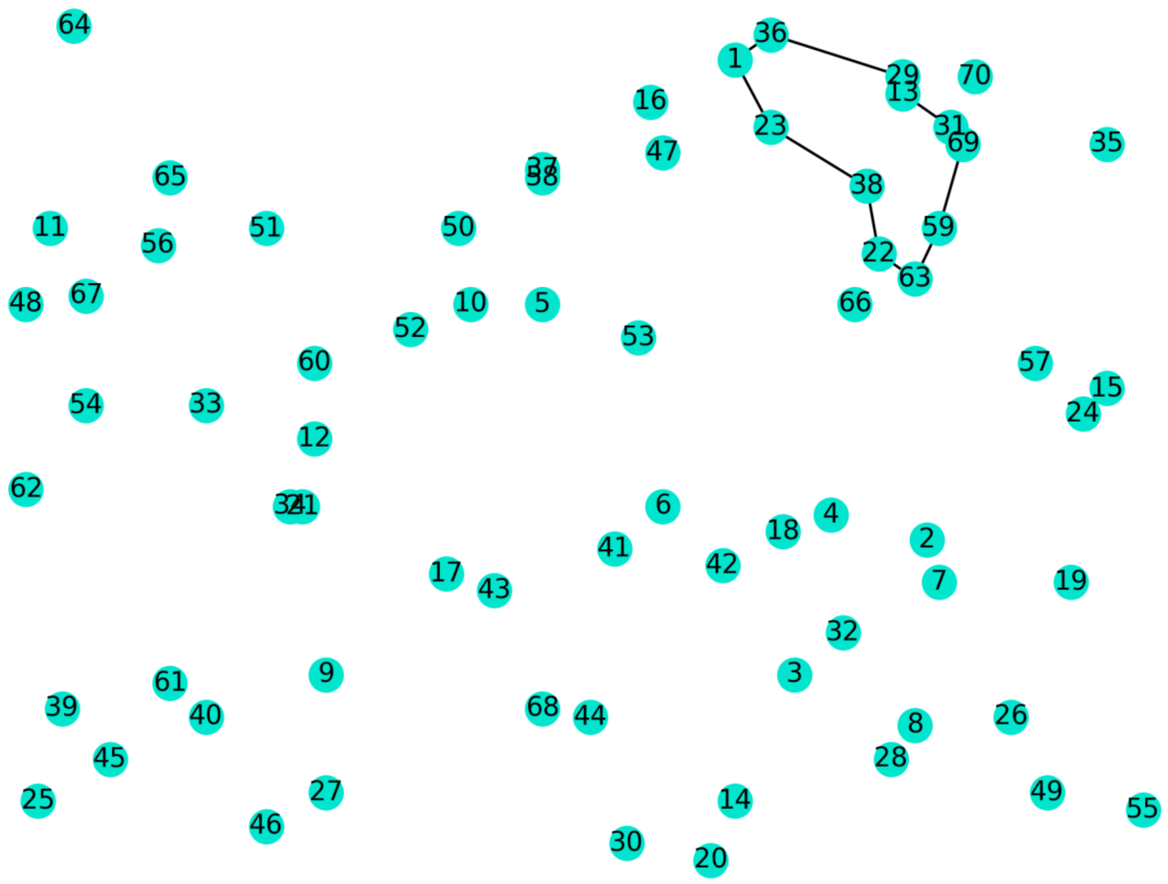
Моделі без додаткових обмежень			
	t1	t2	t3
k=10	4.94438	24.0154	2.7793
Моделі з додатковими обмеженнями виду 1			
	t1-1	t2-1	t3-1
k=10	**1.78687**	2.01321	2.35872
Моделі з додатковими обмеженнями виду 2			
	t1-2	t2-2	t3-2
k=10	2.25503	23.9256	2.83171
Моделі з додатковими обмеженнями виду 1 та виду 2			
	t1-12	t2-12	t3-12
k=10	1.83694	2.20104	2.42985

Табл. 1. Час пошуку розв'язку (в секундах) для різних моделей, солвер Gurobi

Моделі без додаткових обмежень			
	t1	t2	t3
k=10	8.79846	53.1317	5.17371
Моделі з додатковими обмеженнями виду 1			
	t1-1	t2-1	t3-1
k=10	3.63657	**1.98357**	4.42594
Моделі з додатковими обмеженнями виду 2			
	t1-2	t2-2	t3-2
k=10	5.38593	17.6048	4.47828
Моделі з додатковими обмеженнями виду 1 та виду 2			
	t1-12	t2-12	t3-12
k=10	3.47901	2.04511	4.30335

Табл. 2. Час пошуку розв'язку (в секундах) для різних моделей, солвер CPLEX

- Отриманий 10-вершинний цикл найменшої довжини, що починається у вершині s=1.



- Ще одним відомим узагальненням задачі комівояжера є задача m-комівояжерів, в якій дозволяється використовувати більше одного комівояжера.
- Кожен з них має слідувати власним маршрутом, що не перетинається з маршрутами інших, так, щоб кожна вершина графа була відвідана лише один раз лише одним з комівояжерів [3].
- Відома математична постановка даної задачі з обмеженнями виду Міллера, Таккера і Земліна. Математична модель на основі ідеї моделювання задачі про потік для задачі m-комівояжерів може виявитися кращою в сенсі швидкості розв’язання та гнучкості при застосуванні до розв’язання прикладних задач логістики.

- Список використаних джерел

1. Trevor Hastie, Robert Tibshirani, Jerome Friedman The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction (Springer Series in Statistics) : textbook. Springer, 2nd edition, 2016.– 767 p.
2. Стецюк П.І., Соломон Д.І., Григорак М.Ю. Задачі про найкоротші k-вершинні цикли та шляхи. Cybernetics and Computer Technologies. 2021. 3. С. 15–33. https://doi.org/10.34229/2707-451X.21.3.2
3. Біла Г.Д., Корчинський О.О., Стецюк П.І., Хом’як О.М., Шеховцов С.Б. Використання NEOS-сервера для розв’язання двох класів оптимізаційних задач. Cybernetics and Computer Technologies. 2022. 4. С. 56–81. https://doi.org/10.34229/2707-451X.22.4.5

ДЯКУЮ ЗА УВАГУ