Как видно из графиков, полученные в работе сплайн-функции с погрешностью менее 15% описывают поведение системы в области фазового перехода. Таким образом, использование сплайн-функций при проведении вычислительного эксперимента позволяет увеличить в 30–35 раз шаг изменения вероятности заполнения решетки при той же допустимой погрешности вычислений. Предложенный авторами подход дает возможность сократить объем вычислений более чем в 20 раз. Результаты двумерного моделирования могут быть использованы при исследовании процессов фазовых превращений в тонких пленках и жидких кристаллах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *StaufferD., Aharony A.* Introduction to Percolation Theory. — London: Taylor & Francis, 1992.
2. *Grimmet G.* Percolation. — Berlin: Springer-Verlag, 1999.
3. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978. – 508 с.
4. Самарский А.А. Введение в численные методы. – Изд. 3-е, стер. – СПб.: Лань, 2005. – 269 с.
5. Бахвалов Н. С. Численные методы. – Изд. 2-е. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. – 630 с.

SPLINE INTERPOLATION IN PERCOLATION MODELS

N.I. Limanova, doctor of technical sciences, associate professor,
professor of the chair «Applied Mathematics and Computer Science»
M.A. Trenina, senior lecturer of the chair «Applied Mathematics and Computer Science»
Togliatti State University, Togliatti, (Russia)

Keywords: mathematical modeling; numerical methods; spline interpolation; models of cell percolation.

Annotation: In the paper it is proposed to approximate by spline interpolation the dependences of the percolation probability from probability of filling the lattice for a variety of small finite systems. Obtained by the authors spline-functions with an error of less than 15% describe the behavior of the system in the area of phase transition. Using these functions allows you to increase the step changes in the probability of lattice filling in the process of computing experiment in the same margin of calculations error. The proposed approach makes it possible to reduce the amount of calculations in more than 20 times.

УДК 519.688

ЕЩЁ ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К РЕШЕНИЮ ПСЕВДОГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ КОММИВОЯЖЁРА

С.Б. Макаркин, аспирант
Тольяттинский государственный университет, Россия

Ключевые слова: задача коммивояжёра; псевдогеометрический вариант задачи коммивояжёра; геометрические методы решения; рандомизированные алгоритмы.

Аннотация: в настоящей работе изучаются методы восстановления координат городов на основании матрицы расстояний псевдогеометрической задачи коммивояжёра и минимизации отклонения матрицы расстояний, рассчитанной на основе восстановленных координат городов от исходной матрицы расстояний. Также рассмотрены аппроксимационные методы расчёта координат городов в случаях, когда расстояния между ними не удовлетворяют условиям, необходимым для геометрической интерпретации задачи.

ВВЕДЕНИЕ

Задачи оптимизации вообще, и дискретной оптимизации в частности, относятся к кругу востребованных проблем современной прикладной математики. К настоящему времени разработано значительное количество методов решения подобных проблем. Тем не менее, несмотря на невероятный рост вычислительных мощностей в последние десятилетия, проблемы размерности и вычислительной сложности по прежнему накладывают существенные ограничения на применимость этих методов. Исследования, описанные в настоящей работе относятся к т.н. задаче коммивояжёра (ЗКВ). Задача эта заключается, в общем случае, в нахождении наименее затратного маршрута, проходящего через все указанные города с возвратом в исходную точку. Особенностью этой задачи является то, что при относительной простоте определения задачи и нахождения хорошего решения, нахождение действительно *оптимального* маршрута является сложной задачей (строго говоря, эта задача, как при обобщённой постановке задачи, так и для большинства её вариаций, относится к классу NP-полных) [1,2].

ПСЕВДОГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ ВАРИАНТ ЗКВ

Одним из наиболее изученных является т.н. геометрический вариант ЗКВ [3], для которого стоимость маршрута между двумя городами определяется расстоянием между ними (Евклидова норма). В настоящей статье рассматривается двумерный симметричный *псевдогеометрический* вариант ЗКВ, отличающийся от геометрического тем, что все элементы матрицы расстояний дополнительно умножается на случайные числа, генерируемые с нормальным законом распределения, заданной дисперсией и математическим ожиданием **1**. Процедура генерации исходных данных для двумерного случая псевдогеометрического варианта такова: в единичном квадрате случайным образом располагается n точек, $n \in IN$. Полученный набор точек рассматривается как вершины $V=\{v_1,...,v_n\}$ полного взвешенного графа $G=(V,E)$. Элементы матрицы смежности данного графа $D(i,j)$ определяются, как евклидова норма

$$D(i,j)=\sqrt{(x_i-x_j)^2+(y_i-y_j)^2}. \qquad (1)$$

После этого каждый элемент матрицы смежности умножается некоторое случайное число. Для того, чтобы сохранить симметричность, умножаются только элементы, расположенные левее и выше главной диагонали, а элементы, расположенные левее и ниже устанавливаются равными соответствующим рассчитанным элементам ($d_{ij}=d_{ji}$).Такое преобразование матрицы расстояний, трансормирующее геометрическую задачу в пседогеометрическую, не влияет на точность решения, получаемого с применением алгоритмов, оперирующих только матрицей расстояний (например, т.н. муравьиных алгоритмов, например, [4]). В то же время для подходов, опирающихся на координаты точек такое преобразование требует дополнительной обработки исходных данных. Одним из таких подходов является метод эластичной сети, впервые предложенный Р. Дубриным в [5]. Для использования подобных подходов необходимо привести координаты точек в соответствие с полученной матрицей расстояний.

РАСПОЛОЖЕНИЕ ТОЧЕК НА ПЛОСКОСТИ

Для того, чтобы рассчитать координаты точек, воспользуемся следующей методикой. Сначала из множества точек (вершин графа) V выбираются две произвольные точки, v_1 и v_2. Первая точка располагается в начале координат , а вторая - на оси OX так, чтобы расстояние от этой точки до начала координат соответствовало расстоянию между выбранными точками d_{12}, т.е. $v_1=(0,0)$; $v_2=(d_{12},0)$[7]. Координаты третьей точки, v_3, могут быть найдены как точка (точки) пересечения окружностей с центрами в a_1 и a_2 радиусом d_{13} и d_{23} соответственно. Таким образом, необходимо решить систему квадратных уравнений

$$\begin{cases}(x-x_1)^2+(y-y_1)^2=d_{13}^2,\\(x-x_2)^2+(y-y_2)^2=d_{23}^2\end{cases} \qquad (2)$$

где x_1, y_1 – координаты точки v_1, а x_2, y_2 – координаты точки v_2 (назовём такие точки *опорными*), d_{13} – расстояние от v_1 до v_3 и d_{23} – расстояние от v_2 до v_3. В зависимости от конкретных значений d_{13}, d_{23} и d_{12} возможны три варианта определения координат точки v_3.

Если $(d_{13}+d_{23})<d_{12}$, система не имеет решений в области рациональных чисел (т.е. окружности не пересекаются). В этом случае предположим, что точка v_3 расположена на прямой v_1v_2 на расстоянии d_{13}' от v_1 и d_{23}' от v_2 так, что $\frac{d_{13}'}{d_{23}'}=\frac{d_{13}}{d_{23}}$. Если $(d_{13}+d_{23})=d_{12}$, система имеет единственное решение $x_3, y_3 \in \Re$, которое и будет координатами точки v_3. Если $(d_{13}+d_{23})>d_{12}$, система имеет два решения $v_3' = (x_{31}, y_{31}), v_3'' = (x_{32}, y_{32}) : x_{31}, y_{31}, x_{32}, y_{32} \in \Re$. В этом случае случайно выберем одну из точек с уже известными координатами a_t, рассчитаем расстояние от v_3' и v_3'' до v_3 (d_{3t}' и d_{3t}'' соответственно) и выберем решение системы

$$v_3=\begin{cases}v_{3'} & \text{если } d_{3t}' \leq d_{3t}\\ v_{3''} & \text{если } d_{3t}' > d_{3t},\end{cases} \qquad (3)$$

где d_{3t} - расстояние от точки v_3 до v_t согласно матрице расстояний.

Координаты четвёртой и последующих точек определяются как среднее арифметическое от координат, полученных аналогичным способом для всех пар уже рассчитанных точек.

Рассмотрим собственно решение системы уравнений.

1. Алгебраический метод решения системы уравнений

Этот метод решения использован в [6] – решение системы квадратных уравнений методом сложения, либо методом подстановки. Обратим внимание на то, что в решении этой системы уравнений присутствует операция деления на координату одной из опорных точек, что может приводить к делению на **0** (если опорная точка лежит на одной из осей координат).

2. Геометрический метод решения системы уравнений

Существует другой подход к нахождения координаты точек пересечения окружностей, обладающий большей численной устойчивостью. Назовём этот метод *геометрическим*. Сначала задача нахождения точек пересечения двух окружностей сводится к нахождению точки пересечения окружности и прямой [7], после чего решается с применением геометрического подхода [8].

ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Для оценки погрешности вычислений использован подход, аналогичный [6] – вычислим нормированное расстояние Хемминга [9]:

$$D_H=\frac{\sum_{i,j=0}^{n}(d_{ij}-d_{ij}')}{n^2}, \qquad (4)$$

[7] Здесь и далее d_{kn} означает расстояние от точки a_n до точки a_k, согласно матрице смежности D.

где $D=\{d_{11},d_{12},...,d_{nn}\}$ – исходная матрица расстояний, $D'=\{d_{11}',d_{12}',...,d_{nn}'\}$ – матрица расстояний рассчитанная после расположения точек на плоскости согласно исходной матрице расстояний. Очевидно, что $D_H > 0 \forall D, D'$, т.к. на точности расчёта сказываются, по меньшей мере, ошибки округления. Для случая псевдогеометричсекой ЗКВ невязка будет обусловлена ещё и тем, что при преобразовании геометрической задачи в псевдогеометрическую нарушается т.н. правило треугольника $\forall d_{ij}, d_{jk}, d_{ki} \in D : d_{ij} + d_{jk} \Box> d_{ki}$, что делает невозможным расположение узлов графа на плоскости с сохранением всех расстояний между узлами.

РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Для сравнительной оценки точности вышеописанных методов расположения точек по матрице расстояний, автором была разработана программа на C++. Данная программа генерирует координаты n точек $V=\{v_1,v_2,...,v_n\}$ в единичном квадрате с равномерным законом распределения, и по полученным координатам рассчитывается матрица расстояний D каждый элемент которой определяется согласно (1). Далее, каждый элемент матрицы D умножается на случайное число (нормальное распределение с математическим ожиданием 1 и дисперсией μ). На основании полученной матрицы D расстояний выполняется расчёт координат точек $V'=\{v_1',v_2',...,v_n'\}$ одним из двух вышеупомянутых способов (аналитическим или геометрическим). Т.к. мы рассматриваем симметричный вариант ЗКВ, при расчёте расположения точек рассматриваются только те элементы матрицы расстояний, которые расположены выше и левее главной диагонали. На основании рассчитанных координат точек V' рассчитывается матрица расстояний D'. После чего рассчитывается невязка — нормированное расстояние Хемминга (4) между D и D'. Для простоты сравнения и анализа мы будем использовать абсолютное значение рассчитанной невязки. Невязка для 100 случайно сгенерированных графов с числом городов 2000 приведена на рис. 1. Среднее время расчёта координат по матрице расстояний составило 178 мс для аналитического метода и 183 мс для геометрического.

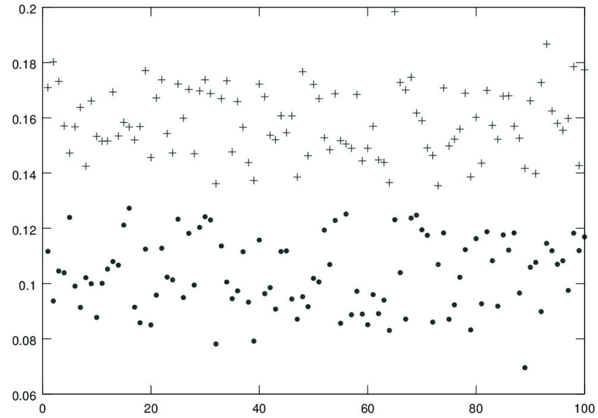
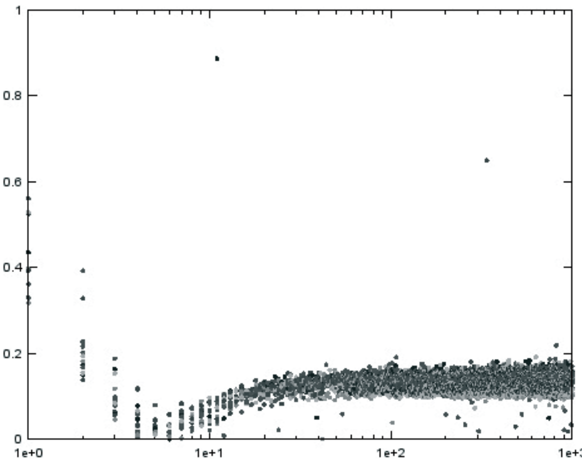


Рис. 1. Невязка исходной и расчётной матриц расстояний; аналитический (+) и геометрический (•) метод.

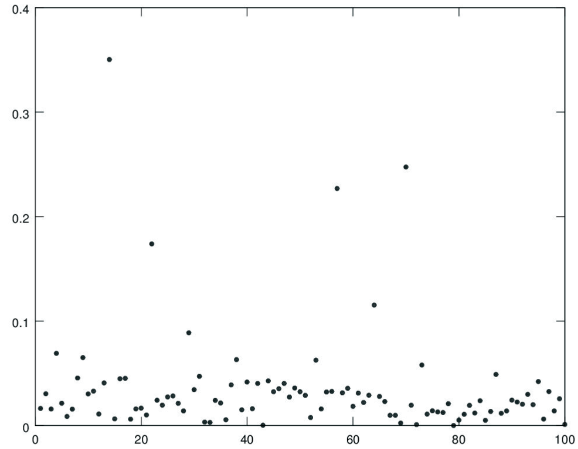
Из полученных данных видно, что для всех обработанных графов геометрический способ решения дал более точный результат. Его мы и будем рассматривать далее.

Сложность расчёта координаты каждой текущей точки на основании координат всех уже известных точек будет расти экспоненциально с увеличением размера задачи, так что для достаточно большого числа городов такой расчёт может оказаться невыполнимым. Возможным решением для упрощения этого расчёта является использование некоторого фиксированного количества случайно выбранных пар опорных точек. Для оценки того, как это решение повлияет на точность результата, были рассчитаны координаты точек для 14 задач размерностью 1000 точек. Для каждой задачи при расчёте координат в качестве опорных точек использовались от 1 до 1000 случайно выбранных пар точек. Результаты расчётов приведены на рис. 2.

Выполненные расчёты показывают, что наименьшее значение невязки получается при использовании 6 пар опорных точек (рис. 2а). Кроме того, из приведённых данных видно, что при дальнейшем (более 6) увеличении количества используемых пар опорных точек невязка не уменьшается, а стремится к некоторому пороговому значению. Таким образом, использование большого количества опорных точек неоправдано.



а) Зависимость невязки от количества пар использованных опорных точек



б)

Невязка при использовании шести пар опорных точек

Рис. 2. при использовании фиксированного числа случайно выбранных опорных точек.

На рис. 2б приведено значение невязки для 100 задач размерностью 1000, для которых координаты точек были рассчитаны на основании координат 6 случайно выбранных опорных точек. Из представленных данных видно, что для большинства случаев невязка оказывается менее 0,05. В то же время, для некоторых входных данных невязка оказывается в несколько раз больше.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате данной работы автором получен алгоритм расположения точек на плоскости, демонстрирующий для большинства наборов входных данных существенно лучший результат (как величине невязки, так и по времени выполнения), чем алгоритм, предложенный [6]. Тем не менее, полученный алгоритм не лишён определённых недостатков, в частности, нестабильность точности, приводящая к появлению всплесков невязки для некоторых входных данных. Для сглаживания таких всплесков возможно применение некоторых эвристик, позволяющих оценить верхнюю границу невязки при получении координат каждой точки. На основании этих эвристик принимается решение о повторном расчёте координат (с использованием других пар опорных точек). Разработка и тестирование таких эвристик – предмет дальнейших исследований.

Работа автора частично поддержана региональным грантом РФФИ № 13-01-97003, а также Федеральной целевой программой “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” на 2009–2013 годы, соглашение № 14.B37.21.1934.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hromkovic J. Algorithmics for Hard Problems. Introduction to Combinatorial Optimization, Randomization, Approximation, and Heuristics. Springer, 2003.
2. Громкович Ю. Теоретическая информаитка. Введение в теорию автоматов, теорию вычислимости, теорию сложности, теорию алгоритмов, рандомизацию, теорию связи и криптографию. БХВ-Петербург, СПб., 2010.
3. Мельников Б., Романов Н. Ещё раз об эвристиках для задачи коммивояжёра // Теоретические проблемы информатики и её приложений. — 2001. — Т. 4. — С. 81–92.
4. Dorigo M., Gambardella L. M. Ant colonies for travelling salesman problem // TR/IRIDIA/1996-3, Universit Libre de Bruxelles, Belgium
5. Dubrin R., Willshaw D. An analogue approach of the travelling salesman problem using an elastic net method // Nature.— 1987.— Vol. 326.— P. 689–691.
6. Крашенинникова К. Об одном подходе к решению псевдогеометрической версии задачи коммивояжёра. // Вектор науки ТГУ.— 2011.— Vol. 2(16).— P. 21–24.
7. Пересечение двух окружностей // MAXimal URL: http://e-maxx.ru/algo/circles_intersection (дата обращения: 28.07.2012).
8. Пересечение окружности и прямой // MAXimal URL: http://e-maxx.ru/algo/circle_line_intersection (дата обращения: 28.07.2012).
9. Hamming R. Error detecting and error correcting codes // The Bell System Technical Journal.— 1950. — Vol. 2.

ONE MORE APPROACH TO SOLVING PSEUDOGEOMETRICAL VERSION OF TRAVELLING SALESMAN PROBLEM

S.B. Makarkin, postgraduate student
Togliatty state university, Russia

Keywords: traveling salesman problem; pseudogeometrical variant of the traveling salesman problem; geometrical approaches to the solution of the traveling salesman problem; randomized algorithms.

Annotation: This paper concerns methods of calculation of the cities coordinates based on the distance matrix and ways to minimize difference between initial distance matrix and distance matrix calculated using restored coordinates. For the cases when distance between cities do not neet the geometrical requirements, some approximation methods are used.