



YUQORI O'LCHAMLI HISOBLASHGA ASOSLANGAN DIZAYN UCHUN FIZIKAGA TAYANGAN DARAXTSIMON QIDIRUV

Bo'ronov Musobek Orifovich

O'zbekiston Milliy Universiteti, Fizika fakulteti 2-kurs talabasi

<https://orcid.org/0009-0000-3238-0122>

Annotatsiya: Ushbu ish hisoblashga asoslangan dizayn va fizik modellashtirishda uchraydigan yuqori o'lchamli, qimmat baholanadigan va gradientlardan holi "qora quti" optimizatsiya masalalarini hal etishga bag'ishlangan. An'anaviy global optimizatsiya algoritmlari bunday sharoitlarda o'lchamlilik la'nati, ko'p cho'qqili noxiziqli landshaftlar va fizik yo'naltiruvning yetishmasligi sababli samaradorlikni yo'qotadi. Mazkur muammoni bartaraf etish maqsadida fizikaga tayangan, Monte Karlo daraxt qidiruvi (MCTS) asosida qurilgan, uzluksiz va yuqori o'lchamli fazolar uchun moslashtirilgan yangi optimizatsiya ramkasi taklif etiladi.

Taklif etilgan yondashuv yo'naltirilgan namuna olish, adaptiv mukofot shakllantirish, surrogat modellarga asoslangan o'rganish hamda eksploratsiya va ekspluatatsiya o'rtasida ierarxik almashinish mexanizmlarini birlashtiradi. Daraxtlar populyatsiyasiga asoslangan global va lokal qidiruv strategiyalari yordamida algoritm murakkab, nokonveks va fizik cheklovlar bilan boshqariladigan dizayn landshaftlarida samarali navigatsiyani ta'minlaydi.

Usul klassik benchmark funksiyalarida zamonaviy metaevristik algoritmlar bilan solishtirib baholanadi va yaqinlashuv tezligi, barqarorlik hamda umumlashuv qobiliyati bo'yicha ustun natijalarni namoyish etadi. Shuningdek, metodning amaliy samaradorligi kristall tuzilma dizayni, atomlararo potentsiallarni moslashtirish va uzluksiz mexanik dizayn masalalarida ko'rsatib beriladi. Umuman olganda, ushbu ish fizikaga tayangan daraxtsimon qidiruvni yuqori o'lchamli hisoblashga



asoslangan dizayn uchun masshtablanuvchi va tushuntirilishi mumkin bo'lgan umumiy optimizatsiya paradigmasi sifatida taklif etadi.

Annotation: *This work addresses high-dimensional, computationally expensive, and gradient-free black-box optimization problems that commonly arise in physics-based modeling and computational design. Conventional global optimization methods often struggle in such settings due to the curse of dimensionality, highly nonconvex and multimodal landscapes, and the lack of physically informed guidance. To overcome these limitations, we propose a physics-informed optimization framework based on Monte Carlo Tree Search (MCTS), specifically adapted to continuous and high-dimensional design spaces.*

The proposed approach integrates directed sampling strategies, adaptive reward shaping, surrogate-assisted learning, and hierarchical switching mechanisms between global exploration and local exploitation. By employing a population of decision trees, the method enables efficient navigation of complex design landscapes governed by physical constraints, where meaningful optimal solutions are sparse.

The performance of the proposed algorithm is evaluated on a wide range of classical benchmark functions and compared against state-of-the-art global optimization algorithms, demonstrating superior or comparable convergence speed, robustness, and generalization capability. Beyond synthetic benchmarks, the method is successfully applied to realistic scientific problems, including crystal structure optimization, fitting of interatomic potential models, and constrained engineering design governed by continuum mechanics. Overall, this work establishes physics-informed tree-based search as a scalable and interpretable paradigm for high-dimensional computational design and scientific optimization.

Аннотация: *Настоящая работа посвящена решению задач высокоразмерной вычислительной оптимизации, возникающих в физическом моделировании и вычислительном дизайне, где целевая функция имеет характер «чёрного ящика», является вычислительно дорогостоящей и не*



допускает надёжного вычисления градиентов. Традиционные методы глобальной оптимизации в таких условиях сталкиваются с серьёзными трудностями, обусловленными проклятием размерности, многомодальными неконвексными ландшафтами и отсутствием физически осмысленного направления поиска.

В данной работе предлагается физически мотивированный подход, основанный на методе Монте-Карло поиска по дереву (Monte Carlo Tree Search, MCTS), адаптированный для непрерывных и высокоразмерных пространств параметров. Разработанный алгоритм сочетает направленное выборочное исследование, адаптивное формирование вознаграждения, суррогатное обучение и иерархический баланс между глобальным исследованием и локальной эксплуатацией. Использование популяции деревьев решений позволяет эффективно исследовать сложные физически ограниченные ландшафты оптимизации.

Эффективность метода подтверждена на наборе классических тестовых функций в сравнении с современными метаэвристическими алгоритмами, где он демонстрирует улучшенную скорость сходимости, устойчивость и обобщающую способность. Практическая применимость подхода также показана на реальных задачах, включая оптимизацию кристаллических структур, подбор межатомных потенциалов и инженерные задачи непрерывного дизайна. В целом работа представляет физически ориентированный древовидный поиск как масштабируемую и интерпретируемую парадигму для высокоразмерного вычислительного дизайна и научной оптимизации.

1. Kirish

Hisoblashga asoslangan dizayn masalalari ko‘pincha uzluksiz qidiruv fazolarida aniqlangan yuqori o‘lchamli optimizatsiya muammolari bilan bog‘liq bo‘lib, bunda maqsad funksiyasi fizik xarajatni, samaradorlik ko‘rsatkichini yoki barqarorlik mezonini ifodalaydi va odatda simulyator yoki sonli model orqali



baholanadi [1]. Bunday masalalar materiallar dizayni [2], teskari tuzilma qidiruvi [3], potentsiallarni moslashtirish [4], topologik va mexanik dizayn [5], shuningdek ko‘p-fizikali birgalikdagi optimizatsiya [6] kabi sohalarda yuzaga keladi. Ushbu holatlarning barchasida maqsad funksiyasi cheklangan hisoblash narxi evaziga so‘rov qilinadigan, amalda “qora quti” sifatida qaraladi.

Bu turdagi masalalar bir nechta sabablar tufayli ayniqsa murakkab hisoblanadi: birinchidan, har bir funktsiyani baholash yuqori hisoblash xarajatini talab qiladi (masalan, zichlik funksional nazariyasi, chekli elementlar usuli yoki ko‘p-fizikali yechimchilar); ikkinchidan, gradientlarning mavjud emasligi yoki differentsiallanuvchanlikning yo‘qligi; uchinchidan esa dizayn landshaftining kuchli noxiziqli, ko‘p cho‘qqililigi va yuqori o‘lchamli bo‘lishidir. Ko‘plab hisoblashga asoslangan dizayn jarayonlarida maqsad funksiyasi shovqinli, differentsiallanuvchi emas va baholash jihatidan qimmat bo‘lib, bu holat klassik gradientga asoslangan usullarni qo‘llashni amalda imkonsiz qiladi.

Formal ravishda, umumiy “qora quti” dizayn optimizatsiyasi masalasi chegaralangan dizayn sohasi D^n ichida joylashgan x^* parametrni topish masalasi sifatida ifodalanadi, bunda u skalyar maqsad funksiyasi f ni minimallashtiradi:

$$x^* = \operatorname{argmin}_{x \in D^n} f(x) \quad (1)$$

bu yerda chegaralangan dizayn sohasi quyidagicha aniqlanadi:

$$D^n = \{ x \in R^n \mid l \leq x \leq u \} \quad (2)$$

Bu yerda n muammoning o‘lchamliligini bildiradi, va $[l, u]$ oraliq har bir o‘zgaruvchi uchun qidiruv fazosidagi pastki va yuqori chegaralarni belgilaydi. An’anaviy tarzda, yuqori o‘lchamli “qora quti” optimizatsiya masalalarini hal qilish uchun keng ko‘lamli algoritmlar ishlab chiqilgan bo‘lib, ular ko‘plab dizayn jarayonlarida asosiy hisoblash cheklovini tashkil qiladi [7, 8].

Dastlabki usullar, masalan, simulyatsiyalangan qotish (simulated annealing) [9, 10], minima hopping [11], metadinamika [12] va tasodifiy qidiruv [13], ehtimollikka asoslangan global tadqiqot strategiyalarini joriy qilgan va keyinchalik tuzilma bashorat qilish, nuqson qidirish va topologiyani takomillashtirish kabi



hisoblashga asoslangan dizayn vazifalarida qoʻllangan. Simulyatsiyalangan qotish lokal minimumlardan chiqish uchun termal sovishni taqlid qilsa, minima hopping va metadinamika global sakrashlarni lokal takomillashtirish bilan birlashtiradi (koʻpincha gradientga asoslangan lokal optimizatsiya bilan birga), bu esa lokal havzalarga ega fizikaga asoslangan dizayn fazolari uchun jozibali xususiyatdir.

Evolutsion algoritmlar (EA), jumladan Genetik Algoritmlar (GA) [14, 15, 16] va Differensial Evolyutsiya (DE) [17], global optimizatsiya paradigmasini biologik ilhomlangan mexanizmlarni — tanlash, krossover va mutatsiya — qoʻllash orqali takomillashtiradi, bu esa avlodlar davomida nomzod yechimlar populyatsiyasini rivojlantirishga imkon berib, notekis landshaftlarda samarali qidiruvni taʼminlaydi.

Biologik ildizga ega boʻlmagan usullardan farqli oʻlaroq, Particle Swarm Optimization (PSO) [17, 18, 19] kabi swarm intelligence algoritmlari markazlashtirilmagan agentlarning ijtimoiy xulq-atvorini modellashtiradi, bunda har bir zarracha oʻz pozitsiyasini individual tajriba va butun guruhning bilimlari asosida yangilaydi. Bu katta parametr fazolarida eksploratsiya va ekspluatatsiyani muvozanatlash uchun sodda, lekin kuchli mexanizm taqdim etadi.

Tabiatdan ilhomlangan metaheuristik algoritmlardan kelib chiqqan holda, Whale Optimization Algorithm (WOA) [20], Gravitational Search Algorithm (GSA) [21] va Ant Colony Optimization (ACO) [22] kabi algoritmlar ekologik va fizik hodisalarni taqlid qiladi, masalan, ovni oʻrab olish yoki tortishish kuchi orqali murakkab landshaftlarni adaptiv harakat bilan bosib oʻtadi. Swarm intelligence usullari bir nechta agentlar oʻrtasida koordinatsiyani joriy qilib, eksploratsiya va ekspluatatsiyani muvozanatlash imkonini beradi — bu koʻp parametrlil materiallar va muhandislik dizayn masalalarida keng qoʻllaniladi.

Paralel ravishda, Bayesian Optimization (BO) [23, 24] juda qimmat “qora quti” funksiyalar uchun mashhurlik qozongan, bu yerda ehtimollikka asoslangan surrogat modellar (masalan, Gaussian jarayonlari) qurilib, ular iterativ ravishda yangilanadi va namuna olishni acquisition funksiyalari orqali yoʻnaltiradi, bu esa



noaniqlikka asoslangan tadqiqot va bashorat qilingan optimal yechimlardan foydalanishni muvozanatlashtiradi. BO hisoblashga juda qimmat bo'lgan vaziyatlarda (masalan, kvant hisoblash, CFD, FEM) to'g'ridan-to'g'ri eksploratsiyani surrogat model va acquisition qoidasi bilan almashtirib, qimmat hisoblash chaqiruvlar sonini minimallashtirish imkonini beradi.

Shunga qaramay, ushbu metodlarning aksariyati amaliy hisoblashga asoslangan dizayn sharoitlarida qiyinchiliklarga duch keladi, chunki o'lchamlilik va fizik cheklovlar ortadi. "O'lchamlilik la'nati" sababli, namuna olish siyrak va ma'lumot beruvchi bo'lmaydi, ayniqsa keng tekisliklar va deyarli degeneratsiyalangan holatlar mavjud bo'lgan ko'p cho'qqili landshaftlarda — bunday sharoitlar fizik qonunlar bilan boshqariladigan dizayn fazolarida keng tarqalgan. Ko'plab klassik usullar ham xotirasiz bo'lib, ular oldingi baholashlar haqidagi ma'lumotni saqlamaydi, natijada keraksiz iteratsiyalar va erta yaqinlashuv yuz beradi.

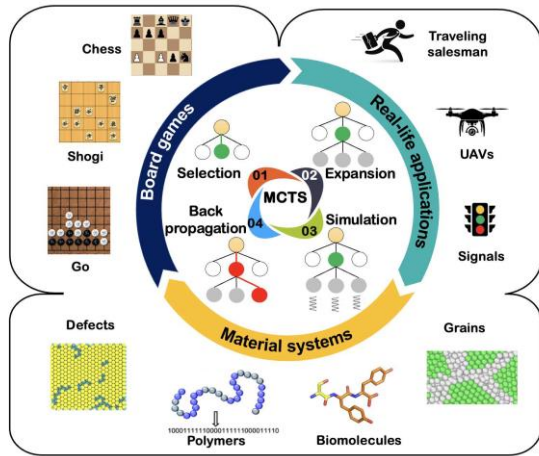
Ushbu cheklovlar o'tgan baholashlardan keladigan fikr-mulohazalarni kelajakdagi namuna olishga integratsiya qiluvchi, reinforcement learning [25], surrogat yordamida yo'naltirilgan qidiruv [26] va ierarxik rejalashtiruvchilar [27] kabi o'rganishga asoslangan strategiyalarning paydo bo'lishiga sabab bo'ldi. Hisoblashga asoslangan dizayn uchun bunday usullar ikki muhim afzallikni taqdim etadi:

Ushbu usullar ikki muhim vazifani bajaradi: (i) fazoda fizik jihatdan istiqbolli yoki cheklovlarga mos keladigan hududlarni aniqlash, va (ii) landshaft bo'ylab moslashuvchan tarzda harakat qilishni, ya'ni faqat taxminiy qoidalar asosida emas, o'rganish orqali o'rganish.

Shu bilan birga, barqaror hisoblashga asoslangan dizayn optimizatori uchun uchta asosiy talab paydo bo'ladi:

- (i) o'lchamlarga moslashadigan adaptiv namuna olish,
- (ii) suyuq va ma'lumot bermaydigan hududlardan chiqish mexanizmlari,
- (iii) dizayn landshaftidagi istiqbolli yechimlardan samarali foydalanishni o'rganish.

Umuman olganda, bu tamoyillar murakkab ilmiy va muhandislik dizayn masalalarida masshtablanuvchi, fizik jihatdan izchil va baholash samaradorligi yuqori optimizatsiyani ta'minlashga imkon beradi.



Rasm 1: Monte Karlo Daraxt Qidiruvi (MCTS) ilovalarining keng doirasi, strategik qaror qabul qilishdan tortib real dunyo optimizatsiyasi va ilmiy dizayn vazifalarigacha bo'lgan misollar bilan ko'rsatildi. Aksariyat mavjud qo'llanmalar diskret harakat fazolarida ishlaydi.

O'rganishga asoslangan strategiyalar orasida, yuqorida keltirilgan talablarni qondirishni maqsad qilgan yondashuvlardan biri sifatida Monte Karlo Daraxt Qidiruvi (MCTS) katta qidiruv fazolarida gradientlarsiz mantiqiy tahlil talab qiladigan hisoblashga asoslangan dizayn vazifalari uchun jozibali alternativani taklif qiladi. Dastlab shaxmat, shogi va go kabi strategik o'yinlarda qaror qabul qilish uchun ishlab chiqilgan [28, 29], MCTS eksploratsiya va ekspluatatsiyani muvozanatlashtirishning tizimli usulini taqdim etadi, bunda qo'lda yaratilgan qoidalar yoki maqsad funksiyasining aniq modeli talab qilinmaydi.

MCTS asimmetrik qaror daraxtini bosqichma-bosqich quradi va daraxt siyosati (masalan, UCT) yordamida dizayn fazosidagi istiqbolli va kam o'rganilgan hududlarni ustun qo'yadi. Rollout'lar nomzod dizaynlarni baholab, yakuniy ballni hisoblaydi va bu ball keyinchalik namuna olish siyosatini yangilash uchun orqaga tarqatiladi. Oddiy tasodifiy namuna olish yoki faqat ehtimollikka asoslangan qoidalar bilan solishtirganda, MCTS hisoblashni dizayn fazosining ma'lumot beruvchi hududlariga yo'naltiradi, bu esa har bir baholash qimmat simulyatsiyani talab



qiladigan vaziyatlarda (masalan, DFT, MD, FEM yoki ko‘p-fizikali yechimchilar) juda jozibali qiladi.

MCTS taxtali o‘yinlardan tashqari, sayohatchi sotuvchilar marshruti, dron navigatsiyasi, avtonom idrok va kombinator molekula va polimer dizayni kabi dizayn va rejalashtirish masalalarida muvaffaqiyatli qo‘llangan [30–34]. Materiallar va kimyoviy kashfiyotlarda esa MCTS nuqson tuzilmasini aniqlash [35, 36], don chegaralarini yaratish [37], kombinator dizayn fazolarini tadqiq qilish, sintez rejalashtirish [34], dori kashfiyoti [38], avtonom robotika [39] va simulyatsiya surrogatlari uchun giperparametrlarni tanlash [40] kabi vazifalarda ishlatilgan. Shu bilan birga, bu qo‘llanmalar ko‘pincha diskret harakat fazolariga asoslangan.

MCTS’ni oddiy tarzda uzluksiz va yuqori o‘lchamli hisoblashga asoslangan dizayn masalalariga kengaytirishda — masalan, kristall tuzilma dizayni (CSD), atomlararo potensial modelini (IAP) moslashtirish, teskari dizayn yoki ko‘p parametrlilik termodinamik optimizatsiya — muhim cheklovlar yuzaga keladi. Klassik MCTS quyidagi jihatlarga ega emas: (i) silliq yoki shovqinli uzluksiz maqsad funksiyalari uchun moslashadigan adaptiv namuna olish, (ii) dizayn o‘lchamliligi oshganda masshtablilik, (iii) vaqt o‘tishi bilan dizayn landshaftidagi tuzilmani o‘rganish va undan samarali foydalanish mexanizmlari.

Diskret domenlarda yaxshi ishlaydigan qat’iy namuna olish sxemalari uzluksiz fazolarda samarali bo‘lmaydi, chunki bu yerda harakat fazosi ko‘pincha cheklanmagan va parametrlar o‘rtasida fizik jihatdan mazmunli bog‘lanishlar mavjud. Shuningdek, standart MCTS qidiruv davomida to‘plangan statistik korrelyatsiyalar yoki landshaft geometriyasidan foydalanmaydi, bu esa fizik cheklovlar bilan boshqariladigan dizayn fazolarida muhim bo‘lib, foydali ma’lumotlar kam va qimmatga tushadi. Shu sababli, MCTS’ni uzluksiz va yuqori o‘lchamli optimizatsiya muammolariga moslashtirish uchun sezilarli o‘zgartirishlar talab etiladi. Klassik MCTS tadqiqotni ildiz tugunidan boshlaydi va tarmoqlanish mexanizmlari orqali yo‘naltirilgan kengayish amalga oshiradi, ammo bu struktura



yuqori o'lchamli fazolarda masshtablilikni ta'minlashda qiyinchilik tug'diradi va global optimizatsiya vositasi sifatida samaradorligini cheklaydi.

Bizning ishimiz siyosatga asoslangan qaror daraxtiga tayangan kuchaytiruvchi o'rganish algoritmlarini samarali va masshtablanuvchi global optimizatorlarga aylantirish uchun umumlashtirilgan ramkani taklif qiladi. Shu maqsadda bir nechta muhim yangiliklarni kiritdik. Birinchidan, algoritmgaga uzluksiz va yuqori o'lchamli fazolarda qidiruv trajektoriyalarini samarali yoyish imkonini beruvchi yo'naltirilgan o'rganish mexanizmi bilan birlashtirilgan samarali namuna olish sxemasi joriy qilindi. Bu qamrov va optimal yechimlarga yaqinlashishni yaxshilaydi. Ikkinchidan, MCTS daraxt siyosati orqali eksploratsiya va ekspluatatsiyani muvozanatlashtirsa-da [41], u murakkab, ko'p cho'qqili landshaftlarda lokal istiqbolli hududlarni ekspluatatsiya qilishni nozik boshqarish imkoniga ega emas. Bizning yondashuvimiz bu imkoniyatni lokal takomillashtirish strategiyalari va adaptiv mukofot shakllantirishni kiritish orqali kengaytiradi, daraxt izchilligi saqlanadi.

Shuningdek, daraxt asosidagi usullarda uchraydigan lokal tuzilib qolish muammosi ham hal qilinadi, bunda chuqur daraxtlar ma'lum subdomenlarni haddan tashqari o'rganib, global yaqinlashuvni kechiktiradi. Buni yumshatish uchun qaror daraxtlarining populyatsiya asosidagi kengaytmasini joriy qildik, bunda global va lokal daraxt populyatsiyalari tushunchasi kiritilib, qidiruv fazosidagi turli hududlarni bir vaqtning o'zida o'rganish va yuqori qiymatli hududlarda chuqurlik va diqqatni saqlash ta'minlanadi.

Bizning ramkamizni yuqori o'lchamli qiyin test funksiyalari to'plamida sinab ko'rdik va uning real ilmiy va muhandislik masalalarida qo'llanishi mumkinligini namoyish etdik. Bu masalalar orasida materialshunoslikda kristall tuzilma dizayni (CSD), atomlararo potensial modellari/ kuch maydonlari, shuningdek, bosimli idish optimizatsiyasi va payvandlangan birikmalarni dizayni kabi uzluksiz dizayn vazifalari mavjud. Barcha sinovlarda bizning usulimiz ilg'or metaheuristik va qora



quti optimizatsiya algoritmlaridan doimiy ravishda ustun natijalarni ko'rsatdi, masshtablilik, barqarorlik va yaqinlashuv samaradorligini oshirdi.

Umuman olganda, ushbu ish o'rganishga asoslangan ramkalarni murakkab, yuqori o'lchamli global optimizatsiya muammolarini hal qilish uchun umumiy maqsadli optimizator sifatida qo'llash imkoniyatini ko'rsatadi.

2. Metodologiya

2.1 Monte Karlo Daraxt Qidiruvi

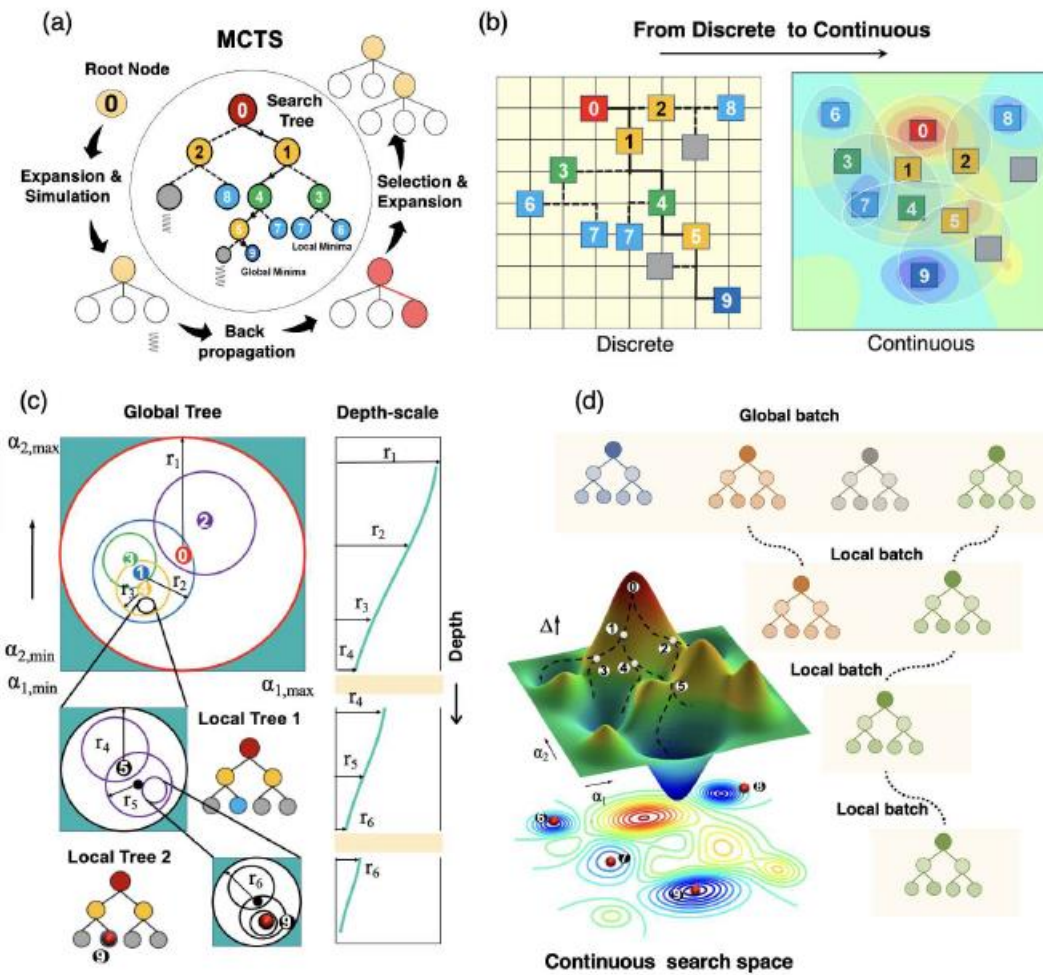
An'anaviy Monte Karlo Daraxt Qidiruvi (MCTS) algoritmi to'rtta asosiy bosqich orqali ishlaydi: tanlash (Selection), kengaytirish (Expansion), simulyatsiya (Simulation) va orqaga tarqatish (Backpropagation). Ushbu bosqichlar siklik ravishda bajarilib, hisoblash jihatdan samarali va moslashuvchan tarzda ko'p hollarda diskret bo'lgan yuqori o'lchamli dizayn fazolarini tadqiq qilish imkonini beradi (Rasm 2.a). Iterativ tuzilma MCTS'ga keng kombinator landshaftlar bo'ylab to'liq enumeratsiyaga tayanmasdan harakat qilish imkonini beradi.

Tanlash bosqichida algoritm joriy daraxtni ildiz tugunidan barg tugunigacha o'rganadi va har bir tugunni tanlashda Upper Confidence Bound (UCB) asosida maqsad siyosat funksiyasini maksimal darajada qiladigan bolalar tugunlarini tanlaydi. Ushbu mezon ekspluatatsiya va eksploratsiya o'rtasidagi muvozanatni ta'minlaydi: yuqori o'rtacha mukofotga ega tugunlarni tanlash orqali ekspluatatsiya, kamroq o'rganilgan tugunlarni ziyorat qilish orqali esa eksploratsiya amalga oshiriladi.

Berilgan i tuguni uchun UCB quyidagicha ifodalanadi [41]:

$$UCB(node_i) = \max(z_1, z_2, z_3, \dots, z_k) + C \sqrt{\frac{\ln(v_p)}{v_i}} \quad (3)$$

Bu yerda v_i — i tugunining tashriflar soni, v_p — ota tugun tashriflar soni, C esa eksploratsiya va ekspluatatsiya muvozanatini boshqaruvchi parametrdir.



Rasm 2: Qaror daraxtiga asoslangan MCTS yordamida uzluksiz qidiruv fazolarida hisoblashga asoslangan dizayn.

(a) MCTS'ning turli bosqichlari, ildiz tugunidan boshlanib, qidiruv daraxti kengayadi.

(b) Diskret harakat fazosidan uzluksiz harakat fazosiga o'tish, bunda tugun atrofida cheksiz sonli mumkin bo'lgan yo'nalishlar mavjud.

(c) Daraxt ichidagi masshtablash oynalari chuqurroq tarmoqlarga istiqbolli hududlarda ekspluatatsiyani yo'naltirish imkonini beradi.

(d) 2D maqsad funksiyasi bilan uzluksiz qidiruv fazosining tipik ko'rinishi. Daraxt odatda landshaftdagi eng yuqori maqsadli hududdan boshlanadi va lokal minimumlar orqali tarmoqlanadi. Qidiruv fazosida daraxtlar populyatsiyasi (batch) yaratiladi. Birinchi bosqich global tadqiqotga bag'ishlangan; keyingi bosqichlarda



lokal optimizatsiya uchun istiqbolli yechimlardan kamroq daraxtlar yaratiladi. Qidiruv global optimumga yaqinlashgan sari daraxtlar soni asta-sekin kamaytiriladi.

Joriy tugun va uning ota tugunining tashriflar soni mos ravishda v_i va v_p bilan belgilanadi, C esa eksploratsiya va ekspluatatsiya muvozanatini boshqaruvchi sozlanadigan konstantadir. Kengaytirish bosqichida yangi bola tugun tanlangan ota tugun konfiguratsiyasini biroz o'zgartirish orqali yaratiladi. Ushbu o'zgarishlar dizayn fazosida diskret yoki kvantlangan harakatlarni ifodalaydi. Simulyatsiya bosqichida yangi tugun bir yoki bir nechta rollout orqali baholanadi (yoki yangi tugun atrofidagi parametrlarning samaradorligini baholash ansambli yordamida). Rollout'lar tezkor empirik modellardan yoki yuqori aniqlikdagi hisoblash metodlaridan foydalanib bajarilishi mumkin, maqsad — nomzod yechim bilan bog'liq muhim samaradorlik ko'rsatkichlarini baholash. Orqaga tarqatish bosqichida simulyatsiya natijasida olingan mukofotlar daraxt bo'ylab yuqoriga tarqatiladi va barcha ota tugunlar statistikasi (masalan, tashriflar soni va o'rtacha mukofot) bosqichma-bosqich yangilanadi.

2.2 Yuqori o'lchamli uzluksiz fazolarda tugunlarni adaptiv namuna olish

Har bir tugunda amalga oshirilgan rollout'lar ota tugundan bola tugunni tanlash uchun ishlatiladi va bu qidiruv fazosida daraxtni o'sish va navigatsiya qilishning ajralmas qismi hisoblanadi. An'anaviy MCTS'da yangi namunalar oldindan belgilangan diskret harakatlardan olinadi. Biroq uzluksiz fazolarda (Rasm 2b) ikki asosiy o'zgarish talab qilinadi. Birinchidan, harakatlar endi diskret emas, balki uzluksiz bo'lib, mutatsiya protokolini talab qiladi. Ikkinchidan, tanlangan parametrlar tugun atrofida yetarlicha tarqalgan bo'lishi kerak, shunda keyingi tugunni tanlash uchun yo'nalish ma'nosi paydo bo'ladi.

O'lchamlilik oshgan sari muhim qiyinchilik yuzaga keladi: rollout nuqtalarini teng taqsimlash qiyinlashadi, chunki qidiruv fazosining hajmi eksponentsial o'sadi va namunalar lokalizatsiyalanadi. Ushbu masalani hal qilish



uchun turli yuqori o'lchamli namuna olish sxemalari taklif qilingan. Eng mashhurlari orasida Latin Hypercube Sampling va hypersfera sampling mavjud.

Biz daraxtdagi boshlang'ich ildiz tugunlarini yaratishda Latin Hypercube Sampling'dan foydalanamiz, bu turli boshlang'ich nuqtalarni ta'minlaydi. Mavjud tugun atrofida namunalarni olish uchun hypersfera sampling ishlatiladi. Bu usul joriy nuqtaning x_r markazida radiusi r_{max} bo'lgan d-o'lchovli hypersfera ichida yangi nomzod nuqtalarni olishni o'z ichiga oladi:

$$x'_r = x_r + r \frac{u}{\|u\|}, \text{ bu yerda } r = r_{max} \cdot \xi^{\frac{1}{d}}, \xi \sim U(0,1) \quad (4)$$

Bu yerda $u \sim N(0, I)$ tasodifiy tanlangan yo'nalish vektorini bildiradi, va masshtablash omili $r = r_{max} \cdot \xi^{\frac{1}{d}}$ hypersfera hajmi bo'ylab teng taqsimlangan namuna olishni ta'minlaydi. Tasodifiy o'zgaruvchi ξ namunani radial pozitsiyasini boshqaradi: ξ ni (0, 1) oraliqda bir xillik bilan olish $\xi^{\frac{1}{d}}$ orqali xaritaga tushirish radii taqsimotini to'g'ri beradi, shunda nuqtalar hypersfera hajmi bo'ylab teng taqsimlanadi (markazga yaqin jamlanmaydi).

Hypersfera samplingning asosiy cheklovlaridan biri shundan iboratki, tugun markazi atrofida izotropik tarqalish erishilgan bo'lsa-da, tugun bo'ylab hajmi qamrab olish uchun zarur bo'lgan namunalar soni o'lchamlilik ortishi bilan tez oshadi, bu esa baholashlar soni va hisoblash xarajatlarini oshiradi.

Ushbu cheklovni yengish uchun biz yo'nalishga asoslangan namuna olish sxemasidan foydalanamiz, u tugun va uning ota tugunlaridan istiqbolli yo'nalishlarni o'rganadi. Ushbu modelga asoslangan yondashuv yaxshilanishga olib kelishi ehtimoli yuqori bo'lgan yo'nalishlarni bashorat qiladi va shu orqali yuqori o'lchamli fazolarda namuna olish samaradorligini sezilarli darajada oshiradi.

2.3 Logistik Surrogat: Yo'nalishga asoslangan namunaviy olish mexanizmi

Daraxtga asoslangan optimizatsiya algoritmlarida odatiy namuna olishda har bir rollout berilgan tugunda oldingi natijalardan mustaqil ravishda yaratiladi. Ushbu xotirasiz xususiyat ba'zi hollarda yaxshi yaqinlashuvni beradi, ammo u muhim



cheklovga ega: agar rollout davomida istiqbolli yoʻnalish topilsa, algoritm shu yoʻnalishda yana namuna olish ehtimoli kam boʻladi, agar yangi ota tugun yaratmasa. Shu bilan birga, muvaffaqiyatli yoʻnalishda takroriy namuna olish koʻpincha qoʻshimcha yaxshilanish va tezroq yaqinlashuvga olib keladi.

Buning uchun kelajakdagi namunalarni ilgari yaxshilangan natijalarni bergan yoʻnalishlarga yoʻnaltirish foydali boʻladi. Uzluksiz yuqori oʻlchamli fazolarda xotirasiz namuna olish cheklovlarini yengish uchun biz Logistic Surrogate Sampler'ni joriy qilamiz, u tugunning mahalliy qidiruv tarixiga asoslangan holda kelajakdagi rollout'larni yoʻnaltiradi.

Berilgan tugun parametri x uchun biz tajriba nuqtalari va ularning mos maqsad natijalarini yigʻamiz: $H_{node} = \{(x^{(i)}, E^{(i)})\}$. Har bir tajribaga binar tasnif yorligʻi $y^{(i)}$ beriladi, bunda $y^{(i)} = 1$ agar $E^{(i)} < E(x)$ (muvaffaqiyat), aks holda 0. Asosiy jihatlar quyidagilar: (i) yangi nuqtani qaysi yoʻnalishda olish, va (ii) namuna oʻz oldingisidan qanchalik uzoqda boʻlishi (qadam uzunligi). Yoʻnalish qidiruvini qadam uzunligi qidiruvidan ajratish uchun nisbiy oʻzgarish $\Delta x^{(i)} = x^{(i)} - x$ ikki alohida xususiyat toʻplamiga ajratiladi:

$$u^{(i)} = \text{sign}(\Delta x^{(i)}) \in \{-1, 0, 1\}^d, \quad \phi_k(r^{(i)}) = \exp(-(r^{(i)} - c_k)^2). \quad (5)$$

Bu yerda $u^{(i)}$ yoʻnalish komponentini ifodalaydi, $\phi(r)$ esa xususiyat vektori boʻlib, skalyar Evklid masofasi $r^{(i)} = \|\Delta x^{(i)}\|$ qidiruv radiusi R_{max} boʻylab c_k markazida joylashgan Gaussian Radial Basis Function (RBF) bazasiga proyeksiya qilinadi.

Algoritm namunani olishni yoʻnaltirish uchun ikki bogʻlangan logistik regressiya modelidan foydalanadi. Yoʻnalishga asoslangan optimizatsiya quyidagi tarzda amalga oshiriladi:

$$P(y = 1 | u) = \sigma(w_{dir}^T u + b), \quad (6)$$

Oʻrganilgan model keyin qidiruv yoʻnalishi uuu ni faollik bilan optimallashtirish uchun stoxastik tepalik-koʻtarilish protsedurasida ishlatiladi. Algoritm oʻrganilgan koeffitsiyentlarning belgilari dan boshlanib, uuu ning tasodifiy oʻlchamlarini bosqichma-bosqich almashtiradi va faqat muvaffaqiyat ehtimolini



oshiradigan o'zgarishlarni qabul qiladi. Yo'nalish belgilanganidan so'ng, qadam uzunligi ikkinchi model orqali belgilanadi:

$$P(y = 1 | r) = \sigma(w_{dir}^T \phi(r) + b), \quad (7)$$

bu yerda $\phi(r)$ — radiali bazis funktsiyalariga asoslangan xususiyat vektori, w_{dist} va b esa bias parametridir. Ushbu o'rganilgan taqsimotdan aniq namunalar olish uchun Inverse Transform Sampling ishlatiladi. Kumulativ taqsimot funksiyasi (CDF) quyidagicha hosil qilinadi:

$$CDF(r) = \int_0^r P(y = 1 | \rho) d\rho. \quad (8)$$

Ma'lum bir nuqta $\tau \in [0, CDF(R_{max})]$ oraliqda bir xillik bilan olinadi, va mos qadam uzunligi r $CDF(r) = \tau$ yechimi orqali aniqlanadi. Ushbu modellarning ishga tushirilishi uchun, har bir tugunning birinchi k baholari qat'iy heuristik jadval bo'yicha amalga oshiriladi: ota tugunning momentumu, chegaralarning geometrik markazi va diagonal ekstremumlar namunalanadi. Keyinchalik, modellarga mahalliy landshaft topologiyasiga moslashish uchun har p iteratsiyadan so'ng qayta o'qitish amalga oshiriladi.

2.4 Tadqiqot va Ekspluatatsiyani Muvozanatlashtirish uchun Oyna Masshtablash

Uzluksiz qidiruv fazolarida qaror daraxtlarining muhim jihatlaridan biri — daraxt chuqurligi ortib borgan sari qadam uzunligini to'g'ri boshqarishdir. Diskret harakatlarga ega daraxtlardan farqli ravishda, uzluksiz fazolarda har bir harakatning kattaligi doimiy bo'lsa, bu muammoli holatlarga olib kelishi mumkin. Xususan, chuqur tugunlar istiqbolli hududlar atrofida lokal aniqlashtirishni amalga oshirishi kerak, sayoz tugunlar esa kengroq global tadqiqotga imkon berishi lozim. Boshqacha aytganda, qidiruv daraxti chuqurlashgan sari algoritm eksploratsiya radiusini asta-sekin kamaytirib, optimumlar yaqinida aniqroq qidiruvga o'tishi kerak.

Ushbu muammoni hal qilish uchun biz tugun chuqurligiga bog'liq masshtablash sxemasini joriy qilamiz. Bu sxema namuna olish oynasi o'lchamini (r_{max} bilan belgilanadi) tugun chuqurligi funksiyasi sifatida adaptiv ravishda kichraytiradi (Rasm 2c). Normalizatsiyalangan parametrlar $x \in [0, 1]^d$ uchun



namuna olish radiusiga qo'llaniladigan masshtablash koeffitsienti quyidagicha aniqlanadi:

$$s(\text{depth}) = b \cdot \exp(-a \cdot \text{depth}^2) \quad (9)$$

bu

yerda:

$b \in (0, 0.5]$ — boshlang'ich masshtablash kattaligi bo'lib, odatda 0.5 ga teng qilib olinadi,

$a > 0$ — chuqurlik bo'yicha so'nish tezligini boshqaruvchi parametr, depth — daraxtdagi joriy tugunning chuqurligi.

Ushbu masshtablash mexanizmi yuqori chuqurlikdagi tugunlarning kichikroq hududlarda namuna olishini ta'minlaydi va shu orqali global qidiruvdan lokal qidiruvga bosqichma-bosqich o'tishni amalga oshiradi. Shuni ta'kidlash kerakki, mos masshtablash xatti-harakati vazifaga bog'liq bo'lishi mumkin.

Yondashuvni yanada barqaror qilish maqsadida, biz odatda bir nechta daraxtlarni parallel ravishda ishga tushiramiz. Har bir daraxt turli a parametri bilan boshlang'ich holatga keltiriladi; bu parametr odatda $[0.05, 0.1]$ oralig'idan tanlanadi. b parametri qidiruv oynasi erisha oladigan maksimal radiusni belgilaydi. Ushbu daraxtlar global va lokal to'plamlarga guruhlanadi va maxsus almashinish protokoli yordamida daraxtning qachon keng eksploratsiyadan nozik ekspluatatsiyaga o'tishi aniqlanadi. Ushbu almashinish mexanizmi va to'plamlar strategiyasi keyingi bo'limda batafsil muhokama qilinadi.

2.5 Daraxtlarni ierarxik paketlash

Uzluksiz va yuqori o'lchamli fazolarda MCTS qo'llashdagi muhim muammolardan biri shundan iboratki, qidiruv jarayoni bitta boshlang'ich nuqtadan boshlanib, ildiz tugundan tarmoqlanadi. Yagona daraxt ildiz atrofidagi lokal hududni samarali tadqiq qila olsa va ko'pincha yaqin yechimga yaqinlashsa-da, murakkab va noxiziq (non-konveks) landshaftlarda bu strategiya yetarli darajada samarali bo'lmaydi. Qidiruv jarayoni haddan tashqari lokalizatsiyalanib, suboptimal hududlarda "tiqilib qolish" ehtimoli yuqori bo'ladi. Bunday tuzoqlardan chiqish



uchun daraxt juda ko'p sonli shoxlarni o'stirishi kerak bo'ladi, bu esa hisoblash xarajatlarining keskin oshishiga va yaqinlashuvning sekinlashishiga olib keladi.

Ushbu lokal cheklovni bartaraf etish maqsadida biz evolyutsion algoritmlar va metaevristikalarga xos bo'lgan populyatsiyaga asoslangan yondashuvdan ilhomlangan strategiyani qabul qilamiz. Aniqrog'i, parallel ishlovchi daraxtlar to'plamini joriy qilamiz; bu to'plam global daraxtlar paketi deb ataladi (Rasm 2d). Ushbu paketdagi har bir daraxt qidiruv fazosining turli nuqtalarida Latin Hypercube Sampling (LHS) yordamida boshlang'ich holatga keltiriladi va unga oldindan belgilangan oraliqdan tasodifiy tanlangan masshtablash parametri a biriktiriladi. Bunday ansambl global qidiruvning xilma-xilligini ta'minlaydi. Global daraxtlarning muhim xususiyatlaridan biri shundaki, eksploratsiya konstantasi C daraxtning yaxshilanish ko'rsatishiga qarab, bazaviy qat'iy qiymat va juda katta qiymat o'rtasida almashib turadi (Qo'shimcha Rasm 1 ga qarang). Bundan tashqari, global daraxtlar maksimal chuqurlik bilan cheklanadi, biroq ularning kengligi, ya'ni tarmoqlanish darajasi cheklanmaydi. Shu bilan birga, daraxtning o'sishi shartli hisoblanadi: daraxt faqat obyektiv funksiya qiymatlarini muntazam ravishda yaxshilab borayotgan taqdirdagina kengayishiga ruxsat etiladi. Global qidiruv bosqichi yakunlangach, daraxtlardan obyektiv funksiya bo'yicha eng yaxshi natija ko'rsatgan cheklangan sonli nomzodlar ajratib olinadi. Ushbu nomzodlar keyingi bosqich — lokal paket uchun urug' vazifasini bajaradi. Har bir lokal daraxt o'zining mos global ajdodidan masshtablash parametri $a_{ref,i}$ hamda yakuniy oyna o'lchami $b_{ref,i}$ ni meros qilib oladi (9-tenglamaga muvofiq, bu yerda $b_{ref,i} = S_{final,i}$).

Global bosqichdan farqli ravishda, lokal paketdagi i -chi daraxt uchun oyna o'lchami $b_{ref,i}$ keyingi lokal bosqichlarda obyektiv funksiya qiymatining yaxshilanishiga qarab adaptiv ravishda yangilanadi. Agar joriy bosqichda yaxshilanish kuzatilsa, yangi oyna o'lchami quyidagicha aniqlanadi:

$$b_{new,i} = b_{prev,i} \left(\frac{f_{prev,i} - f_{curr,i} + \varepsilon}{f_{prev,i} - f_{target,i} + \varepsilon} \right)^\alpha \text{ agar } f_{curr,i} < f_{prev,i} \text{ bo'lsa, (10)}$$

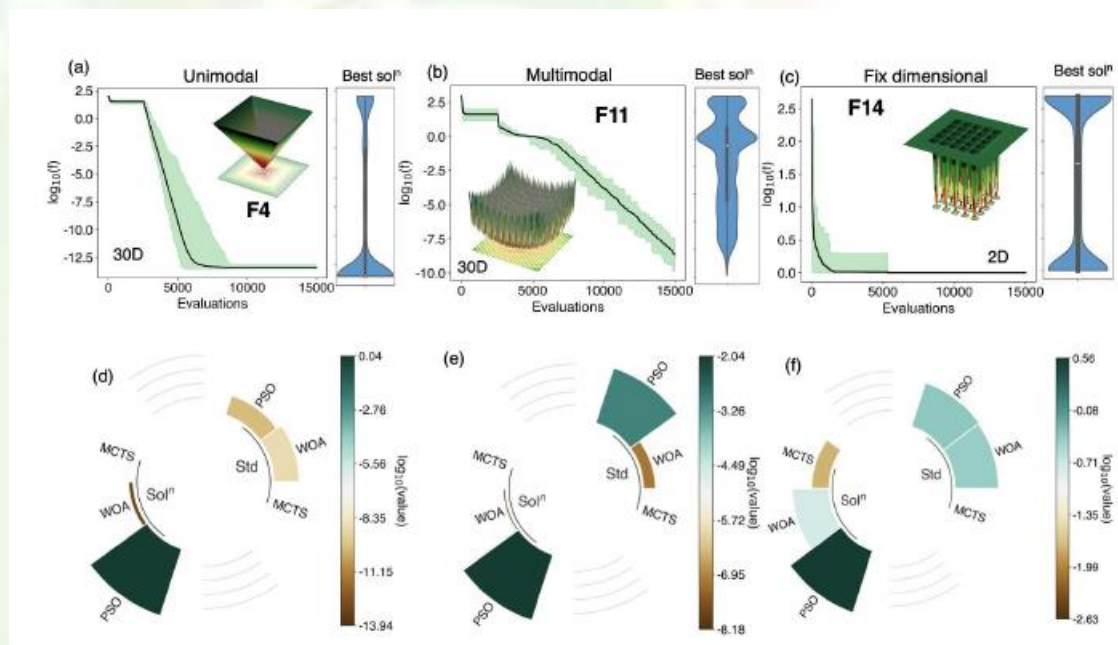
$$\text{aks holda, ya'ni yaxshilanish bo'lmasa, } b_{new,i} = b_{prev,i} \cdot \delta. \text{ (11)}$$

Bu

yerda:

$f_{curr,i}$ — i-chi daraxt uchun joriy eng yaxshi obyektiv funksiya qiymati,
 $f_{prev,i}$ — shu daraxt uchun oldingi eng yaxshi qiymat,
 $f_{target,i}$ — maqsad obyektiv qiymat,
 α — yaxshilanishga sezgirlikni boshqaruvchi daraja ko'rsatkichi,
 ϵ — nolga bo'lishni oldini oluvchi kichik musbat konstanta,
 $\delta \in (0, 1)$ — yaxshilanish bo'lmaganda qo'llaniladigan so'nish koeffitsienti.

Ushbu adaptiv oyna mexanizmi lokal paket rivojlanishi davomida har bir lokal daraxt uchun ruxsat etilgan qidiruv hududini bosqichma-bosqich toraytiradi (Rasm 2d), natijada juda nozik va aniqlashtirilgan ekspluatatsiya amalga oshiriladi. Global bosqichdan farqli ravishda, lokal daraxtlarning chuqurligi cheklanmaydi va ular obyektiv funksiya qiymatini yaxshilab borayotgan ekan, yanada chuqurroq o'sishda davom etishi mumkin.



Rasm 3: Sinov funksiyalarida biz taklif etgan MCTS-ga asoslangan optimizatsiya usulining samaradorligini taqqoslash. (a–c) 30 ta mustaqil ishga tushirish uchun yaqinlashuv egri chiziqlari keltirilgan bo'lib, bunda obyektiv funksiya f ning logarifmi baholashlar soniga bog'liq holda tasvirlangan. Shuningdek, eng yaxshi yechimga erishilgan qidiruv jarayonidagi namuna olish taqsimoti ham ko'rsatilgan. Uchta benchmark funksiya mos ravishda: unimodal (F4), multimodal



(F11) va qat'iy o'lchamli (F14) funksiyalardir. (d–f) (a–c) da ko'rsatilgan funksiyalar uchun c-MCTS, WOA va PSO algoritmlarining 30 ta mustaqil sinovdagi eng yaxshi topilgan yechimlari va ularning standart og'ishlari bo'yicha ishlash samaradorligi taqqoslangan.

Ekspluatatsiyani kuchaytirish maqsadida eksploratsiya konstantasi juda kichik qiymatga o'rnatiladi, natijada har bir lokal daraxt gradientdan mustaqil lokal optimizatorga aylanadi va istiqbolli hududlarni nozik aniqlashtirishga yo'naltiriladi (Qo'shimcha Rasm 1d–k ga qarang). Lokal paket optimizatsiyasi bir nechta raundlar davomida takrorlanadi. Har bir raunddan so'ng yetarli darajada natija bermayotgan daraxtlar shartli ravishda kesib tashlanadi va faqat obyektiv funksiya qiymatini muntazam yaxshilab borayotgan daraxtlargina saqlab qolinadi.

Har bir bosqichda, berilgan lokal daraxt uchun, oldingi bosqichda topilgan eng yaxshi nomzod yangi ildiz tugun sifatida qabul qilinadi. Bu yondashuv qidiruv jarayonining uzluksizligini ta'minlaydi va yuqori sifatli yechimlar haqidagi axborotni saqlab qoladi. Muhimi shundaki, kesish jarayonidan keyin ham paketda kamida bitta eng yaxshi ishlayotgan daraxt doimo saqlab qolinadi va keyingi raundga meros qilib o'tkaziladi. Shu tariqa, butun qidiruv jarayoni davomida barqaror va uzluksiz ekspluatatsiya yo'li ta'minlanadi.

3 Natijalar. Yuqori o'lchamli sinov funksiyalarida samaradorlikni baholash

Benchmark (sinov) funksiyalari [43, 44, 45] optimizatsiya algoritmlarini baholash uchun keng qo'llaniladigan sun'iy matematik landshaftlardir. Ular unimodal, multimodal va qat'iy o'lchamli multimodal kabi turli landshaft turlariga ega bo'lib, algoritmlarni yaqinlashuv tezligi, aniqlik, barqarorlik, masshtablanuvchanlik hamda lokal minimumlar va shovqinga sezgirlik kabi xususiyatlar bo'yicha sinovdan o'tkazish uchun mo'ljallangan.

Unimodal funksiyalar (masalan, Sphere, Rosenbrock, Step, Schwefel 1.2) faqat bitta global optimumga ega bo'lib, algoritmning qanchalik tez va ishonchli tarzda yaqinlashishini tekshiradi. Multimodal funksiyalar (masalan, Rastrigin,



Ackley, Griewank) esa muntazam yoki nomuntazam joylashgan ko'plab lokal minimumlarni o'z ichiga oladi. Bunday landshaftlar eksploratsiya va ekspluatatsiya o'rtasidagi muvozanatni sinovdan o'tkazadi, va o'lchamlilik ortishi bilan masalaning murakkabligi yanada kuchayadi. Qat'iy o'lchamli benchmark funksiyalar (masalan, Shekel's Foxholes va shunga o'xshashlar) esa o'lcham soni oldindan belgilangan bo'lib, algoritmlarning murakkab, ammo cheklangan o'lchamli landshaftlarda qanday ishlashini baholashga xizmat qiladi.

1-jadvalda unimodal (F1–F7), multimodal (F8–F13) va qat'iy o'lchamli (F14–F23) toifalarga guruhlangan benchmark funksiyalar uchun olingan optimizatsiya natijalari taqqoslangan. Har bir funksiya uchun o'rtacha (ave) obyektiv qiymatlar keltirilgan bo'lib, eng kichik o'rtacha qiymat tegishli funksiya bo'yicha eng yaxshi ishlashni ifodalaydi.

F	MCTS				WOA		PSO		Random	
	Logistic		Hypersphere		ave	std	ave	std	ave	std
	ave	std	ave	std						
Unimodal (UM)										
F1	0.00000E+00	0.00000E+00	1.71678E-22	7.07787E-22	1.41E-30	4.91E-30	0.000136	0.000202	4.26E+04	3.08E+03
F2	3.35265E-05	2.04925E-05	1.73077E+00	8.99247E+00	1.06E-21	2.39E-21	0.042144	0.045421	1.28E+06	2.37E+06
F3	1.69045E-08	1.44483E-08	1.91803E+00	1.36430E+00	5.39E-07	2.93E-06	70.12562	22.11924	4.91E+04	5.85E+03
F4	3.64745E-14	1.14179E-14	3.03847E+00	2.48030E+00	0.072581	0.39747	1.086481	0.317039	7.17E+01	2.60E+00
F5	2.73319E+01	1.06457E-01	1.19554E+02	2.96610E+02	27.86558	0.763626	96.71832	60.11559	1.03E+08	1.59E+07
F6	5.89632E-07	1.00714E-06	3.68666E-01	1.01298E+00	3.116266	0.532429	0.000102	8.28E-05	4.16E+04	3.70E+03
F7	5.43754E-04	4.35580E-04	9.51802E-02	3.43504E-02	0.001425	0.001149	0.122854	0.044957	4.60E+01	7.16E+00
Multimodal (MM)										
F8	-7.98161E+03	8.17351E+02	-7.62086E+03	5.08047E+02	-5080.76	695.7968	-4841.29	1152.814	-4.16E+03	2.46E+02
F9	1.42618E+00	7.68023E+00	1.36873E+02	4.22360E+01	0	0	46.70423	11.62938	3.42E+02	1.27E+01
F10	1.42109E-15	2.69007E-15	1.27711E+00	6.91224E-01	7.4043	9.897572	0.276015	0.50901	1.98E+01	1.64E-01
F11	6.63646E-09	9.64278E-09	8.04556E-03	8.61277E-03	0.000289	0.001586	0.009215	0.007724	3.84E+02	3.12E+01
F12	1.04244E-05	9.37367E-06	1.20933E+00	1.62317E+00	0.339676	0.214864	0.006917	0.026301	1.67E+08	4.17E+07
F13	6.34632E-03	8.94680E-03	4.09345E-03	5.30989E-03	1.889015	0.266088	0.006675	0.008907	4.06E+08	8.20E+07
Fixed-dimensional (FD) / Composite										
F14	9.98004E-01	6.00428E-11	1.031138E+00	1.784333E-01	2.111973	2.498594	3.627168	2.560828	1.0972	0.2789
F15	4.17900E-04	2.80031E-04	1.00653E-03	3.03070E-04	0.000572	0.000324	0.000577	0.000222	0.00242	0.00100
F16	-1.03163E+00	2.220446E-16	-1.03163E+00	2.22045E-16	-1.03163	4.2E-07	-1.03163	6.25E-16	-1.02502	0.00598
F17	3.97887E-01	0.000000E+00	3.97887E-01	0.000000E+00	0.397914	2.7E-05	0.397887	0	0.40191	0.00444
F18	3.00000E+00	1.52550E-15	3.00000E+00	1.20533E-15	3	4.22E-15	3	1.33E-15	3.09997	0.08394
F19	-3.86278E+00	1.42302E-13	-3.86278E+00	1.33227E-15	-3.85616	0.002706	-3.86278	2.58E-15	-3.85545	0.00531
F20	-3.32237E+00	9.93810E-12	-3.32237E+00	9.24445E-16	-2.98105	0.376653	-3.26634	0.060516	-3.06146	0.08211
F21	-1.01532E+01	4.12262E-08	-8.96974E+00	2.14523E+00	-7.04918	3.629551	-6.8651	3.019644	-3.54978	0.98577
F22	-1.04029E+01	4.66669E-07	-1.04029E+01	4.72028E-11	-8.18178	3.829202	-8.45653	3.087094	-3.53778	0.99651
F23	-1.05364E+01	1.14046E-08	-1.05364E+01	2.76303E-10	-9.34238	2.414737	-9.95291	1.782786	-3.17910	0.83388

Six-Hump Camelback, Goldstein–Price, Hartmann 3D/6D hamda Shekel 5/7/10 kabi funksiyalar past o'lchamli (2–6) fazolarda aniqlangan bo'lsa-da, juda zich va "xavfli" landshaftlarga ega bo'lib, aldamchi tuzilmalar sababli nozik, yuqori



aniqlikdagi qidiruv xatti-harakatlarini sinovdan o'tkazadi. Benchmark funksiyalar standartlashtirilgan baholash muhitini ta'minlaydi va bu quyidagi imkoniyatlarni beradi: (i) turli usullarni bir xil sharoitda taqqoslash, (ii) algoritmlarning turli landshaft turlaridagi kuchli va zaif tomonlarini aniqlash, (iii) natijalarning qayta tiklanishi va umumlashuvini ta'minlash, hamda (iv) algoritm xatti-harakatini tahlil qilish (masalan, yaqinlashuv egri chiziqlari, mustaqil ishga tushirishlar bo'yicha xatolik dispersiyasi).

Biz taklif etgan MCTS qaror-daraxtiga asoslangan algoritm jami 23 ta benchmark funksiya (1-jadval) yordamida baholandi. Ushbu funksiyalar unimodal (UM), multimodal (MM) va qat'iy o'lchamli (FD) toifalarni qamrab oladi. F1–F7 funksiyalar unimodal va masshtablanuvchi bo'lib (masalan, Sphere, Rosenbrock), 30 o'lchamli qidiruv fazosida yagona global optimumga ega va yaqinlashuv tezligi hamda ekspluatatsiya qobiliyatini baholash uchun qulaydir. F8–F13 funksiyalar ham 30 o'lchamli bo'lib, ko'plab lokal minimumlarga ega multimodal landshaftlarni ifodalaydi (masalan, Rastrigin, Ackley, Griewank) va global tadqiqot hamda barqarorlikni sinovdan o'tkazadi. F14–F23 esa qat'iy o'lchamli (odatda 2–6 o'lchamli) multimodal funksiyalardir. Har bir funksiyaning matematik ifodasi Qo'shimcha 1-jadvalda keltirilgan.

3-rasmda taklif etilgan algoritmning uchta vakillik funksiyada — F4 (unimodal), F11 (multimodal) va F14 (qat'iy o'lchamli) — 30 ta mustaqil sinov asosida standart metaevristikalar, ya'ni Whale Optimization Algorithm (WOA) va Particle Swarm Optimization (PSO) bilan taqqoslangan ishlash samaradorligi ko'rsatilgan. F4 va F11 funksiyalari uchun algoritm mos ravishda 10^{-14} va 10^{-9} tartibidagi sonli aniqlikka erishadi, F14 funksiyasi uchun esa global optimumning aniq qiymatiga (taxminan 0.998) barqaror ravishda yetadi. Bularning barchasi yaqinlashuv yaqinida juda kichik dispersiya bilan amalga oshiriladi.

Eng yaxshi yechim topilgan alohida ishga tushirish uchun namuna olish taqsimotiga qaralsa (3-rasm a–c), unimodal funksiya holatida qidiruv dastlab fazoni toraytirishga bir qism namunalarni sarflaydi, keyin esa iteratsiyalarning asosiy qismi



yuqori sonli aniqlikka erishishga yo'naltiriladi. Bu holat past qiymatlar hududida zich namuna taqsimoti bilan yaqqol namoyon bo'ladi.

Multimodal funksiya uchun esa boshlang'ich namuna olish unimodal holatga o'xshash bo'lsa-da, eksploratsiya butun jarayon davomida nisbatan bir tekis taqsimlangan holda saqlanadi va faqat yaqinlashuv bosqichida keskin kamayadi. Qat'iy o'lchamli funksiyalar uchun algoritmning javobi deyarli ikkilik xarakterga ega: dastlab imkoniy yechimlarni izlash uchun ma'lum iteratsiyalar sarflanadi, istiqbolli hududlar aniqlangach esa qidiruv aynan shu hududlarga yo'naltiriladi va funksiya morfologiyasida aks etgan holda nozik sozlash bosqichi boshlanadi.

3-rasm (d–f) da ko'rsatilganidek, taklif etilgan algoritm nafaqat WOA va PSO ga nisbatan yaxshiroq yechimlarga erishadi, balki mustaqil ishga tushirishlar bo'yicha ancha kichik dispersiyani ham namoyon etadi. Barcha funksiyalar bo'yicha qo'shimcha taqqoslashlar 1-jadvalda keltirilgan. Masalan, F1 funksiyasi uchun Logistic MCTS mutlaq nol qiymatga (0.0) erishadi, bu esa sonli aniqlik chegaralaridan ham yuqori bo'lib, Hypersfera bazaviy usulidan (10^{-22}) ustun natijani ko'rsatadi. F2 funksiyasi uchun esa sonli aniqlik jihatidan WOA ustunlik qiladi. F3 holatida MCTS WOA ga nisbatan yaxshiroq natija beradi (1.69×10^{-8} ga qarshi 5.39×10^{-7}), bu algoritmning nozik sozlash qobiliyatini ko'rsatadi. F5 va F7 funksiyalarida eng yaxshi natijalar MCTS tomonidan olinadi. F8–F23 oralig'idagi funksiyalarda esa MCTS deyarli barcha holatlarda eng yaxshi ishlashni namoyon etadi.

Alohida e'tiborga loyiq natija Schwefel funksiyasi (F8) uchun kuzatiladi: MCTS qidiruvi o'rtacha -7981 qiymatiga yetadi, bu esa Hypersfera bazaviy usuli va boshqa metaevristikalarda topilgan -7620 qiymatidan ancha pastdir. Bu holat algoritmning chuqur va aldanchi minimumlardan chiqib keta olish qobiliyatini ko'rsatadi. Istisno sifatida F9 (Rastrigin) funksiyasini keltirish mumkin, bunda WOA mutlaq 0 ga erishadi, MCTS esa 1.42 qiymatida to'xtaydi. Bu ehtimol Rastrigin funksiyasining panjarasimon muntazam tuzilishi WOA ning o'ziga xos qidiruv mexanizmlariga qulayroq bo'lgani bilan izohlanadi. Qat'iy o'lchamli funksiyalar



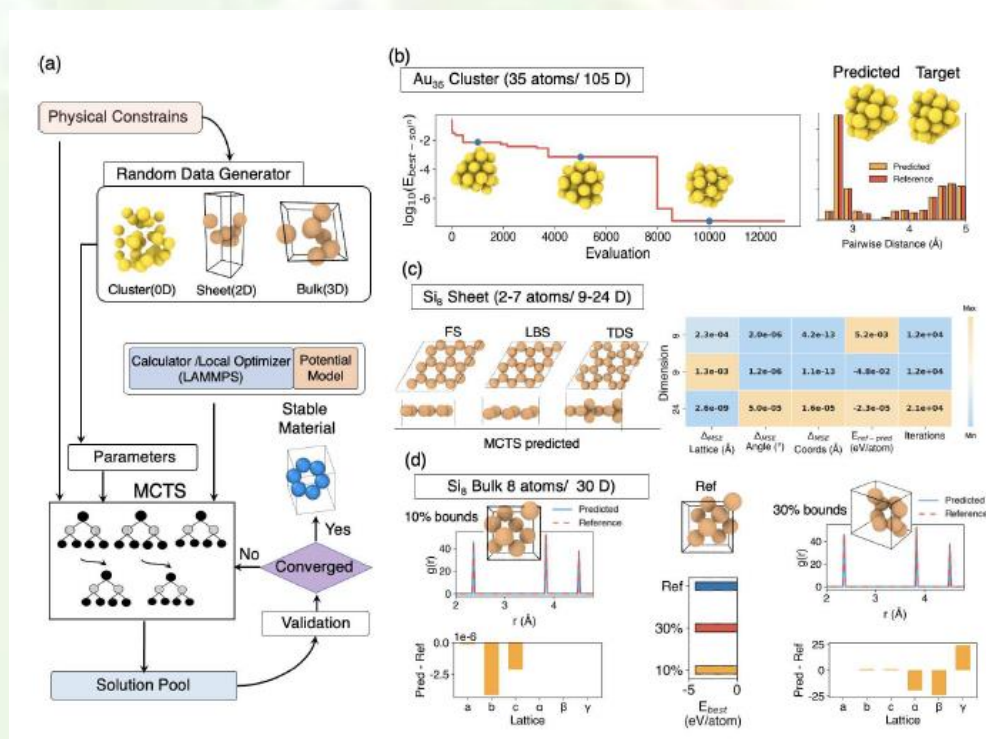
(F14–F23) uchun esa MCTS barcha sinovlarda sonli aniqlik darajasida aniq global yechimga erishadi.

Ushbu natijalar, shuningdek, biz qoʻllagan ikkita namuna olish yadrosi — izotrop Hypersfera namuna olishi va yoʻnalishli Logistik surrogate — oʻrtasidagi sifat jihatidan farqni ham koʻrsatadi. Izotrop namuna olish shovqinli landshaftlarda barqaror zaxira mexanizmi vazifasini bajarsa, yoʻnalishli Logistik surrogate hatto analitik gradientlar mavjud boʻlmagan sharoitda ham lokal topologiyani samarali oʻrganadi. F1 dagi mukammal yaqinlashuv va F8 dagi chuqur minimumlar orasida sakrash qobiliyati shuni koʻrsatadiki, Logistik model mos ravishda qayta oʻqitilganda eksploratsiya xarajati va yoʻnalish aniqligi oʻrtasidagi muvozanatni yoʻqotmasdan, 23 ta benchmarkdan 21 tasida izotrop yondashuvga teng yoki undan ustun natija beradi.

Bu benchmarklardagi ishlash tendensiyalari 2-boʻlimda kiritilgan algoritmik komponentlar bilan bevosita bogʻliq. Har bir tugunda qoʻllaniladigan yoʻnalishli logistik surrogate (2.3-boʻlim) obyektiv funksiyani tarixan yaxshilagan yoʻnalishlarga namuna olishni ogʻdirish orqali samarasiz rollout'lar sonini kamaytiradi. Bu holat global optimum yaqinida namunalar zichlashuvida yaqqol koʻrinadi (Qoʻshimcha rasm 1.d–k). Chuqurlikka bogʻliq oyna masshtablashi (2.4-boʻlim) algoritmnining dastlab keng global tadqiqotni saqlab, keyinchalik yuqori aniqlikdagi ekspluatatsiyaga oʻta olishini tushuntiradi, bu F4 va F14 funksiyalarida aniq namoyon boʻladi (3-rasm a–c). Nihoyat, global–lokal daraxtlar populyatsiyasi (2.5-boʻlim) mustaqil ishga tushirishlar boʻyicha past dispersiyaning asosiy sababidir: turli daraxtlar turli minimum havzalarini tadqiq qiladi, kesish va almashinish protokoli esa yuqori qiymatli hududlarni topgan daraxtlarni ustuvor ravishda saqlab qoladi. Ushbu komponentlar birgalikda algoritmnining silliq unimodal landshaftlarda raqobatbardosh boʻlishini, murakkab multimodal va qatʼiy oʻlchamli landshaftlarda esa yaqqol ustunlikka erishishini taʼminlaydi.

Shuni taʼkidlash kerakki, benchmark sinov funksiyalari real optimizatsiya muammolarini taqlid qilish uchun yaratilgan boʻlsa-da, ular amaliy masalalarda

uchraydigan obyektiv landshaftlarning to'liq murakkabligini aks ettira olmaydi. Masalan, nanoo'lchamli materiallarni modellashtirish sohalarida — kristall tuzilmani bashorat qilish yoki atomistik kuch maydoni modellarini ishlab chiqishda — obyektiv funksiyalar odatda noxiziqli, silliq bo'lmagan energiya landshaftlariga ega bo'lib, o'lchamlilikka kuchli bog'liq va kondensirlangan modda fizikasi bilan cheklangan bo'ladi. Bunday real muammolar simmetriya cheklovlari, kimyoviy moslik va termodinamik barqarorlik kabi qo'shimcha murakkabliklarni ham o'z ichiga oladi, bu esa optimizatsiya vazifasini idealizatsiyalangan benchmark funksiyalarga qaraganda ancha qiyinlashtiradi. Keyingi bo'limlarda biz taklif etilgan optimizatsiya algoritmining aynan shunday fizik cheklovlarga ega real muammolarga qo'llanishini namoyish etamiz. Bunda global optimumni aniqlash aniqligi bilan bir qatorda, masala sohasiga xos fizik cheklovlarga rioya qilish qobiliyati ham standartlashtirilgan mezonlar orqali baholanadi.



Rasm 4: MCTS optimallashtirish algoritmining kristall tuzilma optimallashtirishida turli miqyoslarda qo'llanilishi. (a) Kristall tuzilmani bashoratlash tizimida algoritmdan foydalanishning asosiy ish jarayoni: fizik cheklovlarni boshqarish moduli, fizik jihatdan yaroqli konfiguratsiyalarni hosil qiluvchi va tuzilma hamda parametrik tasvirlar o'rtasida o'zgartirishni amalga



oshiruvchi generator, optimallashtirish algoritmi hamda xossa baholovchi yoki hisoblovchi moduldan iborat. (b) 35 ta atomdan iborat (105 o'lchamli fazo) oltin (Au) nanoklasterining global minimum holatini bashoratlashga qo'llanishi; bunda energiya barqarorligi tahlil qilinadi va yakuniy konfiguratsiya juft atomlararo masofalar gistogrammasi orqali etalon tuzilma bilan solishtiriladi. (c) Qatlamli ikki o'lchamli materiallarga qo'llanishi: ma'lum strukturaviy xususiyatlarga ega bo'lgan kremniyning (silicen) metastabil polimorfini topishga yo'naltirilgan tuzilma-asosli qidiruv. MCTS tomonidan bashorat qilingan elementar katak hamda turli polimorflar bo'yicha bashorat aniqligi keltirilgan. (d) Energiya asosidagi maqsad funksiyasi yordamida amorf, yuqori energiyali boshlang'ich konfiguratsiyadan boshlab, kremniyning (kubik olmos) davriy hajmiy (3D material) asosiy holat tuzilmasini optimallashtirish samaradorligini baholash. Yakuniy olingan konfiguratsiya, etalon konfiguratsiya va ularning radial taqsimot funksiyasi (RDF) orqali strukturaviy solishtirilishi qidiruv fazosining turli chegaralari (10% va 30%) uchun ko'rsatilgan.

Xulosa

Ushbu ish yuqori o'lchamli hisoblashga asoslangan dizayn va global optimizatsiya masalalarida **fizikaga tayangan Monte Karlo Daraxt Qidiruvi (MCTS)** yondashuvining samaradorligini ko'rsatadi. Taklif etilgan usul uzluksiz va yuqori o'lchamli dizayn fazolarida yo'naltirilgan namuna olish, logistik surrogat modellari va ierarxik daraxt paketlash mexanizmlari orqali eksploratsiya va ekspluatatsiyani optimal tarzda muvozanatlashtiradi.

Sinov funksiyalari va real ilmiy masalalarda, jumladan kristall tuzilma dizayni, atomlararo potensial modellar va cheklangan muhandislik dizayn vazifalarida usul yuqori aniqlik, barqarorlik va hisoblash samaradorligini namoyish etdi. Shu bilan birga, metod fizik cheklovlarni saqlagan holda global va lokal optimumlarga masshtablanuvchan yondashuvni ta'minlaydi.

Natijada, bu ish **uzluksiz "qora quti" optimizatsiya va fizikaga asoslangan hisoblashga asoslangan dizayn** jarayonlarini integratsiya qiluvchi yangi



paradigmani taklif etadi, bu ilmiy va muhandislik optimizatsiya masalalarida samarali qo‘llanish imkoniyatini yaratadi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR RO‘YXATI:

- [1] Gr’egoire Allaire. *Numerical analysis and optimization: an introduction to mathematical modelling and numerical simulation*. OUP Oxford, 2007.
- [2] Alex Zunger. Inverse design in search of materials with target functionalities. *Nature Reviews Chemistry*, 2(4):0121, 2018.
- [3] Artem R Oganov, Andriy O Lyakhov, and Mario Valle. How evolutionary crystal structure prediction works — and why. *Accounts of Chemical Research*, 44(3):227–237, 2011.
- [4] Jackelyn A Martinez, Dundar E Yilmaz, Tao Liang, Susan B Sinnott, and Simon R Phillpot. Fitting empirical potentials: Challenges and methodologies. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 17(6):263–270, 2013.
- [5] Ji-Hong Zhu, Wei-Hong Zhang, and Liang Xia. Topology optimization in aircraft and aerospace structures design. *Archives of computational methods in engineering*, 23(4):595–622, 2016.
- [6] Oliver Hennigh, Susheela Narasimhan, Mohammad Amin Nabian, Akshay Subramaniam, Kaustubh Tangsali, Zhiwei Fang, Max Rietmann, Wonmin Byeon, and Sanjay Choudhry. Nvidia simnet™: An aiaccelerated multi-physics simulation framework. In *International conference on computational science*, pages 447–461. Springer, 2021.
- [7] Kei Terayama, Masato Sumita, Ryo Tamura, and Koji Tsuda. Black-box optimization for automated



discovery. *Accounts of Chemical Research*, 54(6):1334–1346, 2021.

[8] Donald R Jones, Matthias Schonlau, and William J Welch. Efficient global optimization of expensive

black-box functions. *Journal of Global optimization*, 13(4):455–492, 1998.

[9] Jean Pannetier, J Bassas-Alsina, Juan Rodriguez-Carvajal, and Vincent Caignaert. Prediction of crystal

structures from crystal chemistry rules by simulated annealing. *Nature*, 346(6282):343–345, 1990.

[10] Emile HL Aarts et al. *Simulated annealing: Theory and applications*. Reidel, 1987.

[11] Stefan Goedecker. Minima hopping: An efficient search method for the global minimum of the potential

energy surface of complex molecular systems. *The Journal of chemical physics*, 120(21):9911–9917, 2004.