Metody numeryczne
Sprawozdanie z ćwiczeń laboratoryjnych nr 10

Poszukiwanie minimum wartości funkcji metodą symulowanego wyżarzania

Jan Zajda
Informatyka Stosowana
WFiIS
Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie
16 maja 2020

1. Wstęp teoretyczny

Jedną z metod znajdowania minimum funkcji jest symulowane wyżarzanie, w swoim działaniu bazujące na pewnych zjawiskach zachodzących w termodynamice. Posługujemy się w niej algorytmem typu Monte Carlo, którego istotną różnicą w stosunku do innych iteracyjnych algorytmów tego typu jest możliwość wyboru gorszego rozwiązania. Metoda ta jest wykorszystywana w szczególnie trudnych problemach, choć sam algorytm jest relatywnie prosty.

Na początku wybieramy dla n wędrowców położenie początkowe oraz ustalamy parametr - temperaturę na wartość $T = T_{max}$. Następnie w każdej iteracji pozwalamy wędrowcom zrobić określoną liczbę kroków o losowych wartościach. Dbamy przy tym, aby wędrowcy nie wyszli poza obszar, który nas interesuje. Przy każdym kroku, jeśli wędrowiec znajdzie się w punkcie o mniejszej wartości niż poprzednio to akceptujemy nową pozycję, a jeśli nie to akceptujemy ją z pewnym zależnym od temperatury prawdopodobieństwem zadanym przez rozkład Boltzmanna, które będziemy obliczać jako:

$$exp(-\frac{p' - p}{T}), \tag{1}$$

gdzie p' to nasze nowe położenie, p to stare położenie.

Po każdej iteracji algorytmu zmniejszamy wartość temperatury T, w naszym przypadku wg wzoru:

$$T = \frac{T_{max}}{2^{i_{IT}}},$$

gdzie i_{IT} jest iteracją, którą aktualnie wykonujemy.
Spowoduje to, że zgodnie ze wzorem (1), w każdej iteracji zmniejsza nam się prawdopodobieństwo akceptacji gorszej pozycji.

2. Zadanie do wykonania

2.1. Opis problemu

W naszym zadaniu poszukujemy minimum następującej funkcji w obszarze $[-10, 10] \times [-10, 10]$:

$$f(x, y) = sin(x)sin(y) - exp(-(x + \frac{\pi}{2})^2 - (y - \frac{\pi}{2})^2).$$

Przyjmujemy następujące dane:

Temperatura początkowa: $T_{max} = 10$
Liczba iteracji: $IT = 20$
Liczba wędrowców: $n = 200$
Położenie początkowe dla wszystkich wędrowców: $(x^0, y^0) = (5, 5)$
Liczba kroków dla każdego wędrowca w jednej iteracji: $k = 100$

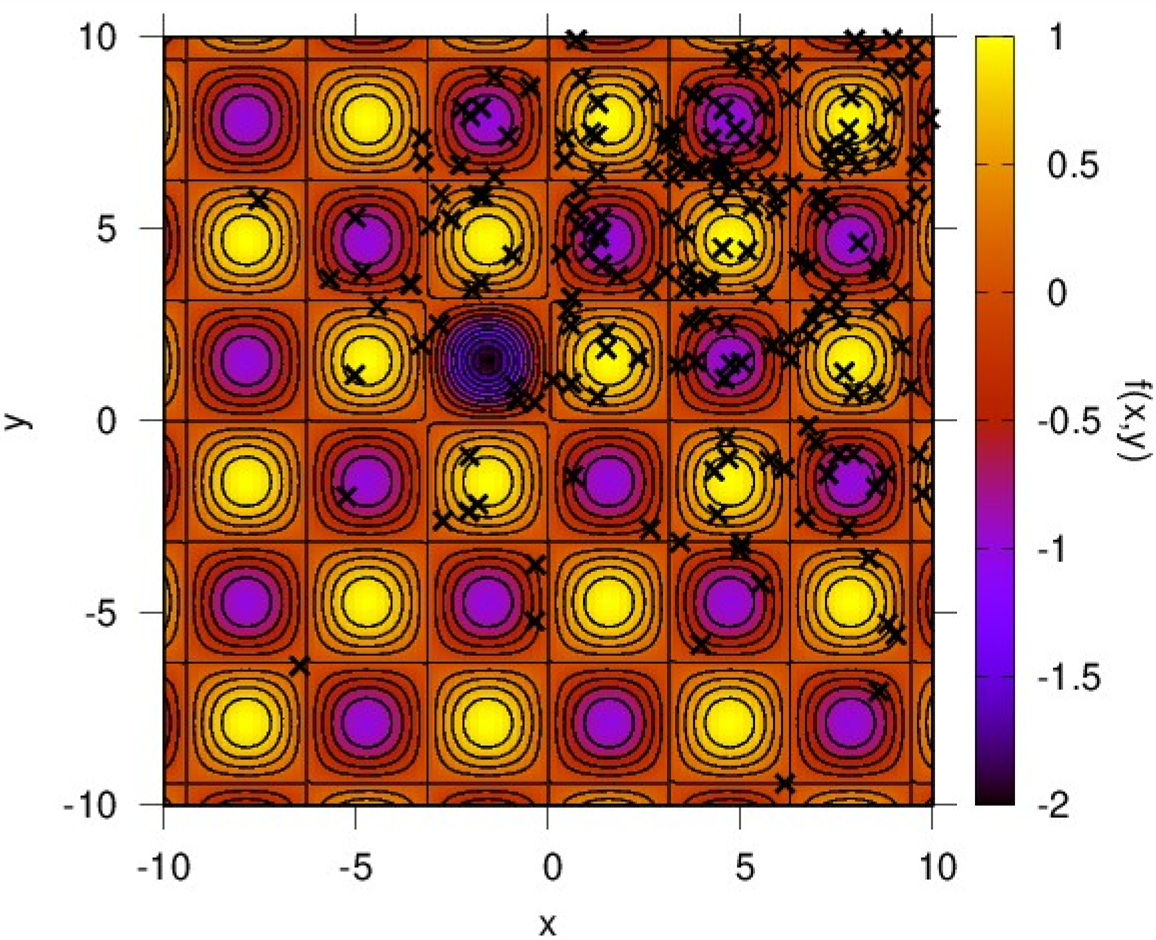
Długość kroków dla każdego wędrowca losujemy z przedziału $[-1, 1]$ zarówno dla współrzędnej x jak i y. W przypadku wyjścia poza zakres losujemy ponownie, do skutku.

2.2. Wyniki

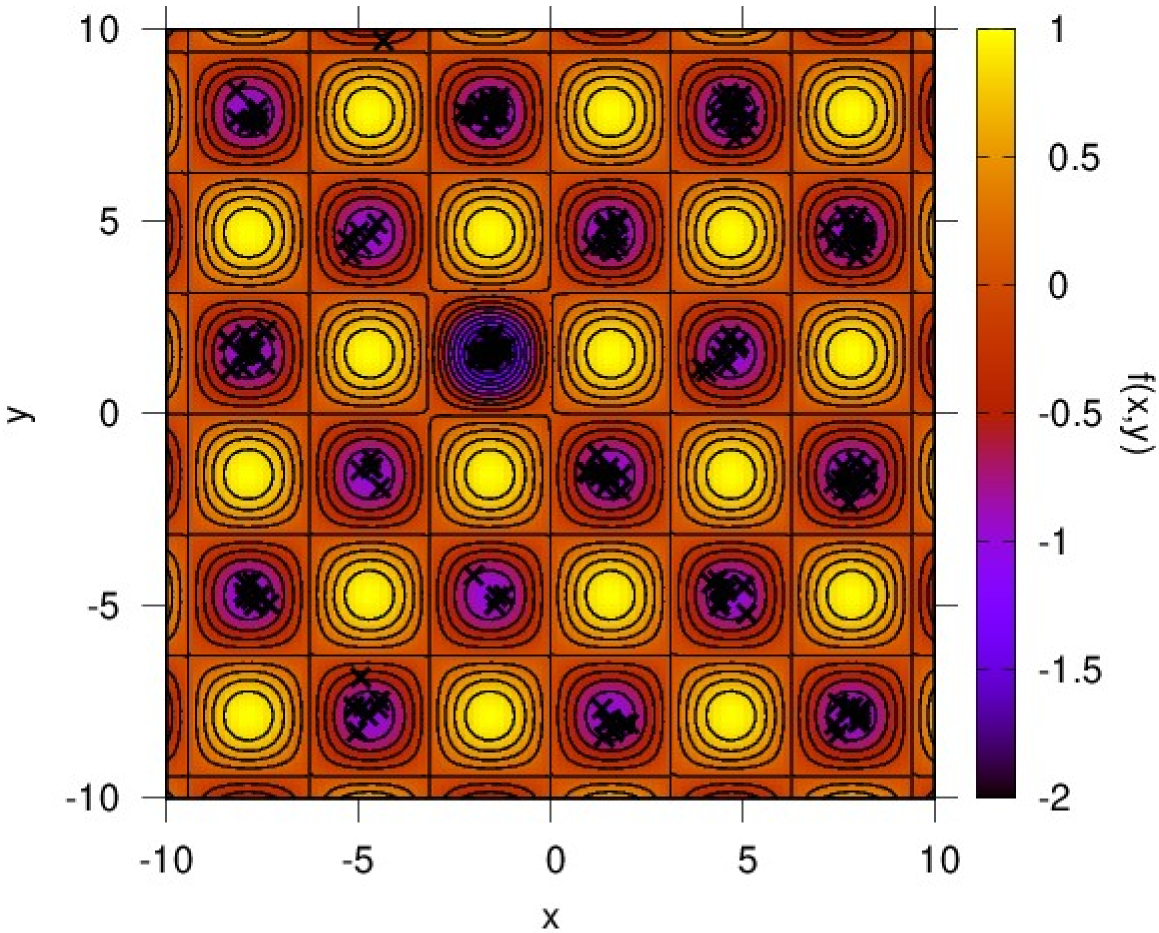
Rysujemy wykresy funkcji $f(x, y)$ w naszym ustalonym obszarze z zaznaczonymi położeniami wędrowców, po wykonaniu wszystkich kroków dla iteracji $i_T = 0, 7, 20$.

Ponadto dla pierwszego wędrowca wypisujemy wartości funkcji $f(x, y)$ dla wszystkich kroków.

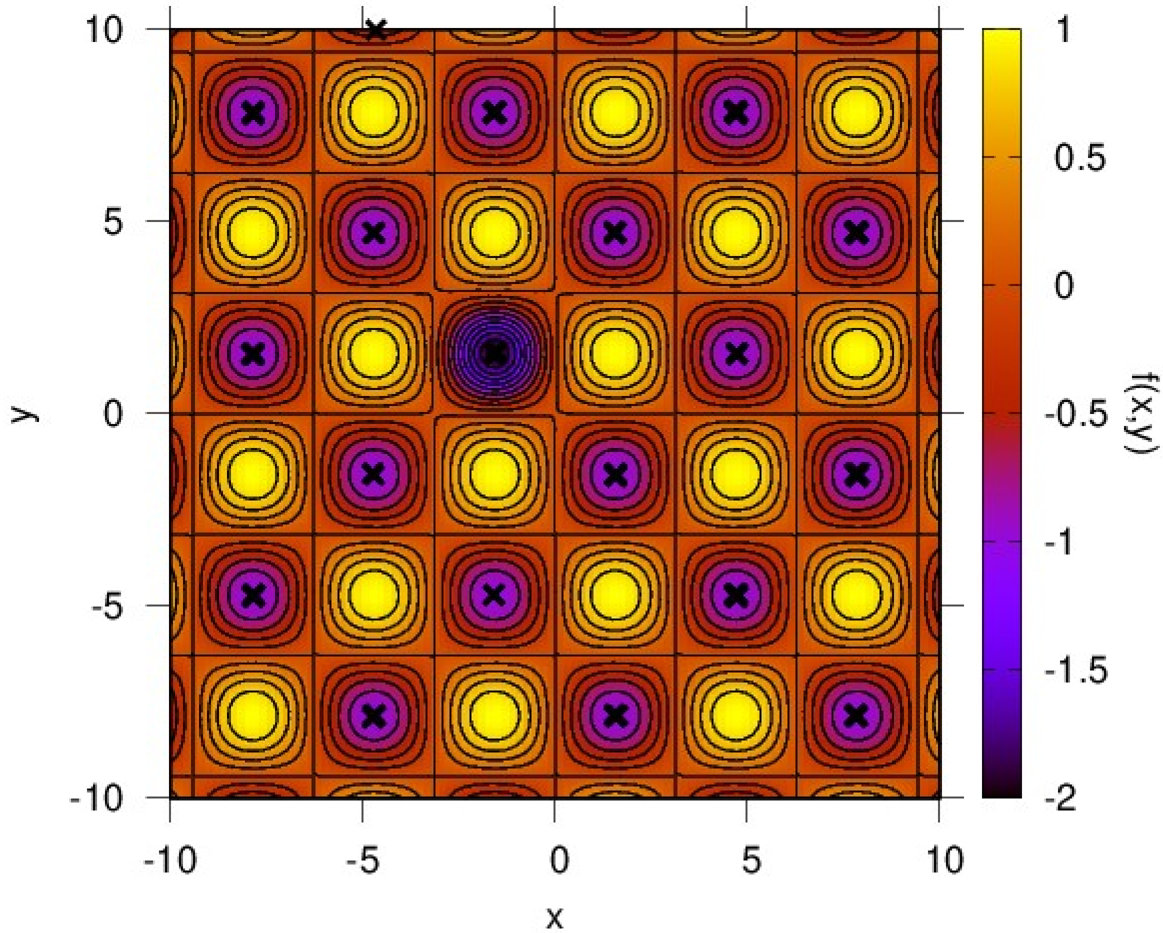
Zamieszczono także efekt działania algorytmu przy pominięciu obniżania temperatury.



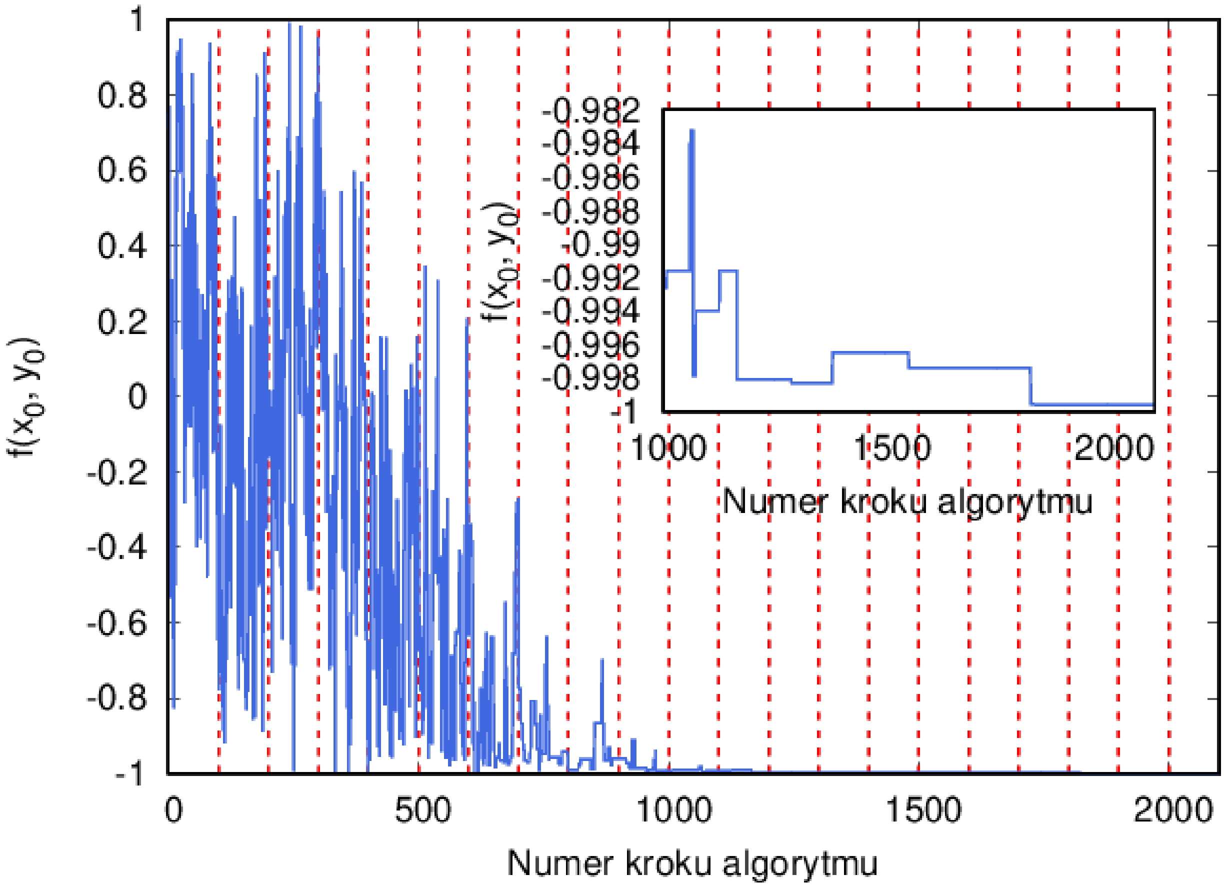
Wykres 1: Położenia wędrowców po wykonaniu wszystkich kroków dla iteracji $i_T = 0$.



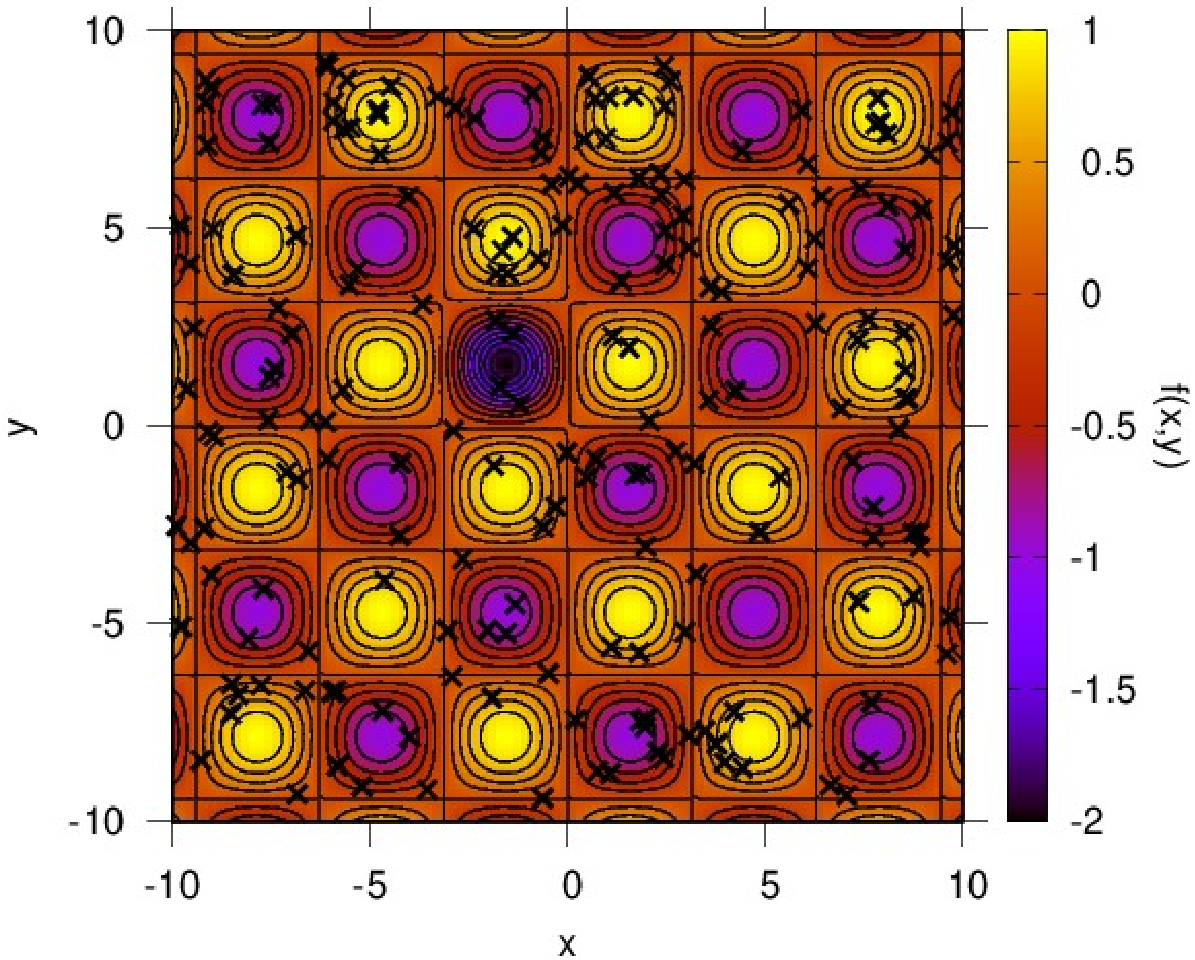
Wykres 2: Położenia wędrowców po wykonaniu wszystkich kroków dla iteracji $i_T = 7$.



Wykres 3: Położenia wędrowców po wykonaniu wszystkich kroków dla iteracji $i_T = 20$.



Wykres 4: Wartości funkcji dla wszystkich położeń pierwszego wędrowca.



Wykres 5: Położenia wędrowców po wykonaniu wszystkich kroków dla iteracji $i_T = 20$, przy ustalonej temperaturze.

Znalezione minimum funkcji w szukanym obszarze:
Minimum $f(x_{min}, y_{min}) = -1.99999$ w punkcie $(x_{min}, y_{min}) = (1.57379, 1.57027)$.

3. Wnioski

Jak widać po powyższych wykresach, metoda wyżarzania pozwoliła znalezć nam minima funkcji w rozważanym obszarze, w pewnym przybliżeniu. Rozważana funkcja nie posiada globalnego minimum, ale znaleziona najmniejsza wartość odpowiada naszym oczekiwaniom. Na początku działania algorytmu położenia wędrowców rozsiane są bardzo chaotycznie, ale już po iteracji $i_{IT} = 7$, wędrowcy znajdują się w pobliżu poszukiwanych minimów. Możemy to też zaobserwować na wykresie 4, gdzie po około 1000 krokach położenia wędrowców są już bardzo stabilne. Wartości w położeniach prawie się nie zmieniają lub zmieniają się nieznacznie.

Dodatkowo widzimy, na wykresie 4, że wędrowiec pierwszy pozwolił nam znaleźć jedynie minimum lokalne w danym obszerze, równe w przybliżeniu -1. To pokazuje nam zarazem zaletę tej metody, gdyż obok najmniejszej wartości znajdujemy też minima lokalne, ale także trudność polegającą na wybraniu odpowiedniej liczby wędrowców. Wybranie jednego wędrowca w przypadku danej funkcji oraz rozważanego przedziału byłoby zdecydowanie niewystarczające.

Kolejnym ważnym aspektem jest obniżanie temperatury. Na wykresie 5 widzimy efekt pominięcia tego kroku. Mimo wykonania wszystkich iteracji, położenia wędrowców są nadal chaotycznie rozsiane. Jest to spowodowane niemalejącym prawdopodobieństwem akceptacji gorszego położenia.