考虑组合优化问题

$$\begin{aligned} \min \ & f(x) \\ \text{s. t. } & g(x) \geq 0 \\ & x \in D \end{aligned}$$

背景

在温度 T 下, 金属物体的分子停留在状态 r 满足 Boltzmann 概率分布

$$P\{\overline{E} = E(r)\} = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E(r)}{k_B T}\right),$$

其中, $E(r)$ 表示状态 r 的能量, $k_B > 0$ 为 Boltzmann 常数, 而 $\overline{E}$ 表示分子能量的一个随机变量. $Z(T)$ 为概率分布的标准化因子

$$Z(T) = \sum_{s \in D} \exp\left(-\frac{E(s)}{k_B T}\right).$$

特性

1. 温度 T 很高时 （即 $T \to \infty$），概率 $P\{\overline{E} = E(r)\}$ 接近常数 $1/|D|$, 其中 $|D|$ 是状态空间 D 中状态的个数.

2. 对于 $E_1 < E_2$, 因为

$$P\{\overline{E} = E_1\} - P\{\overline{E} = E_2\}$$
$$= \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E_1}{k_B T}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}\right)\right]$$

有

$$P\{\overline{E} = E_1\} - P\{\overline{E} = E_2\} > 0, \quad \forall T > 0.$$

3. $P\{\overline{E}=E(r_{\min})\}$ 是 T 的递减函数这是因为

$$\frac{\partial P\{\overline{E}=E(r_{\min})\}}{\partial T}<0.$$

注:

$$\frac{\partial P\{\overline{E}=E(r)\}}{\partial T}$$

$$=\frac{\exp\left(-\frac{E(r)}{k_B T}\right)}{Z(T)k_B T^2}\left[E(r)-\frac{\sum\limits_{s\in D}E(s)\exp\left(-\frac{E(s)}{k_B T}\right)}{Z(T)}\right]$$

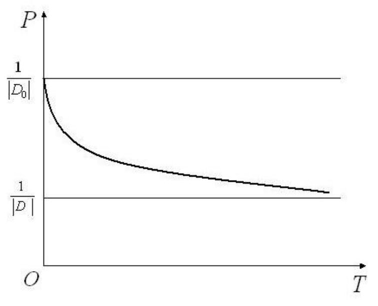
4. 当 $T \to 0$,

$$P\{\overline{E} = E(r_{\min})\} \to \frac{1}{|D_0|}$$

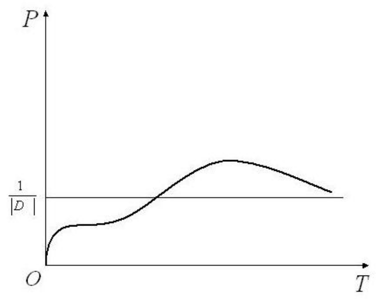
其中 D_0 是具有最低能量的状态集合. 故分子停留在最低能量状态的概率趋于 1.

5. 在非能量最低状态， 温度较高时， 分子在这些状态的概率在 $1/|D|$ 附近； 当温度趋于 0 时， 分子在这些状态的概率趋于 0.

6. 可知， 温度越低， 能量越低的状态的概率值越高. 在极限状况， 只有在能量最低的点概率不为零.



(a) 在能量最低状态



(b) 在非能量最低状态

Figure: Boltzmann 函数曲线

例

设概率分布为

$$p(x) = \frac{1}{q(t)} \exp\left(-\frac{x}{t}\right)$$

其中能量点为 $x = 1, 2, 3, 4,\ q(t) = \sum_{i=1}^{4} \exp(-\frac{x}{t})$

	x=1	x=2	x=3	x=4
t=20	0.269	0.256	0.243	0.232
t=5	0.329	0.269	0.221	0.181
t=0.5	0.865	0.117	0.016	0.002

组合优化问题与金属物体退火的比较

组合优化问题	金属物体
解	状态
最优解	能量最低状态
费用函数	能量