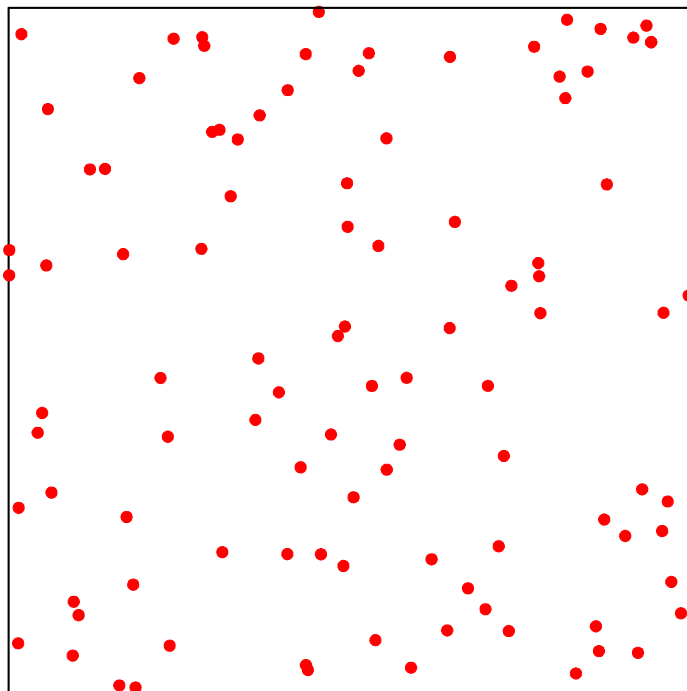


# Komputerowe wyżarzanie (simulated annealing)

Problem komiwojażera - najkrótsza droga łącząca N punktów.

Optymalizacja kombinatoryczna -  $N!$  możliwości



Zastosowanie metody Monte Carlo do znajdowania minimum funkcji celu  
(Kirkpatrick, S.; C. D. Gelatt, M. P. Vecchi, Science. 220 (1983) 671)

Technika:

Ciekły metal -> wolne schładzanie --> kryształ

Symulacje fizyczne:

Energia układu w czasie chłodzenia metodą Monte Carlo z algorytmem Metropolis'a maleje. Wolne chłodzenie pozwala znaleźć stan podstawowy.

## Fizyka

E- energia

T- temperatura

$$P\{E(X)=\varepsilon\}=Z^{-1}(T)\exp(-\varepsilon/kT)$$

## Optymalizacja

C - funkcja celu

a- parametr kontrolny

$$P\{C(i)=c\}=Q^{-1}(a)\exp(-c/a)$$

Wyżarzanie dowolnego układu wymaga

1. Opisu możliwych konfiguracji.
2. Generатора losowych zmian w konfiguracji.
3. Funkcji celu, której minimum szukamy.
4. Parametru kontrolnego (odpowiednika temperatury).
5. Planu powolnego chłodzenia:  
po jakim czasie zmniejszyć parametr kontrolny i o ile.

Zastosowanie wyżarzania do problemu komiwojażera

Model. N losowo wybranych punktów  $(x_i, y_i)$  w kwadracie jednostkowym.

Funkcja celu:

$$L = \sum_i [(x_i - x_{i+1})^2 + (y_i - y_{i+1})^2]^{1/2}$$

Cykliczne warunki brzegowe  $(x_{i+1}, y_{i+1}) = (x_1, y_1)$

Parametr kontrolny  $a$

$$a_0 > \max \{ \Delta L \},$$

gdzie  $\Delta L$  obliczamy na pewnej liczbie losowych konfiguracji N punktów

Plan chłodzenia

$$a_{i+1} = s^* a_i, \quad s < 1, \quad \text{np. } s = 0.95, 0.9$$

## Generator zmian konfiguracji

1. Wybrać losowo sektor i odwrócić w nim kolejność punktów

przykład

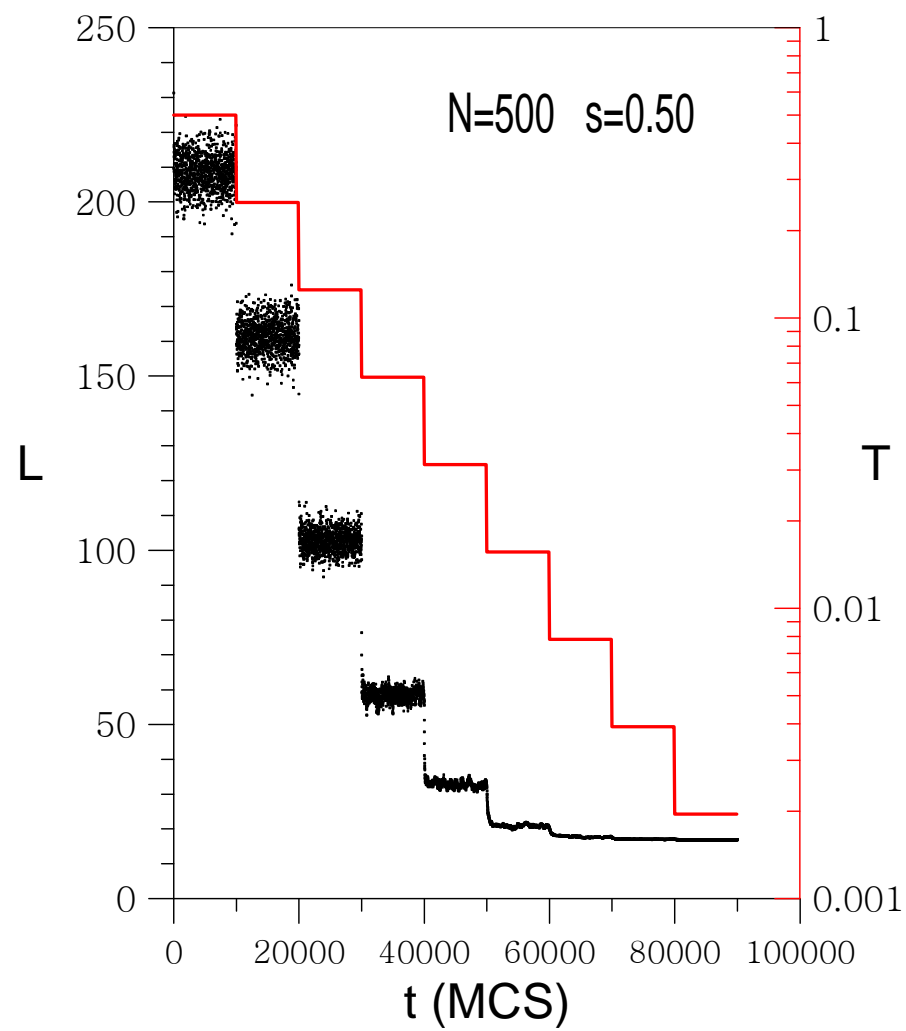
$$\begin{array}{cccc|ccc|c} 1 & 7 & 4 & 2 & 8 & 5 & 3 & 6 \\ 1 & 7 & 4 & 2 & 3 & 5 & 8 & 6 \end{array}$$

2. Wybrać losowo sektor i przenieść w losowo wybrane miejsce

przykład

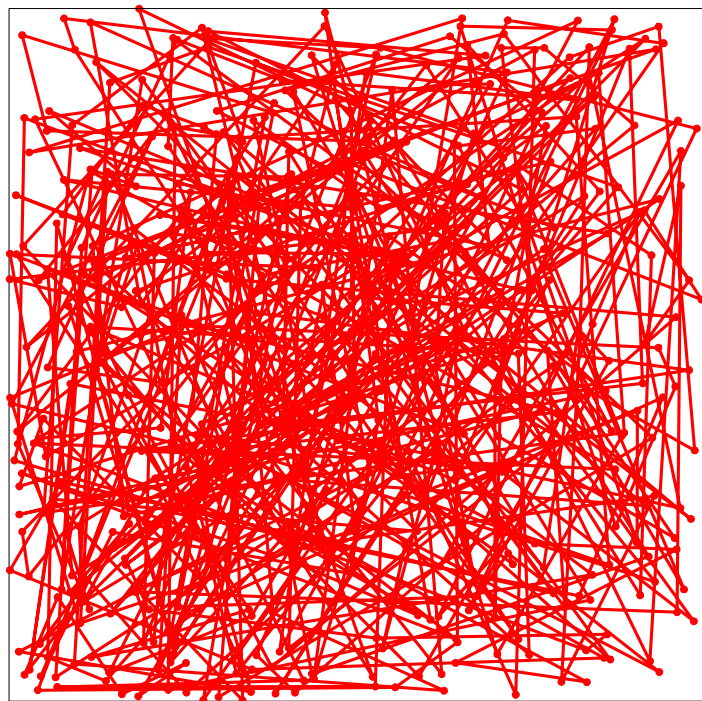
$$\begin{array}{cccc|cc|c} 1 & 7 & 4 & 2 & 3 & 5 & 8 & 6 \\ 1 & 7 & 3 & 5 & 8 & 4 & 2 & 6 \end{array}$$

Długość drogi w czasie chłodzenia:  $N=500$ ,  $T_{i+1}=0.5*T_i$ ,  $t_i=10000$  MCS



Przykładowe konfiguracje dla  $N=500$  i  $T_{i+1}=0.95*T_i$

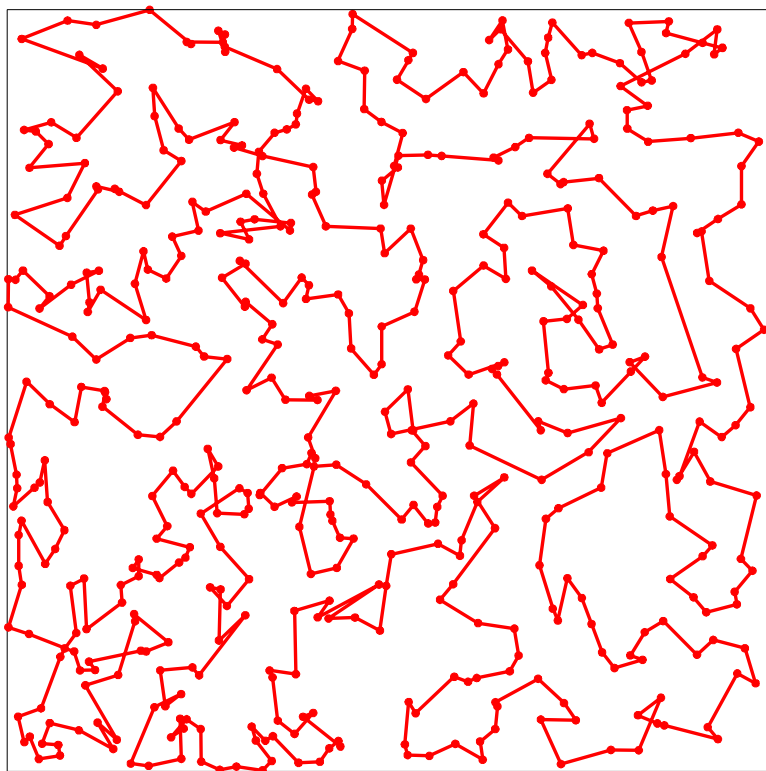
$T=0.5$   $L=210.0$



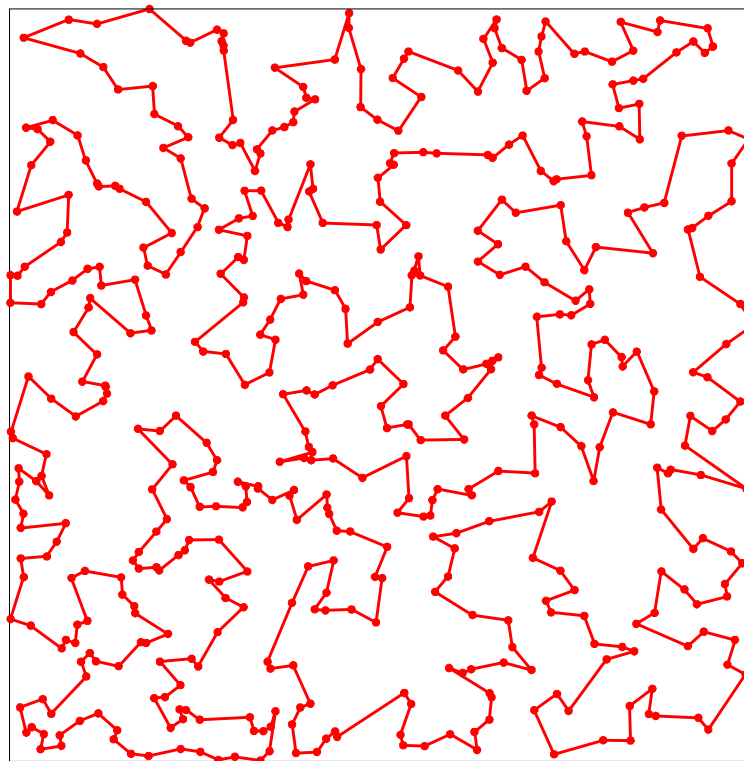
$T=0.1$   $L=86.9$



$T=0.01$   $L=19.4$



$T=0.001$   $L=16.9$





Rozkład  $N$  ładunków punktowych w kole jednostkowym.

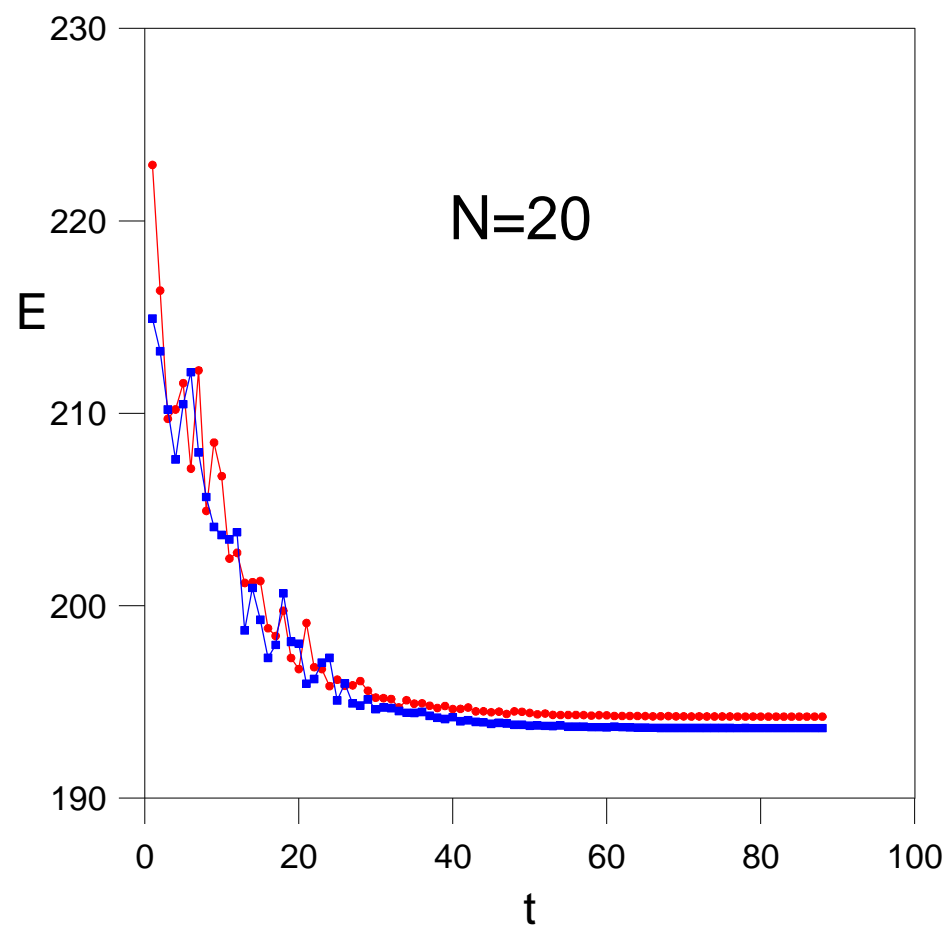
Jaka konfiguracja zapewnia minimum energii potencjalnej?

Można pokazać, że dla  $N < 12$  minimum  $E$  daje konfiguracja równoodległych  $N$  punktów na okręgu.

Dla  $N=12$  zwycięża konfiguracja z jednym ładunkiem w środku i 11 na okręgu.

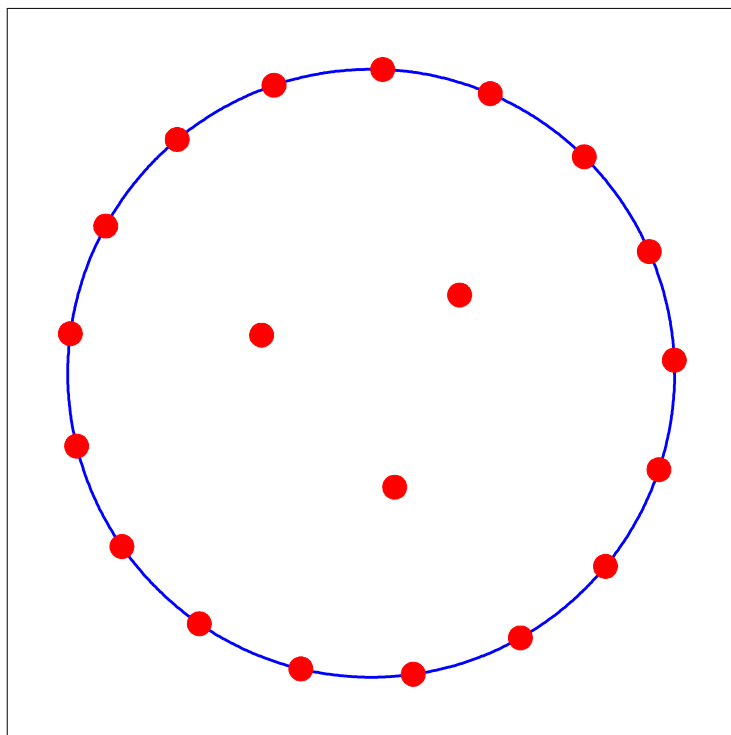
A co będzie dla  $N > 12$  ?

Przykład ewolucji energii podczas chłodzenia dla  $N=20$ .

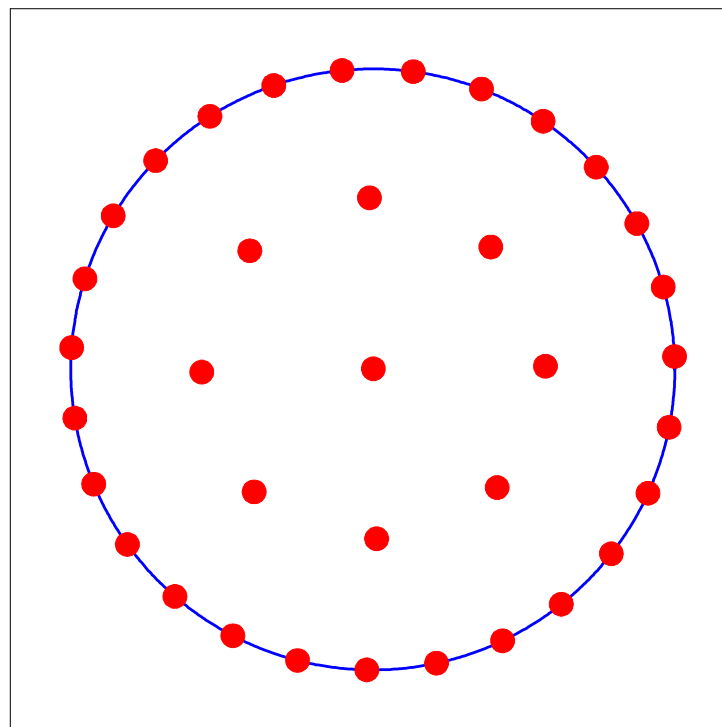


## Pojawiają się wewnętrzne orbity

$T=0.0001$   $N=20$



$T=0.0001$   $N=36$

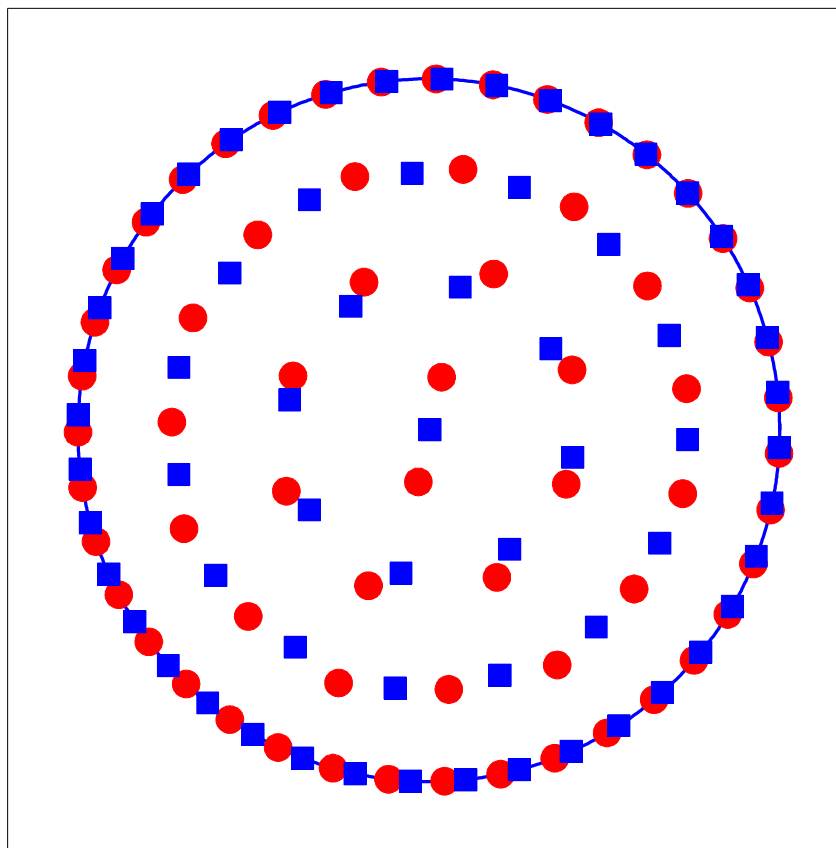


Wynik symulacji zależy od planu chłodzenia i generatora konfiguracji

$E=2480.92069$

$E=2479.66492$

$T=0.0001$   $N=64$



Przykład konfiguracji dla dużego N.

$T=0.0001$   $N=256$

