

# Алгоритм имитации отжига

Жбанников Станислав,  
127 мм

# Природные предпосылки



С целью улучшения качеств (повышение твёрдости, устранение внутренних дефектов) некоторый сплавов металлов используется метод отжига (закалка).

Основная суть метода заключается в чередовании нагревания и охлаждения металла. В таком процессе повышается вероятность металла оказаться в состоянии с наименьшей энергией, которое характеризуется отсутствием дефектов в структуре.

# Алгоритм Метрополиса

Первые идеи улучшенного алгоритма локального поиска были представлены в работе Метрополиса, Розенблата и Теллера (Metropolis, Rosenbluth, Teller, 1953). Метод был разработан для моделирования физической системы согласно принципам стат. Механики:

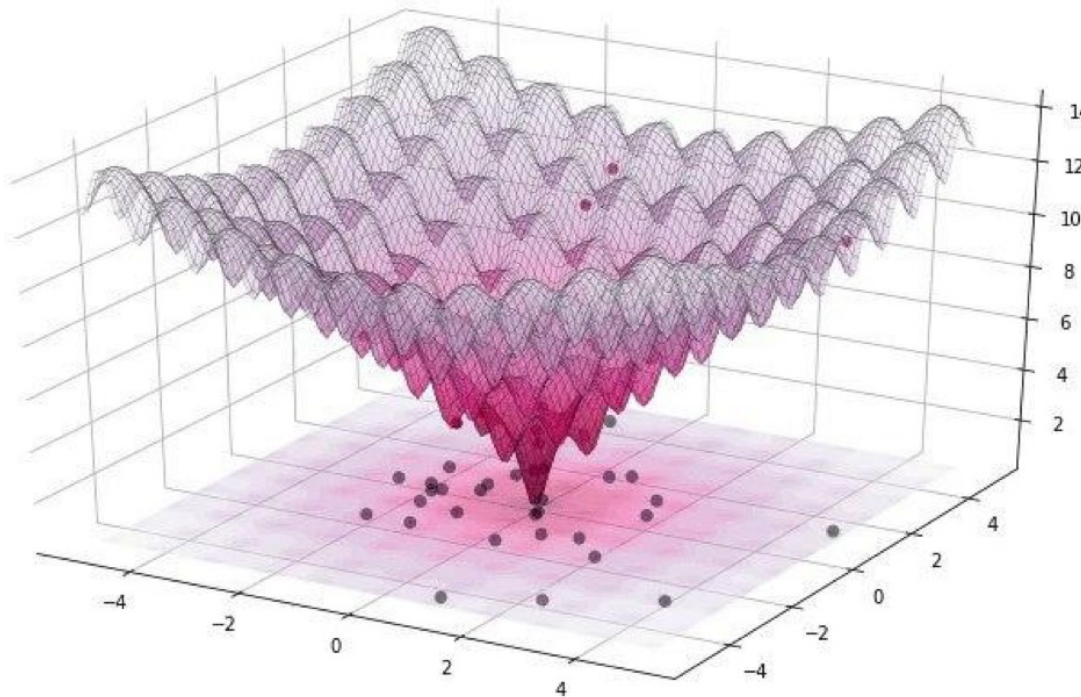
- $e^{-E/kT}$  — Распределение Больцмана описывает вероятность нахождения системы в состоянии с энергией  $E$ ;
- При высокой температуре вероятность перехода в другое состояние высока, а при низкой температуре мала, в следствии чего состояние системы стабильно;

Описание алгоритма:

- 1) Выбирается случайное состояние системы и измеряется энергия;
- 2) Генерируется новое состояние в которое система может перейти посредством малых возмущений (малое  $dE$ ), измеряется его энергия;
- 3) Если энергия нового состояния меньше то система однозначно переходит в него. Если же энергия нового состояния больше, то система переходит в него лишь с некоторой вероятностью  $p = e^{-dE/kT}$ , которая определяется из распределения Больцмана для полученной разности энергий и заданной температуры  $T$ .

**Доказано, что модель проводит приблизительно нужное время в каждом состоянии в соответствии с уравнением Гиббса-Больцмана при стремлении количества итераций к бесконечности.**

# Имитация отжига



Алгоритм Метрополиса может быть использован для задач оптимизации, если задать функцию потерь задачи в виде энергии системы.

Основным достоинством алгоритма является способность избегать локальных минимумов, тк система с некоторой вероятностью может перейти в состояние с большей энергией.

Основная проблема заключается в плохой сходимости около глобального минимума, тк система часто переходит в состояния с большей энергией.

Имитация отжига является модификацией алгоритма Метрополиса для задач оптимизации. Отличие состоит в задании температуры в виде убывающей функции, вместо константы. Эта особенность позволяет системе не застрять в высокоэнергетическом локальном минимуме при высокой температуре (высока вероятность переходов с повышением энергии) и лучше сойтись к глобальному минимуму при низкой температуре (практически отсутствию переходов с повышением энергии).

# Имитация отжига

Алгоритм имитации отжига является лишь приближенным методом поиска глобального максимума (точным является, например, полный перебор). Используется в комбинаторных задачах дискретной оптимизации, таких как:

Теоретические NP-сложные задачи:

- MaxCut;
- Проблема Коммивояжера;
- Проблема раскраски графа;

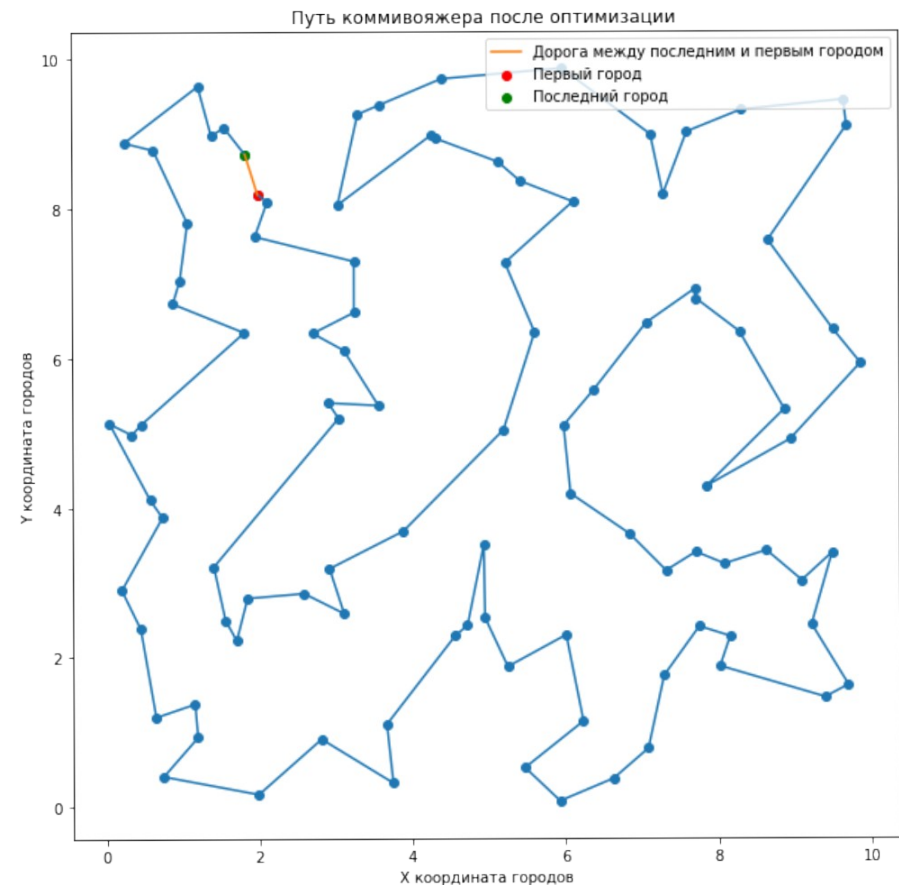
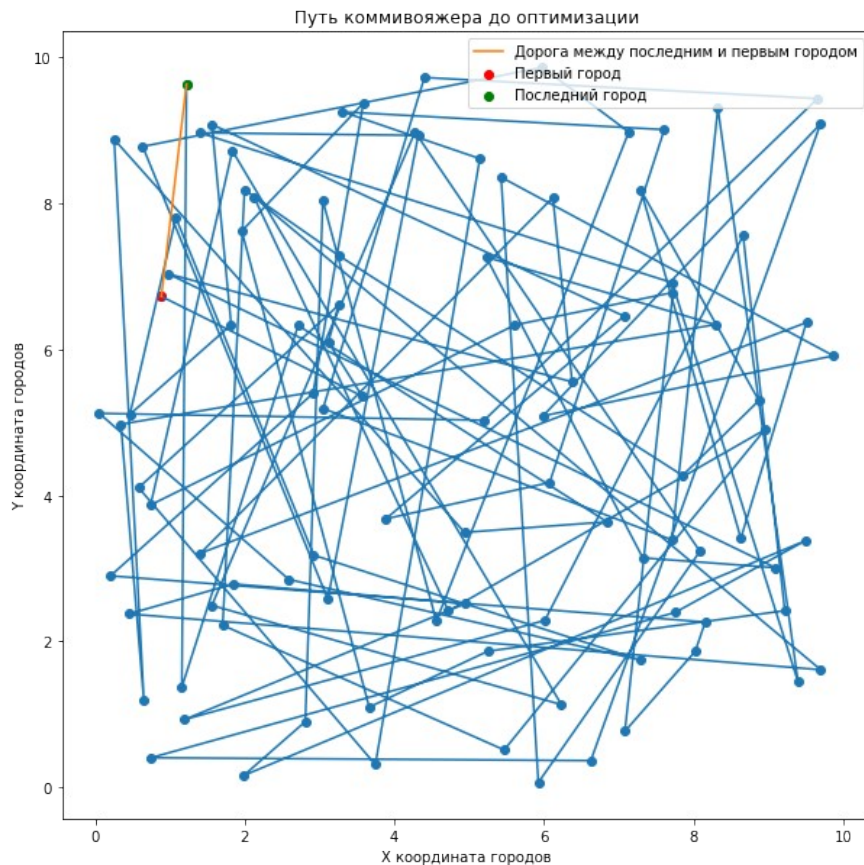
Возможно использовать в реальных задачах:

- Глобальная оптимизация движение транспорта;
- Составление оптимального расписания.



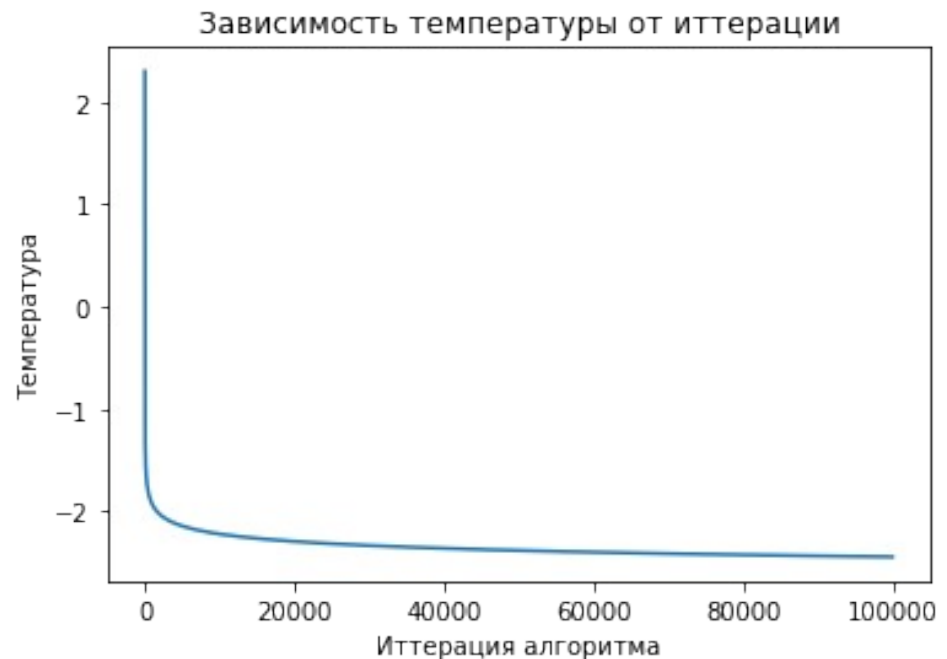
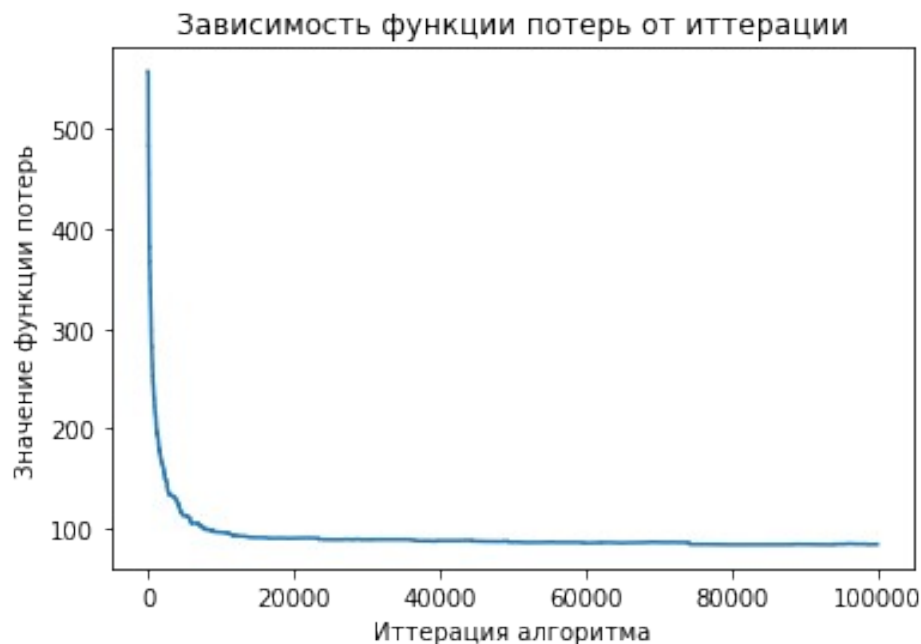
# Решение задачи коммивояжера методом имитации отжига

Задача коммивояжера — определение наикратчайшего пути, соединяющего заданную замкнут последовательность точек (оптимальный путь между городами).



# Температурв оптимизации

Рассмотрим изменение энергии системы или функции потерь (длина пути для данной задачи) в процессе отжига. Также построим закон изменения температуры со временем.



Закон изменения температуры задаётся в зависимости от особенностей задачи. В данном случае выбран Больцмановский отжиг  $E = T_0 / \ln(1+t)$ , обеспечивающий хорошую сходимость за счёт низкой скорости изменения температуры.

# Квантовый отжиг

По аналогии с классическим алгоритмом в 1998г был экспериментально реализован алгоритм квантового отжига, концепция которого была разработана ещё в 1981г. Его идея заключается в сопоставлении функции потерь изинговому гамильтониану некоторой квантовой системы  $\sum h_i s_i + \sum J_{ij} s_i s_j$ , и последующей минимизации его энергии.

- Первая коммерческая реализация квантового отжига (D-wave [128 кубитов в кластерах по 8 запутанных] **2011 г** );
- Исследовательская группа Google заключает, что D-wave 2X (1152 кубита) значительно превосходит известные классические методы в серии комбинаторных оптимизационных задач ( **2015 г**);
- Последняя модель Advantage 5640 кубитов в кластерах по 8 запутанных (**2020г**).



# Сопоставление гамильтониана для задачи коммивояжера

Функция потерь для задачи коммивояжера представляет собой суммарное расстояние пути. Запишем квантовый аналог.

Рассмотрим простейшую задачу для 4-х городов

- Сопоставим расстояниям между городами элементы матрицы  $J_{ij}$  и вес самих городов через  $h_i$  в Изинговом Гамильтониане;
- Выделим на каждый город по 4 кубита, чтобы закодировать его порядковый номер в виде (0010 — 3-й город);
- В итоге путь может быть записан в виде последовательности вида (1000 0010 0001 0100), где каждая 4-ка кубитов на новой итерации генерируется случайным образом.
- Далее сам алгоритм оптимизации аналогичен классической имитации отжига, при этом происходит над физической квантовой системой.

**Спасибо за внимание!**