

Methoden und Anwendungen der Optimierung (MAO)

Kapitel 5: Metaheuristiken – Simulated Annealing

Univ.-Prof. Dr. Michael Schneider
Christian Schröder

Deutsche Post Chair – Optimization of Distribution Networks (DPO)
RWTH Aachen University

schroeder@dpo.rwth-aachen.de

WS 2017/18



Deutsche Post
Chair - Optimization of
Distribution Networks

RWTHAACHEN
UNIVERSITY

Gesamtgliederung

- 1 Einführung: Heuristiken, Komplexität
- 2 Greedy Algorithmen
- 3 Lösungsqualität und Approximation
- 4 Lokale Suche
- 5 **Metaheuristiken**
 - Einführung
 - ILS
 - VND, VNS
 - Tabu Search
 - Large Neighborhood Search
 - Genetische Algorithmen
 - **Simulated Annealing**

Agenda

5 Metaheuristiken – Simulated-Annealing

Metaheuristiken

Ziele des Kapitels:

- das Prinzip von Simulated Annealing (SA) erklären können
- den Metropolis-Algorithmus und SA unterscheiden können
- die Bausteine Abkühlschema, Akzeptanzkriterium, Nachbarschaft und Stoppkriterium zur Definition von SA sinnvoll selbst ausgestalten können
- verstehen, wie man SA zu anderen Metaheuristiken wie Threshold Accepting, Sintflut-Algorithmus und Record-to-Record Travel abändern kann

Simulated-Annealing

Merke: (Simulated-Annealing)



Simulated-Annealing basiert auf einer *zufallsgesteuerten Nachbarschaftssuche*. Verbessernde Schritte werden immer, verschlechternde Schritte nur aufgrund eines parametrisierten, zufallsgesteuerten *Akzeptanzkriteriums* durchgeführt. Ein Kontrollparameter, die sogenannte *Temperatur T* , wird im Lauf des Verfahrens langsam abgesenkt, was dazu führt, dass verschlechternde Schritte weniger häufig akzeptiert werden.

Physikalische Analogie

Simulated-Annealing ist eine der bekanntesten und am häufigsten verwendeten Metaheuristiken.

Der Name *Simulated-Annealing* bedeutet „simuliertes Ausglühen“.

Das Ausglühen – insbesondere von Metallen – ist ein Prozess, bei dem ein Stoff aufgewärmt wird und beim Abkühlen von seiner zunächst flüssigen Form in eine kristalline Struktur übergeht. Die Zielsetzung ist es dabei, gleichmäßige Kristallstrukturen zu erzeugen. Dies ist nur möglich, wenn der Stoff langsam abgekühlt wird. Ein zu schnelles Abkühlen führt hingegen zur Bildung kleiner Kristalleinheiten, die Unregelmäßigkeiten an ihren Rändern aufweisen.

Physikalische Analogie

Annahmen zum physikalischen Experiment:

- Beim Abkühlprozess wird Energie zwischen einzelnen Gebieten ausgetauscht, so dass schließlich ein thermodynamisches Gleichgewicht entsteht.
- Um ein physikalisches Modell für das Abkühlen zu motivieren, führen wir den Begriff des Zustands $j \in X$ ein, wobei X die Menge aller möglichen Zustände ist.
- Wir nehmen hier an, dass die Menge X endlich ist.
- Ein Zustand spiegelt eine mögliche Kristallstruktur wider.
- Jede Struktur bzw. jeder Zustand $j \in X$ hat ein Energieniveau E_j .
- Bei einer Temperatur T kann ein Zustandsübergang vom Zustand $i \in X$ zu einem durch geringe Veränderung entstandenen Nachbarzustand $j \in X$ stattfinden, wobei die Wahrscheinlichkeit des Übergangs von den jeweiligen Energieniveaus E_i und E_j abhängt.

Physikalische Analogie

Annahmen zum physikalischen Experiment (Forts.):

- Falls die Energie des Nachbarzustands $j \in X$ geringer als die Energie des aktuellen Zustands $i \in X$ ist, findet der Übergang mit Sicherheit statt.
- Ist jedoch die Energie des Nachbarzustands höher, so wird dieser mit einer Wahrscheinlichkeit von

$$P(E_j, E_i, T) = e^{-\frac{E_j - E_i}{kT}}$$

akzeptiert, ansonsten verbleibt man weiter im Zustand i . Dabei ist k die sog. *Boltzmann-Konstante*.

- Das so definierte Akzeptanzkriterium beruht auf einer Arbeit von Metropolis et al. aus dem Jahre 1953 und wird als *Metropolis-Kriterium* bezeichnet.
- Aus dem Akzeptanzkriterium ergibt sich, dass die Wahrscheinlichkeit eines Zustandsübergangs vom Zustand $i \in X$ zum Zustand $j \in X$ mit steigender Energiezunahme $E_j - E_i$ abnimmt.

Metropolis-Algorithmus

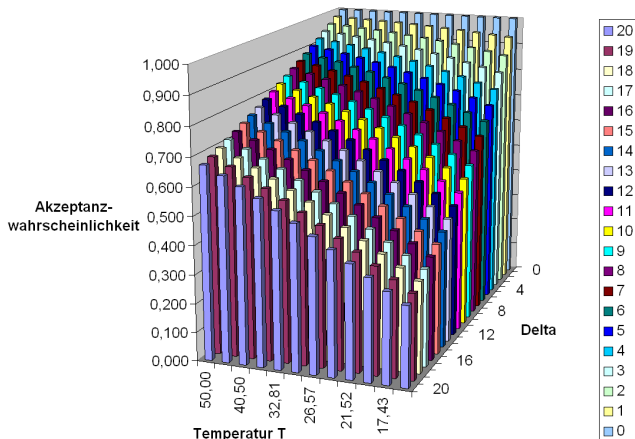
Man simuliert auf dem Computer das folgende Experiment, was das thermische Gleichgewicht eines Metalls bei Temperatur T beschreibt:

Algorithmus 1 : Metropolis-Algorithmus

```
// Input: Zustandsraum  $X$ ; Startzustand  $i \in X$ ; Temperatur  $T$   
repeat  
|   WÄHLE zufälligen Nachbarzustand  $j$  von  $i$   
|   BESTIMME Energiedifferenz  $\Delta := E_j - E_i$   
|   if  $\Delta < 0$  then  
|   |   // akzeptiere niedrigeres Energieniveau immer  
|   |   SETZE  $i := j$   
|   else  
|   |   // bedingte Akzeptanz höherer Energieniveaus  
|   |   Mit Wahrscheinlichkeit  $\exp(\frac{-\Delta}{kT})$  SETZE  $i := j$   
until (ohne Ende)
```

Metropolis-Algorithmus

Metropolis Akzeptanzwahrscheinlichkeit $P(i \rightarrow j) = \exp(\frac{-\Delta}{T})$ mit $\Delta := E_j - E_i$ (für $k = 1$):



Metropolis-Algorithmus I

Führt man dieses ursprünglich von Metropolis et al. (1953) erstmalig beschriebene Experiment “unendlich lange” aus, so stellt sich ein *Gleichgewichtszustand* ein (unter zusätzlichen Voraussetzungen).

Es gilt:

1

$$P(j) = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E_j}{kT}\right)$$

ist die Wahrscheinlichkeit des Zustands j im Gleichgewicht.
(mit einer Normierungskonstante $Z(T)$).

2

für $T \rightarrow \infty$ ist dies eine Gleichverteilung auf allen Zuständen:

$$P(x) = \frac{1}{|X|} \quad \text{für alle } j \in X$$

Metropolis-Algorithmus II

- 3 für $T \rightarrow 0$ ist dies eine Gleichverteilung auf allen Zuständen mit minimaler Energie

$$X_{min} := \{j \in X : E_j \leq E_i \text{ für alle } i \in X\}:$$

$$P(x) = \begin{cases} \frac{1}{|X_{min}|} & \text{falls } j \in X_{min} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Simulated-Annealing I

Simulated Annealing besteht aus folgenden *generischen Bausteinen*:

- 1 *Nachbarschaft \mathcal{N} und Startlösung x*
- 2 *Abkühlschema* mit
 - Starttemperatur
 - Anzahl Schritte bei konstanter Temperatur
 - Update-Funktion
- 3 *Stoppkriterium*

Simulated-Annealing II

Zu 2.: Im generischen Simulated-Annealing Algorithmus wird

- ausgehend von einer *Starttemperatur* T_0
- die Temperatur für eine feste *Anzahl von* L bzw. L_t *Schritten* konstant gehalten und
- danach mittels einer *Update-Funktion* angepasst. Das Update geschieht aufgrund der aktuellen Temperatur T_t und der aktuellen Iteration t .

Simulated-Annealing

Algorithmus 2 : Simulated-Annealing (für Minimierungsproblem)

```
// Input: Startlösung  $x$ , Abkühlschema  $(T_t, L_t)$ 
SETZE  $t := 0, L := L_0, T := T_0$  und  $x_{best} := x$ 
repeat
    // Innere Schleife =  $L$  Schritte im Metropolis-Alg.
    repeat  $L$  mal
        // zufällige Wahl
        WÄHLE zufällig ein  $x' \in \mathcal{N}(x)$ 
        SETZE  $\Delta := c(x') - c(x)$ 
        // zufällige Akzeptanz bei Verschlechterung
        if  $\Delta \leq 0$  oder  $(\Delta > 0$  und mit Wahrscheinlichkeit  $\exp(-\frac{\Delta}{T_t}))$  then
            SETZE  $x := x'$ 
        if  $c(x) < c(x_{best})$  then SETZE  $x_{best} := x$ 
    until
        SETZE  $t := t + 1$ 
        UPDATE  $T := T_t$  und  $L := L_t$ 
until Stoppkriterium erfüllt
// Output: beste Lösung  $x_{best}$ 
```

Implementation

Nachbarschaft \mathcal{N} : Die *Konvergenz des Metropolis-Algorithmus im Sinne der oben genannten Wahrscheinlichkeitsverteilung* kann nachgewiesen werden, falls die Nachbarschaft \mathcal{N} folgende Eigenschaften besitzt:

- 1 \mathcal{N} ist *zusammenhängend*
- 2 die *Wahrscheinlichkeit für die Generierung* von $x' \in \mathcal{N}(x)$ aus x ist *positiv* und ist *identisch* zu der für die Generierung von x aus x' ; dies ist erfüllt, wenn
 - (a) \mathcal{N} symmetrisch ist,
 - (b) $|\mathcal{N}(x)| = |\mathcal{N}(x')|$ für alle x und x' gilt und
 - (c) die zufälligen Nachbarn aufgrund einer Gleichverteilung gezogen werden

Implementation

Mögliche Stoppkriterien:

- in den letzten N Iterationen ist keine Verbesserung des Zielfunktionswerts eingetreten (Wahl von N abhängig von der Größe der Instanz)
- die Temperatur ist unter einen vorgegebenen unteren Wert gesunken
- etc.

Wahl der Starttemperatur T_0 :

- anfangs sollte gut „durchgemischt“, d.h. fast jeder Zustandsübergang akzeptiert werden
- bestimme oder schätze die maximale Verschlechterung ab mittels

$$\Delta^{max} := \max_{x \in X} \max_{x' \in N(x)} (c(x') - c(x))$$

und wähle $T_0 := \beta \cdot \Delta^{max}$ mit $\beta \gg 1$ z.B. mit $\beta = 10$

Implementation

Länge (=Anzahl der Iterationen bei konstanter Temperatur) $(L_t)_t$:

Allgemeine Empfehlung: Wähle gleich große Längen

$$L_t := L := \max_{x \in X} |\mathcal{N}(x)| \quad \forall t = 0, 1, 2, \dots$$

entsprechend der Größe der Nachbarschaft bzw. dem Vielfachen hiervon.

Die *Konvergenz von Simulated Annealing* bedeutet, dass nach unendlich vielen Iterationsschritten eine Gleichverteilung auf den global minimalen Lösungen erreicht wird.

Dies erfordert weitere (technische) Voraussetzungen und insbesondere, dass das Update der Temperatur sehr langsam stattfindet.

Implementation

Update der Temperatur: In der Praxis kühlt man schneller ab, beispielsweise. . .

- exponentiell (=geometrisch) gemäß

$$T_{t+1} := \alpha \cdot T_t \text{ mit } \alpha \in \{0,8; 0,99\}$$

- (Lundy-Mees) gemäß

$$T_{t+1} := \frac{T_t}{1 + \beta T_t} \text{ mit } \beta \text{ kleine Zahl}$$

- (Aarts und Korst) gemäß

$$T_{t+1} := \frac{T_t}{1 + (T_t \cdot \ln(1 + \delta)/3\sigma(c_t))}$$

mit $\sigma(c_t)$ Standardabweichung der ZF-Werte der letzten L_t Iterationen
und Parameter $\delta > 0$

Implementation

Die Regel von Aarts und Korst garantiert, dass die Wahrscheinlichkeiten $P_j(T_t)$ und $P_j(T_{t+1})$ im jeweiligen Metropolis-Algorithmus

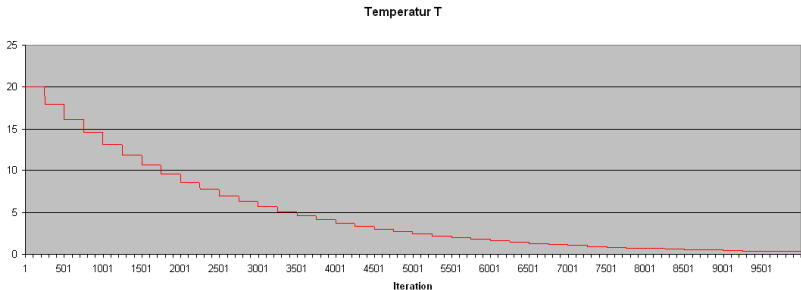
$$\frac{1}{1 + \delta} < \frac{P_j(T_t)}{P_j(T_{t+1})} < 1 + \delta$$

erfüllen, d.h. nahe beieinander liegen.

Simulated-Annealing - Cooling Schedule

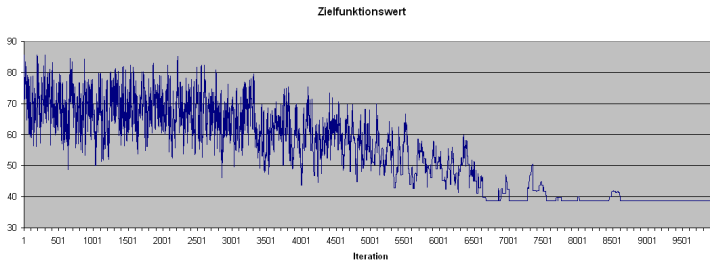
Beispiel: Abkühlschema mit

- $T_0 := 20$
- geometrisch abkühlen mit $T_{t+1} := 0,9 \cdot T_t$
- konstante Stücke mit Länge $L_t = 250$ für alle $t \in \mathbb{N}_0$



Simulated-Annealing

Beispiel (Forts.): Wir untersuchen ein 12-Städte STSP. Gegeben sind die 2-Opt-Nachbarschaft und das obige Abkühlschema ($L_t = 250$; geometrisch abkühlen mit $T_0 = 20$ und $\alpha = 0,9$):



Die Abbildung zeigt, dass

- bei höherer Temperatur eher eine Zufallssuche stattfindet,
- bei mittlerer Temperatur nur noch ein geringer Teil der verschlechternden Schritte akzeptiert wird und
- bei geringer Temperatur nur noch eine lokale Suche mit ausschließlich verbessernden Schritten durchgeführt wird.

Verwandte Methoden zu Simulated-Annealing

Durch Änderung des *zufallsgesteuerten* (mit Wahrscheinlichkeit $\exp(-\frac{\Delta}{T})$ akzeptieren) in ein *deterministisches Akzeptanzkriterium* erhält man andere Metaheuristiken.

Bedingte deterministische Akzeptanz, wenn...

Threshold Accepting: ...die Verschlechterung $\Delta \leq \delta_t$ erfüllt für fallende Folge von Schwellwerten (δ_t) , $\delta_t \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$

Sintflut-Algorithmus: ...der Zielfunktionswert $c(x') \leq \delta_t$ erfüllt für fallende Folge von Schwellwerten (δ_t) , $\delta_t \rightarrow LB$ für $t \rightarrow \infty$

Record-To-Record-Travel: ...der Zielfunktionswert $c(x') \leq \delta_t$ erfüllt, wobei die Schwellwerte δ_t von der besten gefundenen Lösung (=record) abhängen (z.B. $\delta_t = (1 + \varepsilon)c(x_{best})$ für $\varepsilon > 0$ klein)

Zur Vertiefung...



- (Aarts u. a., 1997)
- (Hoos und Stützle, 2005): Seiten 76-78

- [Aarts u. a. 1997] Aarts, Emile H. L. ; Korst, Jan H. M. ; van Laarhoven, Peter J. M.: Simulated Annealing. In: Aarts, Emile (Hrsg.) ; Lenstra, Jan K. (Hrsg.): *Local Search in Combinatorial Optimization*. Chichester, UK : John Wiley and Sons, 1997, S. 91–120
- [Hoos und Stützle 2005] Hoos, H.H. ; Stützle, T.: *Stochastic Local Search Foundations and Applications*. San Francisco, CA : Morgan Kaufmann Publishers, Elsevier, 2005. – ISBN 1558608729