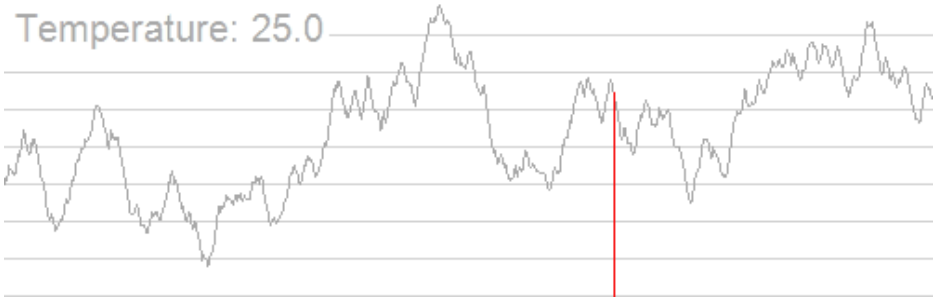
Метод отжига

Алгоритм имитации отжига (англ. *simulated annealing*) — эвристический алгоритм глобальной оптимизации, особенно эффективный при решении дискретных и комбинаторных задач.

Алгоритм вдохновлён процессом отжига в металлургии — техники, заключающейся в нагревании и контролируемом охлаждении металла, чтобы увеличить его кристаллизованность и уменьшить дефекты. Симулированние отжига в переборных задачах может быть использовано для приближённого нахождения глобального минимума функций с большим количеством свободных переменных.

Алгоритм вероятностный и не даёт почти никаких гарантий сходимости, однако хорошо работает на практике при решении NP-полных задач. Иногда на контестах им удаётся сдать сложные комбинаторные задачи, у которых есть нормальное решение: Ильдар Гайнуллин сдает отжигом div2E на динамику по подмножествам.



Описание алгоритма

Для примера будем рассматривать задачу коммивояжёра:

> Есть n городов, соединённых между собой дорогами. Необходимо проложить между ними кратчайший замкнутый маршрут, проходящий через каждый город только один раз.

Пусть имеется некоторая функция $f(x)$ от *состояния* x, которую мы хотим минимизировать. В данном случае x это перестановка вершин (городов) в том порядке, в котором мы будем их посещать, а $f(x)$ это длина соответствующего пути.

Возьмём в качестве базового решения какое-то состояние x_0 (например, случайную перестановку) и будем пытаться его улучшать.

Введём *температуру* t — какое-то действительное число (изначально равное единице), которое будет изменяться в течение оптимизации и влиять на вероятность перейти в соседнее состояние.

Пока не придём к оптимальному решению или пока не закончится время, будем повторять следующие шаги:

1. Уменьшим температуру $t_k = T(t_{k-1})$.
2. Выберем случайного *соседа* x — то есть какое-то состояние y, которое может быть получено из x каким-то минимальным изменением.
3. С вероятностью $p(f(x), f(y), t_k)$ сделаем присвоение $x \leftarrow y$.

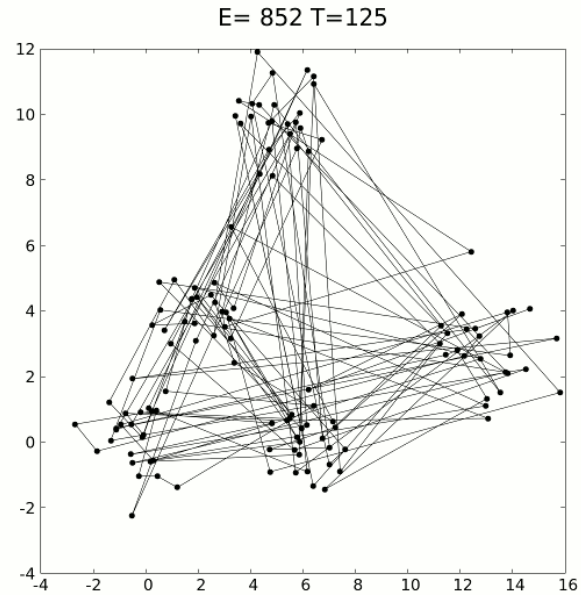
В каждом шаге есть много свободы при реализации. Основные эвристические соображения следующие:

1. В начале оптимизации наше решение и так плохое, и мы можем позволить себе высокую температуру и риск перейти в состояние хуже. В конце наоборот — наше решение почти оптимальное, и мы не хотим терять прогресс. Температура должна быть высокой в начале и медленно уменьшаться к концу.
2. Алгоритм будет работать лучше, если функция $f(x)$ «гладкая» относительно этого изменения, то есть изменяется не сильно.
3. Вероятность должна быть меньше, если новое состояние хуже, чем старое. Также вероятность должна быть больше при высокой температуре.

Например, можно действовать так:

1. $t_k = \gamma \cdot t_{k-1}$, где γ это какое-то число, близкое к единице (например, 0.99). Оно должно зависить от планируемого количества итераций: оптимизация при низкой температуре почти ничего не будет менять.
2. В случае с перестановками этим минимальным изменением может быть, например, своп двух случайных элементов.
3. Если y не хуже, то есть $f(y) \le f(x)$, то переходим в него в любом случае. Иначе делаем переход в y, с вероятностью $p = e^{\frac{f(x)-f(y)}{t_k}}$ — это экспонента отрицательного числа, и она даст вероятность в промежутке $(0, 1)$.

Вообще, в выборе конкретных эвристик не существует «золотого правила». Все компоненты алгоритма сильно зависят друг от друга и от задачи.



Реализация

На практике применим алгоритм к другой задаче:

> Дана шахматная доска $n \times n$ и n ферзей. Нужно расставить их так, чтобы они не били друг друга.

Будем кодировать состояние так же перестановкой чисел от 0 до $(n-1)$: ферзь номер i будет стоять на пересечении i-той строки и p_i-того столбца.

Такое представление кодирует не все возможные расстановки, но это даже хорошо: точно не учтутся те расстановки, где ферзи бьют друг друга по вертикали или горизонтали.

Выберем функцию $f(p)$, равную числу успешно расставленных ферзей.

Примерно эквивалентный код на C++:

```
const int n = 100;  // размер доски
const int k = 1000; // количество итераций алгоритма

int f(vector<int> &p) {
    int s = 0;
    for (int i = 0; i < n; i++) {
        int d = 1;
        for (int j = 0; j < i; j++)
            if (abs(i - j) == abs(p[i] - p[j]))
                d = 0;
        s += d;
    }
    return s;
}

// генерирует действительное число от 0 до 1
double rnd() { return double(rand()) / RAND_MAX; }

int main() {
    // генерируем начальную перестановку
    vector<int> v(n);
    iota(v.begin(), v.end(), 0);
    shuffle(v.begin(), v.end());
    int ans = f(v); // текущий лучший ответ

    double t = 1;
    for (int i = 0; i < k && ans < n; i++) {
        t *= 0.99;
        vector<int> u = v;
        swap(u[rand() % n], u[rand() % n]);
        int val = f(u);
        if (val > ans || rnd() < exp((val - ans) / t)) {
            v = u;
            ans = val;
        }
    }

    for (int x : v)
        cout << x + 1 << " ";

    return 0;
}
```

Здесь подсчёт количества свободных диагоналей работает за $O(n^2)$. Его можно соптимизировать до $O(n)$ и делать в $O(n)$ итераций больше: можно создать булев массив, в котором для каждой диагонали хранить, была ли она занята. С этой оптимизацией уже должна быть сдаваема эта задача на информатиксе.

Упражнение. Соптимизируйте пересчёт до $O(1)$.

Примечание. На самом деле, задача о ферзях решается конструктивно.