Optymalizacja. Symulowane wyżarzanie

dr hab. inż. Maciej Komosiński

Instytut Informatyki
Politechnika Poznańska
www.cs.put.poznan.pl/mkomosinski

Wyżarzanie

- wzrost temperatury gorącej kąpieli do takiej wartości, w której ciało stałe topnieje
- *powolne* zmniejszanie temperatury do chwili, w której cząsteczki ułożą się wzajemnie i osiągną (ang. *ground state*) temperaturę zerową
- przeciwieństwo hartowania

Algorytm Metropolis

- Metropolis i in. (1953) – algorytm statystycznego *symulowania* (Monte Carlo) zmian ciała stałego w gorącej kąpieli aż do stanu termicznej równowagi

- losowe generowanie sekwencji stanów ciała stałego:
  - stan i ciała stałego i jego energia E_i,
  - perturbacja (małe zniekształcenie) $\rightarrow$ następny stan. Energia następnego stanu wynosi E_j.
  - jeśli $E_j - E_i \leq 0$, stan j jest akceptowany jako stan bieżący
  - w przeciwnym wypadku, stan j jest akceptowany z pewnym prawdopodobieństwem:

$$\exp\left(\frac{E_i - E_j}{k_B T}\right)$$

    T – temperatura kąpieli
    k_B – stała Boltzmanna

- https://www.youtube.com/watch?v=h1NOS_wxgGg, https://www.youtube.com/watch?v=vTUwEu53uzs

Analogie do optymalizacji

System fizyczny	Problem optymalizacji
stan	rozwiązanie
energia	koszt
ground state	optimum
temperatura T	parametr kontrolny c
szybkie schładzanie	lokalna optymalizacja
powolne schładzanie	symulowanie wyżarzanie

Symulowane wyżarzanie

- zastosowanie algorytmu **Metropolis** do optymalizacji kombinatorycznej
- inne nazwy: *simulated annealing, Monte Carlo annealing, probabilistic hill climbing, stochastic relaxation*

Kryterium akceptacji

- i, j – rozwiązania
- $f(i)$, $f(j)$ – koszty
- kryterium akceptacji określa czy j uzyskane z i jest akceptowane

$$\mathbf{P}_c\{\text{accept } j\} = \begin{cases} 1 & \text{if} \quad f(j) \leq f(i) \\ \exp\left(\frac{f(i)-f(j)}{c}\right) & \text{if} \quad f(j) > f(i) \end{cases}$$

Zadanie domowe: narysuj $e^{\frac{-\Delta}{c}}$ dla kilku różnych c.

procedure SYMULOWANE_WYŻARZANIE
begin
    INICJALIZUJ(x_{start}, C_0, L)
    k:=0
    x:=x_{start}
    repeat
        for $l := 1$ **to** L_k **do**
        begin
            GENERUJ(x' z $N(x)$)
            if $f(x') \leq f(x)$ **then**
                $x := x'$
            else
                if $\exp(-(f(x') - f(x))/C_k) > random[0,1)$ **then**
                    $x := x'$
        end
        $k := k + 1$
        OBLICZ(C_k)
    until WARUNEK_STOPU
end

cykle...

Zbieżność algorytmu SW

- można uzyskać takie L_k i c_k, które zapewniają zbieżność SW do optimum
- dobre przybliżenie SW: generowanie homogenicznych łańcuchów Markowa skończonej długości dla skończonej sekwencji malejących wartości parametru kontrolnego

Łańcuch Markowa

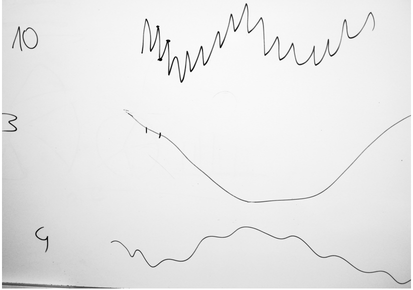
- łańcuch Markowa jest sekwencją prób (rozwiązań), w której prawdopodobieństwo wyniku danej próby zależy (tylko) od wyniku poprzedniej próby
- łańcuch Markowa jest niehomogeniczny jeśli prawdopodobieństwo przejścia zależy od numeru próby k. Jeśli nie zależy, to łańcuch Markowa jest homogeniczny

Sposób (schemat) chłodzenia określa

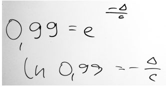
- skończona sekwencja wartości parametru kontrolnego, tj.
  - początkowa wartość parametru kontrolnego c_0
  - funkcja dekrementacji parametru kontrolnego
  - końcowa wartość parametru kontrolnego
- skończona liczba przejść dla każdej wartości parametru kontrolnego, tj.
  - skończona długość każdego homogenicznego łańcucha Markowa

Wartość początkowa parametru kontrolnego

- wartość c_0 powinna być odpowiednio wysoka by zapewnić akceptację wszystkich przejść (początkowy współczynnik akceptacji jest bliski 1).



- zależy od problemu (patrz formuła z Δf i $\mathbf{P}_c$)



- np. $p \approx 0.98$ i średnie $\Delta f = 1000 \Rightarrow c_0 \approx 49\,500$
- albo symulujemy podgrzewanie...

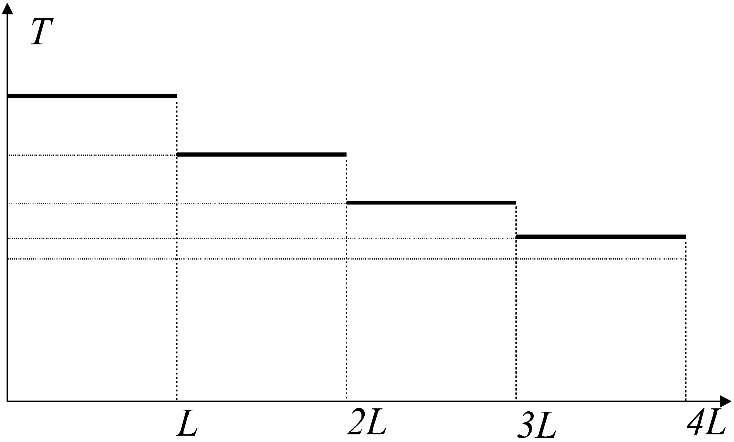
Sposób chłodzenia Kirkpatricka, Gelatta i Vecchi'ego

- Zmniejszanie wartości parametru kontrolnego:

  $$c_{k+1} = \alpha\ c_k, \qquad k = 1, 2, \ldots$$
  $$c_{k+1} = \alpha^k\ c_0$$

  α jest stałą mniejszą od 1 (np. $0.8 - 0.99$)

Prosty sposób chłodzenia: np. $L_k = L$



Długość łańcucha Markowa

- powinna wystarczyć by algorytm mógł „odwiedzić” wszystkich sąsiadów przynajmniej raz (osiągnąć stan równowagi termodynamicznej na każdym poziomie temperatury)
- ponieważ prawdopodobieństwo akceptacji zmniejsza się w czasie, można by się spodziewać $L_k \to \infty$ dla $c_k \to 0$. Dlatego ogranicza się długość łańcucha Markowa dla małych c_k
- w praktyce – proporcjonalna do średniego rozmiaru sąsiedztwa

Wartość końcowa parametru kontrolnego

Algorytm kończy działanie, gdy np. bieżące rozwiązanie nie zmieni się dla kilku kolejnych łańcuchów Markowa.

Inne schematy chłodzenia