

Sprawozdanie z Projektu Zaliczeniowego

Fizyka Ogólna

Temat:

Simulated Annealing - interpretacja
Pythonowa

Autorzy:

Bartosz Wojtaś 337408
Norbert Gościcki 337329

7 lutego 2026

Spis treści

1	Wstęp Teoretyczny	2
1.1	Analogia termodynamiczna	2
1.2	Podstawy fizyki statystycznej	2
2	Model Fizyczny Projektu	2
2.1	Definicja Hamiltonianu	2
2.2	Dynamika układu i operator ruchu	3
3	Implementacja i Parametryzacja	3
3.1	Kluczowe stałe symulacji	3
4	Przebieg Symulacji i Wyniki	3
4.1	Faza 1: Chaos (Wysoka Temperatura)	4
4.2	Faza 2: Tworzenie klastrów (Średnia Temperatura)	4
4.3	Faza 3: Krystalizacja i Hartowanie (Niska Temperatura)	5
5	Wnioski	5

1 Wstęp Teoretyczny

1.1 Analogia termodynamiczna

Metoda symulowanego wyżarzania (*Simulated Annealing*, SA) jest algorytmem heurystycznym inspirowanym procesem wyżarzania w metalurgii. W fizyce ciało stałe ogrzewa się do wysokiej temperatury, w której atomy zyskują dużą swobodę ruchu (faza ciekła), a następnie powoli ochładza. Pozwala to atomom na zajęcie pozycji w sieci krystalicznej o minimalnej energii wewnętrznej.

Zbyt szybkie chłodzenie (hartowanie) prowadzi do powstania defektów sieci i stanu metastabilnego (szkła), który odpowiada lokalnemu minimum energii. Powolne chłodzenie umożliwia osiągnięcie stanu podstawowego (kryształu idealnego), co odpowiada globalnemu minimum funkcji celu.

1.2 Podstawy fizyki statystycznej

Podstawą teoretyczną metody jest statystyka Boltzmann-Gibbsa. Prawdopodobieństwo P , że układ w temperaturze T znajdzie się w stanie o energii E , wyraża się wzorem:

$$P(E) \sim \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) \quad (1)$$

gdzie k_B to stała Boltzmann.

W algorytmie SA kluczowa jest akceptacja stanów o wyższej energii ("gorszych"), co pozwala na ucieczkę z minimów lokalnych. Prawdopodobieństwo przejścia ze stanu E_1 do stanu E_2 (gdzie $\Delta E = E_2 - E_1 > 0$) zdefiniowane jest przez kryterium Metropolis:

$$P(\text{akceptacja}) = \begin{cases} 1 & \text{dla } \Delta E \leq 0 \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right) & \text{dla } \Delta E > 0 \end{cases} \quad (2)$$

W wysokich temperaturach mianownik ułamka w wykładniku jest duży, co sprawia, że $P \approx 1$ – układ zachowuje się jak gaz (duża entropia). W niskich temperaturach $P \rightarrow 0$ dla $\Delta E > 0$, co wymusza "zamrażanie" układu w dolinach potencjału.

2 Model Fizyczny Projektu

W zrealizowanym projekcie problem komiwojażera (TSP) zmapowano na układ fizyczny cząstek oddziałujących.

2.1 Definicja Hamiltonianu

Rolę Hamiltonianu (funkcji energii całkowitej układu) pełni suma euklidesowych odległości między kolejnymi miastami w permutacji. Dla N miast, gdzie miasto i ma współrzędne (x_i, y_i) , energia E wynosi:

$$H = E_{tot} = \sum_{i=1}^N \sqrt{(x_{i+1} - x_i)^2 + (y_{i+1} - y_i)^2} \quad (3)$$

gdzie przyjmujemy warunek brzegowy $x_{N+1} = x_1$ (zamknięta pętla).

2.2 Dynamika układu i operator ruchu

Aby symulować fluktuacje termiczne, zastosowano operator topologiczny typu **2-opt**. Polega on na "rozcięciu" trasy w dwóch losowych miejscach i odwróceniu (rewersji) fragmentu ścieżki. Z fizycznego punktu widzenia jest to lokalna perturbacja układu, mająca na celu eliminację przecięć (węzłów), które w tej analogii reprezentują stany wysokoenergetyczne.

3 Implementacja i Parametryzacja

Program zaimplementowano w języku Python z wykorzystaniem biblioteki `matplotlib` do wizualizacji w czasie rzeczywistym.

3.1 Kluczowe stałe symulacji

Na podstawie kodu źródłowego przyjęto następujące parametry termodynamiczne:

- **Liczba stopni swobody:** $N = 60$ (liczba miast).
- **Temperatura początkowa (T_0):** 2500.0. Jest to temperatura dobrana eksperymentalnie, zapewniająca niemal 100% akceptację gorszych rozwiązań w początkowej fazie (faza "topnienia").
- **Schemat chłodzenia:** Zastosowano chłodzenie geometryczne (wykładnicze):

$$T_{k+1} = \alpha \cdot T_k \quad (4)$$

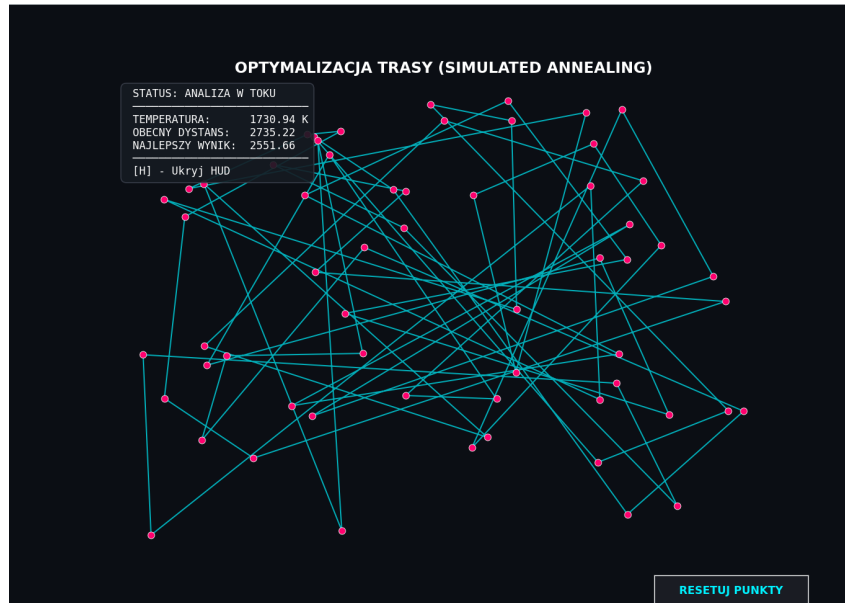
gdzie współczynnik chłodzenia $\alpha = 0.9993$. Taka wartość (bliska 1) symuluje bardzo powolne odprowadzanie ciepła, co jest warunkiem koniecznym do krystalizacji.

4 Przebieg Symulacji i Wyniki

Przeprowadzono serię symulacji, obserwując ewolucję układu. Proces można podzielić na trzy wyraźne fazy termodynamiczne.

4.1 Faza 1: Chaos (Wysoka Temperatura)

Dla $T > 1000$, układ zachowuje się jak gorący gaz. Akceptowane są niemal wszystkie zmiany, w tym te drastycznie wydłużające trasę. Wizualnie objawia się to "migotaniem" całej struktury i dużą liczbą przecięć. Energia układu fluktuuje wokół wysokiej średniej.



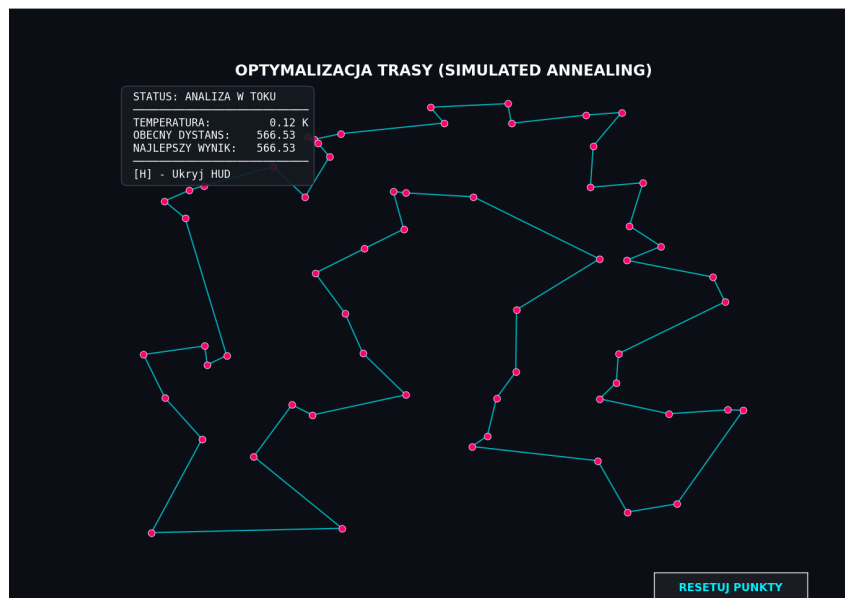
Rysunek 1: Układ w wysokiej temperaturze. Widoczne liczne przecięcia tras (wysoka energia wzbudzenia).

4.2 Faza 2: Tworzenie klastrów (Średnia Temperatura)

W miarę spadku temperatury ($T \approx 500 - 200$), układ zaczyna formować lokalne struktury (klastry). Połączenia między bliskimi miastami stają się stabilne, ale globalna struktura wciąż ulega zmianom. Jest to odpowiednik formowania zarodków krystalizacji w cieczy.

4.3 Faza 3: Krystalizacja i Hartowanie (Niska Temperatura)

Dla $T < 10$, prawdopodobieństwo akceptacji pogorszenia wyniku dąży do zera ($\exp(-\Delta E/T) \rightarrow 0$). Układ "osiada" w lokalnym minimum. Dzięki powolnemu chłodzeniu ($\alpha = 0.9993$), obserwujemy eliminację ostatnich przecięć (rozplątywanie węzłów). Końcowa trasa tworzy otwarty wielokąt bez samoprzecięć.



Rysunek 2: Stan końcowy (temperatura bliska 0). Układ osiągnął stan o niskiej energii (krótka trasa bez przecięć).

5 Wnioski

Zrealizowany projekt potwierdza skuteczność metod fizyki statystycznej w rozwiązywaniu problemów optymalizacji kombinatorycznej. Kluczowe obserwacje:

1. **Rola temperatury:** Temperatura pełni rolę parametru kontrolnego sterującego entropią układu. Umożliwia ucieczkę z minimów lokalnych, co jest niemożliwe w klasycznych algorytmach zachłannych.
2. **Szybkość chłodzenia:** W eksperymentach z mniejszym współczynnikiem α (np. 0.90), układ zastygał zbyt szybko, pozostawiając liczne przecięcia (defekty). Wartość 0.9993 okazała się optymalna dla 60 miast.
3. **Topologia:** Metoda 2-opt jest wysoce efektywna w eliminowaniu przecięć, co w języku fizyki odpowiada relaksacji naprężeń topologicznych w sieci.

Algorytm symulowanego wyżarzania jest doskonałym przykładem transferu wiedzy z termodynamiki do informatyki stosowanej.