

Algorytm symulowanego wyżarzania

Opis algorytmu

Podstawy algorytmu symulowanego wyżarzania zostały opisane po raz pierwszy w roku 1953 przez Metropolisia. Zarówno swoją nazwę, jak i sposób działania zawdzięcza on analogii do pewnych zjawisk fizycznych. W procesach ochładzania (zestalania) cieczy, jak i stygnięcia metali zaobserwowano, że przy stopniowym, powolnym ochładzaniu, cząsteczki ciała oddając energię rozkładają się w sposób bardziej systematyczny tworząc bardziej równomierne struktury. Jeżeli spadek temperatury jest zbyt szybki, to cząsteczki ciała nie znajdują optymalnego położenia i rozłożą się bardziej chaotycznie. Podstawowym wzorem wykorzystywanym w termodynamice do opisu powyższego zjawiska, który został niejako przeniesiony do opisywanego algorytmu jest wzór:

$$P(E) \approx e^{\left(\frac{-E}{kT}\right)} \quad (1)$$

gdzie k jest stałą Boltzmanna.

Algorytm symulowanego wyżarzania

Opis algorytmu

Algorytm symulowanego wyżarzania jest rozwinięciem wcześniejszych metod iteracyjnych, które opierały się na ciągłym ulepszaniu istniejącego rozwiązania do momentu, gdy nie udawało się go dalej poprawić.

Przejście z jednego rozwiązania do drugiego jest realizowane przez tzw. funkcję przejścia i polega na znalezieniu rozwiązania sąsiedniego, co jest zależne od problemu, w którym algorytm jest zastosowany. Wadą tych metod było to, że zatrzymywały się one przy rozwiązaniu pseudo-optymalnym stanowiącym jedynie minimum lokalne optymalizowanej funkcji. Algorytm taki nie miał możliwości „wyjść” z niego, aby kontynuować optymalizację w kierunku globalnego minimum.

Algorytm symulowanego wyżarzania

Opis algorytmu

Ważną różnicą pomiędzy pierwotnymi metodami iteracyjnymi, a algorytmem symulowanego wyżarzania jest możliwość wyboru przez niego gorszego rozwiązania. Wybór taki jest dokonywany z pewnym prawdopodobieństwem. Dzięki temu algorytm symulowanego wyżarzania może w określonych warunkach wyjść ze znalezionej minimum lokalnego i dalej podążać w kierunku rozwiązania optymalnego.

Algorytm symulowanego wyżarzania

Opis algorytmu

Parametrem algorytmu, który ma wpływ na prawdopodobieństwo wyboru gorszego rozwiązania jest parametr przeniesiony bezpośrednio z podstaw termodynamicznych algorytmu, czyli temperatura. Im wyższa, tym prawdopodobieństwo wyboru gorszego rozwiązania jest większe. Im niższa, tym algorytm jest bardziej zbliżony w działaniu do typowych metod iteracyjnych. To właśnie znajduje odzwierciedlenie w drugim ważnym aspekcie algorytmu symulowanego wyżarzania czyli w powolnym ochładzaniu.

Algorytm symulowanego wyżarzania

Opis algorytmu

Na początku działania algorytmu temperatura jest wysoka, dzięki czemu algorytm może bardzo często zmieniać konfigurację rozwiązania, niejednokrotnie wybierając rozwiązanie gorsze. Wraz z kolejnymi iteracjami algorytmu temperatura spada i wybierane są częściej rozwiązania lepsze. Pod koniec pracy algorytmu, temperatura jest na tyle niska, że prawdopodobieństwo wyboru gorszego rozwiązania jest bliskie zeru. Algorytm zachowuje się wówczas, jak typowy algorytm iteracyjny i stara się maksymalnie ulepszyć rozwiązanie.

Algorytm symulowanego wyżarzania

Schemat algorytmu symulowanego wyżarzania

Wyznaczyć rozwiązanie początkowe s

Wyznaczyć temperaturę początkową t

repeat

 for $i = 0$ to L

 Wyznaczyć losowo sąsiednie rozwiązanie $s' \in N(s)$

$\delta = f(s') - f(s)$

 if $\delta < 0$ then $s = s'$

 else

 Wylosować x z zakresu $(0,1)$

 if $(x < \exp(\frac{-\delta}{t}))$ then $s = s'$

$t = \alpha(t)$

until warunekzatrzymania = true

Zwrócić rozwiązanie s

gdzie:

- s - bieżące rozwiązanie,
- $N(s)$ - zbiór sąsiednich rozwiązań dla rozwiązania s ,
- δ - różnica kosztów rozwiązań: nowego i poprzedniego,
- $f(s)$ - funkcja oceny rozwiązania (funkcja kosztu),
- t - aktualna temperatura,
- $\alpha(t)$ - funkcja zmiany temperatury,
- L - długość epoki (liczba wewnętrznych iteracji).

Algorytm symulowanego wyżarzania

Opis algorytmu

Okazuje się, że ta dość prosta strategia została zastosowana z dużym powodzeniem w wielu problemach optymalizacyjnych. Czasami są wprowadzane pewne modyfikacje w stosunku do algorytmu podstawowego, dotyczące np. kryterium zatrzymania algorytmu bądź też sposobu zmiany temperatury. Niektóre implementacje algorytmu symulowanego wyżarzania są zrealizowane tak, że algorytm pracuje w sposób ciągły, teoretycznie w nieskończoność starając się ulepszać rozwiązanie. Ten sposób jest pomocny w sytuacjach, gdy dane wejściowe algorytmu ulegają modyfikacjom w trakcie jego działania.

Algorytm symulowanego wyżarzania

Oprócz przedstawionego powyżej schematu algorytmu, stosuje się często również jego zmodyfikowaną wersję z zapamiętywaniem najlepszego rozwiązania. Jej ogólny schemat wygląda następująco

```
Wyznaczyć rozwiązanie początkowe  $s$  i  $s_B$ 
Wyznaczyć temperaturę początkową  $t$ 
repeat
  for  $i = 0$  to  $L$ 
    Wyznaczyć losowo sąsiednie rozwiązanie  $s' \in N(s)$ 
    if  $(f(s') < f(s_B))$  then  $s_B = s'$ 
     $\delta = f(s') - f(s)$ 
    if  $\delta < 0$  then  $s = s'$ 
    else
      Wylosować  $x$  z zakresu  $(0,1)$ 
      if  $(x < \exp(\frac{-\delta}{t}))$  then  $s = s'$ 
   $t = \alpha(t)$ 
until warunekzatrzymania = true
Zwrócić rozwiązanie  $s_B$ 
```

Sednem działania tej wersji algorytmu jest wykorzystanie jeszcze jednego rozwiązania oprócz bieżącego i sąsiedniego. Jest to rozwiązanie najlepsze, które na początku działania algorytmu jest rozwiązaniem inicjalnym. W toku dalszego działania algorytmu rozwiązanie to zostaje zastąpione nowo znalezionym rozwiązaniem sąsiednim w przypadku, gdy koszt rozwiązania sąsiedniego jest niższy niż koszt rozwiązania najlepszego. Na koniec działania algorytmu zwracane jest właśnie to rozwiązanie najlepsze.

Algorytm symulowanego wyżarzania

Opis algorytmu

Dzięki temu mamy pewność, że rozwiązanie zwracane przez algorytm jest najlepszym rozwiązaniem znalezionym podczas jego działania. W pierwotnej wersji algorytmu zwracane jest rozwiązanie bieżące, w takim stanie w jakim znajduje się ono po osiągnięciu kryterium zatrzymania. Może więc się zdarzyć, że algorytm po osiągnięciu najlepszego możliwego rozwiązania, przejdzie do rozwiązania gorszego i zostanie w tym punkcie. Jeśli nie uda mu się ponownie wyjść z tego punktu do rozwiązania lepszego, to w rezultacie otrzymamy rozwiązanie gorsze od najlepszego, mimo że po drodze takie rozwiązanie zostało znalezione. Dlatego też druga wersja algorytmu jest częściej stosowana i została użyta także w niniejszej pracy.

Algorytm symulowanego wyżarzania

Parametry algorytmu

Na działanie algorytmu symulowanego wyżarzania mają wpływ jego parametry i sposób ich wyznaczania. Do ogólnych parametrów algorytmu, niezależnych od problemu w jakim jest on stosowany, należą: temperatura początkowa (T_0), długość epoki (liczba wewnętrznych iteracji algorytmu), funkcja zmiany temperatury i kryterium zatrzymania. Istnieje wiele różnych wariantów wyznaczania temperatury początkowej. Jedną z bardziej rozbudowanych metod jest przyjęcie pewnego prawdopodobieństwa, z jakim ma być przyjęte gorsze rozwiązanie w pierwszej iteracji algorytmu. Na tej podstawie i w wyniku działania pewnej liczby kroków funkcji zmieniającej konfigurację wyznacza się temperaturę początkową. Dobrym i prostszym sposobem jest uwarunkowanie temperatury początkowej od kosztu rozwiązania początkowego. Mając określoną funkcję kosztu rozwiązania (zależną od implementacji algorytmu w konkretnym problemie) wyznaczamy T_0 przez pomnożenie wartości kosztu rozwiązania początkowego przez przyjęty z góry współczynnik.

Algorytm symulowanego wyżarzania

Parametry algorytmu

Długość epoki ma znaczący wpływ na działanie algorytmu. Im jest ona dłuższa, tym algorytm może dokonywać większej liczby zmian w konfiguracji znajdując się na określonym poziomie temperatury i tym samym większe są szanse na znalezienie lepszych rozwiązań. Teoretycznie jej długość jest wyznaczana jako określony procent wielkości sąsiedztwa konfiguracji. Jednakże w praktyce trudno jest czasami określić wielkość sąsiedztwa, bądź też zależy ona w znacznym stopniu od konkretnej implementacji. Dlatego też jej długość najczęściej zostaje wyznaczona eksperymentalnie dla konkretnego problemu. Generalnie im dłuższa epoka tym algorytm działa dokładniej, ale jednocześnie zwiększa się czas jego wykonania.

Algorytm symulowanego wyżarzania

Parametry algorytmu

Funkcja zmiany temperatury prawie zawsze jest sprowadzana do operacji $T = rT$, gdzie r jest z góry określonym współczynnikiem. Ten sposób zmiany temperatury jest w zupełności wystarczający, natomiast wielkość współczynnika r waha się zwykle pomiędzy 0.85 a 0.98.

Algorytm symulowanego wyżarzania

Parametry algorytmu

Kryterium zatrzymania jest parametrem, który w największym stopniu podlega modyfikacjom w konkretnych implementacjach algorytmu symulowanego wyżarzania. Najczęstszym i najprostszym sposobem jest przyjęcie określonej liczby kroków (zewnętrznej pętli algorytmu). Innym często stosowanym sposobem jest zatrzymywanie algorytmu w momencie, gdy od pewnej (ustalonej) liczby kroków nie dokonano poprawy rozwiązania. Jeszcze innym rozwiązaniem jest zatrzymywanie algorytmu w momencie, gdy liczba zaakceptowanych ruchów spośród wszystkich ostatnio wykonanych spadła poniżej określonego procenta. Generalnie im dłużej algorytm może działać zanim zostanie osiągnięte kryterium zatrzymania tym lepsze może uzyskać wyniki. Trzeba jednak pamiętać, że ma to także wpływ na znaczne wydłużenie czasu jego działania.