

Optymalizacja. Symulowane wyżarzanie

dr hab. inż. Maciej Komosiński, prof. PP

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

- 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

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 Boltzmannna

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 Boltzmannna

Analogie do optymalizacji

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

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

Kryterium akceptacji

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

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

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 $\exp(-(f(x') - f(x))/C_k) > \text{random}[0, 1)$ then

$x := x'$

end

$k := k + 1$

OBLICZ(C_k)

until WARUNEK_STOPU

end

procedure SYMULOWANE_WYZARZANIE

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 $\exp(-(f(x') - f(x))/C_k) > \text{random}[0, 1)$ then

$x := x'$

end

$k := k + 1$

OBLICZ(C_k)

until WARUNEK_STOPU

end

cykle...

- można uzyskać takie L_k i c_k , które zapewniają zbieżność SW do optimum

- 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 jest sekwencją prób (rozwiązań), w której prawdopodobieństwo wyniku danej próby zależy (tylko) od wyniku poprzedniej próby.

- 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 (jednorodny w czasie).

Sposób (schemat) chłodzenia określa

- skończona sekwencja wartości parametru kontrolnego, tj.
 - początkowa wartość parametru kontrolnego c_0
 - funkcja dekrementacji parametru kontrolnego
 - końcowa wartość parametru kontrolnego

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).

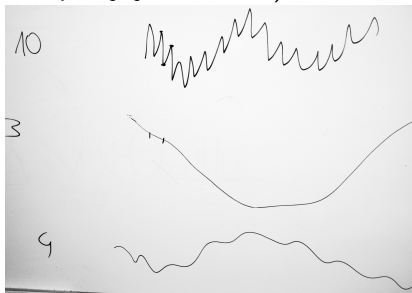
Wartość początkowa parametru kontrolnego

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



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 P_c)

$$0.99 = e^{-\frac{\Delta f}{c}}$$
$$\ln 0.99 = -\frac{\Delta f}{c}$$

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

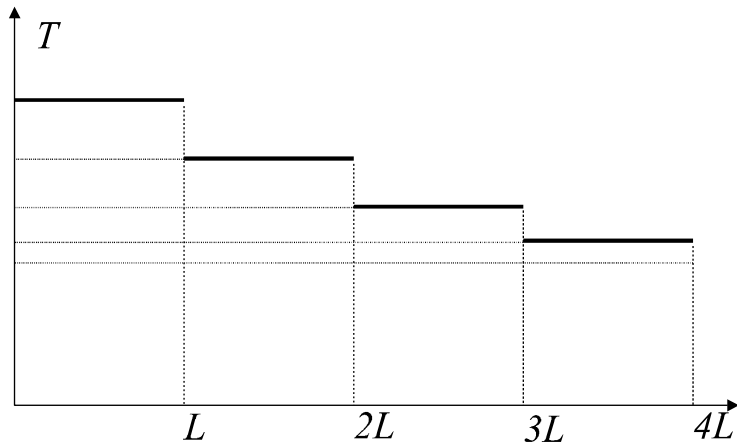
- Zmniejszanie wartości parametru kontrolnego:

$$c_{k+1} = \alpha c_k, \quad k = 1, 2, \dots$$

$$c_{k+1} = \alpha^k c_0$$

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

Prosty sposób chłodzenia: np. $L_k = L$



- powinna wystarczyć by algorytm mógł „odwiedzić” wszystkich sąsiadów przynajmniej raz (osiągnąć stan równowagi termodynamicznej na każdym poziomie temperatury)

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 $L_k \rightarrow \infty$ dla $c_k \rightarrow 0$. Dlatego ogranicza się długość łańcucha Markowa dla małych c_k

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 $L_k \rightarrow \infty$ dla $c_k \rightarrow 0$. 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

