

НОВЫЙ РЕЖИМ ОХЛАЖДЕНИЯ В АЛГОРИТМЕ СИМУЛЯЦИИ ОТЖИГА

П. М. Карпов

Вычислительный центр им. А. А. Дородницына Российской академии наук

Поступила в редакцию 10.02.2016 г.

Аннотация. В работе предложен новый режим охлаждения для алгоритма симуляции отжига. Его аналитическая форма получена при помощи эмпирической модели поведения симуляции отжига и условия постоянной термодинамической скорости. Тесты на множестве задач глобальной оптимизации показывают, что новый режим по эффективности обычно превосходит наиболее распространённое геометрическое охлаждение.

Ключевые слова: симуляция отжига, комбинаторная оптимизация, глобальная оптимизация, метаэвристики.

Annotation. A novel simulated annealing cooling schedule is proposed. Its analytic form is derived from the empiric model of the simulated annealing dynamics and the constant thermodynamic speed condition. Tests performed on multiple global optimization problems demonstrate that the proposed schedule typically outperforms the geometric cooling.

Keywords: simulated annealing, combinatorial optimization, global optimization, metaheuristics.

ВВЕДЕНИЕ

Симуляция отжига (СО) – алгоритм оптимизации, предложенный Киркпатриком [1] и независимо Черны [2], являющийся адаптацией алгоритма выборки Метрополиса [3]. СО имитирует процесс отжига в металлургии, при котором металл нагревается до температуры выше температуры кристаллизации и затем медленно охлаждается. Этот процесс устраняет внутреннее напряжение и в результате приводит к кристаллической решётке с малой внутренней энергией. СО находит широкое применение благодаря эффективности и простоте реализации.

Сформулируем задачу оптимизации: найти решение x , максимизирующее или минимизирующее целевую функцию (ЦФ) $E(x)$. Допустим также, что имеется метод генерации случайных ходов, переводящих решение x в соседнее решение x' . На каждом шаге рассмотрению подвергается новое соседнее решение. В отличие от стохастического восхождения (hillclimbing), которое принимает лишь ходы, приводящие к улучшению, СО

иногда принимает ходы, ухудшающие значение ЦФ, что позволяет ей выходить из локальных оптимумов. Без ограничения общности допустим, что мы имеем дело с проблемой минимизации. В классическом алгоритме СО используется критерий Метрополиса: вероятность принятия хода, приводящего к изменению энергии (ЦФ) $\Delta E = E(x') - E(x)$ есть

$$P(\Delta E / T) = \min \left(\exp \left(-\frac{\Delta E}{T} \right), 1 \right),$$

где T – параметр по аналогии с оригинальным процессом называемый температурой и имеющий ту же размерность, что и ЦФ. Все ходы, приводящие к улучшению ($\Delta E \leq 0$) принимаются, но вероятность принятия ухудшающих ходов ($\Delta E > 0$) зависит от температуры. Лишь ходы с ΔE порядка T имеют значительный шанс принятия, в то время как ходы с $\Delta E \gg T$ скорее всего будут отвергнуты. Изменяя параметр T , можно контролировать свойства поиска: при очень высоких температурах принимаются почти все ходы (случайный поиск, жидкое состояние), в то время как при очень низких температурах принимаются лишь хорошие ходы (локаль-

<code>i := 0</code>	Сбросить счётчик итераций
<code>x := Random_Solution</code>	Создать начальное решение
<code>Best := x</code>	
repeat	
<code>x' := Random_Neighbour(x)</code>	Сгенерировать соседнее решение
<code>dE := E(x') - E(x)</code>	Вычислить изменение энергии
if <code>Random < P(dE / T(i))</code> then	Принять или отвергнуть
<code>x := x'</code>	пользуясь критерием принятия
if <code>E(x) < E(Best)</code> then	Обновить лучшее решение
<code>Best := x</code>	
<code>i := i + 1</code>	
until <code>Stopping_Condition</code>	Проверить критерий остановки
return <code>Best</code>	Вернуть лучшее решение

ный поиск, кристаллическое состояние). СО работает постепенно понижая температуру, что позволяет изучить пространство поиска сначала на грубом, а затем на более тонком уровне.

Обобщённая процедура СО может быть записана следующим образом (Алгоритм).

Наиболее значимым элементом алгоритма, не относящимся к постановке задачи, является температурный режим. Целью настоящей работы является поиск функции $T(i)$, повышающей эффективность оптимизации. Вопрос выбора температурного режима можно сформулировать в терминах задачи оптимального управления процессом отжига. При таком рассмотрении управляющим воздействием является температура, критерием качества управления – наилучшее достигнутое значение целевой функции. Как будет показано в следующей части, привлечение понятий термодинамики позволяет получить решение поставленной таким образом задачи в виде управления с обратной связью. Однако такое решение обладает рядом недостатков. Отсутствие явного выражения для функции $T(i)$ не позволяет вычислить время работы алгоритма и затрудняет анализ его поведения. Управление осложняется необходимостью численной оценки параметров процесса. В данной работе предложен альтернативный подход, основанный на принципе разомкнутого управления и позволяющий получить функцию температуры в явном виде.

ОПТИМАЛЬНОЕ ОХЛАЖДЕНИЕ

Полезной величиной, происходящей из исходной термодинамической аналогии является теплоёмкость, которая определяется так (см. [1]):

$$C(T) = \frac{\partial \langle E(T) \rangle}{\partial T} = \frac{1}{k} \frac{\sigma^2(T)}{T^2}.$$

Приведённое равенство нетрудно доказать с использованием статсуммы Z :

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i}, \quad p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}, \quad \beta = \frac{1}{kT},$$

где β – обратная температура, p_i – вероятность микросостояния i .

Оптимальный в термодинамическом смысле режим соответствует минимальному производству энтропии при заданном начальном и конечном состоянии. Для информационных процессов, энтропия имеет смысл необходимого количества информации, что в алгоритме симуляции отжига соответствует количеству итераций. Приближённым решением задачи минимального производства энтропии является режим постоянной термодинамической скорости [4]:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{\nu T}{\epsilon \sqrt{C}}, \quad \nu = \frac{\langle E \rangle - E_{eq}(T)}{\sigma},$$

где ν – термодинамическая скорость, ϵ – время релаксации системы, $\langle E \rangle$ – средняя энергия системы, $E_{eq}(T)$ – энергия системы в равновесии со средой температуры T , σ –

стандартное отклонение энергии. При таком режиме система всегда находится на расстоянии фиксированного количества σ от равновесия. Если положить ϵ постоянной величиной, этот режим преобразуется в

$$\frac{dT}{dt} = -A \frac{T}{\sqrt{C}}, \quad \frac{d \ln T}{dt} = -A \frac{T}{\sigma}.$$

Другими словами, логарифмическая производная температуры обратно пропорциональна нормированному стандартному отклонению σ/T . В дальнейшем будем подразумевать постоянство времени релаксации, так как это устраняет необходимость его измерения и значительно упрощает расчёты.

НОВЫЙ РЕЖИМ ОХЛАЖДЕНИЯ

Возможный способ получения новых режимов состоит в постулировании некоторой формы теплоёмкости или стандартного отклонения энергии и последующем решении дифференциального уравнения для режима постоянной термодинамической скорости. Для многих реальных задач, $\sigma(T)$ может быть достаточно точно описана сигмоидой в логарифмическом масштабе температур:

$$\sigma(T) \sim \left(1 + e^{-q(\ln T - \ln T_s)}\right)^{-1} = 1 / \left(1 + \left(\frac{T_s}{T}\right)^q\right),$$

где T_s – параметр центра, q – параметр ширины сигмоиды. Пример приведён на рис. 1.

В частном случае $q=1$ оказывается возможным аналитическое решение:

$$\frac{d \ln T}{dt} = -AT \left(1 + \frac{T_s}{T}\right), \quad T(0) = T_0,$$

$$T(t_{max}) = T_{fin}, \quad t_{max} = 1,$$

$$T(t) = \frac{T_s}{(1 + T_s/T_0) \left(\frac{1 + T_s/T_f}{1 + T_s/T_0}\right)^t - 1},$$

где $t = i/i_{max}$ – относительное время, лежащее в диапазоне $[0..1]$, i_{max} – общее количество итераций. Полученный режим остаётся определённым при $T_0 \rightarrow +\infty$ и принимает в таком случае вид

$$\frac{T(t)}{T_s} = \left(\left(1 + \frac{T_s}{T_f}\right)^t - 1\right)^{-1}.$$

При типичных значениях T_0 , T_s и T_f , эта предельная форма отличается от оригинала с конечной T_0 весьма незначительно. Она избавляет от параметра T_0 , поэтому будет использоваться в дальнейшем. Такое приближение не ограничивает общность, так как любая конечная температура T_0 будет пройдена в самом начале такого режима.

Время, за которое достигается температура T_s , равно

$$t = \frac{1}{\log_2 \left(1 + \frac{T_s}{T_f}\right)}.$$

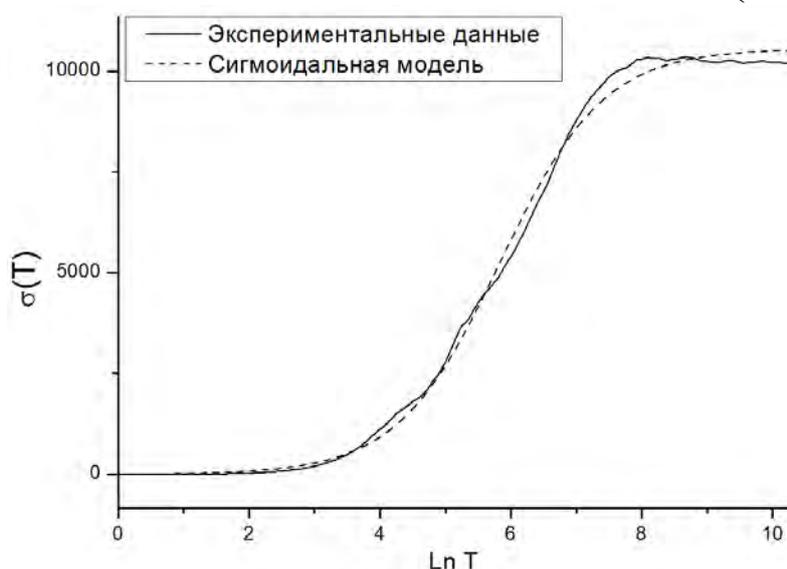


Рис. 1. Зависимость стандартного отклонения от температуры для задачи коммивояжёра (задача KroA150 из [5])

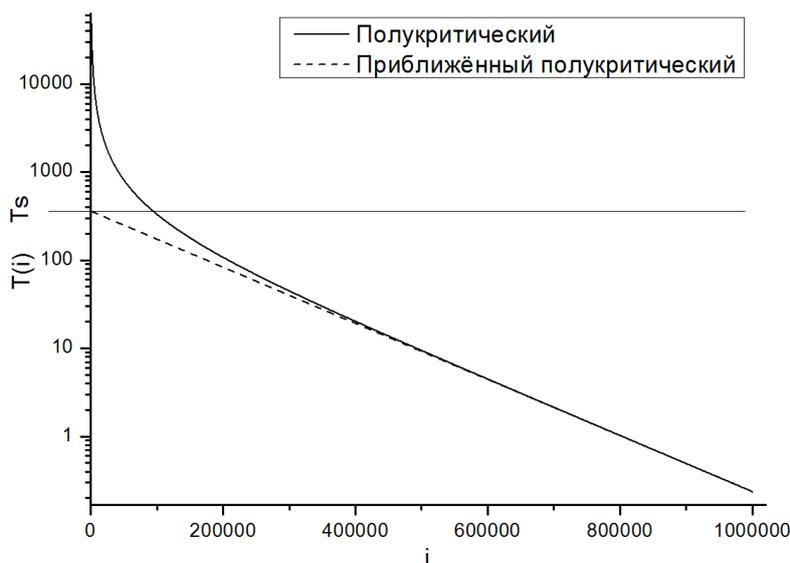


Рис. 2. Пример нового режима и его приближённой версии

Такой режим обладает следующей структурой: относительно быстрое охлаждение до T_s , затем постепенное охлаждение до T_f .

Разложение логарифма температуры в ряд Тейлора около $t = 1$ даёт:

$$\ln T(t) = \ln T_f + (1-t) \left(1 + \frac{T_f}{T_s} \right) \ln \left(1 + \frac{T_s}{T_f} \right) + O((t-1)^2),$$

что при условии $T_s \gg T_f$ преобразуется в геометрическое охлаждение с начальной температурой T_s :

$$\ln T(t) \approx (1-t) \ln T_s + t \ln T_f.$$

Оригинальный режим и его приближённая версия изображены на рис. 2.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ СРАВНЕНИЕ

Представленный режим охлаждения использует параметр центра сигмоиды T_s . Для его вычисления были использованы специальные калибровочные запуски алгоритма. Во время такого запуска отслеживается зависимость энергии от времени $E(t)$, затем вычисляется зависимость стандартного отклонения:

$$\sigma(t) = \sqrt{F \left(\left(E(t) - \langle E(t) \rangle \right)^2 \right)},$$

$$\langle E(t) \rangle = F(E(t)),$$

где F – низкочастотный фильтр.

Использовался низкочастотный фильтр с биэкспоненциальной импульсной характеристикой:

$$h(i) = e^{-\frac{|i|}{\lambda}}.$$

Параметр фильтра в каждом случае выбирался так, чтобы сглаживание было достаточно сильным для подавления случайного шума, но в то же время сохраняло характерные особенности поведения зависимостей. Искомый параметр T_s определялся путём подгонки модели $\sigma(T)$ к экспериментальным данным методом нелинейных наименьших квадратов.

Эксперименты проводились на 11 задачах глобальной оптимизации, из которых одна (кластеры Леннарда-Джонса) является непрерывной, остальные – комбинаторные. Краткие сведения о параметрах экспериментов сведены в табл. 1.

В качестве основы для сравнения выступал наиболее популярный режим геометрического охлаждения:

$$T(i) = T_0 e^{-i/\tau}, \quad \tau = i_{max} / \ln \left(\frac{T_0}{T_f} \right),$$

где T_0 и T_f – начальная и конечная температуры соответственно. Он обеспечивает быстрое охлаждение (и соответственно скорость сходимости) и демонстрирует хорошие результаты на практике. Для его объективного сравнения с другими режимами необходим автоматический способ выбора параметров

Параметры экспериментов для различных задач

Задача	Краткое имя	Случай	$i_{max} / 10^3$
Задача коммивояжёра [5]	TSP	N = 150	3000
Клеточный автомат максимальной плотности [6]	CA	N = 10	300
Построение магических квадратов	MagSqr	N = 8	200
Минимальная Доминация [7]	MinDom	N = 15	110
Максимальная Доминация [8]	MaxDom	N = 17, NQ = 9	150
Модель протеина на двумерной решётке [9]	2DHP	N = 50	50
Минимальное линейное размещение [10]	MinLA	N = 8	200
Худший случай сортировки Шелла [11]	Shellsort	N = 50	200
Кластер Леннарда-Джонса [12]	LJ	N = 27	1000
3D N ферзей [13]	3DNQ	N = 8, NQ = 48	800
Классическая криптография [14]	Crypto		50

T_0 и T_f . В настоящей работе используются следующие оценки, полученные в [15]:

$$T_0 = \frac{\Delta E_0}{P^{-1}(1/2)}, \Delta E_0 = 3\sigma_\infty$$

$$T_f = e^{-m} \frac{\Delta E_{min}}{P^{-1}(1/i_{cold})}, i_{cold} = i_{max} / 3, m = 1,$$

где σ_∞ – стандартное отклонение изменения энергии при бесконечной температуре, ΔE_{min} – минимально значимое изменение ЦФ.

Для каждой задачи и режима охлаждения производилось не менее 10^4 запусков алгоритма. После проведения эксперимента, целевые функции усреднялись и приводились к форме абсолютной ошибки в сравнении с оптимумом δ и ошибки по отношению к геометрическому охлаждению ϵ :

$$\delta = \left| \langle \text{ЦФ} \rangle - \text{ЦФ}_{opt} \right|, \epsilon = \frac{\delta}{\delta(GO)},$$

где $\langle \text{ЦФ} \rangle$ – среднее значение целевой функции, ЦФ_{opt} – глобальный оптимум целевой функции, $\delta(GO)$ – абсолютная ошибка геометрического охлаждения. Сравнение относительных ошибок для разных задач затруднено, так как задачи отличаются по сложности. Для большей наглядности данные преобразовывались в коэффициент ускорения, показывающий, во сколько раз необходимо увеличить количество итераций геометрического охлаждения для достижения результатов рас-

сматриваемого режима. Коэффициент ускорения вычисляется по формуле

$$K = 2^{\log_H \epsilon}, H = \epsilon_{GCx2},$$

где ϵ – относительная ошибка рассматриваемого режима, H – коэффициент сложности задачи, равный относительной ошибке геометрического охлаждения с вдвое большим количеством итераций. Результаты тестирования приведены в табл. 2.

Обе разновидности режима показывают лучшие результаты в сравнении с геометрическим охлаждением в 8 из 11 задач. Приближенная версия показывает лучшие результаты, чем оригинальная в 8 случаях, но из-за отсутствия высокотемпературной части является гораздо менее стабильной. Обычная версия в самом худшем случае проигрывает геометрическому охлаждению незначительно, в то время как приближенная версия в редких случаях показывает существенно худшие результаты. Влияние высокотемпературной части сильнее всего выражено для задач минимального линейного размещения, сортировки Шелла и криптоанализа. Таким образом, наиболее безопасным является использование полной версии режима, что соответствует теории. Использование приближенного режима может несколько улучшать результаты, но является рискованным.

Результаты тестирования полной и приближённой версий нового режима.
Жирным выделены лучшие результаты

Задача	Относительные ошибки		Сложность H	Коэффициенты ускорения	
	Полный	Приближённый		Полный	Приближённый
TSP	0.91766	0.86628	0.7496	1.22956	1.41231
CA	0.9843	0.92079	0.85865	1.07463	1.4555
MagSqr	0.92999	0.92494	0.8421	1.3401	1.36985
MinDom	0.95748	1.13197	0.8293	1.17458	0.63188
MaxDom	0.95697	0.80361	0.76594	1.12112	1.76535
2DHP	0.96322	0.95868	0.8645	1.19529	1.22248
MinLA	0.87727	0.79453	0.66869	1.25299	1.4861
Shellsort	1.06473	1.80964	0.86053	0.74869	0.06476
LJ	1.08637	1.14303	0.46916	0.92693	0.88476
3DNQ	0.97168	0.96458	0.90836	1.23021	1.29702
Crypto	0.97902	0.90229	0.80373	1.06958	1.38567
Медиана	0.96322	0.92494	–	1.17458	1.36985
Худший	1.08637	1.80964		0.74869	0.06476

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе был предложен новый режим охлаждения для алгоритма симуляции отжига. На основе экспериментальных данных была введена эмпирическая зависимость стандартного отклонения энергии от температуры. Использование условия постоянной термодинамической скорости в совокупности с частным случаем введённой модели позволило в аналитическом виде получить новый режим охлаждения. Полученный режим состоит из быстрого охлаждения до центральной температуры и охлаждения, близкого к геометрическому, до конечной. Для выбора температурного параметра используются специальные запуски алгоритма и последующее построение модели. Проведённое на 11 задачах глобальной оптимизации экспериментальное исследование показало, что новый режим обычно приводит к повышению эффективности на 20..40 % в сравнении с геометрическим охлаждением. Возможно, что использование более точных моделей может привести к ещё более эффективным режимам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kirkpatrick S., Gerlatt C. D. Jr., Vecchi M. P. Optimization by Simulated Annealing / S. Kirkpatrick, C. D. Gerlatt Jr., M. P. Vecchi // Science. – 1983. – № 220. – pp. 671–680.
2. Černý V. Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: An efficient simulation algorithm / V. Černý // Journal of Optimization Theory and Applications. – 1985. – № 45. – pp. 41–51.
3. Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines / N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller // The Journal of Chemical Physics. – 1953. – № 21 (6). – pp. 1087–1092.
4. Andresen B., Gordon J. M. Constant thermodynamic speed for minimizing entropy production in thermodynamic processes and simulated annealing / B. Andresen, J. M. Gordon // Physical Review E. – 1994. – № 50. – pp. 4346–4351.

5. TSPLIB / Режим доступа: <http://comopt.ifl.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95/>
6. *Chu G., Stuckey P. J., De La Banda M. G.* Using relaxations in maximum density still life / G. Chu, P. J. Stuckey, M. G. De La Banda // CP'09 Proceedings of the 15th international conference on Principles and practice of constraint programming. Heidelberg. Springer-Verlag Berlin. – 2009. – pp. 258–273.
7. A001366. The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences. / Режим доступа: <http://oeis.org/A001366>
8. *Ostergard P. R. J., Weakley W. D.* Values of Domination Numbers of the Queen's Graph / P. R. J. Ostergard, W. D. Weakley // The Electronic Journal of Combinatorics. – 2001. – Volume 8, Issue 1.
9. *Dill K. A.* Theory for the folding and stability of globular proteins / K. A. Dill // Biochemistry. – 1985. – Volume 24, No. 6. – pp. 1501–1509.
10. *Fishburn P., Tetali P., Winkler P.* Optimal linear arrangement of a rectangular grid / P. Fishburn, P. Tetali, P. Winkler // Discrete Mathematics. – 2000. – № 213. – pp. 123–139.
11. *Cotta C., Moscato P.* A Mixed Evolutionary Statistical Analysis of an Algorithm's Complexity / C. Cotta, P. Moscato // Applied Mathematics Letters. – 2003. – Vol. 16, No. 1. – pp. 41–47.
12. *Doye J.* Lennard-Jones Clusters / Режим доступа: <http://physchem.ox.ac.uk/~doye/jon/structures/LJ.html>
13. Attacking Queens Contests / Режим доступа: <http://recmath.com/contest/AttackingQueens/FinalReport.html>
14. *Clark A. J.* Optimisation Heuristics for Cryptology / A. J. Clark // PhD thesis. Queensland University of Technology. – 1998.
15. *Карпов П. М.* Выбор начальной и конечной температур в алгоритме симуляции отжига / П. М. Карпов // Научная перспектива. – 2012. – № 6. – с. 91–93.

Карпов П. М. – аспирант Вычислительного центра им. А. А. Дородницына Российской академии наук.
E-mail: reoser@mail.ru

Карпов P. M. – the PhD student of A. A. Dorodnitsyns computing center of Russian Academy Sciences.
E-mail: reoser@mail.ru