УДК 681.5.015.23

В. В. Дегтярев – студент кафедры компьютерной математики и программирования
М. Д. Поляк – научный руководитель

МЕТОД ИМИТАЦИИ ОТЖИГА В ЗАДАЧАХ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

В современном научном мире существует множество задач, сводящихся к поиску глобального оптимума некоторой функции. Однако из-за сложности нахождения глобального минимума (или максимума), решение задачи поиска сводится к нахождению локальных экстремумов, что зачастую неприемлемо в рамках, налагаемых на анализируемую систему ограничений. Сегодня возможно использование современных ЭВМ для расширения возможностей решения задач по нахождению глобальных экстремумов. На сегодняшний день метод отжига для нахождения глобального минимума широко применяется во многих оптимизационных задачах – финансовых, телекоммуникационных сетях, а также для обучения нейронных сетей.

Метод отжига в физике и металлургии – вид термической обработки металлов и сплавов, при котором производится нагревание, а затем медленное охлаждение метала. Вследствие этого происходит переход структуры кристаллической решетки в более равновесное (упорядоченное) состояние.

Метод имитации отжига – это техника оптимизации, использующая упорядоченный случайный поиск на основе аналогии с процессом образования в веществе кристаллической структуры с минимальной энергией при охлаждении.

В процессе проектирования обычно возникает задача определения наилучших значений параметров объекта. Такая задача называется оптимизационной. Если оптимизация связана с расчетом оптимальных значений параметров при заданной структуре объекта, то она называется параметрической оптимизацией [1].

Стандартная математическая задача оптимизации формулируется следующим образом. Среди элементов x, образующих множество X, найти такой элемент x', который доставляет минимальное значение $f(x')$ заданной функции $f(x)$. Для того, чтобы корректно поставить задачу оптимизации необходимо задать:

- допустимое множество – множество x;
- целевую функцию;
- критерии поиска (min или max).

От класса решаемой задачи зависит выбор конкретного метода оптимизации. Задачи можно классифицировать по виду целевой функции и области допустимых решений, которая задаётся системой равенств и неравенств или более сложным алгоритмом.

Методы оптимизации классифицируют в соответствии с задачами оптимизации:

- локальные методы сходятся к какому-нибудь локальному экстремуму целевой функции;
- глобальные методы имеют дело с многоэкстремальными целевыми функциями.

Существующие в настоящее время методы поиска можно разбить на три большие группы:

- детерминированные;
- случайные (стохастические);
- комбинаторные.

Приведем примеры алгоритмов для каждой из групп алгоритмов.

Среди детерминированных методов можно отметить:

- метод Фибоначчи;
- троечный поиск.

Среди стохастических методов можно выделить:

- метод Монте-Карло;
- метод имитации отжига;

- эволюционные алгоритмы;
- генетические алгоритмы;
- дифференциальная эволюция;
- муравьиный алгоритм;
- метод роя частиц.

В группе комбинаторных методов часто рассматривают метод ветвей и границ.

Рассмотрим задачу нахождения глобального минимума с использованием алгоритма имитации отжига для некоторой функции $f(x)$, на множестве x на некотором пространстве S. Элементы множества S представляют собой состояние физической системы, значение функции f интерпретируется как энергия системы в точке $E = f(x)$. Алгоритм имитации отжига подразумевает, что система в каждый момент времени должна обладать какой-то температурой T. Как правило, с течением времени температура уменьшается. При попадании в состояние x при температуре T, следующее состояние системы выбирается в соответствие с заданным порождающим семейством вероятностных распределений $\varsigma(x,T)$. Это семейство при фиксированных T и x задает случайный элемент $G(x,T)$ со значением в пространстве S. После генерации нового состояния $x' = G(x,T)$, система с вероятностью $h(\Delta E,T)$ переходит к следующему шагу с состоянием x', в противном случае генерация x' повторяется. Здесь ΔE обозначает приращение функции энергии $f(x') - f(x)$. Величина $h(\Delta E,T)$ называется вероятностью принятия нового состояния (см. [2]).

В качестве функции $h(\Delta E,T)$ будем использовать:

$$h(\Delta E,T) = \frac{1}{1+\exp(\Delta E / T)}. \tag{1}$$

Рассмотрим основные этапы работы алгоритма:

1) Случайным образом выбирается начальная точка $x = x_0, x_0 \in S$. Текущее значение энергии E устанавливается в значение $f(x_0)$.

2) k – я итерация основного цикла состоит из следующих шагов:

a. Сравнить энергию системы E в состоянии x с найденным на текущий момент глобальным минимумом. Если $E = f(x)$ меньше, то изменить значение глобального минимума.

b. Сгенерировать новую точку $x' = G(x,T)$.

c. Вычислить значение функции в ней $E' = f(x')$.

d. Сгенерировать случайное число α из интервала [0; 1].

e. Если $\alpha < h(E'-E, T(k))$, то установить $x = x', E = E'$ и перейти к следующей итерации. Иначе – повторить с шага (b), пока не будет найдена подходящая точка x'.

Перейдем к рассмотрению схемы Больцмановского отжига. Для Больцмановского отжига изменение температуры задается следующей формулой:

$$T(k) = \frac{T_0}{\ln(1+k)}, k > 0. \tag{2}$$

Семейство распределений $\varsigma(x,T)$ выбирается как семейство нормальных распределений с математическим ожиданием x и дисперсией T, то есть задается плотностью вероятности

$$g(x';x,T) = (2\pi T)^{-\frac{D}{2}} e^{\left(\frac{-|x'-x|^2}{2T}\right)}, \tag{3}$$

где D – размерность пространства состояний.

Рассмотрим задачу поиска минимума функции вида:

$$f(x) = \frac{0.5 + (x+4)(x+1)(x-1)(x-3)}{14}. \tag{4}$$

Для этого воспользуемся методом имитации отжига при начальной температуре $T = 10$.

График функции (4) изображен на рисунке.

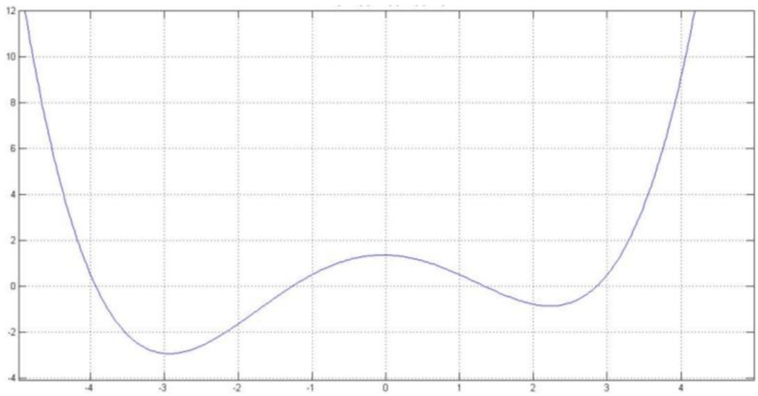

График функции (4)

Оценив график функции можно определить, что минимум функции находится приблизительно в точке -3. Также отметим, что функция имеет два минимума: в точке –3 и в точке 2,3.

Применив алгоритм Больцмановского отжига, получим следующие результаты. Минимум функции равен -2,89981. При этом температура была снижена до значения близкого к 1, после 22027 итераций. При данных начальных параметрах решения задачи поиска глобального минимума достигается в 70% случаях. Это обусловлено тем, что метод отжига является стохастическим методом поиска глобального минимума.

Для Больцмановской схемы при достаточно больших T_0, и количестве итераций K, выбор такого семейства распределений гарантирует нахождение глобального минимума.

Основным недостатком Больцмановского отжига является очень медленное убывание температуры. Например, для того, чтобы понизить исходную температуру в 40 раз, требуется примерно $e^{40} \approx 2.35*10^{17}$ итераций.

Библиографический список

1. Оптимизация (математика) [Электронный ресурс] — URL: http://ru.wikipedia.org/wiki/Оптимизация_(математика) (20.03.2012)
2. Лопатин А.С. Метод отжига. Стохастическая оптимизация в информатике, том 1, 2005 [Журнал]. С. 133-149.