

Метод имитации отжига

Метод поиска решения имитирует процесс отжига металла, когда атомы выстраиваются в кристаллическую решетку, стараясь минимизировать суммарную энергию. При достаточно большой начальной температуре каждый из атомов может совершать достаточно большие «прыжки», которые могут привести в т.ч. и к локальному увеличению суммарной энергии. По мере планомерного снижения температуры «длина» прыжков заметно уменьшается и атомы производят все меньшие колебания около состояния с минимальной энергией, которая достигается при достаточно низком конечном значении температуры.

Данной аналогией можно воспользоваться при решении оптимизационных задач. При этом энергии сопоставляется минимизируемая целевая функция $Q(X)$, прыжки атомов соответствуют случайным изменениям решения (вектора параметров X), приводящим к изменению значения целевой функции ΔQ . Если после внесения изменения $\Delta Q < 0$ (полученное решение лучше предыдущего), оно замещает текущее. Если же после внесенного случайного изменения качество решения ухудшилось ($\Delta Q > 0$), производится вычисление значения вероятности $p = e^{-\frac{\Delta Q}{T}}$, где T – текущая температура, и в случае, если $r_k > p$, где $r_k \in [0; 1]$ – очередное псевдослучайное число, решение замещает предыдущее. При этом от итерации к итерации температура уменьшается: $T^{(i)} = \alpha T^{(i-1)}$, где $\alpha \in [0; 1)$ – настроечный параметр алгоритма, регулирующий темп охлаждения, начиная с некоторого начального значения $T^{(0)}$, что приводит ко все меньшим разрешенным ухудшениям качества текущего решения ΔQ . В ходе итерационного процесса производится оценка качества всех промежуточных решений, наилучшее из которых является результатом работы алгоритма.

Приведенное ниже описание алгоритма ориентировано на решение дискретных оптимизационных задач на примере задачи поиска кратчайшего пути в графе. При этом начальное решение представляет собой путь $[a_{нач}, a_{кон}]$, который в ходе работы алгоритма подвергается следующим случайным изменениям:

- добавление случайной вершины в случайную позицию между начальной и конечной вершинами;
- удаление случайной вершины из текущего пути;
- замена случайной вершины в текущем пути на случайную еще не посещенную вершину;
- перестановка пары выбранных случайно вершин текущего пути.

Все модификации решения производятся так, чтобы начальная и конечная вершины пути всегда оставались на месте. Наибольшее влияние оказывают первая и вторая модификации решения, поэтому их требуется выполнять чаще, незначительное влияние оказывает третья модификация, четвертая практически не влияет на результат в данной задаче.

Описание алгоритма приведено ниже.

1. (инициализация) Задать начальное значение температуры $T := T^{(0)}$, номер итерации $i := 1$, текущий путь $P := [a_{нач}, a_{кон}]$, лучший путь $P^+ := [a_{нач}, a_{кон}]$.
2. Произвести случайную модификацию текущего пути P путем применения к нему одной из описанных выше модификаций.

3. Оценить полученное изменение качества решения – длины пути: $\Delta L = L(P') - L(P)$,
где P' – путь после случайной модификации. Рассчитать значение $p = e^{-\frac{\Delta L}{T}}$.
4. Если $\Delta L < 0$ или $(\Delta L > 0) \wedge (r_k > p)$, положить $P := P'$.
5. Если $L(P) < L(P^+)$, положить $P^+ := P$.
6. Произвести модификацию температуры $T := \alpha T$ и номера итерации $i := i + 1$.
7. Если $i < C$, где C – заданное число итераций, перейти к п. 2.
8. Конец алгоритма.

Для работы алгоритма требуется задание начальных значений настроечных параметров метода $T^{(0)}$, α , C , а также вероятностей применения различных модификаций решения.