

PA081: Programování numerických výpočtů

9. Simulované žihání

Aleš Křenek

jaro 2011

- ▶ při vysokých teplotách se molekuly volně pohybují
- ▶ s poklesem teploty se pohyb zpomaluje
- ▶ látky postupně krystalizují
- ▶ rychlé schlazení - velké množství malých krystalů
 - ▶ není to energeticky optimální stav
 - ▶ nízká teplota nedovoluje přeskupení
- ▶ pomalé schlazení - velké krystaly
- ▶ kritická je rychlost ochlazování

- ▶ Boltzmanova distribuce pravděpodobnosti

$$P(E) = e^{-\frac{E}{kT}}$$

- ▶ i za nízké teploty existuje malá pravděpodobnost dosažení vysoce energetického stavu
- ▶ systém může přejít i „nahoru“

- ▶ Boltzmanova distribuce pravděpodobnosti

$$P(E) = e^{-\frac{E}{kT}}$$

- ▶ i za nízké teploty existuje malá pravděpodobnost dosažení vysoce energetického stavu
- ▶ systém může přejít i „nahoru“
- ▶ standardní optimalizační algoritmy
 - ▶ cesta k nejbližšímu minimu
 - ▶ odpovídají rychlému chlazení
 - ▶ mohou minout globální minimum

- ▶ Metropolis et al., 1953, simulace termodynamického systému
- ▶ v každém kroku se vygeneruje sada možných následníků
- ▶ pravděpodobnost změny konfigurace z E_0 do E_i

$$p_i = \min\left\{e^{-\frac{E_i - E_0}{kT}}, 1\right\}$$

- ▶ k dalšímu stavu se přejde na základě náhodného výběru
- ▶ postupně se snižuje teplota T

- ▶ „energie“ je minimalizovaná funkce
- ▶ stav systému je aktuální aproximace \mathbf{x}
- ▶ potřebujeme generátor náhodných změn $\Delta\mathbf{x}$
 - ▶ nejproblematictější část
 - ▶ existuje-li cesta „dolů“, měl by ji nabídnout
- ▶ různé navržené metody vhodné pro různé problémy

- ▶ zachovává operace reflexe, expanze, a kontrakce
- ▶ počítá s **modifikovanými funkčními hodnotami**
 - ▶ náhodná funkce, velikost úměrná teplotě T
 - ▶ **přičtená** k hodnotě uložené ve vrcholu simplexu
 - ▶ **odečtená** od hodnoty v nově zkoušené bodě
- ▶ je-li nemodifikovaný krok „dolů“, je přijat
- ▶ úměrně teplotě jsou někdy přijaty i kroky „nahoru“
- ▶ při nenulové teplotě se simplex roztáhne na celou dosažitelnou oblast
- ▶ postupným schlazením se zachytí v nejhlubším minimu
 - ▶ nikoli jistě, pouze pravděpodobně

- ▶ různé strategie chlazení
 - ▶ snížení T na $T(1 - \epsilon)$ po každých m krocích
 - ▶ snížení na $T_0(1 - k/K)$ po m krocích
 k, K jsou počty provedených/plánovaných kroků
 - ▶ a další ...
- ▶ restart metody
 - ▶ některý vrchol simplexu je nahrazen dosavadním nejlepším bodem
 - ▶ nesmí být uvnitř

- ▶ rozšíření standardních metod o „teplotní“ faktor
- ▶ využívají náhodný generátor
 - ▶ nalezení globálního minima pouze s jistou pravděpodobností
 - ▶ při různé inicializaci různé výsledky
 - ▶ citlivé na rychlost „chlazení“
- ▶ vhodné pro funkce bohaté na lokální minima
 - ▶ standardní metoda se téměř jistě chytí do pasti
- ▶ mohou pomoci v případech, kdy neznáme chování funkce dopředu
 - ▶ poslední zoufalý pokus, nikoli univerzální řešení