

SIMULATED ANNEALING

1 Grundidee

Annealing ist der Begriff aus der Physik, speziell Thermodynamik, welches einen Abkühlprozess beschreibt. Uns speziell interessiert eine Art Schmelze, die in einem zu abkühlenden Wärmebad eingebettet ist. Vereinfacht formuliert versucht die abkühlende Schmelze eine Struktur anzunehmen, sodass der Energiezustand möglichst gering ist. Bei hinreichend langsamer Abkühlung kristallisiert die Schmelze, sodass bei einem speziellen Temperaturniveau diese mit geringster (null) Energie einfriert. Wird die Schmelze zu schnell abgekühlt (abgeschreckt, schockgekühlt), so frieren die Atome/Moleküle in einer weniger günstigen Struktur ein, und die Schmelze bleibt in einem lokalen Energieminimum hängen, und hat nicht mehr die Möglichkeit, ohne Zufuhr von Energie von aussen (=Temperaturerhöhung im Wärmebad), zu einer anderen Struktur zu wechseln.

Als erste Näherung ist das eine korrekte Beschreibung des Abkühlprozesse, der aber komplexer als in dieser Darstellung ist, denn das Energieniveau bei gegebener Temperatur der Schmelze kann durchaus variieren. Die statistische Mechanik lehrt uns, dass das Energieniveau durch eine stochastische Größe mit der Gibbs-Boltzmann Dichtefunktion (Temperatur T fixiert) beschrieben werden,

$$P\{\text{Schmelze hat das Energieniveau } E\} = \frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{E}{k_b T}}$$

wobei $k_b = 1.3806 \cdot 10^{-23}$ J/K die Boltzmannkonstante ist, und ($Z(T)$ ist eine Normierungskonstante, sodass es eine Wahrscheinlichkeitsverteilung ergibt).

Dies zeigt, dass bei gegebener Temperatur für die Schmelze jedes Energieniveau möglich ist, unterschiedliche Energieniveaus aber jeweils mit unterschiedlicher Wahrscheinlichkeit annimmt. Es ist aber das Energieniveau tendenziell geringer, sofern die Temperatur niedriger ist. Anders ausgedrückt, die Wahrscheinlichkeit, dass das System gleiches oder höheres als ein vorgegebenes Energieniveau $\bar{E} > 0$ hat, nimmt bei sinkender Temperatur ab. Senkt man nun die Temperatur T gegen 0, so geht auch die Wahrscheinlichkeit, dass das System in einem Energieniveau $\bar{E} > 0$ oder darüber ist, gegen 0. Also dass System erstarrt bei dem absoluten Nullpunkt $T = 0$ mit Wahrscheinlichkeit 1 total. Ähnliches bleibt gültig, wenn das System über dem absoluten Nullpunkt bei einem positiven Energieniveau erstarrt (vergleiche dazu Wasser bei $T = 273,15K$ bzw. $T = 0C$).

2 Simulated Annealing - die Heuristik

Für Kirkpatrick et al 1983 war diese Gesetzmäßigkeit der statistischen Mechanik der Ausgangspunkt für eine Idee, um mit einem heuristischen Algorithmus Optimierungsaufgaben zu lösen. Die Aufgabenstellung ist eine reellwertige Zielfunktion $f(x)$ über einen zulässigen Raum X zu minimieren. Die Zielfunktion übernimmt die Rolle des Energieniveaus, also die Wahl eines $x \in X$ und die Berechnung der Zielfunktion $f(x)$ simuliert das Energieniveau der fiktiven Schmelze.

Sinkt nun die Temperatur im Wärmebad, so hat die Schmelze grundsätzlich die Tendenz in einen Zustand mit einem geringeren Energieniveau überzugehen. Ist die Temperatur hoch gewählt, so ist diese grundsätzliche Tendenz noch kaum ausgeprägt, bei niedriger

Temperatur um so stärker. In der Heuristik wird diese Begebenheit wie folgt modelliert: der Übergang von einem zulässigen $x \in X$ in ein zulässiges $y \in X$ mit $c := f(x)$ und $\bar{c} := f(y)$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{wird durchgeführt} & \bar{c} < c \\ \text{wird mit Wahrscheinlichkeit } e^{-\frac{\bar{c}-c}{T}} \text{ durchgeführt} & \bar{c} \geq c \end{array} \right. \quad (1)$$

Der erste Teil der Heuristik würde bei einem angemessenen Auswahlverfahren für y zu einem lokalem Minimum führen, der zweite Teil lässt mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit zu, dass andere vielleicht bessere Minima gefunden werden. Insbesondere wenn die Temperatur T noch hoch ist, wird eine Suche nach alternativen Minima noch sehr wahrscheinlich sein, da die Exponentialfunktion noch fast bei 1 liegt. Andererseits bei niedrigeren Temperaturen wird es umso unwahrscheinlicher sein, dass sich die Heuristik aus dem Einzugsbereich, sofern einmal drinnen, eines Minimum rausbewegt, je besser (kleiner) das Minimum ist.

Wenn nun die Heuristik einen vernünftigen Abkühlzeitplan, eine sinnvollen Auswahlvorschrift für einen Folgepunkt y von einem gegebenen x , man spricht auch von Nachbarn von x , und ein Kriterium, wann sich der Algorithmus bei festgelegter Temperatur bei einem Gleichgewicht eingependelt hat, dann steht doch nichts im Wege, dass nach Beendigung des heuristischen Algorithmus das (globale) Minimum ermittelt wird. Oder? ;-)...

3 Simulated Annealing - der Algorithmus

Formal benötigen wir

Abkühlzeitplan: Es ist einmal wichtig zu klären, mit welcher Temperatur gestartet und mit welchen Schrittweiten diese stufenweise reduziert wird. Weiters bedenke, dass nicht bekannt ist bei welcher Temperatur die Schmelze einfriert. Da der Taupunkt nicht bekannt ist, muss die Temperatur hinreichend oft reduziert werden, sodass die Heuristik auch wirklich konvergiert.

Ein möglicher Weg zur Bestimmung der Starttemperatur kann sein, dass vorerst eine vernünftige Temperatur fix gewählt wird und etwa 50 – 200 Schritte mit dieser durchgeführt werden; mit Schritt ist gemeint, dass versucht wird von x zu einem Nachbar y zu springen (siehe oben). Ist die Anzahl der angenommenen Schritte (d.h. der Algorithmus springt von einem x zu einem Nachbar y) weniger als 80%, so wird die Temperatur verdoppelt und man verfährt mit der neuen Temperatur analog.

Natürlich kann die Temperatur nicht kontinuierlich gesenkt werden, sondern dies geschieht in diskreten Schritten. Die simpleste Form ist natürlich ein Prozentsatz, etwa 80% bis 99,5%, also $T_{neu} = \alpha T_{alt}$, mit $0.8 \leq \alpha \leq 0.995$. Sinnvoller ist es natürlich zusätzliche Information heranzuziehen, wie etwa die Standardabweichung σ der Funktionsauswertungen $f(x)$ bei den Berechnungen bei der letzten Temperaturfestlegung T_{alt} . Daraus ergibt sich etwa folgende Temperaturadaption (γ ist ein technische Parameter, der positiv aber sehr klein gewählt werden soll)

$$T_{neu} = \frac{T_{alt}}{1 + (1 + \gamma) \frac{T_{alt}}{3\sigma}}$$

oder

$$T_{neu} = T_{alt} e^{[\text{mittleres } \Delta c] \frac{T_{alt}}{\sigma^2}}$$

Letztere stellt z.B. sicher, dass die stufenweise Verringerung auf die Veränderung pro Zeitschritt und nicht auf die logarithmierte Veränderung pro Zeitschritt bezogen wird, und bewirkt dass bei geringer Standardabweichung σ vergleichsweise viele kleine Schritte bei kühlerer Temperatur durchgeführt werden.

Schlussendlich muss noch festgelegt werden, wann der Algorithmus abbricht. Die einfachste Form ist natürlich, den Algorithmus nach einer fix vorgegebenen Anzahl von Temperaturstufen zu beenden. Wenn aus ähnlichen Aufgabenstellungen (z.B. bei Re-run nach geringfügigen Parameteränderungen) die Größenordnung der Erstarrungstemperatur bekannt ist, so spricht nichts dagegen, diese zu verwenden. Alternativ kann nach einigen direkt aneinanderfolgenden Temperaturreduktionen (etwa 5-15), bei denen sich keine signifikanten Änderungen gezeigt haben, die Berechnung gestoppt werden. Keine signifikanten Änderungen kann z.B. heißen, dass das mittlere Δc bei angenommenen Schritten relativ klein ist.

Auswahlvorschrift (Nachbarn): Zuerst ist es notwendig festzulegen, wie der zulässige Raum konfiguriert wird. I.A. wird nicht der zulässige Raum direkt übernommen, sondern auf eine Form gebracht, die die sinnvolle Anwendung der SA Heuristik erst ermöglicht. Diskretisierung des Zustandsraumes, aber auch Vergrößerung des Zustandsraumes durch Verwendung von ganzzahligen Variablen anstelle von vorgesehenen Binärvariablen und vieles mehr sind hier schon angewendet worden. Eine generelle Regel gibt es nicht, und es wird einfach pragmatisch versucht, die Heuristik zum Funktionieren zu bringen; und dies ist oft problemspezifisch. Ähnliches gilt auch für Auswahlgenerator für die Auswahl eines y bei vorgegebenen x . Alles was funktioniert ist erlaubt... im Extremfall ein über den Zustandsraum gleichverteilter Zufallsgenerator.

Kriterium für Gleichgewicht: Pro Temperaturstufe wird oft eine fixe Anzahl an Schritten (Auswahl eines Nachbarn) implementiert; hier werden oft mehrere 100 bis 1000 verwendet. Echtes Simulated Annealing, in Anlehnung an das physikalische Ebenbild, soll aber bei jedem Temperaturschritt ein (Quasi)Gleichgewicht annehmen; erst dann fährt man mit der nächstniedrigen Temperaturstufe fort. Generell gilt, je näher der Algorithmus bei einem Minimum ist, umso unwahrscheinlicher wird der Sprung zu einem Nachbarn.

Also, typischerweise wird in einem Gleichgewicht der Sprung von x zu einem Nachbarn y nicht allzu oft durchgeführt (was ein Indikator dafür ist, dass man in der Nähe eines Minimums ist). Eine simple Vorgangsweise zur Festlegung eines Gleichgewichtes kann daher sein, dass nach einigen Schritten (50, 100) der Anteil der akzeptierten Nachbarn ermittelt wird, und sofern dieser Anteil nicht eine vorgegebene Grenze übersteigt das System in einem Gleichgewicht wähnt. Sollte aber dieser Anteil noch zu hoch sein, so rechnet man weitere Schritte (50, 100) und wiederholt diese Überprüfung. Man sollte dies aber nicht zu oft machen (also gesamt maximal 200 Schritte), da das System insbesondere bei hohen Temperaturen (man stelle sich einen brodelnden Kochtopf vor) schwerlich in ein Gleichgewicht kommt. Also nach einigen Versuchen wird dann auf alle Fälle die Temperatur um eine Stufe gesenkt.

Differenzierter ist die Methode, wo die Anzahl der nicht angenommenen Nachbarn dynamisch in Betracht gezogen werden. Es ist aber hier besser nicht nur den zuletzt erreichten Zustand zu betrachten, sondern einen gleitenden Durchschnitt (moving

average) der Anzahl der Sprünge bei einigen zuletzt berechneten Schritten zu verwenden (z.B. letzten 20). Wenn nun der Anteil der angenommenen Sprünge unter eine Schwelle fällt, z.B. maximal jeder Fünfte, dann kann man das System in einem Gleichgewicht wähenen.

4 Simulated Annealing anhand von Hanford Waste

Die 21 Tanks ergeben zuviel Masse als dass diese auf einmal verglast werden können. Die Tanks sollen in drei Gruppen zu genau je 7 Tanks verarbeitet werden. Also neben den Frittengaben ist noch ein kombinatorisches Problem der Gruppierung der Tanks gegeben, welche durch 63 binäre Variablen (21 pro Gruppe) kodiert wird.

Bei dem Hanford Waste Problem drängt sich ein hybrider Ansatz Simualted Annealing (SA) und Mathematische Programmierung (hier NLPs) auf. Alle möglichen Aufteilungen der 21 Tanks in 3 Mischungen werden den Zustandsraum des SA bilden. Sind nun drei Mischungen einer Aufteilung festgelegt, so lässt sich die minimal benötigte Menge an Fritten, sodass die 3 Mischungen jeweils den technischen Bedingungen zur Verglasung genügen, durch drei unabhängige NLPs errechnen. Daraus ergibt sich dann die Gesamtmenge an Fritten für diese Konfiguration, also erhalten wir daraus das Energieniveau für den SA.

Als Starttemperatur sei z.B. 1000 Grad gewählt und als Abkühlzeitplan wählt man z.B. 95% der Temperatur der Vorstufe; also in der Stufe 2 dann 950%, Stufe 3 dann 902,5% etc. Als Abbruchkriterium könnte man wählen, dass 20 Stufen durchlaufen werden, oder dass z.B. auf 50 Grad abgekühlt wird, oder - reaktiv - wenn z.B. 5 Stufen lang maximal eine Verbesserung um ein vorgegebenes kleines $\varepsilon > 0$ erreicht wird (aber $\varepsilon = 0$ ist auf Grund von numerischen Ungenauigkeiten abzuraten).

Als Auswahlvorschrift (Nachbarn) kann man eine der folgenden 3 Operatoren (jeweils angewandt mit einer Wahrscheinlichkeit 1/3) anwenden:

- Tausche ein Element aus der Mischung 1 mit einem aus der Mischung 2
- Tausche ein Element aus der Mischung 1 mit einem aus der Mischung 3
- Tausche ein Element aus der Mischung 2 mit einem aus der Mischung 3

plus den Operator wähle irgendein Element aus der Mischung, welcher natürlich bei jedem Schritt zweimal angewendet werden muss.

Eine Stufe (= T ist fix) wird verlassen (Gleichgewicht), wenn z.B. eine vorgegebene maximale Anzahl von Nachbarn überprüft wurde (z.B. 50), oder wenn z.B. 5 Mal hintereinander der Nachbar verworfen wurde, oder wenn z.B. bei den letzten 20 Nachbarn 17 Mal der Nachbar verworfen wurde.