Použití metody Monte Carlo v optimalizačních úlohách

- optimalizační úlohy jsou důležité v řadě oblastí
  - minimalizace nebo maximalizace času, nákladů, výkonu, zisku
- řešení těchto úloh je velmi náročné pro větší a větší systémy a najít přesné řešení je často prakticky nemožné, protože počet operací roste exponenciálně s velikostí systému
- mnohdy ale stačí přibližné řešení nebo skoro optimální řešení, které může být nalezeno i pro velké systémy v konečném rozumném čase
- jedna z takových metod je založená na analogii se statistickou fyzikou, kdy veličina H, kterou optimalizujeme, odpovídá energii (potenciálu) ve stat. fyzice a zavedením „teploty" T, která se v průběhu simulace může měnit (snižovat), používáme MC simulaci k nalezení optimálního řešení tak, že každé konfiguraci přiřadíme Boltzmannův faktor $e^{-H/T}$ a děláme náhodné změny konfigurace s tím, že zkušební přijímáme pomocí Metropolisova alg.
- teplota se zavádí proto, aby se zvýšila pravděpod. přechodu mezi konfiguracemi a našlo se „optimum" rychleji

postupné snižování teploty v simulaci odpovídá tzv. metodě žíhání (annealing), kdy se snažíme vytvořit perfektní krystal tím, že udržujeme systém vždy na určité teplotě než zrelaxuje a pak opět snížíme; odtud pojem simulated annealing (simulace žíhání)

- metoda byla poprvé publikována v časopisu Science,
  (Kirkpatrick, Gelatt, Vecchi: Science 220 (1983) 671)
  kteří ji aplikovali na problémy optimalizace při konstrukci počítačů, ale i TSP.

budeme si ji ilustrovat pro problém obchodního cestujícího dle Černého: J. Optim. Theory and Appl. 45 (1985) 41
(Komenského univ. v Bratislave)

Problém obchodního cestujícího (traveling salesman problem - TSP)

- mějme N měst (stanic), mezi nimiž vedou cesty s tím, že pro každé 2 města existuje alespoň 1 cesta a mějme též zadány vzdálenosti mezi každými dvěma městy (matice D $N \times N$ vzdáleností, obecně ne nutně symetrická (jednosměrky!))
  - úlohou pak je najít nejkratší uzavřenou (musí se dostat domů) cestu, procházející alespoň jednou každým městem (je pak jedno, kde začínáme)

Pozn: existuje samozřejmě i řada jiných variant (neuzavřená cesta, více cest mezi 2 městy atd.) ale my se budeme pro ilustraci zabývat je touto základní

- ač existují přesné algoritmy, které najdou globální optimum (minimální délku cesty) jako řešení hrubou silou $O(n!)$ nebo (Bellman-)Held-Karpův algoritmus $O(n^2 2^n)$, případně speciální alg. pro velká množství měst ($< 100\,000$ řešeny pomocí metody větví a mezí, branch-and-bound) nebudeme se jimi zabývat
- v současnosti se používají heuristické a přibližné algoritmy, které jsou schopny řešit tento problém až pro miliony měst s tím, že získané řešení leží s velkou pravděpodobností v rozmezí 2-3% od přesného optimálního řešení

- řešení pomocí Monte Carlo metody s Metropolisovým alg.
  - mějme N měst a matici D ($N \times N$) se vzdálenostmi tj. $D(i,j)$ udává vzdálenost (příp. dobu) cesty z města i do j
  - dále nechť $\{c_i\}_{i=1}^{N}$ je lib. permutace měst, pak délka cesty

$$d = \sum_{k=1}^{N-1} D(c_k, c_{k+1}) + D(c_N, c_1)$$

- algoritmus metody MC:

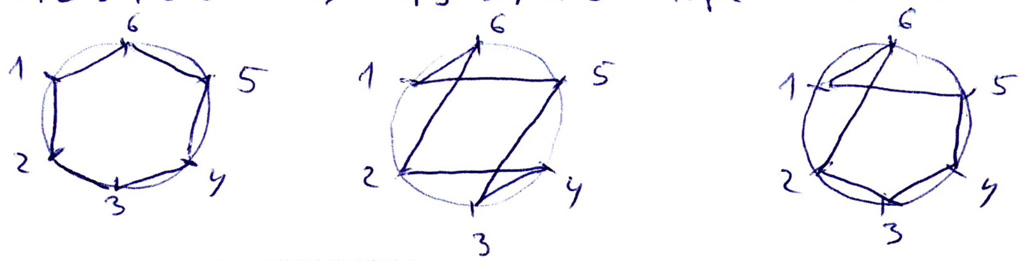
1) zvol počáteční permutaci $\{c_i\}_{i=1}^{N}$ (libovolně)
a zvol „teplotu" T ($\lesssim$ střední hodnotě vzdálenosti $D(i,j)$)
nebo metoda pokus omyl

2) zvol i a j a zkonstruuj zkušební permutaci $\{t_i\}_{i=1}^{N}$
přehozením i a j v současné permutaci c,
buď přímým přehozením, nebo částečnou reverzí

Pozn. a) zcela náhodná volba i a j nevede obvykle k nalezení optimálního řešení, lepší je polonáhodná volba, jak navrhl Černý: i volíme systematicky od 1 do N a j určíme náhodně $\neq i$

b) přehození i a j může vést k velké změně d a častému odmítnutí, lépe je obrátit část permutace, tj. nahradit (pro $i<j$, pro $i>j$ od c_j do c_i)
$$c_i, c_{i+1} \ldots c_{j-1}, c_j \leftrightarrow c_j, c_{j-1}, \ldots c_{i+1}, c_i$$

Př. 123456 $\longrightarrow$ 153426 lépe 154326



3) spočti délku cesty d' pro testovací perm. t

Metropolis $\rightarrow$ 4) pokud $d' < d$ nebo $\xi \in \langle 0,1) < \exp[(d-d')/T]$
pak $c = t$ a $d = d'$, jinak nic

5) opakuj od bodu 2)

- problém se zastavením: po určité době dosáhneme „rovnovážné" ~~hodnoty~~ hodnoty pro danou teplotu a délka cesty bude fluktuovat kolem ní, pak je vhodné snížit teplotu (např. 5–10x) a najít lepší řešení, to můžeme opakovat vícekrát, pokud již nedochází ke změnám (všechny testovací permutace jsou odmítnuty), skončíme