

1 Асимптотическая сходимость алгоритмов имитации отжига

Несмотря на недетерминированный характер алгоритма имитации отжига, для него возможно строгое обоснование сходимости в терминах теории вероятностей. Для этого используется теория цепей Маркова.

Последовательность дискретных случайных величин $\{X_n\}$ называется **цепью Маркова**, если

$$P(X_{n+1} = i_{n+1} | X_n = i_n, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0) = P(X_{n+1} = i_{n+1} | X_n = i_n)$$

Иначе говоря, цепь Маркова – это последовательность случайных величин, в которой значение каждой случайной величины зависит только от значения предыдущей.

Если указанная выше вероятность не зависит от номера шага n , то цепь Маркова является **однородной**.

Множество всех значений случайных величин $\{i_k\} = I$ также называют состояниями. Цепь Маркова описывает систему со счетным числом состояний, переходы между которыми осуществляются случайным образом с известными вероятностями. Так как множество состояний счетно (по определению дискретной случайной величины), цепь Маркова можно представить конечной либо бесконечной матрицей, где элемент на пересечении i -й строки и j -го столбца есть вероятность перейти из состояния i в состояние j .

Схему работы алгоритма имитации отжига можно рассматривать как цепь Маркова, где состояния – это все возможные расписания. По построению алгоритма вероятность выполнить ту или иную операцию зависит только от текущего расписания.

Построенная цепь Маркова обладает двумя свойствами: неразложимостью и ацикличностью.

Неразложимость означает, что $\forall i, j \in I: \exists n \in \mathbb{N}: (P^n)_{ij} > 0$, то есть из любого состояния можно перейти в любое за конечное число шагов с ненулевой вероятностью

Ацикличность означает, что $\forall i \in I: \gcd(n \in \mathbb{N} | (P^n)_{ii} > 0) = 1$. Для неразложимой цепи достаточно, чтобы это условия выполнялось хотя бы на одном решении.

У цепи Маркова $\{X_n\}$ существует **стационарное распределение**, если предел $\{q_i\} = \lim_{k \rightarrow \infty} P(X_k = i | X_0 = j)$ не зависит от j .

Пусть цепь Маркова неразложима и апериодична. Тогда у нее существует единственное стационарное распределение, определяемое формулами:

$$q_i = \sum_{j \in I} q_j \cdot P_{ji}$$

Следствием данной теоремы является то, что вектор стационарного распределения можно определить из системы *уравнений детального баланса*:

$$q_i \cdot P_{ij} = q_j \cdot P_{ji} \quad \forall i, j$$

Для стандартного алгоритма имитации отжига, представленного цепью Маркова, вероятность перехода из состояния А в состояние В есть произведение вероятности генерации решения В, если текущее решение – А, и вероятности принять В в качестве нового приближения.

$$P_{ij}(t) = G_{ij} \cdot A_{ij}(t)$$

Если температура не меняется, то эти вероятности всегда одинаковые, то есть цепь Маркова однородна. Если вероятность генерации любого из решений в окрестности текущего одинакова, а вероятность принятия нового решения определяется стандартными формулами, то вероятности перехода в цепи Маркова при заданной температуре определяются следующей формулой.

$$P_{ij}(t) = \frac{1}{N} \cdot \min(1, e^{\frac{f(i)-f(j)}{t}})$$

Здесь N – размер окрестности решения, $f(i)$ – значение целевой функции на решении i.

При фиксированном значении температуры стационарное распределение для заданной таким образом цепи Маркова будет иметь следующий вид, определяемый из уравнений детального баланса.

$$q_i(t) = \frac{\exp(-\frac{f(i)}{t})}{\sum_j \exp(-\frac{f(j)}{t})}$$

Устремляя температуру к нулю и переходя к пределу, получим, что вероятность после бесконечного числа шагов получить неоптимальное решение равна 0, а вероятности получения каждого из оптимальных решений одинаковы. Следовательно, имеет место следующая теорема.

Теорема. При стремлении температуры к нулю стационарное распределение приближается к распределению, допускающему только оптимальные решения.

На практике данное утверждение не согласуется с реальным применением алгоритма имитации отжига: теорема содержит два предельных перехода, что означает, что нужно при каждом значении температуры делать бесконечное число итераций, и затем переходить к пределу по значениям температуры. В реальности число итераций с фиксированным значением температуры сильно ограничено, поэтому требуется более точная модель.

Пусть значение температуры на n -й итерации алгоритма равно t_n , а матрица переходов цепи Маркова непостоянна и зависит от текущего значения температуры. Такая цепь называется **неоднородной**. Для рассматриваемого в данной работе алгоритма имитации отжига, значения элементов матрицы переходов имеют следующий вид.

$$P_{ij}(t_n) = \frac{1}{\varepsilon(i)} \cdot \min(1, e^{\frac{f(i)-f(j)}{t_n}})$$

Пусть $U_{ij}(m, k) = P(X(k) = j | X(m-1) = i)$, то есть матрица U определяется как $U(m, k) = \prod_{n=m}^k P(n)$.

Неоднородная цепь Маркова называется **слабо эргодической**, если

$\forall i, j, l \in I, \forall m > 0: \lim_{k \rightarrow \infty} (U_{il}(m, k) - U_{jl}(m, k)) = 0$. Неформально это означает, что $X(k)$ перестает зависеть от $X(m)$ с ростом k , независимо от номера итерации m .

Неоднородная цепь Маркова называется **сильно эргодической**, если $\forall i, j \in I, \forall m > 0: \lim_{k \rightarrow \infty} (U_{ij}(m, k)) = q_j^*$. Неформально это означает сходимость по распределению к вектору q^* .

Для однородных цепей Маркова слабая и сильная эргодичность тождественны, но для неоднородных в общем случае это не так.

Дальнейшие рассуждения опираются на следующие две теоремы.

Теорема. Цепь Маркова слабо эргодична, если следующий ряд расходится для некоторых значений $\{N_k\}$: $\sum_{k=1}^{\infty} (1 - \tau_1(P(k)^{N_k}))$, где коэффициент эргодичности: $\tau_1(P) = 1 - \min_{i,j \in I} \sum_{l=1}^{|I|} \min(P_{il}, P_{jl})$.

Теорема. Цепь Маркова сильно эргодична, если 1) Она слабо эргодична, 2) На каждой итерации у матрицы $P(k)^T$ есть собственное значение, равное 1 и собственный

вектор $q(k)$, 3) Для этих собственных векторов сходится числовой ряд $\sum_{k=1}^{\infty} \|q(k) - q(k+1)\|_1$

Сформулируем основную теорему об асимптотической сходимости алгоритма имитации отжига.

Теорема. Пусть значения температуры таковы, что $t_k \geq \frac{\Gamma}{\log(k+k_0)}$, $\Gamma > 0$, $k_0 > 2$.

Тогда цепь Маркова, соответствующая алгоритму имитации отжига, сходится к стационарному распределению вида $q_i = \frac{1}{|\mathfrak{Z}|} \chi_{\mathfrak{Z}}(i)$, где $\mathfrak{Z}$ – множество оптимальных решений.

Доказательство. Сначала докажем сильную эргодичность цепи Маркова. Как несложно видеть, условие (2) из теоремы означает существование собственного вектора q , удовлетворяющего уравнению $P(k)^T \cdot q = q$, или построчно, $q_i = \sum_{j \in I} q_j \cdot P_{ji}$, что равносильно уравнениям детального баланса. Проверим, что значения

$$q_i = \frac{1}{\sum_j \left(\frac{1}{\min \left(1, e^{\frac{f(i)-f(j)}{t_n}} \right)} \right)}$$

удовлетворяют этим уравнениям.

Обозначим $\min \left(1, e^{\frac{f(i)-f(j)}{t_n}} \right) = A_{ij}$. Заметим, что для этой функции верно тождество $A_{ij} \cdot A_{jk} = A_{ik}$.

Запишем уравнение детального баланса для q и проверим, что они выполняются.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sum_j \left(\frac{A_{ij}}{A_{ji}} \right)} G_{ij} \cdot A_{ij} &= \frac{1}{\sum_k \left(\frac{A_{jk}}{A_{kj}} \right)} G_{ji} \cdot A_{ji} \\ \frac{1}{\sum_j \left(\frac{A_{ij}}{A_{ji}} \right)} &= \frac{1}{\sum_k \left(\frac{A_{jk}}{A_{kj}} \right)} \cdot \frac{A_{ji}}{A_{ij}} \\ \frac{1}{\sum_j \left(\frac{A_{ij}}{A_{ji}} \right)} &= \frac{1}{\sum_k \left(\frac{A_{jk}}{A_{kj}} \cdot \frac{A_{ij}}{A_{ji}} \right)} \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\sum_j \left(\frac{A_{ij}}{A_{ji}} \right)} = \frac{1}{\sum_k \left(\frac{A_{ik}}{A_{ki}} \right)}$$

Получили тождество.

Проверим выполнение условия (3).

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} \|q(k) - q(k+1)\|_1 &= \sum_{k=1}^{\infty} \sum_i |q_i(k) - q_i(k+1)| = \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \sum_i \left| \frac{1}{\sum_j \left(\frac{A_{ij}(k)}{A_{ji}(k)} \right)} - \frac{1}{\sum_j \left(\frac{A_{ij}(k+1)}{A_{ji}(k+1)} \right)} \right| \leq \\ &\leq C \cdot \sum_{k=1}^{\infty} \sum_i \left| \frac{1}{\sum_j (A_{ij}(k)/A_{ji}(k))} - \frac{1}{\sum_j (A_{ij}(k+1)/A_{ji}(k+1))} \right| = \\ &= C \cdot \sum_i \left| \frac{1}{\sum_j (A_{ij}(1)/A_{ji}(1))} - \frac{1}{\sum_j (A_{ij}(k)/A_{ji}(k))} \right|. \end{aligned}$$

Очевидно, выражение $\sum_j (A_{ij}(k)/A_{ji}(k))$ строго больше 0, так как в нем по крайней мере есть ненулевое слагаемое, соответствующее $i=j$, поэтому вся сумма ряда конечна.

Для проверки условия (1) воспользуемся достаточным условием слабой эргодичности.

Нужно доказать, что ряд $\sum_{k=1}^{\infty} (1 - \tau_1(P(k)^{N_k}))$ расходится. Оценим $P(k)$ снизу.

$$\begin{aligned} P(k) &\geq \left(\min_{i,j} G_{ij} \right) \cdot \exp \left(- \frac{\min(1, f(i) - f(j))}{t_k} \right) = C_1 e^{-C_2/t_k} \\ \sum_{k=1}^{\infty} (1 - \tau_1(P(k)^{N_k})) &\geq \sum_{k=1}^{\infty} C_1^{N_k} e^{-C_2 N_k/t_k} \end{aligned}$$

Учитывая, что $t_k \geq \frac{\Gamma}{\log(k+k_0)}$, получаем ряд вида $C \cdot \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k}$, который расходится.

Осталось определить предел вектора q при стремлении температуры к нулю. Для этого рассмотрим предел

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_j \left(\frac{\min \left(1, e^{\frac{f(i)-f(j)}{t_n}} \right)}{\min \left(1, e^{\frac{f(j)-f(i)}{t_n}} \right)} \right)$$

Если решение i – оптимальное, то знаменатель дроби всегда будет равен 1. Числитель будет равен 1, если j – тоже оптимальное решение, то есть $f(i)=f(j)$, если же $f(i)<f(j)$, то

$e^{\frac{f(i)-f(j)}{t_n}} \rightarrow 0$. Получается, что слагаемое в сумме стремится к 1, если оно соответствует оптимальному решению, и к 0 в противном случае. То есть весь предел равен $|\mathfrak{I}|$, и соответственно $q_i = \frac{1}{|\mathfrak{I}|}$.

Если решение i – не оптимальное, то в знаменателе одной из дробей $f(j)-f(i)>0$, то есть последовательность $e^{\frac{f(i)-f(j)}{t_n}} \rightarrow \infty$, а соответствующее $q_i \rightarrow 0$.

Объединяя все значения q_i , получаем $q_i = \frac{1}{|\mathfrak{I}|} \chi_{\mathfrak{I}}(i)$, что и требовалось доказать.

Что касается скорости сходимости, приведем основные результаты без доказательств.

Пусть $a(k)$ – распределение вероятностей оказаться в том или ином состоянии на шаге k . Сравнив это распределение со стационарным $q(c)$ по норме, получим следующую оценку:

$$\|a(k) - q(c)\|_1 = O(k^{m_2-1} |\lambda_2(c)|^k)$$

Здесь λ_2 - второе по модулю собственное значение матрицы $P(c)$ кратности m_2 .

$\|a(k) - q(c)\|_1 < \varepsilon$, если

$$k > K \cdot \left(1 + \frac{\ln(\varepsilon/2)}{\ln(1 - (\min_{i,j} P_{ij})^K)}\right)$$

$$K = |I|^2 - 3|I| + 3$$

Из данной оценки на k следует, что чтобы достичь заданной наперед точности, нужно совершить число итераций, пропорциональное квадрату от размера пространства поиска, то есть для достижения абсолютной точности алгоритм имитации отжига подходит хуже, чем полный перебор.