

5.2 Moderne Verfahren

Die klassischen Optimierungsverfahren akzeptieren als neue Touren nur solche mit kleinerer Länge. Im Bild des Wanderers bedeutet dies, daß er nur nach unten führende Wege einschlägt. Auf diese Weise gelangt er zwar auf jeden Fall in ein Tal (lokales Minimum), es muß jedoch nicht das tiefste (globales Minimum) sein. Um dorthin zu kommen, ist es unter Umständen notwendig, erst über eine Anhöhe zu klettern. Analog dazu akzeptieren die modernen Optimierungsverfahren unter gewissen Bedingungen auch schlechtere Touren, um von dort evtl. zu besseren Ergebnissen zu gelangen.

5.2.1 Simulated Annealing

Klassische Heuristiken bleiben also häufig in lokalen Minima stecken. Ein ähnliches Verhalten zeigen auch aus der Schmelze erstarrende Kristalle: Im Normalfall bilden sich keine perfekten Kristalle, die in jede Richtung eine völlig regelmäßige Anordnung von Atomen besitzen, sondern es treten Versetzungen und Korngrenzen auf. Solche Fehlstellen erhöhen die Gitterenergie des Kristalls, d. h. ein entsprechendes Atom hat zwar ein lokales, nicht aber das globale Minimum erreicht. Von diesem ist es durch eine energetische Barriere getrennt, die es nicht überwinden kann. Benötigt man perfekte Kristalle ('Einkristalle'), so muß das Erstarren ('Annealing') aus der Schmelze sehr langsam und unter ständiger Energiezufuhr in Form von Wärme erfolgen, die es gestattet, die Barrieren zwischen den Minima zu überspringen, also unter bestimmten Umständen auch energetisch schlechtere Zustände anzunehmen.

Zur Simulation solcher Vorgänge verwendet man in der Physik unter anderem die *Monte-Carlo-Methode*, die ein Zufallselement in die Berechnung einführt. Eine Realisation hiervon ist der *Metropolis-Algorithmus*, der atomare Systeme im thermischen Gleichgewicht mit einem Wärmebad der Temperatur T beschreibt. Änderungen in der Anordnung der Atome werden hierbei zum einen akzeptiert, wenn der neue Zustand energetisch günstiger ist, aber auch schlechtere werden mit einer Wahrscheinlichkeit

$$P(\Delta E) = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right) \quad (5.1)$$

(ΔE : Energiedifferenz, k : Boltzmann-Konstante, T : Temperatur) angenommen. In der Simulation wird dazu eine Zufallszahl zwischen null und eins erzeugt und mit $P(\Delta E)$ verglichen. Ist sie kleiner, so wird der Zustand angenommen.

Beim Traveling Salesman Problem treten an die Stelle der Energien Entfernungen: ΔE entspricht dem Unterschied in der Länge zweier Touren, statt der Temperatur geht man von einer zu verringernden Anfangslänge TEMP aus, die die Energie kT ersetzt. Ist sie groß, so ist $P(\Delta E)$ nahe bei eins und es wird fast jede Änderung akzeptiert. Mit kleiner werdendem TEMP erstarrt die 'Schmelze' immer mehr, so daß nur noch kleinräumige Veränderungen möglich sind. So wird die Tour zuerst großräumig aufgebaut und später in den Details optimiert.

Das Programm 5.7 beginnt mit einer 'Anfangstemperatur', die der maximalen Entfernung zweier Städte in der Entfernungstabelle entspricht. Bei jeder 'Temperatur' werden $10 \cdot \text{STADTANZAHL}$ akzeptierte Veränderungen oder maximal $100 \cdot \text{STADTANZAHL}$ Versuche durchgeführt. Zum Verändern wird dabei die 2-Kantentausch-Routine aus Abschnitt 5.1.2 mit zufälligen Trennstellen verwendet. Nach der angegebenen Versuchsanzahl wird TEMP auf das 0.9-fache verringert und der Prozeß wiederholt. Beendet wird das Verfahren, wenn bei einer bestimmten 'Temperatur' überhaupt keine Veränderungen mehr auftreten.

Bei der Anzahl der Wiederholungen und dem Faktor, mit dem TEMP verkleinert wird, handelt es sich um Erfahrungswerte aus *T. Otto: Reiselust (c't 1/94, Verlag Heinz Heise, 1993)*, die einen guten Kompromiß zwischen Rechenzeit und Ergebnis erzielen sollen. Die Definition der modifizierten Exponentialfunktion E ist notwendig, um Underflow-Fehlermeldungen für betragsmäßig große negative Exponenten zu vermeiden. Da sie nur zum Vergleich mit Zufallszahlen im Bereich $[0,1]$ benutzt wird, liefert sie für Argumente größer null immer zwei zurück.

5.2.2 Threshold Accepting

Simulated Annealing nimmt günstigere Varianten sofort und energetisch ungünstigere mit der Wahrscheinlichkeit $P(\Delta E)$ an. *Threshold Accepting* vereinfacht dies derart, daß alle Änderungen unterhalb einer gewissen Schwelle ('Threshold') akzeptiert werden. Da damit ein Vergleich, eine Division und die Berechnung der Exponentialfunktion wegfallen, verringert dies die Laufzeit, ohne daß sich nennenswerte Verschlechterungen der Ergebnisse zeigen.