优化问题新算法

罗页

复旦大学物理系

January 8, 2009

指导老师：龚新高

intro

- 优化问题
  在解决科学问题时，我们常常需要求解最大或最小值问题，即优化问题。
- 常见算法
  主要有两大类：决定性方法和随机性方法等。
  决定性方法有最速下降法和共轭梯度法。
  随机性方法有蒙特卡洛、模拟退火、遗传算法等。

模拟退火(SA)

- 固体的退火过程+Metropolis算法
- 具体步骤:
  1. 初始时刻在温度$T(t=1)$，选取一个初始态x_t，计算$E(x_t)$
  2. 根据某种跃迁分布，随机从x_t跳到x_{t+1}
  3. 计算$E(x_{t+1})$，如果$E(x_{t+1}) < E(x_t)$，则用x_{t+1}取代x_t， 否侧计算接受率$p = e^{-[E(x_{t+1})-E(x_t)]/T(t)}$和一个(0,1)之间的随机数$r$，如果$p > r$， 就用$x_{t+1}$ 取代x_t，否则保持不变。
  4. 根据降温公式，计算下一步的$T(t+1)$，回到(2)重复以上过程，直到E达到某个预定
- 将问题由$O(e^N)$简化为$O(N^\alpha)$

推广的模拟退火(GSA)

- 基于Tsallis 统计
- 更改后的接收率

$$P_{q_a}(x_t \to x_{t+1}) = \begin{cases} 1 & E(x_{t+1}) < E(x_t) \\ \dfrac{1}{[1+\frac{(q_a-1)(E(x_{t+1})-E(x_t))}{T^a(q_a)}]^{\frac{1}{q_a-1}}} & E(x_{t+1}) \leq E(x_t) \end{cases}$$

- 跃迁分布

$$g_{q_v}(\Delta x_t) = (\frac{q_v-1}{\pi})^{d/2} \frac{\Gamma(\frac{1}{q_v-1}+\frac{D-1}{2})}{\Gamma(\frac{1}{q_v-1}-\frac{1}{2})} \frac{[T^v_{q_v}(t)]^{-\frac{D}{3-q_v}}}{\{1+(q_v-1)\frac{\Delta x_t{}^2}{[T^v_{q_v}(t)]^{-\frac{2}{3-q_v}}}\}^{\frac{1}{q_v-1}+}}$$

- 降温方式

$$T^v_{q_v}(t) = T_{q_v}(1)\frac{2^{q_v-1}-1}{(1+t)^{q_v}-1}$$

Thomson问题

- 电子在球面上的分布，能量最小
- 总能量的表达式

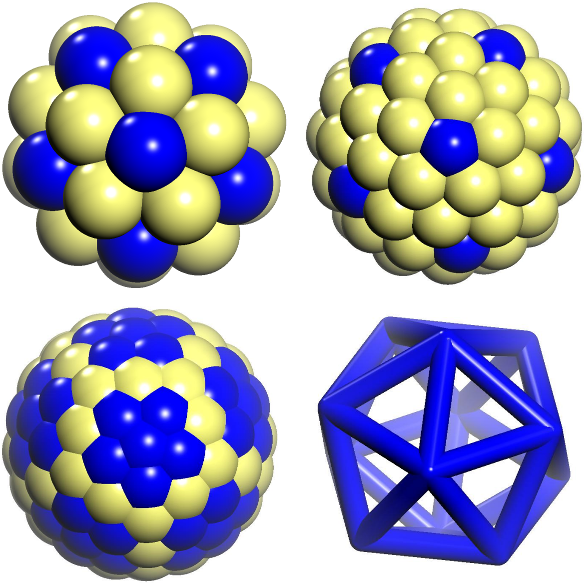
$$E = \sum_{i<j} \frac{1}{|r_i - r_j|}$$

- Erber等人指出，Thomson问题的局域最小数量随e^N增长，且全局最小的窗口很小

精度与计算时间

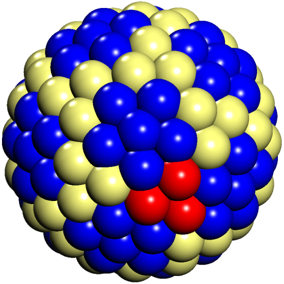
- 当能量降到很低时，采用共轭梯度法加速收敛。
  精度10^{-5}提高到10^{-7}
- 无须退火到很低的温度才终止。
- 对于$E(x_{t+1}) < E(x_t)$，如果差值不大，无需进行共轭梯度。

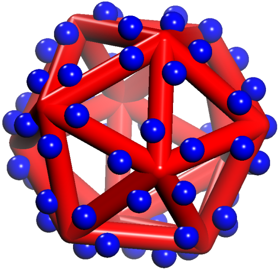
图像的对称性分析

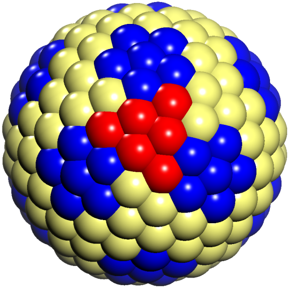


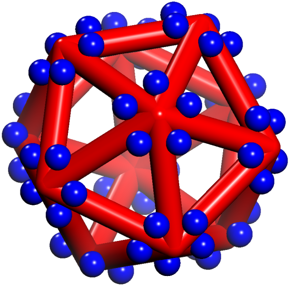
32个电子	72个电子
122个电子	核心

图像的对称性分析









132个电子	核心
192个电子	核心

Altschuler猜想

$N = 10(m^2+n^2+mn)+2$ 的结构在具有正20 面体构型时具有最小值

谢 谢！