

模拟退火算法机理研究

陈华根, 吴健生, 王家林, 陈冰

(同济大学 海洋地质教育部重点实验室, 上海 200092)

摘要: 从机理上分析了采用 Metropolis 概率接受准则的重要性, 认为按照该准则可以使模型跳出局部极小值, 避免了落入局部极小点的可能, 然后在退火计划的控制下模拟退火算法, 最终可以找到最优解, 深入分析了算法的退火计划和模型扰动, 以及两者之间的配合的技巧, 认为算法本身可以作进一步的改进, 并提出了改进的思路, 为下一步的具体改进打下了基础.

关键词: 模拟退火算法; 效率; 最优; 退火计划

中图分类号: TP 301.6

文献标识码: A

文章编号: 0253-374X(2004)06-0802-04

Mechanism Study of Simulated Annealing Algorithm

CHEN Hua-gen, WU Jian-sheng, WANG Jia-lin, CHEN Bing

(Key Laboratory of Marine Geology, Tongji University, Shanghai 200092, China)

Abstract: After the importance of acceptance of Metropolis rule in simulated annealing (SA) algorithm is analyzed, it is considered that this rule can make the model jumping out of local low point and then we find the optimization with the control of annealing scheme. So with a deep analysis of annealing scheme, model vibration and the cooperation skills between them, the improvement about this algorithm is considered possible and the detailed idea is put forward for high efficiency as a good foundation for improvement.

Key words: simulated annealing algorithm; efficiency; optimization; annealing scheme

模拟退火算法(simulated annealing, SA)作为局部搜索算法的扩展, 在每一次修改模型的过程中, 随机产生一个新的状态模型, 然后以一定的概率选择邻域中能量值大的状态. 这种接受新模型的方式使其成为一种全局最优算法, 并得到理论证明和实际应用的验证.

SA 虽然在寻优能力上不容置疑, 但它是以严密的退火计划为保证的, 具体地讲, 就是足够高的初始温度、缓慢的退火速度、大量的迭代次数及同一温度下足够的扰动次数. 因此, SA 的效率问题一直是算法真正走向实用的主要障碍. Ingber 针对这一问题,

提出了非常快速模拟退火计划及相应的算法(very fast simulated annealing, VFSA)^[1], 使得算法效率有所提高, 并且已应用在一些实际研究中. 但是, 在实际应用中效率还是偏低, 并且与约束条件的个数和模型的扰动范围密切相关, 因此仍然阻碍着算法在更多领域中的实际应用. 解决这个问题要点有 3 个: ① 尽可能多地获得与算法有关的已知信息以增加约束条件的个数; ② 减小模型的扰动范围; ③ 进一步改进算法, 提高效率. 从这 3 个要点看, ①和②都是客观的, 均与已知条件相关, 如要进一步获得更多信息需要大量的投入或者查阅多方面资料; 而对

③的改进,可以在原有的条件、在保证算法全局最优的前提下进行,因此是一项十分有意义的尝试。

为此,本文主要对 VFSA 进行了机理上的深入探索和详细分析,发现在其核心技术——退火方式及模型扰动上可进行更合理的配合。文章最后提出了进一步改进的具体思路,为下一步的深入研究打下了良好的基础。笔者的另一篇论文《改进的非常快速模拟退火算法(MVFSA)》将详细地、有针对性地提出新的改进算法,并通过对不同的模型及参数试验比较、分析后,认为 MVFSA 一定程度上克服了传统 SA(包括 VFSA)计算效率低的缺点,使算法进一步走向实际应用。

1 VFSA 概述

模拟退火的概念是根据熔融金属中粒子的统计力学与复杂的组合最优化问题的求解过程的相似性而提出来的^[2]。统计力学的研究表明,在温度 T 、粒子停留在状态 r 满足波兹曼(Boltzmann)概率分布

$$Pr(E(r)) = \frac{1}{Z(T)} \exp\left[-\frac{E(r)}{k_b T}\right] \quad (1)$$

式中: $E(r)$ 为 r 状态的能量; $k_b > 0$,为 Boltzmann 常数; T 为绝对温度,量纲为 1; $Z(T)$ 为概率分布的标准化因子

$$Z(T) = \sum_{s \in D} \exp\left[-\frac{E(s)}{k_b T}\right] \quad (2)$$

在温度 T 时,根据金属内部粒子的状态选择规律, Metropolis 等提出了以下准则:设初始状态 i 为当前状态,该状态的能量为 E_i ,然后对该状态作一随机微扰,得到 1 个新状态 j ,新状态的能量为 E_j 。如果 $E_j < E_i$, j 就为重要状态;如果 $E_j > E_i$,考虑到热运动的影响, j 是否为重要状态要根据固体处于该状态的概率来判断。固体处于状态 i 和 j 的概率的比值等于相应 Boltzmann 因子的比值,即

$$r = \exp[(E_i - E_j) / k_b T], \quad r < 1 \quad (3)$$

用随机数据发生器产生一个 $[0, 1]$ 区间的随机数 ξ ,若 $r > \xi$,则新状态 j 为重要状态,就以 j 取代 i 成为当前状态,否则仍以 i 为当前状态,再重复以上新状态的产生过程。在大量固体状态变换后,系统趋于能量较低平衡状态,固体状态的概率分布趋于 Boltzmann 概率分布。

以上接受新状态的准则称为 Metropolis 准则,相应的算法则称为 Metropolis 算法。

SA 中采用了上述准则,故成为全局寻优算法。Metropolis 准则及算法的优点是:中间解以一定的接

受概率跳出局部极小,避免落入局部极小点的可能,然后在退火温度的控制下最终找到最优解。如没有 Metropolis 准则,就谈不上全局寻优,算法最多只是一种局部算法的搜索,不能找到真正的最优解。

限于篇幅,这里直接给出传统的 SA 流程图(图 1),具体原理已有多部文献^[1,2]给出。

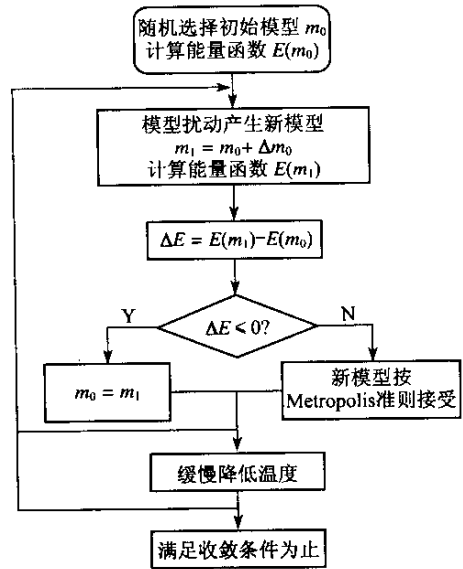


图 1 传统 SA 流程图

Fig. 1 Flow chart of traditional SA

从图 1 可见,算法中包含 1 个内循环和 1 个外循环。内循环就是在同一温度下的多次扰动产生不同模型状态,并按照 Metropolis 准则接受新模型,因此是以模型扰动次数作控制的;外循环包括了温度下降的模拟退火算法的迭代次数的递增和算法停止的条件,因此基本是以迭代次数作控制的。

SA 虽从理论上讲是一种全局最优算法,但在实际使用时为了提高算法效率常采用改进的算法,以保证在有限的时间内完成,文献^[3~5]提到了几种实际使用的 SA,其中 VFSA 最为常用。它使得模拟退火理论真正走向了实际,具备了一定的解决实际问题的能力。后来有许多研究^[6,7]都使用了该算法。VFSA 的流程与 SA 一样,只是为了保证计算在有限时间内完成,主要在模型扰动、接受概率及其退火计划上加以特别的处理。下面分别讨论。

1.1 模型扰动

SA 中新模型的产生是对当前模型进行扰动得到的,常规用的是高斯分布法,而 VFSA 采用依赖于温度的似 Cauchy 分布法,即

$$m'_i = m_i + y_i(B_i - A_i) \quad (4)$$

$$y_i = T \operatorname{sgn}(u - 0.5) [(1 + 1/T)^{2|u-1|} - 1] \quad (5)$$

式中： m_i 为当前模型中第 i 个变量； u 为 $[0, 1]$ 内均匀分布的随机数； $[A_i, B_i]$ 为 m_i 的取值范围； m'_i 为扰动后的模型中第 i 个变量，且 $m'_i \in [A_i, B_i]$ 。

Cauchy 分布产生新模型的优点是：在高温情况下搜索范围大，在低温时搜索仅在当前模型附近，而且，由于其有一平坦的“尾巴”，使其易于迅速跳出局部极值。这一改进加快了 SA 的收敛速度。

1.2 接受概率

由广义 Boltzmann-Gibbs 分布，可给出新的接收概率计算公式

$$P = [1 - (1 - h) \Delta E / T]^{1/(1-h)} \quad (6)$$

式中： $\Delta E = E(m) - E(m_0)$ ； h 为实数。当 $h \rightarrow 1$ 时

$$P = \exp(-\Delta E / T) \quad (7)$$

这是常规 SA 的接受概率公式，为式 (6) 的特例。

1.3 退火计划

$$T(k) = T_0 \exp(-ck^{1/N}) \quad (8)$$

式中： T_0 为初始温度； k 为迭代次数； c 为给定常数； N 为待反演参数的个数。式 (8) 还可写为

$$T(k) = T_0 \alpha^{k^{1/N}} \quad (9)$$

式中 α 为温度衰减率，通常选择 $0.7 \leq \alpha \leq 1.0$ 。在实际应用中，可采用 0.5 或 1.0 代替式 (9) 中的 $1/N$ 。

在 VFSA 中，最终用式 (4) (5) 对当前模型进行扰动产生新模型，新模型按式 (6) 接收，并按式 (9) 缓慢降温。

2 VFSA 机理分析

由于 VFSA 的优越性，许多研究中均引用此项技术。因此，分析 VFSA 无非是尝试在其基础上看是否有进一步改进的可能性。SA 之所以被认为是一种全局搜索优化算法，很大程度上是退火计划、模型扰动方式等因素密切配合的结果。VFSA 也不例外。

要使 VFSA 真正称得上“快速”算法，其退火计划也必须要以较快的速度降温。从式 (8) (9) 可以看出，温度 T 与迭代次数 k 有关，当 k 增大时，温度以较快的速度下降，图 2 绘出了温度 T 与迭代次数 k 的关系曲线。图 2a 表示式 (9) 中 N (待反演参数的个数) 的变化 (其他参数保持不变)；图 2b 表示式 (9) 中 α (温度衰减率) 的变化 (其他参数保持不变)。无论从哪种情况分析，VFSA 的降温速度都是比较快的。

模拟退火的优点在于当温度较高时，可以接受能量值较大的状态，跳出局部极值，从而使当前状态落入包含最优解的最优空间中，而当温度较低时，接受的可能性迅速减小。由于受到较低的退火温度控

制，至一定阶段，算法只接受比当前能量值小的状态。因此，被接受状态的能量值在低温下基本上是递减的，直到出现最小能量状态——最优解。在温度为零时则根本没有接受，只有接受较小能量状态的可能。算法因此退化为局部搜索。在 VFSA 较快的退火计划下，为了实现真正意义上的模拟退火，在温度较高状态下要求扰动状态基本遍历整个解空间，以便寻及到包含最小能量值最优解空间。因此，温度较高时的模型扰动的分布状况在算法中显得尤其重要。所谓模拟退火能跳出局部极值主要也发生在高温下。

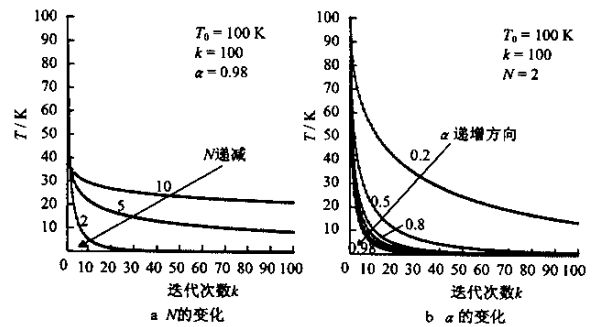


图 2 VFSA 的温度衰减曲线

Fig. 2 Temperature attenuation curve of VFSA

下面举一实例。取 2 个状态，分别记为 x, y ，其定义域为 $[-3, 3]$ ，取其在高温下的模型状态 (以 + 表示) 15 次。为便于比较，用随机数发生器在同一定义域也随机发生 15 个状态 (以 • 表示)。从图 3 可见，高温状态下“+”并没有遍历整个定义空间，而是缩小在图中左下的一个不大的区间内，反而是随机数发生器的 15 个“•”分布比较均匀，基本遍历所定义的空间。(注意，图中 2 个方式的初始状态相同)

可从理论上去分析上述现象。由式 (4) (5)，可以看出 VFSA 的模型扰动方式从本质上讲是局部性的 (高温下范围较大，低温下变小)。新模型的 m'_i 是在当前模型的 m_i 周围扰动后产生的，式中的 y_i 相当于 1 个系数，其大小决定了模型扰动的范围。显然， y_i 是一个特殊的随机数，与退火温度 T 及迭代次数 k 密切相关，更重要的是扰动与 m_i 的位置有关。这种扰动模型决定了在高温状态下有限次的扰动并没有使状态遍历整个定义区间。因此，高温下 VFSA 的空间遍历能力稍逊于随机数发生器。在这种情况下，VFSA 的计算效率可能会相对降低，但问题是很难在计算前确定温度究竟取多大才能算高温。过高或者过低都可能影响算法的收敛与效率。

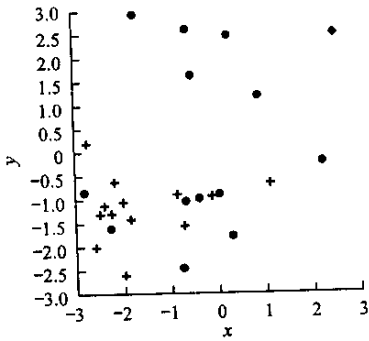


图 3 高温下 VFSA 模型状态分布图

Fig. 3 Model states distribution in high temperature

下面分析在低温状态下, VFSA 扰动方式的特征及其对寻找最优解精度的影响。由于模型扰动是根据式(4)进行的, 因此扰动特征与式中的系数 y_i 密切相关, 而 y_i 又与 m_i, T 及 k 密切相关。为了分析这种关系, 图 4 以实例的形式给出了 k 与 y_i 的关系曲线, 同时给出了递增时温度的模拟退火曲线, 二者可参考比较。从图 4 中可以看到, VFSA 的 y_i 特征在整个模拟退火过程中并没有大变化, 只是到温度很低时, y_i 似乎才有振荡幅度减小的趋势(偶尔也伴有较大振荡)。表明低温下扰动后的模型并非都在当前模型周围, 实际上与当前模型有一定的差距。这就是低温下模型扰动的特征。这种特征对寻找最优解有一定的影响, 表明低温下模型扰动的空间过大, 扰动后模型被接受的几率必然降低, 势必影响寻优效率, 从而影响最终解的精度。

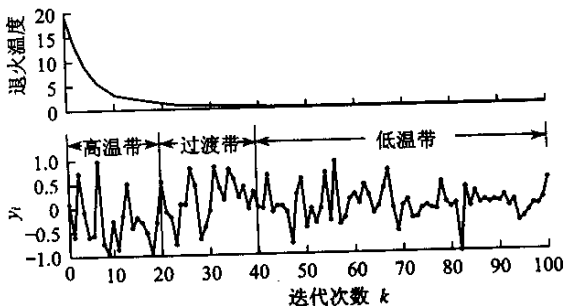


图 4 VFSA 中 k 与 y_i 的关系

Fig. 4 k - y_i relationship in VFSA

3 结论与改进设想

根据上述对 VFSA 的机理探索分析, 可以得到该算法的 2 个基本特点: ① 在高温阶段, 由于其特殊的模型扰动方式, 遍历解空间的能力稍逊于随机发生器, 也就是说扰动幅度不仅与诸多因子有关, 而

且总体上偏小; ② 在低温状态下, 扰动后的模型并非都在当前模型周围, 即扰动幅度过大。这 2 个特点决定了 VFSA 的计算效率可能会偏低, 解的精度因此可能减小。值得高兴的是, 这种探索分析同时给予了改进的基本思路: 在高温下, 以模型的全局扰动方式代替目前的扰动方式; 在低温下, 只要对式(4)中的 y_i 进行某种约束。

改进的具体的做法是将 VFSA 分为 2 个过程。过程一, 采用较高的初始温度和 VFSA 的退火计划, 模型作全局随机扰动, 以搜索并锁定最优解区间。过程二, 采用较低的初始温度和新的退火计划, 模型作局部随机扰动(在当前模型周围), 以在锁定最优解空间后, 由于搜索空间变小, 能提高模型接受效率。新的退火计划将作适当的回火升温, 这样如果当前模型没有跳出局部极小值区间, 适当的升温可以使之再一次跳出, 使最终解更可靠。退火温度与模型扰动方式的改进, 二者密切相关。由于改进是基于 VFSA 的, 故称之为改进的 VFSA, 简称 MVFSA。

需要指出的是, 上述的改进是对退火及模型扰动方式的改变, 而 SA 的广义 Boltzmann-Gibbs 分布接受概率及 Metropolis 准则并没有改变。SA 之所以为全局搜索算法, 其接受概率方式及 Metropolis 准则是其精髓, MVFSA 并没有影响其精髓, 而是使得该二者更具效率, 寻优精度更高, 算法更接近实际应用。笔者目前已经对一些诸如应用 MVFSA 最短路径分析、地球物理中的反演问题等用 SA 作一些具体的研究, 并且取得一定的进展^[8]。

参考文献:

- [1] Ingber L. Very fast simulated annealing[J]. Math Comput Model-ing, 1989, 12: 967-973.
- [2] Arts E, Korst J. Simulated annealing and boltzmann machind[M]. New York: Wiley & Sons, 1989.
- [3] 杨辉, 重力. 地震联合反演基岩密度及综合解释[J]. 石油地球物理勘探, 1998, 33(4): 36-41.
- [4] 康立山. 非数值并行算法——模拟退火算法[M]. 北京: 科学出版社, 1994.
- [5] Kirkpatrick S, Gelatt C D, Vecchi M P. Optimization by simulated annealing[J]. Science, 1983, (220): 671-680.
- [6] 张霖斌, 姚振兴, 纪晨, 等. 快速模拟退火算法及应用[J]. 石油地球物理勘探, 1997, 32(5): 654-660.
- [7] 师学明, 王家映. 一维层状介质大地电磁测深模拟退火法反演[J]. 地球科学, 1998, 23(5): 542-546.
- [8] 陈华根, 吴健生, 王家林. 改进的重力模拟退火反演研究[J]. 吉林大学学报(地球科学版), 2002, (3): 294-303.