第二章 模拟退火法及其局限性

概述

- 是局部搜索算法的一种扩展
- 最早由Metropolis在1953年提出
- Kirkpatrick等人在1983年成功地将模拟退火法用于求解组合优化问题。
- 基本思想是借用金属的退火过程改进局部搜索算法
- 参考马少平《人工智能》7.3节

退火过程的物理描述

- 溶解过程：随着温度的不断上升，粒子逐渐脱离其平衡位置，变得越来越自由，直至溶解温度时，粒子从原来的有序变为完全的无序状态

- 退火过程：随着温度的下降，粒子的热运动逐渐减弱，粒子逐渐停留在不同的状态，从无序趋向有序，直至温度很低时，粒子重新以一定的结构排列。

退火过程的物理性质

- 粒子不同的排列结构，对应不同的能量水平；
- 若退火温度下降的**非常缓慢**，使得每个温度下粒子的排列都达到一种平衡态，则当温度趋于0（绝对温度）时，系统能量将趋于最小值；
- 在温度T下，固体所处的状态具有一定的随机性；
- **物理系统倾向于能量较低的状态**，而热运动又阻碍了系统准确落入低能状态。

退火过程的模型构建

- **准则1：从状态 i 转换为状态 j 的Metropolis准则**

$$
\begin{cases}
E(j)\le E(i)\text{，状态转换被接受；} \\
E(j)>E(i)\text{，状态转移被接受的概率为：} e^{\frac{E(i)-E(j)}{KT}}
\end{cases}
$$

$E(i)$:状态i的能量；T:温度； $K>0$:波尔兹曼常数

- T 固定时，差别越大，概率越小
- $E(i)-E(j)$固定时，T越大概率越大

- **准则2：温度T下,系统处于某个状态i的概率分布**

  由波尔兹曼（Boltzmann）分布给出：

$$P_i(T)=\frac{e^{-\frac{E(i)}{KT}}}{Z_T}$$

当进行足够多次的状态转换后，系统将达到热平衡

$Z_T=\sum_{j\in S}e^{-\frac{E(j)}{KT}}$ 是归一化因子，S是所有可能情况

- **后续分析 $P_i(T)$ 随温度T变化的4种情况：**
  - 同一温度下，两个能量不同的状态
  - 高温下的情况
  - 低温下的情况
  - 当温度下降时的情况

1）在给定的温度T下，设有i、j两个状态且$E(i)<E(j)$，则有：$P_i(T)>P_j(T)$

$$P_i(T)-P_j(T)=\frac{e^{-\frac{E(i)}{KT}}}{Z_T}-\frac{e^{-\frac{E(j)}{KT}}}{Z_T}=\frac{1}{Z_T}e^{-\frac{E(i)}{KT}}\left(1-\frac{e^{-\frac{E(j)}{KT}}}{e^{-\frac{E(i)}{KT}}}\right)$$

$$=\frac{1}{Z_T}e^{-\frac{E(i)}{KT}}\left(1-e^{-\frac{E(j)-E(i)}{KT}}\right)>0$$

$E(i)<E(j)$，该项小于1

- 在任何温度T下，系统处于能量低的状态的概率大于处于能量高的状态的概率。

2）当温度趋于无穷大时：

$$\lim_{T\to\infty}\left(P_i(T)\right)=\lim_{T\to\infty}\left(\frac{e^{-\frac{E(i)}{KT}}}{\sum_{j\in S}e^{-\frac{E(j)}{KT}}}\right)=\frac{1}{|S|}$$

其中|S|表示系统所有可能的状态数。

- 当温度很高时，系统处于各个状态的概率基本相等，接近于平均值，与所处状态的能量几乎无关。

3）当温度趋于0时：

$$\lim_{T\to 0}\left(P_i(T)\right)=\lim_{T\to 0}\left(\frac{e^{-\frac{E(i)}{KT}}}{\sum_{j\in S} e^{-\frac{E(j)}{KT}}}\right)=\lim_{T\to 0}\left(\frac{e^{-\frac{E(i)-E_m}{KT}}}{\sum_{j\in S} e^{-\frac{E(j)-E_m}{KT}}}\right)$$

$$=\lim_{T\to 0}\left(\frac{e^{-\frac{E(i)-E_m}{KT}}}{\sum_{j\in S_m} e^{-\frac{E(j)-E_m}{KT}}+\sum_{j\notin S_m} e^{-\frac{E(j)-E_m}{KT}}}\right)=\lim_{T\to 0}\left(\frac{e^{-\frac{E(i)-E_m}{KT}}}{\sum_{j\in S_m} e^{-\frac{E(j)-E_m}{KT}}}\right)$$

$$=\begin{cases}\frac{1}{|S_m|}, & i\in S_m\\ 0, & i\notin S_m\end{cases}$$

S_m：系统最小能量状态集合

E_m :系统最小能量

- 当温度趋近于0时，系统以等概率趋近于几个能量最小的状态之一，而系统处于其它状态的概率为0。系统以概率1达到能量最小的状态。

4）当温度上升或下降时：

$$\frac{\partial P_i(T)}{\partial T} = \frac{P_i(T)}{KT^2}(E(i) - \overline{E_T})\begin{cases} > 0 & \text{如果 } E(i) > \overline{E_T} \\ < 0 & \text{如果 } E(i) < \overline{E_T} \end{cases}$$

$\overline{E_T} = \sum_{j \in S} E(j) P_j(T)$，温度T下，各状态能量的期望 值

- 系统落入低能量状态的概率随着温度的下降单调上升，而系统落入高能量状态的概率随着温度的下降单调下降。

总结

- 高温时系统处于无序状态，基本以等概率落入各个状态。
- 给定温度下，系统落入低能态的概率大于高能态的概率。故若系统交换充分，趋向于落入较低能的状态。
- 随着温度下降，系统落入低能态的概率增加，落入高能态的概率减少，使得系统各状态能量的期望值随温度的下降单调下降；只有那些能量小于期望值的状态，其概率才随温度下降增加。
- 当温度趋于0时，只剩下那些具有最小能量的状态，系统处于其它状态的概率趋近于0。
- 最终系统将以概率1处于最小能量的一个状态。

退火过程达到最小能量状态的三个前提条件

（1）初始温度必须足够高；

（2）在每个温度下，状态的交换必须足够充分；

（3）温度T的下降必须足够缓慢。

组合优化问题与退火过程的类比

退火过程	组合优化问题
物理系统中的一个状态	组合优化问题的解
状态的能量	解的指标函数
能量最低状态	最优解
温度	控制参数

模拟退火法：

1）随机选择一个解i，k=0，$t_0=T_{max}$（初始温度），计算指标函数$f(i)$。

2）如果满足结束条件，则转15）。

交换足够充分

3） Begin

4）　　如果在该温度内达到了平衡条件，则转13）。

5)　　Begin

6)　　　从i的邻域$N(i)$中随机选择一个解 j。

7）　　　计算指标函数$f(j)$。

8）　　　如果$f(j)<f(i)$，则$i:=j$，$f(i):=f(j)$ ，转4）；否则

9）　　　计算 $P_t(i \Rightarrow j) = e^{-\frac{f(j)-f(i)}{t}}$

10）　　　如果$P_t(i \Rightarrow j)>\text{Random}(0, 1)$，则$i:=j$，$f(i):=f(j)$。

11）　　　转4）

12）　　End

13）　　$t_{k+1}=\text{Drop}(t_k)$，$k=k+1$。

14）End

15）输出结果。

16）结束。

算法的理论性质

- 模拟退火过程中，给定温度下状态（解）的转移可看作是一个一阶马尔可夫链。
- 令$P_t(i, j)$表示温度t下，从状态i 转移到状态 j的一步转移概率，则有：

$$P_t(i,j)=\begin{cases} G_t(i,j)A_t(i,j) & i \neq j \\ 1-\sum_{l\in N(i),l\neq i} G_t(i,l)A_t(i,l) & i=j \end{cases}$$

$G_t(i,j)$：从状态i产生状态j的产生概率；

$A_t(i,j)$：状态i产生状态j后，接受状态j的接受概率

结论：只要$P_t(i, j)$满足一定的条件，模拟退火法以概率1找到组合优化问题的全局最优解。连续问题则未必……

算法的理论性质

- Metropolis准则构造的$P_t(i,j)$满足结论的条件

$G_t(i,j)$的等概率选取：

$$G_t(i,j)=\begin{cases}0 & j\notin N(i)\\ \dfrac{1}{|N(i)|} & j\in N(i)\end{cases}$$

$A_t(i,j)$的设置：

$$A_t(i,j)=\begin{cases}1 & f(j)<f(i)\\ e^{-\frac{f(j)-f(i)}{t}} & else\end{cases}$$

满足上述结论的前提条 件

- 模拟退火法可用于一般的优化问题，通常能找到比局部搜索更好的结果，但可能花费较大的计算量；极端情况，等同于遍历。

模拟退火法与局部搜索的差异

算法思路上的差异（随机接受劣解的策略不同）：

•温度较高时(前期搜索)，接受劣解的概率较大；在初始高温下（初始搜索），接近100%的接受率；
•随着温度下降（搜索深入时），接受劣解的概率逐渐减小；
•温度趋于零时（搜索尾声），接收劣解的概率也趋近于零。

理论性质上的差异：在求解组合优化问题时，模拟退火法可以概率1找到全局最优

算法中的环境参数问题

- 初始温度的确定
- 温度的下降方法
- 内循环的结束条件，即每个温度状态交换何时结束（何谓温度达到平衡条件？）
- 外循环的结束条件，即温度下降到什么时候结束(停机准则)

初始温度的确定（1）

- 一个合适的初始温度，应保证平稳分布中每一个状态的概率基本相等，也就是接受概率P_0近似等于1。在Metropolis准则下，即要求：

$$e^{-\frac{\Delta f(i,j)}{t_0}} \approx 1$$

- 若给定一个较大的接受概率P_0，则：$t_0 = \dfrac{\Delta f(i,j)}{\ln(P_0^{-1})}$

$$\Delta f(i,j) = \max_{i \in S}(f(i)) - \min_{i \in S}(f(i))$$

$$\Delta f(i,j) = \frac{\sum_{i,j \in S} |f(i) - f(j)|}{|S|^2}$$

$$\Delta f(i,j) = \frac{\sum_{i=0}^{|S'|-1} |f(S'(i)) - f(S'(i+1))|}{|S'|}$$

$\Delta f(i,j)$的3种计算方法

•S’：由S随机产生的有序集
•复杂问题可随机产生一些状态代替集合S

初始温度的确定（2）

- 在t_0下随机生成一个状态序列，m_1：指标函数下降的状态数；m_2：指标函数上升的状态数；$\Delta f(i,j)$:状态能量增加的平均值。
- 则m_2个状态中，被接受的个数为：$m_2 e^{-\frac{\Delta f(i,j)}{t_0}}$

平均接受率为：

$$P_0 = \frac{m_1 + m_2 e^{-\frac{\Delta f(i,j)}{t_0}}}{m_1 + m_2}$$

$$t_0^{(1)} = \frac{\Delta f(i,j)}{\ln(P_0^{-1})}$$

求解得：$t_0^{(2)} = \dfrac{\Delta f(i,j)}{\ln\left(\dfrac{m_2}{m_2 P_0 - m_1(1-P_0)}\right)}$

$$\boxed{\begin{array}{l} t_0^{(1)} > t_0^{(2)} \\ t_0^{(1)} \approx 2t_0^{(2)} \end{array}}$$

初始温度的确定（3）

- **模拟固体的升温过程：**

  （1）给定一个希望的初始接受概率P_0，及一个较低的初始温度t_0，如$t_0=1$；

  （2）随机产生一个状态序列，并计算该序列的接收率：

  $$\frac{\text{接受的状态数}}{\text{产生的状态总数}}$$

  如果接收率大于给定的初始接受概率P_0，则转（4）；

  （3）提高温度，更新t_0，转（2）；

  （4）结束。

实际应用时，初始温度常会根据经验确定

温度的下降方法

- 等比例下降

$t_{k+1} = \alpha \cdot t_k$，$0 < \alpha < 1$，一般取$\alpha = 0.8 \sim 0.95$

- 等值下降

$t_{k+1} = t_k - \Delta t$，当K是下降总次数时，$\Delta t = \dfrac{t_0}{K}$

每一温度下的停止准则（1）

- 固定长度方法

  在每一温度下，都使用相同的马尔科夫链长L_k

  —可以理解为每一温度下，状态转换判定次数都为L_k；或者说，迭代次数都是L_k

  —L_k的选取与具体的问题相关，一般与邻域的大小直接关联，通常选择为问题规模n的一个多项式函数。

每一温度下的停止准则（2）

- 基于接受率的停止准则：
  - 规定一个接受次数R，在某一温度下，只有接受的状态数达到R或迭代次数达上限时，才转入下一温度；
  - 规定一个状态接受率R，R等于该温度下接受的状态数除以生成的总状态数。只有接受率达到了R且迭代次数满足要求，才转入下一个温度；
  - 在迭代的过程中，若干相邻的状态称为“一代”，如果相邻两代的解的指标函数差值小于规定的值的话，则停止该温度下的迭代。

算法的终止原则

1)零度法

设定一个正常数ε，当时$t_k < \varepsilon$时，算法结束

2)循环总控制法

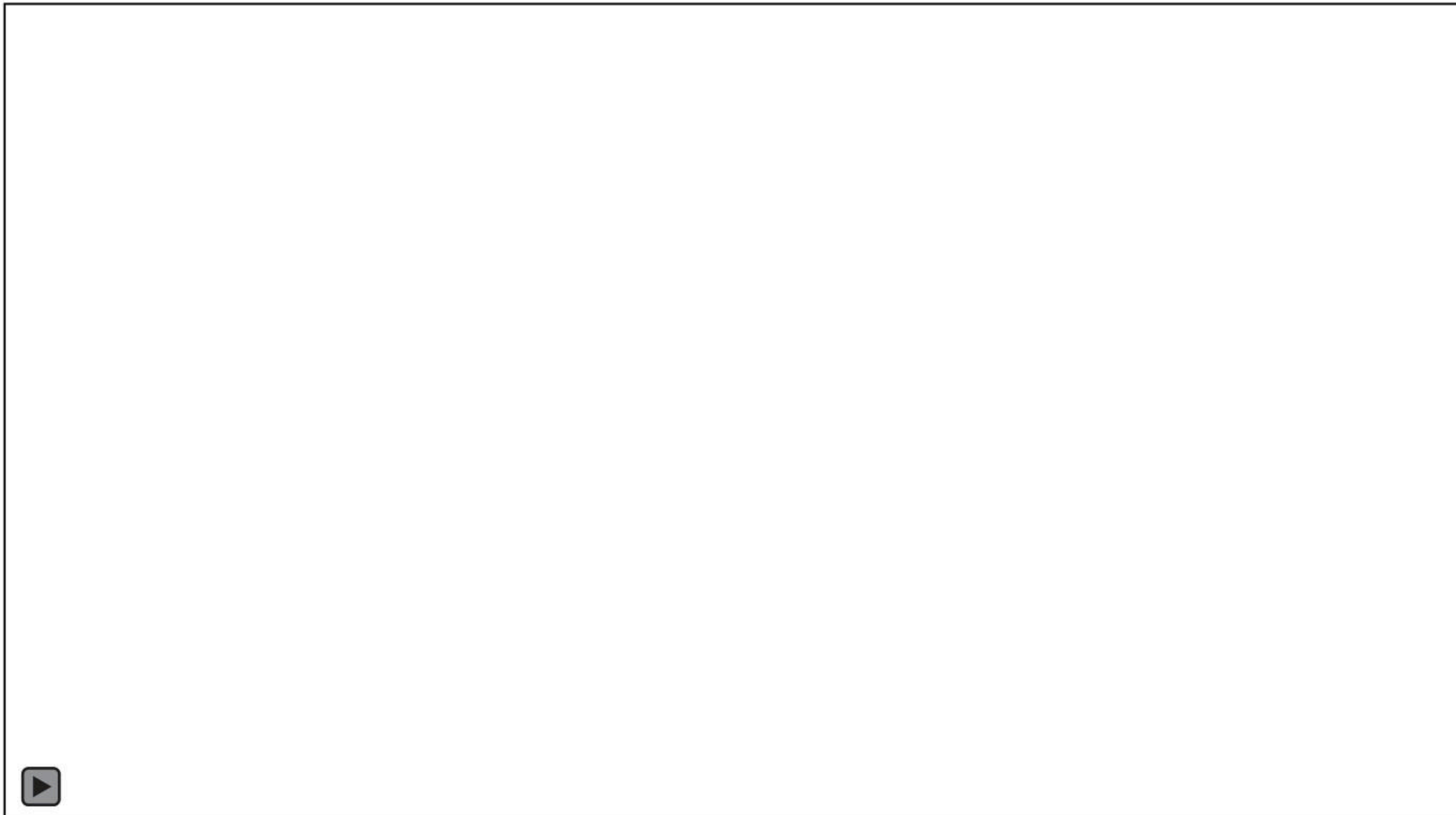
指定温度下降次数K，当迭代次数达到K时，算法停止

3)无变化控制法

如果相邻的n个温度中，解的指标函数值无变化，算法停止

4)接受概率控制法

给定一个小的概率值p，如果在当前温度下除了局部最优状态外，其他状态的接受概率小于p值，则算法结束。



应用举例1——旅行商问题

- **解的表示：**
  – n个城市任一种排列均是问题的一个可能解，表示为:

$$(\pi_1, \ldots, \pi_n)$$

- **指标函数(能量函数)**

$$f(\pi_1, \ldots, \pi_n) = \sum_{i=1}^{n} d_{\pi_i \pi_{i+1}}$$

其中

$$\pi_{n+1} = \pi_1$$

- **新解的产生**
  - 两城市间逆序交换

    设当前解是$(\pi_1,...,\pi_n)$，选中城市u和v，$u<v$。

    新解：$(\pi_1,...,\pi_u,\pi_{v-1},...,\pi_{u+1},\pi_v,\pi_{v+1},...,\pi_n)$

    则两个路径的距离差为：

$$\Delta f=(d_{\pi_u\pi_{v-1}}+d_{\pi_{u+1}\pi_v})-(d_{\pi_u\pi_{u+1}}+d_{\pi_{v-1}\pi_v})$$

- **新解的接受准则**

$$A_t=\begin{cases}1 & \Delta f<0\\ e^{-\frac{\Delta f}{t}} & \Delta f\geq 0\end{cases}$$

- **初始参数的确定**

1)康立山等人的方法：

- 初始温度t_0=280；
- 在每个温度下采用固定的迭代次数，L_k=100n，n为城市数；
- 温度的衰减系数＝0.92，即$t_{k+1}=0.92\times t_k$；
- 算法的停止准则为：当相邻两个温度得到的解无任何变化时算法停止。

2) Nirwan Ansari和Edwin Hou的方法（N&E算法）：

--初始温度t_0的确定：从t_0=1出发，以$t_0=1.05\times t_0$对t_0进行更新，直到接受概率≥0.9，此时得到的温度为初始温度；

--在每个温度下采用固定的迭代次数，L_k=10n，n为城市数；

--温度的衰减系数＝0.95，即$t_{k+1}=0.95\times t_k$；

10城市TSP问题求解结果
（N&E算法，运行1000次）

	路径长度	出现次数	平均转移次数	路径
最优	2.691	906	3952	BCADEFGHIJ
次优	2.752	46	4056	BCADEGFHIJ
第三	2.769	10	4053	DEFGHIJCBA
最差	2.898	5	4497	ABCDEFHIJG

20城市TSP问题求解结果

（N&E算法，运行1000次）

	路径长度	出现次数	平均转移次数	路径
最优	24.38	792	8740	ACLBIQFTMEPRGSOJHDKN
次优	24.62	167	8638	ADCLBIQFTMEPRGSOJHKN
第三	25.17	39	9902	ANKDHIOJSGRPEMTFQBLC
最差	25.50	1	5794	AQFTMEPRGSJOIBLCDHKN

应用举例2——背包问题

- 背包问题(Knapsack problem)是一种组合优化的NP完全问题。可描述为：给定一组物品，每种物品都有自己的重量和价格，在限定的总重量内，如何选择使得物品的总价格最高。

- 例10.1已知背包载量为c=10，现有n=5个物品，它们的重量和价值分别是(2, 3, 5, 1, 4)和(2, 5, 8, 3, 6)。试用模拟退火算法求解该背包问题。

- 解：可行解用0和1的序列表示，例：(10100)表示选择第1、3个物品，而不选择第2、4、5个物品。

已知：
物体个数：n=5
背包容量：**c=10**
重量 w = (2, 3, 5, 1, 4)
价值 v = (2, 5, 8, 3, 6)

第一步：初始化。假设初始解为i=(11001)，初始温度为T=10。计算$f(i)$=2+5+6=13，最优解s=i

第 二步：在T温度下局部搜索，直到“平衡”，　假设平衡条件为执行了3次内层循环。
（2-1）产生当前解i的一个邻域解j（如何构造邻域根据具体的问题而定，这里假设为随机改变某一位的0/1值或者交换某两位的0/1值），假设j=(11100)
要注意产生的新解的合法性，要舍弃那些总重量超过背包装载量的非法解

（2-2）$f(j)$ = 2+5+8=15 > 13=$f(i)$，所以接受新解j
i=j; $f(i)$=$f(j)$=15; 而且s=i;
要注意求解的是最大值，因此适应值越大越优

（2-3）返回（2-1）继续执行。
(a) 假设第二轮得到的新解j=(11010)，由于$f(j)$ = 2+5+3=10 < 15=$f(i)$，所以需要计算接受概率$P(T)$=exp(($f(j)$-$f(i)$)/T) = exp(-0.5) = 0.607，假设random(0,1)>$P(T)$，则不接受新解

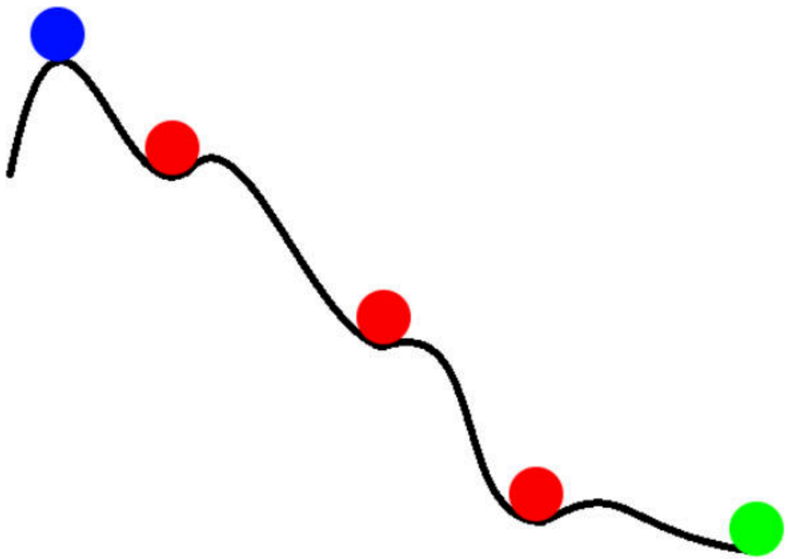
(b) 假设第三轮得到的新解j=(10110)，由于$f(j)$ = 2+8+3=13 < 15=$f(i)$，所以需要计算接受概率$P(T)$=exp(($f(j)$-$f(i)$)/T) = exp(-0.3) = 0.741，假设random(0,1)<$P(T)$，则接受新解
按照一定的概率接受劣解，也是跳出局部最优的一种手段

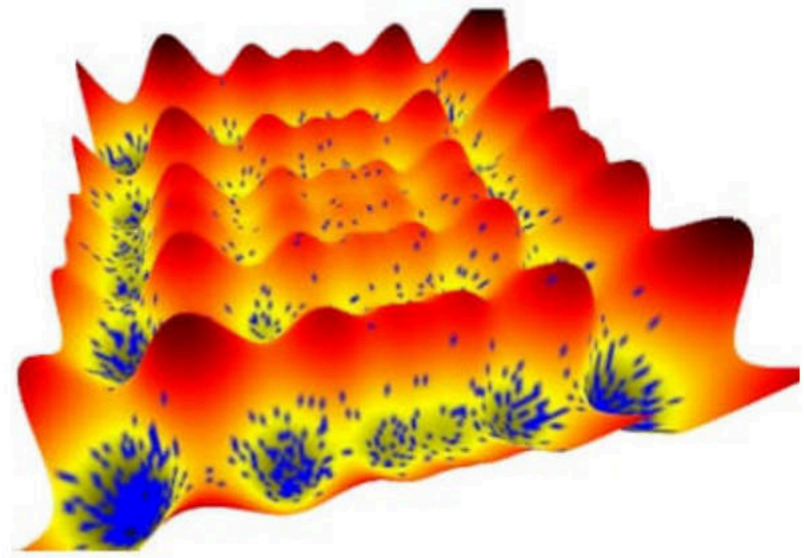
（2-4）这时候，T温度下的“平衡”已达到（即已经完成了3次的邻域产生），结束内层循环

第三步：降温，假设温度降为T=9。如果没有达到结束标准，则返回第二步继续执行

假设在继续运行的时候，从当前解i=(10110)得到一个新解j=(00111)，这时候的函数值为$f(j)$=8+3+6=17，这是一个全局最优解。可见上面过程中接受了劣解是有好处的。

应用举例——函数优化问题





传统优化搜索算法的局限性

- 有限穷举型搜索算法求解NP一难的组合问题时，当规模增大，易产生组合爆炸和维数灾难问题，难以找到全局最优；
- 近似算法如确定性下降搜索算法（梯度下降、乘子法、内点法等），求解连续优化问题时通常需要梯度相关信息；一般只能找到一个近似局部最优，难以找到全局最优解。缺乏有效刻画全局最优的能力。
- 共同点：单点、确定性、局部搜索
- 模拟退火法：单点、随机性、近似最优解

模拟退火法的优缺点及改进之处

- 优点：计算过程简单、通用、稳健性强，适用于并行处理，可用于求解复杂的非线性优化问题
- 缺点：收敛速度慢、执行时间长、算法性能与初始值有关及参数敏感等

- 改进之处：

1) 设计合适的状态产生函数，使其根据搜索进程的需要表现出状态的全空间分散性或局部区域性；

2) 设计高效的退火策略，避免状态的迂回搜索。

3) 采用并行搜索结构，避免陷入局部极小，改进对温度的控制方式。

4) 选择合适的初始状态和算法终止准则。