关于模拟退火算法的报告

姓名：刘丽萍　学号：1200012639　邮箱：lipingliu@pku.edu.cn　电话：18811465518

【摘要】本文由爬山算法导入，详细介绍了模拟退火算法的基本原理、求解过程和实际应用，并对其存在的局限性进行了分析，有助于更加全面地理解模拟退火算法。

【关键字】模拟退火算法 全局最优解

一、　引言

模拟退火算法(Simulated Annealing Algorithms,简称 SAA) 最早的思想是由 N.Metropolist 等人于 1953 年提出，是 20 世纪 80 年代初期发展起来的一种求解大规模组合优化问题的随机性方法。它以优化问题的求解与物理系统退火过程的相似性为基础，利用 Metropolis 算法并适当地控制温度的下降过程实现模拟退火，从而达到求解全局优化问题的目的。【1】

二、　爬山算法（Hill Climbing）

为了更好地理解模拟退火算法，先介绍爬山算法。关于爬山算法与模拟退火，有一个有趣的比喻：爬山算法——兔子朝着比现在高的地方跳去。它找到了不远处的最高山峰。但是这座山不一定是珠穆朗玛峰。这就是爬山算法，它不能保证局部最优值就是全局最优值。模拟退火——兔子喝醉了。它随机地跳了很长时间。这期间，它可能走向高处，也可能踏入平地。但是，它渐渐清醒了并朝最高方向跳去。这就是模拟退火。

爬山算法是一种简单的贪心搜索算法，该算法每次从当前解的临近解空间中选择一个最

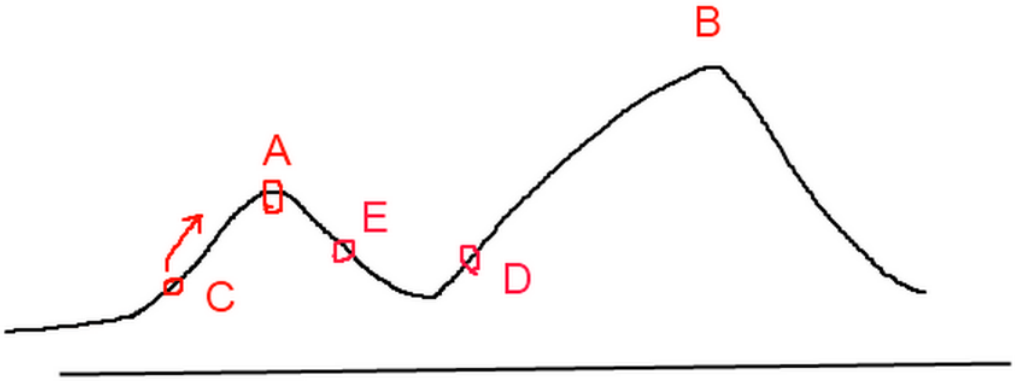

Figure 1　爬山算法示意图

优解作为当前解，直到达到一个局部最优解。其实现很简单，其主要缺点是会陷入局部最优解，而不一定能搜索到全局最优解。如图 1 所示：假设 C 点为当前解，爬山算法搜索到 A 点这个局部最优解就会停止搜索，因为在 A 点无论向那个方向小幅度移动都不能得到更优的解。

三、　模拟退火算法

与爬山算法相比较，模拟退火算法本质也是一种贪心算法，但是其在搜索过程中引入了随机因素。其以一定的概率来接受一个比当前解要差的解，因此有可能会跳出这个局部的最优解，达到全局的最优解。以图 1 为例，模拟退火算法在搜索到局部最优解 A 后，会以一定的概率接受到 E 的移动。也许经过几次这样的不是局部最优的移动后会到达 D 点，于是就跳出了局部最大值 A。【2】

其算法可以简单描述为：

若 J(Y(i+1))>= J(Y(i)) (即移动后得到更优解)，则总是接受该移动；

若 J(Y(i+1))< J(Y(i)) (即移动后的解比当前解要差)，则以一定的概率接受移动，而且这个概率随着时间推移逐渐降低（逐渐降低才能趋向稳定）。

其中，一个重要的变量是“一定的概率”，其计算过程参考了金属冶炼的退火过程，这也就是算法名称的由来。根据热力学的原理，在温度为 T 时，出现能量差为 dE 的降温的概率为 P(dE)，表示为：**P(dE) = exp(dE/(kT))** 。其中 k 是一个常数，exp 表示自然指数，且 dE<0。这条公式说白了就是：温度越高，出现一次能量差为 dE 的降温的概率就越大；温度越低，则出现降温的概率就越小。又由于 dE 总是小于 0（否则就不叫退火了），因此 dE/kT < 0 ，所以 P(dE)的函数取值范围是(0,1) 。随着温度 T 的降低，P(dE)会逐渐降低。对应到组合优化问题，就是移动接近最优解时，“一定概率”会逐渐降低并趋于稳定。【2】

模拟退火技术是一种启发式随机搜索方法，其用于组合优化问题的出发点是基于物理中固体物质的退火过程与一般优化问题的相似性，如表 2 所示。物理退火过程中，在对固体物质进行退火处理时，常先将它加温使其粒子可自由运动，以后随着温度的逐渐下降，粒子逐渐形成低能态晶格。若在凝结点附近的温度下降速率足够慢，则固体物质定会形成最低能量的基态。优化问题也存在类似过程，模拟退火算法最为显著的特征是以一定的概率接受使目标函数增大的移动。其基本思想是从选定的初始解开始，在借助于控制参数 t 递减时产生的一系列 Markov 链中，利用一个新解产生装置和接受准则，重复进行“产生新解—计算目标函数差—判断是否接受新解—接受或舍弃新解”，不断对当前解迭代，从而使目标函数最优的执行过程。由于固体退火必须缓慢降温，才能使固体在每一温度下都达到热平衡，最终趋于平衡状态。因此，控制参数

物理退火	优化问题
物质状态	解
能量最低的物质状态	最优解
退火过程	求解过程
温度	控制参数
能量	目标函数
等温过程	Metropolis 抽样过程

Figure 2 金属物质退火过程与优化问题求解过程比较

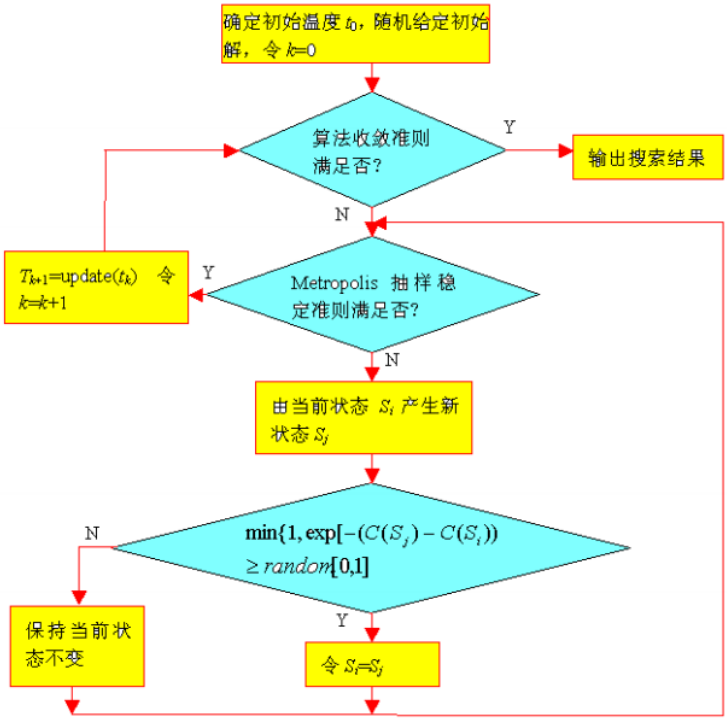

Figure 3 模拟退火算法流程图

t 的值必须缓慢衰减，才能确保模拟退火算法最终趋于优化问题的整体最优解。

其求解步骤如下：1）从可行解空间中任选一初始状态 X0,计算其目标函数值 f(X0)，并选择初始控制温度 T0 和马尔可夫链的长度；2）在可行解空间中产生一个随机扰动，用状态产生函数产生一个新状态 X1 ,计算其目标函数值 f(X1)； 3）根据状态接受函数判断是否接受：如果 f(X1) < f(X0)，则接受新状态 X1 为当前状态，否则按 Metropolis 准则判决是否接受 X1，若接受，则令当前状态等于 X1 ，若不接受，则令当前状态等于 X0；4）跟据某个收敛准则，判断抽样过程是否终止，是则转 5，否则转 2；5）按照某个温度冷却方案降低控制温度；6）根据某个收敛准则，判断退火过程是否终止，是则转 7，否则转 2；7）当前解作为最优解输出。【2】具体数理流程可见图 3。【3】

四、 算法评价

与爬山算法比较，模拟退火算法在搜索过程中引入了随机因素，更有可能跳出局部最优解，获得全局最优解。在参数设置得当的前提下，模拟退火算法搜索效率会高于穷举法。模拟退火算法是一种通用的搜索、优化算法，目前已在工程中得到了广泛应用，诸如 VLSI、生产调度、控制工程、机器学习、神经网络、图像处理等领域。但其本质仍是一种随机算法，只能相对比较快的找到问题的近似最优解，并不一定能找到全局的最优解。其次，求解时间过长，尤其是在变量多、目标函数复杂的情况下，为了得到一个好的近似解，控制参数需要从一个较大的值开始 ，并在每一个温度值下执行多次算法 ,因此迭代运算速度慢；如若初始值选择较小，很可能就得不到全局最优解。也即 SA 算法在克服计算时间较长、效率极低，并适用于规模较大的问题方面，尚需大量的研究工作。

五、 参考文献

1) 朱颢东、钟勇，一种改进的模拟退火算法，计算机技术与发展，2009 年 6 月
2) 苍梧，解析模拟退火算法，2010 年 12 月
3) 谢冰，人工智能之模拟退火算法，2006 年 10 月
4) 王 强，模拟退火算法的改进及其应用，应用数学，1993 年 4 月
5) 余 进，基于模拟退火算法的聚类分析在数据挖掘中的应用，重庆大学，2003 年