

一种改进的模拟退火算法

朱颢东^{1,2}, 钟 勇^{1,2}

(1. 中国科学院 成都计算机应用研究所, 四川 成都 610041;

2. 中国科学院 研究生院, 北京 100039)

摘 要:讨论了传统模拟退火算法的原理、求解过程,详细地分析了它存在的局限,简单叙述了模拟退火算法中关键参数对该算法性能的影响,并给出了该算法的可行的改进方案。提出了一个改进的模拟退火算法。在该改进算法中,为避免遗失当前最优解,增加了记忆功能,将当前最好的状态记忆下来,从而使得模拟退火算法成为一种智能化算法;设计了一个自适应温度更新函数,并设置双阈值使得在尽量保持最优性的前提下减少计算量。最后用改进前后的两个算法来解决一个非线性寻找组合最优问题,实验证明改进后的模拟退火算法是高效的。

关键词:模拟退火算法;马尔可夫链;最优组合

中图分类号:TP301.6

文献标识码:A

文章编号:1673-629X(2009)06-0032-04

A Kind of Renewed Simulated Annealing Algorithm

ZHU Hao-dong^{1,2}, ZHONG Yong^{1,2}

(1. Chengdu Institute of Computer Application, Chinese Academy of Sciences, Chengdu 610041, China;

2. Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

Abstract: Introduced the traditional simulated annealing algorithm through discussing its theory and process, analyzed its shortcoming in detail, simply described influence of key parameters to simulated annealing algorithm and provided feasible improvement. Then presented a method of improving simulated annealing algorithm. In order to avoid missing current optimal solution, the improved algorithm is increased memory function to remember the current best state so that it becomes an intelligent algorithm. Also designed an adaptive temperature update function and set up dual-threshold to reduce amount of calculation. Finally, used the two algorithms to solve a non-linear problem that is searching optimization combination. Through testing, the improved simulated annealing algorithm is better than the traditional simulated annealing algorithm.

Key words: simulated annealing algorithm; Markov chain; optimization combination

0 引言

许多实际优化问题的目标函数都是非凸的,存在许多局部最优解,但是,有效地求出一般非凸目标函数的全局最优解至今仍是一个难题。特别是随着优化问题规模的增大,局部最优解的数目将会迅速增加,这无疑使寻找大规模复杂系统优化问题的全局最优解变得更加困难。求解全局优化问题的方法可分为两类^[1]:一类是确定性方法,另一类是随机性方法。前者基于确定性的搜索策略,在目标函数满足特定的限制条件

下可以对求得全局最优解提供确定性的保证,这类方法一般适用于求解满足特定要求的一些特殊问题。后者在搜索策略中引入了适当的随机因素,对目标函数一般不需要特殊的限制条件,具有比较广泛的适用性,由于采用随机搜索策略,这类方法只能在概率的意义上为求得全局最优解提供保证。

模拟退火算法^[2]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^[2]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 传统模拟退火算法

模拟退火算法(Simulated Annealing Algorithms,简称SAA)最早的思想是由N. Metropolis^[2]等人于1953

收稿日期:2008-10-07;修回日期:2008-12-24

基金项目:四川省科技计划项目(2008GZ0003);四川省科技攻关项目(07GG006-014);中国科学院人才培养计划项目("西部之光")

作者简介:朱颢东(1980-),男,河南虞城人,博士研究生,研究方向为软件过程技术与方法;钟 勇,博士生导师,研究员,研究方向为软件过程技术与方法。

年提出。在1983年, S. Kirkpatrick^[3]等成功地将退火思想引入组合优化领域。

模拟退火算法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。其相似性如表1所示^[4]。

表1 金属物质退火过程与优化问题求解过程比较

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

模拟退火技术是一种启发式随机搜索方法^[5],它在搜索策略上与传统的随机搜索方法不同,它不仅引入了适当的随机因素,而且还引入了物理系统退火过程的自然机理。它在迭代过程中不仅接受使目标函数值变“好”的点,而且还能够以一定的概率接受使目标函数值变“差”的点,接受概率随着温度的下降逐渐减小,由于在整个解的邻域范围内取值的随机性,可使算法跳出局部最优解而获得全局最优解,有利于提高求得全局最优解的可靠性。

SA算法的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 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^[6]:

1) 从可行解空间中任选一初始状态 x_0 ,计算其目标函数值 $f(x_0)$,并选择初始控制温度 T_0 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 x_1 ,计算其目标函数值 $f(x_1)$;

3) 根据状态接受函数判断是否接受:如果 $f(x_1) < f(x_0)$,则接受新状态 x_1 为当前状态,否则按Metropolis准则判决是否接受 x_1 ,若接受,则令当前状态等于 x_1 ,若不接受,则令当前状态等于 x_0 ;

4) 根据某个收敛准则,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 T ;

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 传统模拟退火算法存在的局限

虽然模拟退火算法存在有限度地接受劣解、可以跳出局部最优解、原理简单、使用灵活、适合求解出优化问题的全局最优或近似全局最优解等优点,但它明显地存在以下缺点:

(1) 求解时间太长。在变量多、目标函数复杂时,为了得到一个好的近似解,控制参数 T 需要从一个较大的值开始,并在每一个温度值 T 下执行多次Metropolis算法,因此迭代运算速度慢。

(2) 温度 T 的初值和减小步长较难确定。如果 T 的初值选择较大,减小步长太小,虽然最终能得到较好的解,但算法收敛速度太慢;如果 T 的初值选择较小,减小步长过大,很可能得不到全局最优解。

(3) 搜索过程中由于执行概率接受环节而遗失当前遇到的最优解。

3 模拟退火算法的改进

3.1 模拟退火算法关键参数选择

模拟退火算法包括三函数两准则,即状态产生函数、状态接受函数、温度更新函数、内循环终止准则和外循环终止准则^[7,8],这些环节的设计将决定SA算法的优化性能。此外,初温的选择对SA算法性能也有很大影响。

理论上SA算法的参数只有满足算法的收敛条件,才能保证实现的算法依概率1收敛到全局最优解。然而,由SA算法的收敛性理论知,某些收敛条件无法严格实现,如时齐马氏链的内循环终止准则,即使某些收敛条件可以实现,如非时齐马氏链的更新函数,但也常常会因为实际应用的效果不理想而不被采用。因此,通常只能依据一定的启发式准则或大量的实验加以选取。

理论上是用一个马尔科夫链描述模拟退火算法的变化过程,因此具有全局最优性。实际应用中的模拟退火算法是一个启发式算法。它有诸多的参数需要调整,如起始温度,温度下降的方案、固定温度式的迭代长度及终止规则等,这样就需要人为地调整。

3.2 SA算法可行的改进方案

在确保一定要求的优化质量基础上,提高模拟退火算法的搜索效率(时间性能),是对SA算法进行改进的主要内容。可行的方案包括:

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) 设计高效的退火历程;
- 3) 避免状态的迂回搜索;
- 4) 采用并行搜索结构;
- 5) 为避免陷入局部极小, 改进对温度的控制方式;
- 6) 选择合适的初始状态;
- 7) 设计合适的算法终止准则;

此外, 对模拟退火算法的改进, 也可通过增加某些环节而实现。主要的改进方式包括:

(1) 增加升温或重升温过程。在算法进程的适当时机, 将温度适当提高, 从而可激活各状态的接受概率, 以调整搜索进程中的当前状态, 避免算法在局部极小解处停滞不前。

(2) 增加记忆功能。为避免搜索过程中由于执行概率接受环节而遗失当前遇到的最优解, 可通过增加存储环节, 将“Best So Far”的状态记忆下来。

(3) 增加补充搜索过程。即在退火过程结束后, 以搜索到的最优解为初始状态, 再次执行模拟退火过程或局部趋化性搜索。

(4) 对每一当前状态, 采用多次搜索策略, 以概率接受区域内的最优状态, 而非标准 SA 的单次比较方式。

(5) 结合其他搜索机制的算法, 如遗传算法、混沌搜索等。

3.3 文中 SA 算法的改进方法

熟知, 模拟退火算法在局部极小解处有机会跳出并最终趋于全局最优的根本原因是算法通过概率判断来接受新状态, 这在理论上也已得到严格证明, 即当初温充分高、降温足够慢、每一温度下抽样足够长、最终温度趋于零时, 算法最终以概率 1 收敛到全局最优解。但由于全局收敛条件难以实现, 并且“概率接受”使得当前状态可能比搜索轨迹中的某些中间状态要差, 从而实际算法往往最终得到近似最优解, 甚至可能比中间经历的最好解差, 而且搜索效率较差。为了不遗失“Best So Far”的状态, 并提高搜索效率, 受文献[9~13]的启发, 改进的做法是: 在算法搜索过程中记住中间最优解, 并及时更新, 增加了这种记忆能力的模拟退火算法已成为一种智能化的算法; 设计一个新的温度更新函数: 如果在某一温度下状态被接受的次数较多, 那么, 这时温度降低的幅度应该大一些, 要不然温度降低的幅度应该小些, 这样可以保证在温度更新时有一定的自适应性; 设置双阈值使得在尽量保持最优性的前提下减少计算量, 即在各温度下当前状态连续 maxstep2 步保持不变则认为 Metropolis 抽样稳定, 若连续 maxstep1 次退温过程中所得的最优解均不变则

认为算法收敛。

整个改进的 SA 算法分以下两阶段改进:

(1) 改进的退火过程:

Step1: 给定初始温度 t_0 , 随机产生初始解 S , 令最优解 $\text{Best} = S$, 当前状态 $s(0) = S, p = 0, i = 0$;

Step2: 令 $t = t_i$, 以 $t, \text{Best}, s(i)$ 为参数调用改进的抽样过程, 返回其得到的最优解 Best0 和当前状态 s' , 令 $s(i+1) = S'$

Step3: if $f(\text{Best}) \leq f(\text{Best0})$, then $p = p + 1$

Else $\text{Best} = \text{Best0}, p = 0$

Step4: 退温

$\beta = \text{acceptnum} / (\text{max step} + \text{acceptnum});$

$t_{i+1} = e^{-\beta t_i}; i = i + 1;$

Step5: if $p \geq \text{maxstep1}$ then goto step5

Else goto step2

Step6: 以 Best 为最终解输出, 算法结束。

(2) 改进的抽样过程:

Step1:

$k = 0$, 令初始状态 $s'(0) = s(i)$, 初始最优解

$\text{Best0} = \text{Best}, q = 0, \text{acceptnum} = 0$

Step2:

由状态 $s'(k)$ 利用状态产生函数产生新状态 s , 计算 $\Delta f = f(s) - f(s'(k))$

Step3:

if $\Delta f \leq 0$ then

$s'(k+1) = s, \text{Best0} = s, q = 0, \text{acceptnum} = \text{accept} + 1$

if $\Delta f > 0$ then

Step4:

$k = k + 1$

if 以概率 $\exp(-\Delta f/t)$ s 被接受 then

$s'(k+1) = s, q = 0, \text{acceptnum} = \text{acceptnum} + 1$

else $s'(k+1) = s'(k), q = q + 1;$

If $q \geq \text{maxstep2}$ then goto step5

Else goto step2

Step5:

以 $S' = S'(k)$ 为当前状态, acceptnum 为接受次数、 Best0 为最优解输出到退火过程, 该算法结束。

4 改进的模拟退火算法性能验证

为了测试改进算法的性能, 对下面约束优化问题进行计算, 分别独立运行 50 次, 均能在较短的时间内找到最优解, 证明了算法的有效性。这个约束优化问题^[14]的目标函数是非线性的, 有 5 个自变量, 6 个非线性约束和 10 个上下界约束, 其中 x_2 和 x_4 没有显示地

表2 原 SA 和改进的 SA 结果对比

SA	目标值	次数	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
ISA	-30486.11	1950202	78.00	33.67	30.75	43.63	35.76
	-31023.78	402432	78.00	33.0016	27.0923	44.9971	44.9106

包含在目标函数里。

优化问题如下:

* 目标函数:

$$5.3578547x_3^2 + 0.8356891x_1x_5 + 37.293239x_1 - 40792.141$$

* 约束条件:

$$0 \leq 085.334407 + 0.0056858x_2x_5 + 0.00026x_1x_4 - 0.0022053x_3x_5 \leq 92$$

$$90 \leq 80.51294 + 0.0071317x_2x_5 + 0.0029955x_1x_2 + 0.0021813x_3^2 \leq 110$$

$$20 \leq 9.300961 + 0.0047026x_3x_5 + 0.0012547x_1x_3 + 0.0019085x_3x_4 \leq 25$$

$$78 \leq x_1 \leq 102, 33 \leq x_2 \leq 45,$$

$$27 \leq x_3 \leq 45, 27 \leq x_4 \leq 45, 27 \leq x_5 \leq 45$$

算法中参数 maxstep1 设为 200, maxstep2 设为 300, 试验对比结果如表 2 所示。

由表 2 可以看出原 SA 算法的抽样次数要比改进算法 ISA 多 4 倍, 而目标结果还不如改进的算法, 从这可以说明本次算法改进是成功的。

5 结束语

讨论了传统模拟退火算法的原理、过程, 详细地分析了它的不足, 给出了该算法的可行的改进方案。然后提出了一个改进的模拟退火算法, 接着用改进前后的两个算法来解决一个非线性寻找组合最优问题。试验表明改进后的算法在时间性能上有了较大的提高, 而且得到的解还优于传统模拟退火算法得到的解, 这也说明了该算法在解决非线性组合优化问题上有一定的优势。

参考文献:

- [1] Steinbrunn M, Moerkotte G, Kemper A. Heuristic and Randomized Optimization for the Join Ordering Problem[J]. The VLDB Journal, 1997, 6(3):8-17.
- [2] Metropolis N, Rosenbluth A. Rosenbluth Metal, Equation of state calculations by fast computing machines[J]. Journal of Chemical Physics, 1953, 56(21):1087-1092.
- [3] Kirkpatrick S, Jr Gelatt C D, Vecchi M P. Optimization by simulated annealing[J]. Science, 1983, 220(11):650-671.
- [4] 涂进. 基于模拟退火算法的聚类分析在数据挖掘中的应用[D]. 重庆:重庆大学, 2003.
- [5] 佟萍. 模拟退火算法在 Web 服务合成中的应用[J]. 计算机技术与发展, 2006, 16(3):220-222.
- [6] 贾德香, 唐国庆, 韩净. 基于改进模拟退火算法的电网无功优化[J]. 继电器, 2004, 32(4):32-36.
- [7] 庞哈利, 郑秉霖, 徐心和. 一种自适应的模拟退火算法[J]. 控制与决策, 1999, 14(5):23-28.
- [8] 林慧君, 彭宏. 模拟退火算法在全局查询优化中的应用[J]. 计算机技术与发展, 2006, 16(4):155-157.
- [9] 王强. 模拟退火算法的改进及其应用[J]. 应用数学, 1993, 4(3):392-397.
- [10] 洪沛霖, 张佑生, 邢燕. 基于改进模拟退火算法的手写体数字识别[J]. 计算机技术与发展, 2007, 17(9):15-17.
- [11] 刘吉来. 无功优化的改进模拟退火算法[J]. 电力学报, 1998, 13(2):86-89.
- [12] 齐平, 贾瑞玉, 贾兆红, 等. 用遗传模拟退火算法挖掘特征项权重的研究[J]. 计算机技术与发展, 2007, 17(2):143-145.
- [13] 杜秀全, 程家兴. 基于退火进化算法的机器人足球策略研究[J]. 计算机技术与发展, 2008, 18(2):101-103.
- [14] 玄光男, 程润伟. 遗传算法与工程设计[M]. 北京:科学出版社, 2000.

(上接第 31 页)

国电力出版社, 2000:66-76.

- [2] Barshan, Billur. Fast processing techniques for accurate ultrasonic range measurements[J]. Measurement Science and Technology, 2000, 11(1):45-50.
- [3] 王峰, 葛立峰. 一种高精度超声测距系统的设计[J]. 计算机技术与发展, 2008, 18(1):229-236.
- [4] 陈春林, 陈宗海, 卓睿. 基于多超声波传感器的自主移动机器人探测系统[J]. 测控技术, 2004, 23(6):11-13.
- [5] 赵广涛, 程荫杭. 基于超声波传感器的测距系统设计[J].

微计算机信息, 2006, 22(1):129-131.

- [6] Tikanmki A, Mkel T, Pietikinen A, et al. Multi-Robot System for Exploration in an Outdoor Environment[J]. Robotics and Applications and Telematics, 2007, 9(1):563-567.
- [7] Dai Guangzhi, Chen Tiequn. Design on Measurement and Control System of Cleaning Robot Based on Sensor Array detection [C]//Control and Automation, 2007. ICCA 2007. IEEE International Conference. [s.l.]:[s.n.], 2007:1319-1322.
- [8] 孙骁苗, 周东辉, 栗欣. 移动机器人的多传感器测距系统设计[J]. 传感器与微系统, 2006, 25(2):50-52.