从零开始学数学建模

模拟退火

主讲人：北海

b站/公众号：数学建模BOOM

模拟退火

- 模型简介
- 适用赛题
- 典型例题与原理讲解
- 代码求解

模拟退火

❑不断试错

❑ 模拟退火的“实例”

- 齐白石原是木匠，快30岁才正式学画。直到57岁以后画风开始转变，才真正有所成就
- 鲁迅原学医，25岁弃医从文，但37岁时才写出第一篇白话文小说《狂人日记》
- 项羽24岁巨鹿之战成名，26岁称王却走错了路子，三十出头就……

❑ 模拟退火的基本思想，就是走出舒适圈，多去“试一试”，万一成了呢?

模拟退火

❑不断试错

❑ 模拟退火的基本思想，就是走出舒适圈，多去“试一试”，万一成了呢?

- **舒适区：** 当前处于**局部最优**解（鲁迅那个年代能留学的都是佼佼者）
- **试一试：** **随机**试探新解，有更好的解就直接选新解，没更好的则以一定概率选择新解
- **万一成了：** 找到了**更优解甚至最优**解，青史留名（载入语文/历史课本）
- **也可能没成：** 求的**新解反而更差**了（项羽没有去统一而是封王结果......）

- **一次没成，多试几次：** **继续随机试探**（齐白石也不是转行后立马成名的）

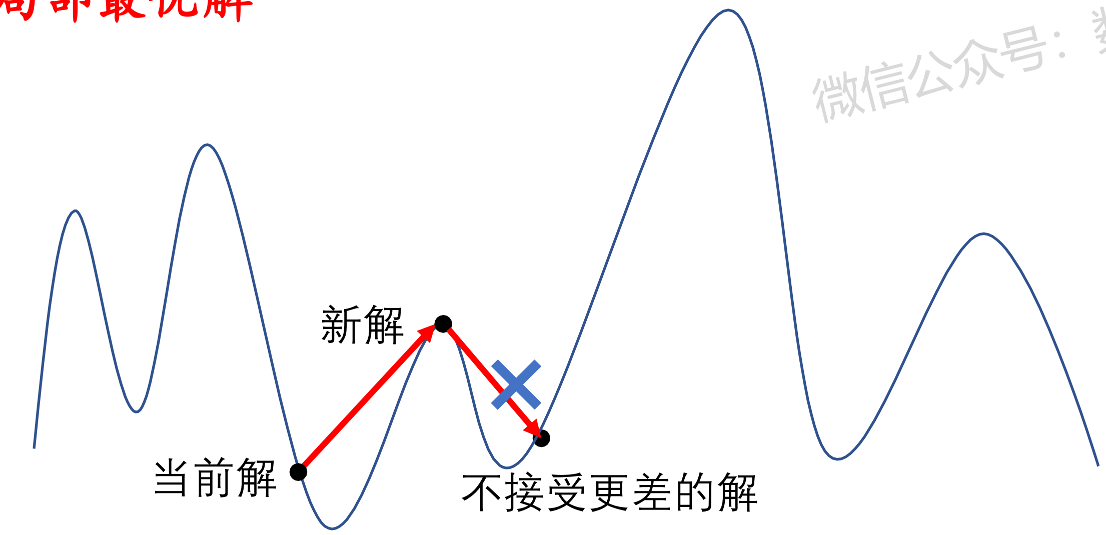
模拟退火

❑贪心算法失效——陷入局部最优

❑ 从爬山说起

- 假如北海想要在日落前爬上一座山的最高峰（求最优解）
- 但山中云雾缭绕、**视野受限**，只能看到当前位置**附近一定范围内**的情况
- 贪心算法：在视野内选取一个点，**如果更高，就过去；否则就不去**
- **直到**视野内没有更高的点，则输出当前解作为最终解（视频中有板书过程）

- 显然，当北海走到某个小山峰时，四周看不到更高的点，就不会走下山去、寻找更高的峰
- 从而陷入了**局部最优解**

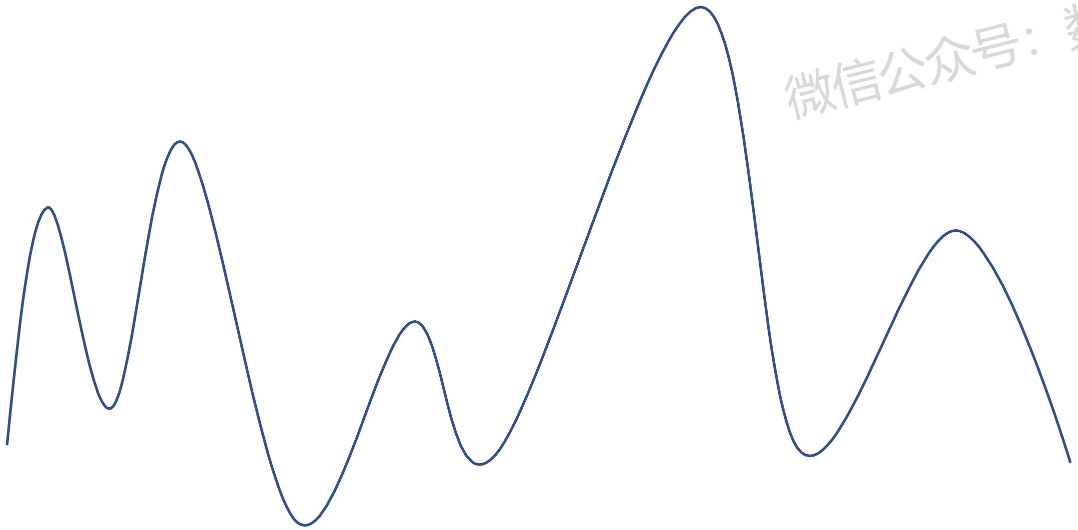


模拟退火

❑贪心算法失效——陷入局部最优

❑ 模拟退火思想

- 那么在可见范围内，随机选择一点
- 1.如果该点比当前位置**更高**，就**直接去**该点（优化）
- ★ 2.如果该点**更低**，那么就多掷几次硬币，结合该点与当前点的高度差决定去不去（**一定概率**）
- 在刚才的局部最优解的峰，会有一定概率走下了当前山峰，从而发现另一个山峰的上坡
- 从而就有可能走上新的更高峰

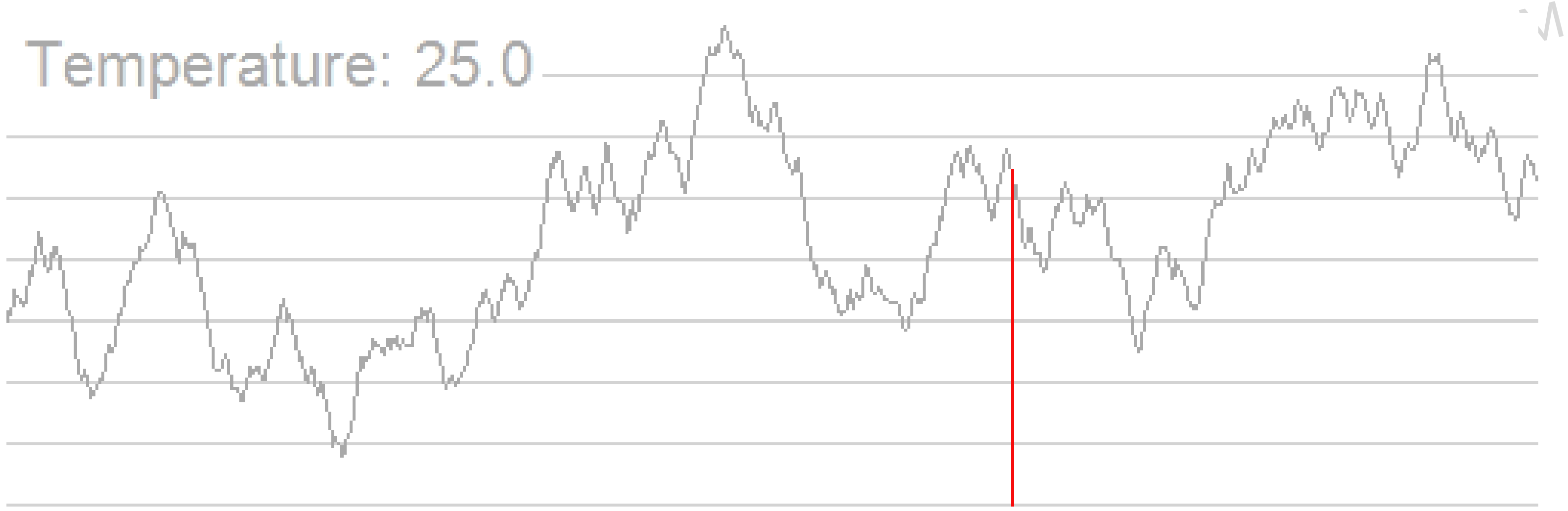


模拟退火

❑贪心算法失效——陷入局部最优

❑ 算法关键点

- 时间有限，需设置终止条件（“退火”过程中温度不断降低，剩余时间不多时就别乱跑）
- 且算法需要做到：若当前所处的山峰越高，前往低点的概率越低（**概率**的表达式）
- 这样才能使求得最优解的概率更大
- 关键在于，“**概率**”怎么求



- （图片源于Wikipedia）

模拟退火

- 模型简介
- 适用赛题
- 典型例题与原理讲解
- 代码求解

模拟退火

❑适用赛题

- ❑ 可行解过多、 NP-hard问题
- ❑ NP-hard问题
  - 旅行推销员问题（Travelling salesman problem, TSP）：给定一系列城市和每对城市之间的距离，求解访问**每一座**城市**一次**并**回到起始**城市的**最短**回路
  - TSP问题是组合优化中的一个**NP-hard**问题，该问题的可行解是所有顶点的全排列，随着顶点数的增加，会产生组合爆炸，传统算法难以求解
  - 此时就适合用模拟退火等启发式算法求近似解
- ❑ 适用赛题特点
  - 有些规划类问题的**可行解过多**，传统算法运算时间过长
  - 能够列出可行解的任一排列（例如题目要求最短回路，起码能先写出个回路作为初始化）
- ❑ 国赛题目：高等教育学费标准
  - 假设高校所需1000万经费，涉及多种筹款路径，理论上的筹款组合方案过多，若暴力求解可能费时几十小时，此时就适合模拟退火求解

模拟退火

- 模型简介
- 适用赛题
- 典型例题与原理讲解
- 代码求解

模拟退火

❑典型例题

❑ 遍历全国省会

- 已知全国34个省会城市（包括直辖市、自治区首府和港澳台）的经纬度坐标（第一个为北京）
- 现在需要从北京出发，到所有城市视察
- 要求每个城市**只能到达一次**，并最终回到北京
- 求视察路线方案，使得总路径最短

❑ 问题分析

- 若把所有可能的路线方案都列出来再求最小值，则有33！（33的阶乘）种方案
- 这是10^{36}数量级，运算时间会很长
- 此时可考虑使用模拟退火

- 本期课程的原理讲解内容对于部分同学来说较难理解，应结合代码理解

模拟退火

❑原理与求解思路

❑ 所有可行解

- 本题的解空间就是固定起点和终点的所有可行路线的集合
- 题目要求以北京作为起点和终点，那么设起点北京为1号城市x_1
- ★ 余下需要遍历的33个城市依次设为2，3，……，34号城市x_{34}
- 最后还需回到北京，设终点北京为35号城市x_{35}
- 因为起点与终点固定，则共有33！个可行解

❑ 目标函数：总路程最短

- 从1号x_1出发遍历34个城市最后回到1号x_{35}
- 第i号城市x_i与第$i+1$号城市x_{i+1}之间的路径长度设为$d_{x_i x_{i+1}}$
- 则目标函数：

$$\boxed{\min f\left(x_1, x_2, \cdots, x_{35}\right)=\sum_{i=1}^{34} d_{x_i x_{i+1}}}$$

模拟退火

❑原理与求解思路

❑ 1、初始化

- 设定一个初始温度T_0和问题的一个初始解$x(0)$
- 有那么多种可行解，可以随便选一个作为初始解
- 例如本题，可以把原始数据的排列直接作为初始解，解为$x_1 x_2 x_3 \ldots\ldots x_{35}$
- 或利用蒙特卡罗法求一个较好的初始解（课程第四部分代码求解会讲）

❑ 2、随机产生新解

- 在当前温度T_i下随机求一个解x'，制定产生新解的准则（准则不唯一，能确保随机即可）
- 假设上一步的解为：

$$x_1 \cdots x_{u-1} x_u x_{u+1} \cdots x_{v-1} x_v x_{v+1} \cdots x_{35}$$

- 随机选序号u,v，将u到v的这部分转为逆序，得到解：

$$x_1 \cdots x_{u-1} x_v x_{v-1} \cdots x_{u+1} x_u x_{v+1} \cdots x_{35}$$

模拟退火

❑原理与求解思路

❑ 3、计算目标函数差值

- 随机得到的解x'和当前解$x(i)$，两种方案总路径的差值记为Δf：

$$\Delta f = (d_{x_{u-1}x_v} + d_{x_u x_{v+1}}) - (d_{x_{u-1}x_u} + d_{x_v x_{v+1}})$$

❑ 4、是否接受新解

- 接受准则：

$$P = \begin{cases} 1, & \Delta f < 0, \\ exp(-\Delta f / T_i), & \Delta f \geq 0. \end{cases}$$

- 表达式中判断准则$exp(-\Delta f / T_i)$是由热力学得到的灵感，后面补充讲解
- 题目求总路径最短，如果$\Delta f < 0$意味解x'的总路径更短，则接受x'作为新解，$x(i)= x'$
- $\Delta f > 0$意味解x'总路径更长不如原解$x(i)$，但为防止陷入局部最优解，仍以一定概率接受x'
- 在代码实现上，if $exp(-\Delta f / T_i) \geq$ rand 则接受x'作为新解，否则保留解$x(i)$
- ★ 显然，Δf越小，意味着随机解的总路径比原解的总路径短更多，那么接受x'的概率就更大

❑原理与求解思路

❑ 5、马尔科夫过程

- 在当前温度T_i下，重复2、3、4步
- 温度T_i不变时，判断准则中的$exp(-\Delta f/T_i)$由Δf决定，而Δf由随机解x'和当前解$x(i)$决定
- 所以新解$x(i+1)$只与$x(i)$有关，而与更早的$x(i\text{-}1)$，$x(i\text{-}2)$，……$x(0)$无关
- 显然这是个马尔科夫过程，x'在原解$x(i)$的邻域中符合均匀分布*

❑ 6、退火过程

- 选定降温系数α，求得新温度$T_{i+1}=\alpha T_i$，此处设为0.999
- 再重复2、3、4、5步；然后继续降低温度……

❑ 7、结束条件

- 直到温度足够小，设终止温度为$e=10^{-30}$，当$T<e$时终止迭代，输出最终解
- 退火过程足够慢、每个温度下寻找新解的次数足够多，则最终解是全局最优解的概率越大*

模拟退火

❑原理与求解思路

❑ *理论上模拟退火可以找到全局最优（该部分不要求掌握）

- 马尔科夫过程随机解x'只与$x(i)$有关，所以x'在原解$x(i)$的邻域中符合均匀分布
- 而x'被接受的状态由上页的概率表达式P所决定
- 那么经过有限次的重复2、3、4步，在温度T_i下解的平衡态x_i满足**玻尔兹曼分布**：

$$\boxed{P_i(T_i) = \frac{e^{-\frac{f(x_i)}{T}}}{\sum_{j\in S} e^{-\frac{f(x_j)}{T_j}}}}$$

- 平衡态x_i代表温度T_i下任意一种可能出现的解，S为所有可能出现的解的集合
- 式中$f(x_i)$代表该解下的总路径（目标函数值）
- 接着降低温度，$T_{i+1} < T_i$，在温度T_{i+1}下有限次的重复2、3、4步
- 整个优化过程就是不断寻找新解和缓慢降温的交替过程，那么温度趋于0时得到最终解
- 重点在于，温度趋于0时得到的最终解，是不是接近于全局最优解？

模拟退火

❑原理与求解思路

❑ *理论上模拟退火可以找到全局最优（该部分不要求掌握）

- 上一页提到，温度T_i下解的平衡态x_i满足玻尔兹曼分布，根据玻尔兹曼分布和状态转移概率：

$$P_i(T_i) = \frac{e^{-\frac{f(x_i)}{T_i}}}{\sum_{j\in S} e^{-\frac{f(x_i)}{T_i}}}$$

温度T_i下的平衡态分布

$$P = \begin{cases} 1, & \Delta f < 0, \\ exp(-\Delta f/T_i), & \Delta f \geq 0. \end{cases}$$

温度T_i下的状态转移概率

- 从玻尔兹曼分布可知，温度$T \to 0$时某个值大于0的状态（函数值）$f(x_i)$的分布概率趋于0
- 也就意味着只有$f(x_i)$尽可能趋于0的状态才会存在
- 对应现实问题，求得的最终解中只有f_{min}，也就是最优解（本题的最短路径）

- 从状态转移概率公式可知，当温度$T \to 0$，$\Delta f \geq 0$时转移到更高函数值的概率趋近于0
- 也就意味着温度极低时，转移到更差解的概率越小、会以更大概率停留在当前解

- 结论：当寻找新解次数足够多、降低温度足够慢，最终会以接近于1的概率求得全局最优解

模拟退火

❑原理与求解思路

❑ *理论上模拟退火可以找到全局最优（该部分不要求掌握）

- 证明：根据玻尔兹曼分布和状态转移概率，求最终从一个极低的温度转移到$T=0$后的概率分布，结合两个公式可得：

$$P^* = \lim_{T\to 0} \frac{e^{-\frac{f(x_i)-f_{min}}{T_i}}}{\sum_{j\in S} e^{-\frac{f(x_j)-f_{min}}{T_j}}} = \lim_{T\to 0} \frac{e^{-\frac{f(x_i)-f_{min}}{T_i}}}{\sum_{j\in S_{min}} e^{-\frac{f(x_j)-f_{min}}{T_j}} + \sum_{j\notin S_{min}} e^{-\frac{f(x_j)-f_{min}}{T_j}}}$$

$$= \lim_{T\to 0} \frac{e^{-\frac{f(x_i)-f_{min}}{T_i}}}{\sum_{j\in S_{min}} e^{-\frac{f(x_j)-f_{min}}{T_j}}} = \begin{cases} \frac{1}{|S_{min}|}, & i\in S_{min}, \\ 0, & others. \end{cases}$$

- 而$\sum_{x_i\in S_{min}} P^* = 1$，意味着将以接近于1的概率求得全局最优解

模拟退火

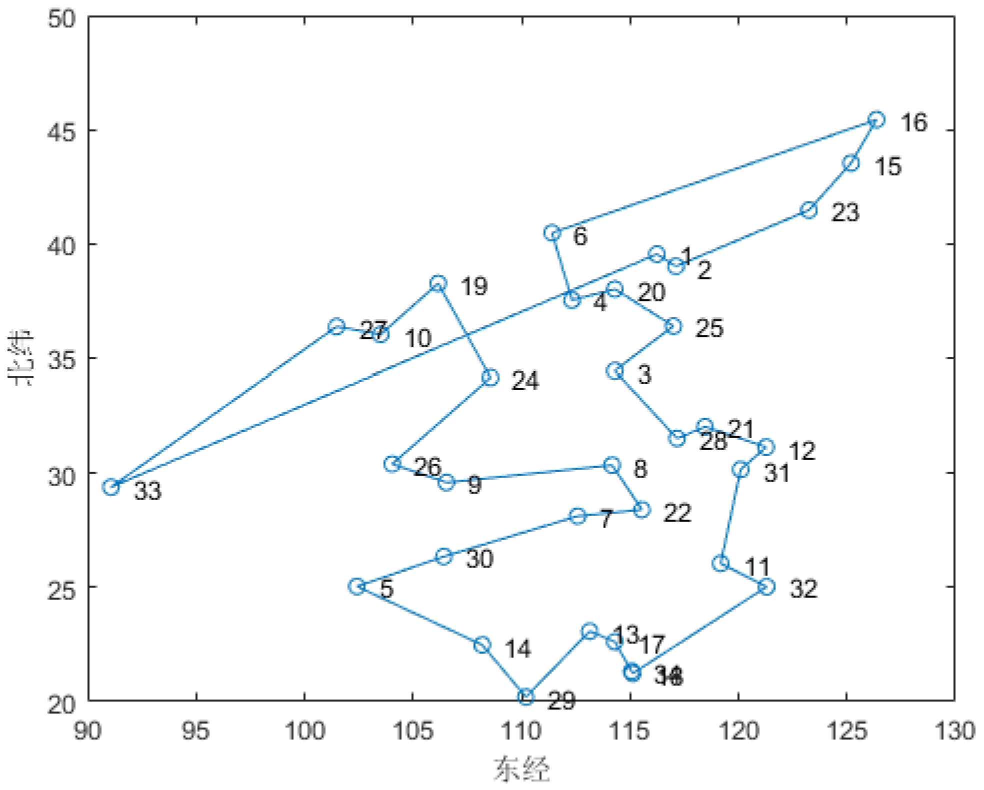
- 模型简介
- 适用赛题
- 典型例题与原理讲解
- 代码求解

模拟退火

❑代码求解

❑ 代码求解

- 接下来讲解代码，可到文件**SA.mlx**中查看
- 重点在于，如何在代码中实现课程第三部分原理讲解中的各种计算
- 求解结果每次都不一样



模拟退火

❑写出你的笔记

❑ 费曼学习法

- 费曼学习法：以教代学
- 只有当你能够教会别人，才代表你真正学会了！

❑ 有奖征集：每学完一期课程，整理笔记，发布在各平台

- 将你每节课所学到的，整理出一套笔记
- 尽量不要照搬或截图课程的内容
- 可自行发布在知乎/CSDN等等各类平台
- 符合以下要求的文章，且文章点赞超过100或浏览量超1万的，可获取半价退款奖励（联系北海的QQ：1980654305 ）
- 1、标题设为：XXXX（模型或算法）——北海数学建模课程笔记
- 2、文章首行写：本文为北海的数模课程学习笔记，课程出自微信公众号：数学建模BOOM。

- “从零开始学数学建模”系列课程
  - 本期课程视频出自b站up：数学建模BOOM
  - 全套课程请关注微信公众号：数学建模BOOM，回复“课程”

END