

模拟退火算法在指数曲线拟合中的应用

许小勇

(云南民族大学, 云南 昆明 650031)

[摘 要] 本文介绍了模拟退火算法的原理和求解方法,并将其用于指数曲线的拟合,在 Matlab语言环境下实现了该算法,并且与文献中的遗传算法、线性回归相比较。数值模拟结果表明,该算法能更好地实现最优拟合。

[关键词] 模拟退火算法;指数曲线拟合;Matlab

[中图分类号] TG156.2 [文献标识码] A [文章编号] CKN字 07-005(2006)04-0035-03

Application of Simulated Annealing Algorithm in Exponent Curve Fitting

Xu XiaoYong

(Yunnan Nationalities University, Kunming Yunnan 650031)

Abstract: This essay deals with the principle and approaches of simulated annealing algorithm and puts it into use of exponent curve fitting under Matlab language. By comparing with Genetic Algorithms, Linear regression, the author draws the conclusion that simulated annealing algorithm is more accurate and the best to realize the fitting.

Key words: simulated annealing algorithm; exponent curve fitting; Matlab

人们在生产生活当中常需要根据以往的历史数据,来对将来的工作进行预测,如产量、销售量、发病率等,根据这些已有的数据描绘出其变化规律,这就用拟合曲线将其变化规律体现出来,从而对以后的工作采取有效的措施,拟合的曲线要求预测值与真实值差的平方和最小。本文将探讨用模拟退火算法对指数曲线进行拟合,采用文献^[1]中引用的例子进行数值模拟,模拟结果令人满意。

1. 模拟退火算法

1.1 算法原理

模拟退火算法的基本思想是从一给定解开始,从邻域中随机产生另一个解,接受 Metropolis 准则允许目标函数在有限范围内变坏,它由一控制参数 t 决定,其作用类似于物理过程中的温度 T ,对于控制参数的每一取值,算法持续进行“产生—判断—接受或舍去”的迭代过程,对应着固体在某一恒定温度下的趋于热平衡的过程,当控制参数逐渐减小并趋于 0 时,系统越来越趋于平衡态,最后系统状态对应

于优化问题的全局最优解,该过程也称为冷却过程,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 经缓慢衰减,才能确保模拟退火算法最终优化问题的整体最优解。

1.2 算法具体步骤

(1) 给定模型每一个参数变化范围,在这个范围内随机选择一个初始模型 m_0 ,并计算相应的目标函数值 $E(m_0)$ 。

(2) 对当前模型进行扰动产生一个新模型 m ,计算相应的目标函数值 $E(m)$,得到 $E = E(m) - E(m_0)$ 。

(3) 若 $E < 0$,则新模型被接受;若 $E > 0$,则新模型 m 按概率 $P = \exp(-E/T)$ 进行接受, T 为温度。当模型被接受时,置 $m_0 = m$, $E(m_0) = E(m)$ 。

(4) 在温度 T 下,重复一定次数的扰动和接受过程,即重复步骤 (2)、(3)。

(5) 缓慢降低温度 T 。

(6) 重复步骤 (2)、(5),直至收敛条件满足为止。

[收稿时间] 2006-03-15

[作者简介] 许小勇 (1983-),男,云南民族大学数学与计算机科学学院。

算法的实质分两次循环,随机扰动产生新模型并计算目标函数值(或称能量)的变化,决定是否被接受。由于算法初始温度设计在高温条件,这使得E增大的模型可能被接受,因而能舍去局部极小值,通过缓慢地降低温度,算法最终能收敛到全局最优值。

2 目标函数与控制条件

2.1 目标函数

设 y_i 是在点 x_i 的测量值 ($i = 1, 2, \dots, n$), y_i 是在点 x_i 用拟合函数计算出的计算值,则在 n 个数据点上的误差平方和为 $f = \sum_{i=1}^n (y_i - y_i)^2$,显然这个函数值越小越好。

2.2 状态产生函数

为了便于应用SA算法,文中的新状态是以形式较为简单的均匀概率分布方式产生的,由此构造的状态函数为:

$x_{j+1} = x_j + \text{step} * (\text{rand} - 0.5)$,式中 x_{j+1} 与 x_j 分别为新旧状态参数;step为扰动系数,rand为0-1间的随机数产生器。

2.3 温度更新函数

采用指数退温过程^[1],即 $T_{k+1} = d(T_k) = T_k$,文中 $d = 0.95$ 。

2.4 循环终止准则

内循环采用定步长抽样,外循环也采用定温度。本文在每次内循环的过程中,记忆使目标函数值在该温度下达到最小值的状态函数值,作为降温后的状态参数初值。

3. 数值算例

根据上述算法对文献^[1]引用的阳新县1976~1989年传染病总发病率情况进行拟合。

表 1 原始数据

年份	1976	1977	1978	1979	1980	1981	1982	1983	1984	1985	1986	1987	1988	1989
t	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
总发病率	1016.1	84.89	553.4	339.7	268.5	414.7	416.3	317.5	242.2	141.2	80.4	115.9	70.3	22.9

3.1 拟合结果

以年份顺序编号作为自变量,记为 t ,以总发病率作为因变量,记为 Y ,运用模拟退火算法拟合非线性曲线模型 $Y = 10^{a+bt}$,尝试模拟退火算法。参数设定 $T = 1000$,结束温度 $T_0 = 0.001$,步长 $\text{step} = 0.001$,Markov链长 $L = 300$ 。本文在Matlab语言环境下,编制了模拟退火算法程序,经过多次运

算得到拟合函数为: $Y = 10^{2.900841 - 0.069839t}$,残差和 $\text{err} = 432287.8$ 。

3.2 算法结果比较

拟合结果与文献^[1]中遗传算法、曲线回归法的比较如表2。

表 2 各算法拟合结果比较

提取参数	退火算法	遗传算法	曲线回归
	2.900841	2.902344	3.118500
b	-0.069839	-0.070312	-0.100500
残差	432287.8	434276.7	671718.5

4. 结果讨论

模拟退火算法拟合非线性曲线的过程是寻找 y ,使之与原始数据 y 的剩余平方和最小,是一种动态估计参数值的过程,在该算例中退火算法比文献^[2,3]遗传算法、曲线回归法拟合指数曲线的方法确实拟合得更好,结果令人满意。但模拟退火算法的耗时较长,如何提高算法的运行效率是值得研究的,可以考虑与其他算法的结合,如与遗传算法、神经网络等,这也是作者将进一步努力的地方,本文的方法也可以用于其他类型的非线性曲线的拟合。

[参考文献]

[1] 蔡煜东.遗传算法在医用非线性曲线拟合中的应用[J].生物医学工程杂志,1995.159-161.
[2] 康立山,谢云.非数值并行计算——模拟退火算法[M].北京:

科学出版社,1998.

[3] 谢云.模拟退火算法综述[J].微型计算机,1998,(10).

附:模拟退火源程序:

```
function [err] = h(sol) %构造目标函数
t = 1: 14;
L = [1016 1 84.89 553.4 339.7 268.5 414.7 416.3
317.5 242.2 141.2 80.4 115.9 70.3 22.9];
[m, n] = size(L);
err = zeros(1, n);
A = sol(1); B = sol(2);
err = 0;
for i = 1: n
err = err + (L(i) - 10^(A + B * i)).^2;
```

```
end
close all      %主程序
clear
bound = [ 0 - 1 ;
          4 0 ];
[m, n] = size(bound);
D = bound(1, 1: n);
U = bound(2, 1: n);
for i = 1: n
    x1(i) = D(i) + rand*(U(i) - D(i));
end
x1
N = 1;
T = 1000;
T0 = 0.001;
k = 250;
a = 0.965;
step = 0.001;
T1 = clock;
s = sprintf('程序运行正在进行,请稍等 ..... ');
disp(s);
while T > T0
    for t = 1: k
        f1 = h(x1);
        for i = 1: n
            x2(i) = x1(i) + step*(rand - 0.5);
            while x2(i) < D(i) | x2(i) > U(i)
                x2(i) = x1(i) + step*(rand - 0.5);
            end
        end
        f2 = h(x2);
        if f2 - f1 < 0
            x1 = x2;
            elseif exp((f1 - f2)/T) > rand
                x1 = x2;
            end
            temp_x(t, 1: n) = x1;
            temp_y(t, 1) = h(x1);
        end
        [ty, ti] = min(temp_y);
        x1 = temp_x(ti, 1: n);
        X(N, 1: n) = x1;
        Y(N) = h(x1);
        N = N + 1;
        T = a*T;
    end
    T2 = clock;
    CostTime = T2 - T1;
    if CostTime(6) < 0
        CostTime(6) = CostTime(6) + 60;
        CostTime(5) = CostTime(5) - 1;
    end
    if CostTime(5) < 0
        CostTime(5) = CostTime(5) + 60; CostTime(4) = CostTime(4) - 1;
    end
    tt = 1: N - 1;
    plot(tt, Y)
    [fmin, I] = min(Y);
    x = X(I, 1: n)
    fmin
    str4 = sprintf('程序运行耗时 %d小时 %d分钟 %.4f秒', CostTime(4), CostTime(5), CostTime(6));
    disp(str4);
```

(上接第 23页)

CAD创新设计,关键零部件实现网络化生产,开发一批具有自主知识产权的软件系统,加快新产品开发;开发完成全厂统一网络平台的计算机辅助工艺设计系统 CAPP,建立完整的工艺信息数据库,完成 PDM/CAPP/ERP的集成技术;结合工厂的业务流程完善化以及机制、体制的改革,全面推行以成本管理为中心,面向供应链的 ERP系统,采购与库存、财务、生产等三大模块全面上线,实现集成化;全面启动

ERP二期工程,实施销售管理、人力资源管理、质量控制管理等模块,完成与一期工程的全面集成;建立企业信息门户/办公自动化(EP/OA)系统,规范管理,提高效率,实现资源共享、远程办公、流程控制,为企业决策提供基础平台;完成企业级服务器及中心交换机的升级换代,建立完善的网络入侵检测系统,网络防病毒系统及网络管理系统,确保网络信息安全。为中国重大动力装备制造业的振兴和重装基地建设再创新的佳绩。