6. 模拟退火

堵威

华东理工大学 自动化系

2021.4.15

本章内容

1. 自然退火

2. 简单的模拟退火算法

3. 冷却调度

4. 实施的问题

本章内容

1. 自然退火

2. 简单的模拟退火算法

3. 冷却调度

4. 实施的问题

背景知识

- 模拟退火的概述
  - 以化学物质的冷却和结晶行为为基础的优化算法
  - 单一个体的随机算法，不涉及候选解的种群
  - 智能优化算法，进化算法、(1+1)-ES
  - 1953年，Nicholas Metropolis为研究相互作用的粒子的性质开发的算法奠定了模拟退火的基础
  - 1970年，Keith Hastings推广了Metropolis等人的结果
  - 模拟退火也称为Metropolis-Hastings算法

自然退火

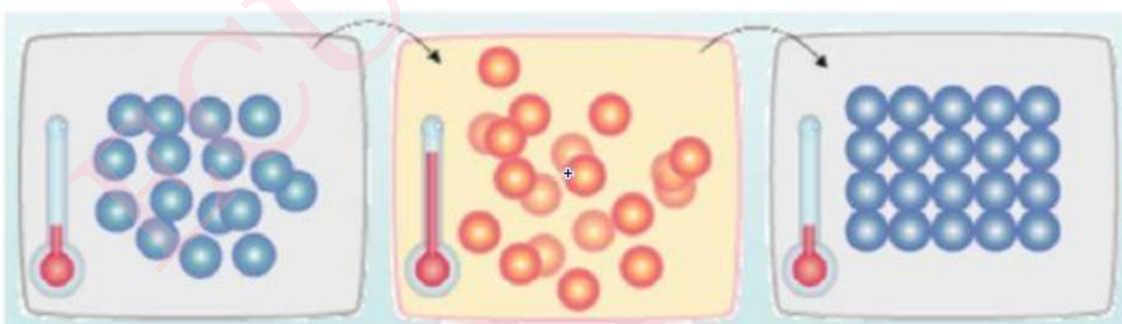
- 晶格状结构
  - 晶格状结构：液体或固体中原子或分子的一种排列，自然界中优化能力的一个范例
  - 常见的晶格状结构：石英、冰、盐等
  - 在高温时不会表现出太多结构，高温让物质的能量大增导致很多振动和混乱



自然退火

- 晶格状结构
  - 温度降低时，晶格状物质会进入一个更有序的状态
  - 晶格状物质进入的特定状态不会始终相同
  - 物质经过多次加热和冷却，每次会进入不同的均衡状态，但是每个均衡状态的能量往往更低
  - 退火：给物质加热并让它冷却到再结晶的过程

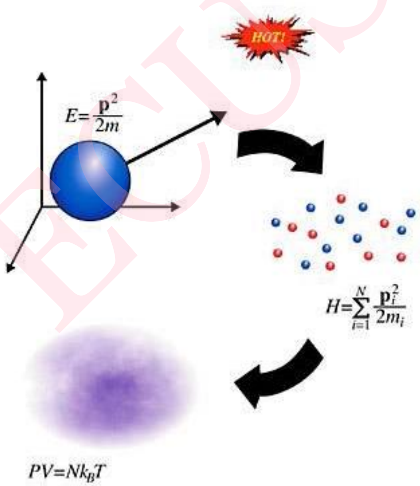
加温过程　　缓慢冷却过程

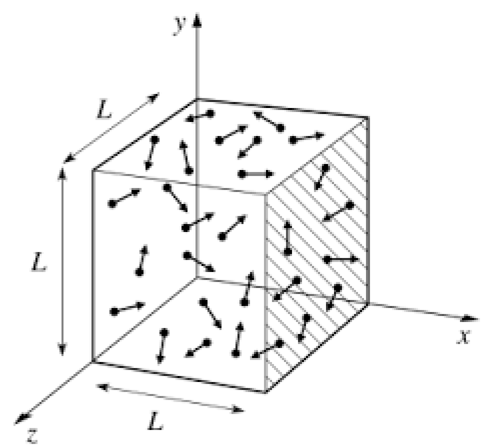


初始状态　　加热到一定温度　　缓慢冷却后

自然退火

- 退火
  - 以统计力学为基础，统计力学研究大量相互作用的粒子的行为
  - 研究物质性质时，所观察到的是最有可能发生的性质（原子个数在每立方厘米10^{23}数量级上）
  - 会经常出现能量均衡的组态，尽管在所有可能的组态中只占很小的一部分（自然是一个优化器）





自然退火

- 退火
  - 用E(s)表示某物质中原子在特殊组态s的能量，则原子系统处于组态中的概率可表示为：

$$P(s)=\frac{\exp[-E(s)/(kT)]}{\sum_w \exp[-E(w)/(kT)]}$$

k为玻尔兹曼常数，T是系统在能量均衡时的温度，分母为对所有可能的组态w求和

  - 假设系统处于组态q，随机选择一个组态r作为系统下一时刻的候选组态：

$$P(r|q)=1 \text{ if } E(r)<E(q) \qquad P(r|q)=\exp[(E(q)-E(r))/(kT)] \text{ if } E(r)\geq E(q)$$

在某个温度下，系统从一个组态转移到另一个组态时，如果新组态的内能小，则无条件接受；如果新组态内能大，则满足判断条件再接受。

本章内容

1. 自然退火

2. 简单的模拟退火算法

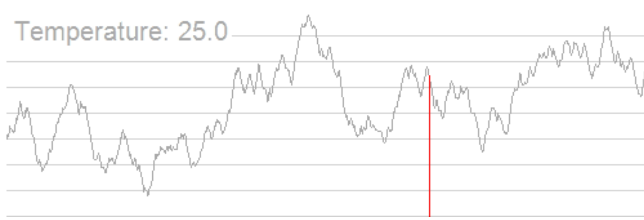
3. 冷却调度

4. 实施的问题

简单的模拟退火算法

- 概述
  - 自然退火让晶体进入低能量组态
  - 算法模拟：对于最小化问题，对于候选解s，从高的“温度”开始，随机生成候选解r并评估其适应度；如果r的“能量”小于s，则更新候选解；否则，以某个概率更新候选解
  - 随着时间的推进，温度会降低，候选解会有进入低“能量”的趋势

自然退火		模拟退火
原子组态	↔	候选解
温度	↔	探索搜索空间的趋势
冷却	↔	降低探索的趋势
原子组态的改变	↔	候选解的改变



简单的模拟退火算法

- 模拟退火算法伪代码
  - 最小化f(x)的基本模拟退火算法，U[0,1]返回在[0,1]上均匀分布的随机数

T = 初始温度 > 0
$\alpha(T)$ = 冷却函数：对所有T，$\alpha(T) \in [0,T]$
初始化最小化问题f(**x**)的一个候选解$\mathbf{x}_0$
While not (终止准则)
    生成一个候选解**x**
    If f(**x**)<f($\mathbf{x}_0$) then
        $\mathbf{x}_0 \leftarrow \mathbf{x}$
    else
        r←U[0,1]
        If r<exp[(f($\mathbf{x}_0$)-f(**x**))/T] then
            $\mathbf{x}_0 \leftarrow \mathbf{x}$
        End if
    End if
    $T \leftarrow \alpha(T)$
下一次迭代

简单的模拟退火算法

- 模拟退火算法伪代码
  - 简单直观、以自然的优化过程为基础；几个调试参数
  - 初始温度T：给定了搜索的上界，如果初始温度过高，算法收敛慢；如果初始温度过低，算法将不能有效地探索搜索空间
  - 冷却调度$\alpha(T)$：控制收敛的速率，如果$\alpha(T)$过快，晶格状结构会迅速冷却，退火过程会收敛到一个混乱的状态；如果$\alpha(T)$过慢，退火过程的收敛就需要较长时间
  - 每次迭代生成候选解的策略：随机生成，或者尝试生成一个比$\mathbf{x}_0$更好的$\mathbf{x}$

本章内容

1. 自然退火

2. 简单的模拟退火算法

3. 冷却调度

4. 实施的问题

冷却调度

- 线性冷却
  - 最简单的一类冷却，其调度为：

$$\alpha(T) = T_0 - \eta k$$

其中，T_0是初始温度，k为模拟退火的迭代次数，η是一个常数

  - 需要保证对所有k，$T>0$；应该选择η使得在最大迭代次数时的温度为正，或采用

$$\alpha(T) = \max\{T_0 - \eta k,\ T_{min}\}$$

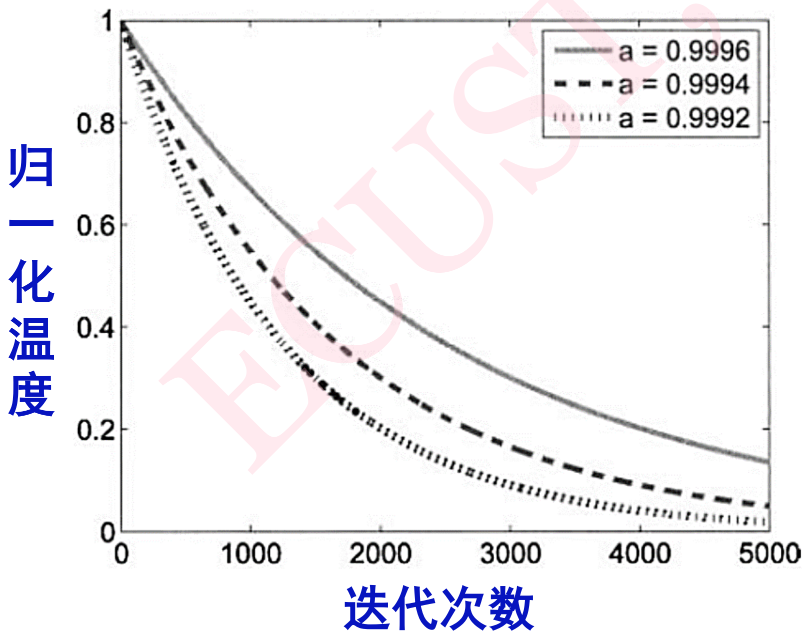
其中，T_{min}是用户指定的最低温度。

冷却调度

- 指数冷却
  - 指数冷却的调度为：

$$\alpha(T) = aT$$

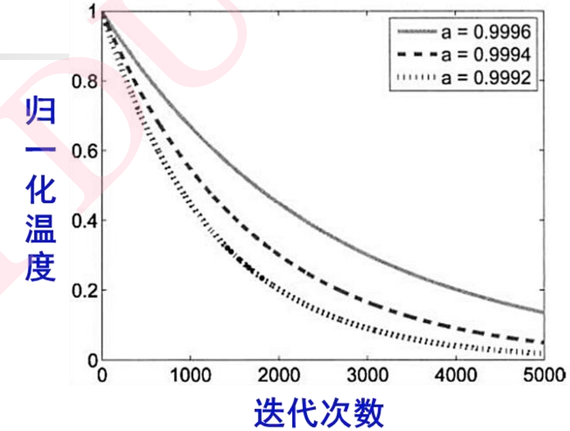
其中，$a \in (0.8,1)$，a值大冷却调度会慢



左图为指数冷却调度归一化后的温度随a变化的曲线，a通常接近1，冷却速率对a的变化很敏感

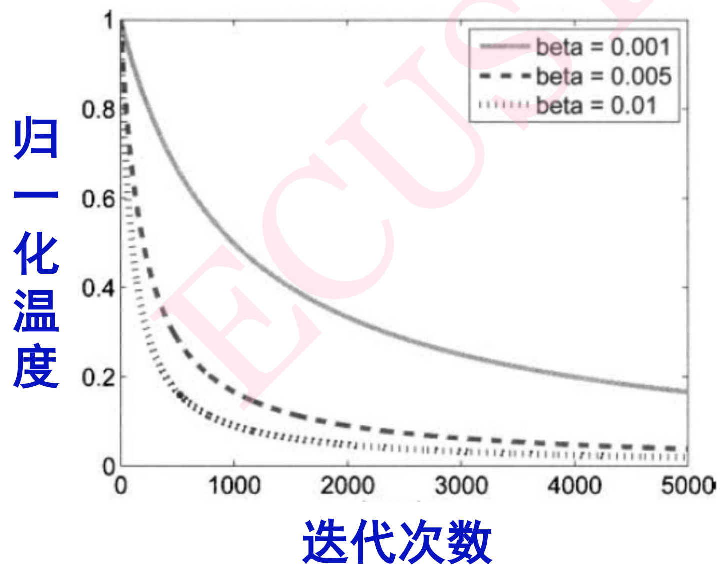
冷却调度

- 逆冷却
  - 逆冷却的调度为：



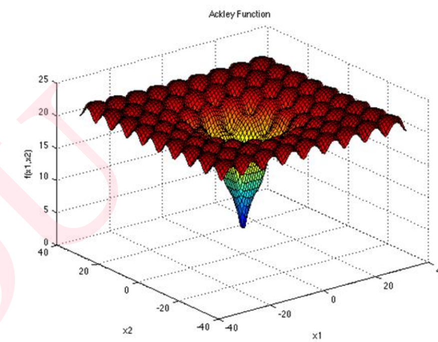
$$\alpha(T) = T/(1+\beta T)$$

其中，β是一个小的常数，通常为0.001的数量级。β值较小冷却调度会较慢。



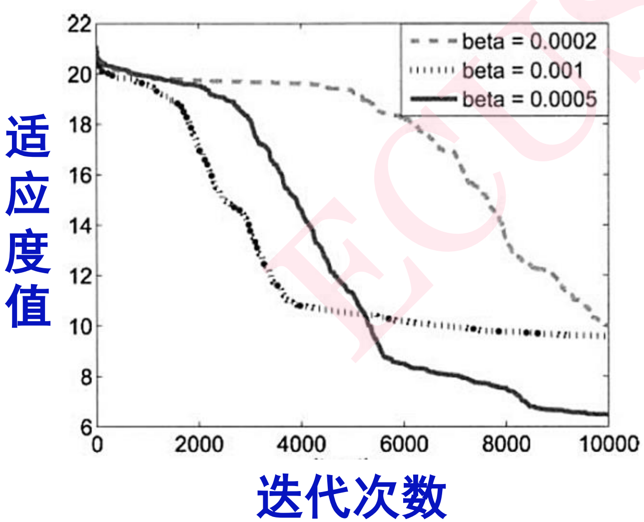
冷却速率对β变化很敏感。通过选择适当的a值和β值，指数冷却调度和逆冷却调度可以非常相似

冷却调度



- 逆冷却
  - 例：用模拟退火算法优化20维的Ackley函数，采用逆冷却函数 $T_{k+1}=T_k/(1+\beta_k T_k)$，其中k是迭代次数，β是冷却调度参数，$T_k$是在第k次迭代的温度，$T_0=100$。在每次迭代，用以$\mathbf{x}_0$位中心的高斯随机数生成下一个新的候选解：

$$\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x}_0 + N(\mathbf{0}, T_k \boldsymbol{I})$$，其中，$N(\mathbf{0}, T_k \boldsymbol{I})$是均值为0，协方差为$T_k\boldsymbol{I}$的高斯随机向量，$\boldsymbol{I}$为20×20的单位矩阵。



β太小(β=0.0002)，冷却过程很慢

β太大(β=0.001)，冷却过程很快

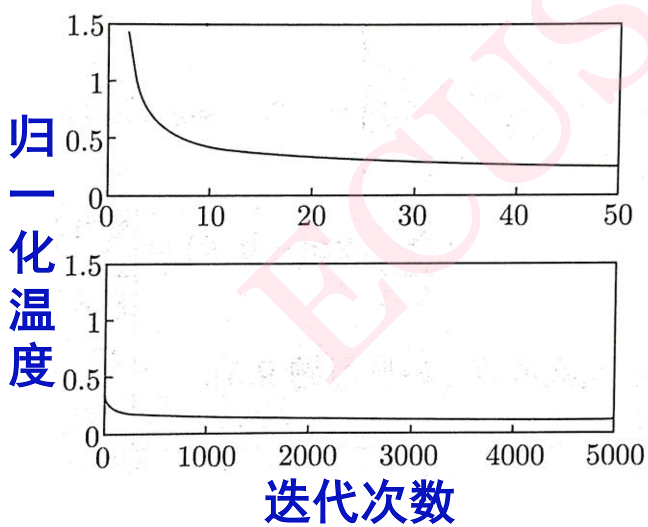
β适中(β=0.0005)，收敛最好

冷却调度

- 对数冷却
  - 对数冷却的调度为：

$$\alpha(T) = c / \ln k$$

其中，c是一个常数，k是模拟退火的迭代次数。有时也一般化为：$\alpha(T) = c / \ln(k+d)$，其中d为一个常数，通常设为1。



- 上部的图：前50次迭代的温度
- 下部的图：前5000次迭代的温度
- 在前几次迭代中温度下降得非常快，然后变得很慢，所以对数冷却不太实用

冷却调度

- 对数冷却
  - 尽管对数冷却调度实用性不强，但是在理论上颇有吸引力：已经证明，在某种条件下，对数冷却调度能得到全局最小

简要说明：假设有一个离散问题，搜索空间的规模有限。已知x_k为当前第k次迭代的候选解，由高斯分布生成候选解x的概率为：

$$g_k \equiv P(x|x_k) = (2\pi T_k)^{D/2} \exp\left[-||x - x_k||_2^2/(2T_k)\right]$$

为了能访问搜索空间中的每一个可能的候选解，只需证明当迭代次数趋于无穷大，无法访问x的概率趋于零：

$$\lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N} (1 - g_k) = 0$$

冷却调度

- 对数冷却
  - 尽管对数冷却调度实用性不强，但是在理论上颇有吸引力：已经证明，在某种条件下，对数冷却调度能得到全局最小

对上面的公式取对数，得到：

$$\ln\left[\lim_{N\to\infty}\prod_{k=1}^{N}(1-g_k)\right]=\lim_{N\to\infty}\left[\ln\prod_{k=1}^{N}(1-g_k)\right]=-\infty$$

在$g_1=g_2=\ldots=0$附近泰勒展开：

$$\ln[(1-g_1)(1-g_2)\cdots]=\ln 1-g_1-g_2-\cdots$$

将上面两个式子结合，当迭代数趋于无穷大，以100%概率访问x的充分条件为

$$\lim_{N\to\infty}\sum_{k=1}^{N}g_k=\infty$$

冷却调度

- 对数冷却
  - 尽管对数冷却调度实用性不强，但是在理论上颇有吸引力：已经证明，在某种条件下，对数冷却调度能得到全局最小

g_k给定，且如果$T_k = T_0 / \ln k$，可以得到：

$$\lim_{N\to\infty}\sum_{k=1}^{N}(2\pi T_0/\ln k)^{D/2}\exp\left[-\|x-x_k\|_2^2/(2T_0/\ln k)\right] \geq$$

$$\sum_{k=1}^{\infty}\exp(-\ln k)=\sum_{k=1}^{\infty}1/k=\infty$$

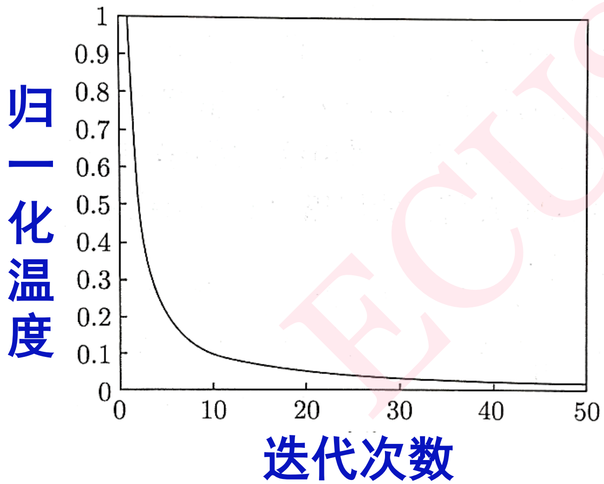
如果T_0足够大，不等式就成立。

冷却调度

- 逆线性冷却
  - 逆线性冷却的调度为：

$$\alpha(T) = T_0 / k$$

其中， T_0是初始温度，k是模拟退火的迭代次数。



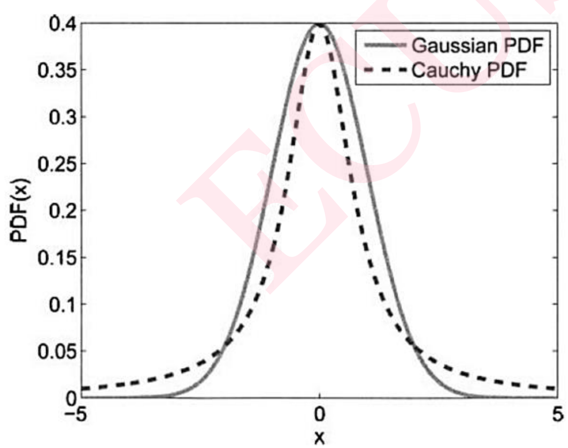
- 在最初几代中表现出了对数调度的快速冷却
- 避开了非零温度和后面温度中的缓慢冷却：温度下降得很快并迅速达到零度
- 对需要大量探索的问题不太有效

冷却调度

- 逆线性冷却
  - 逆线性冷却在理论上也颇具吸引力，已经证明：在某种条件下逆线性冷却能得到全局最小

简要说明：假设有一个离散问题，搜索空间的规模有限。已知x_k为当前第k次迭代的候选解，由柯西分布生成候选解x的概率为：

$$g_k \equiv P(x|x_k) = \frac{T_k}{(||x - x_k||_2^2 + T_k^2)^{(D+1)/2}}$$



- 柯西概率密度函数与高斯概率密度函数
- heavy tail
- 生成的候选解更有可能远离当前的候选解

冷却调度

- 逆线性冷却
  - 逆线性冷却在理论上也颇具吸引力，已经证明：在某种条件下逆线性冷却能得到全局最小

g_k给定，且如果$T_k = T_0 / k$，可以得到：

$$\lim_{N\to\infty}\sum_{k=1}^{N}\frac{T_0/k}{(\|x-x_k\|_2^2+T_0^2/k^2)^{(D+1)/2}} \geq \sum_{k=1}^{\infty} 1/k = \infty$$

对于适当的T_0值不等式成立。

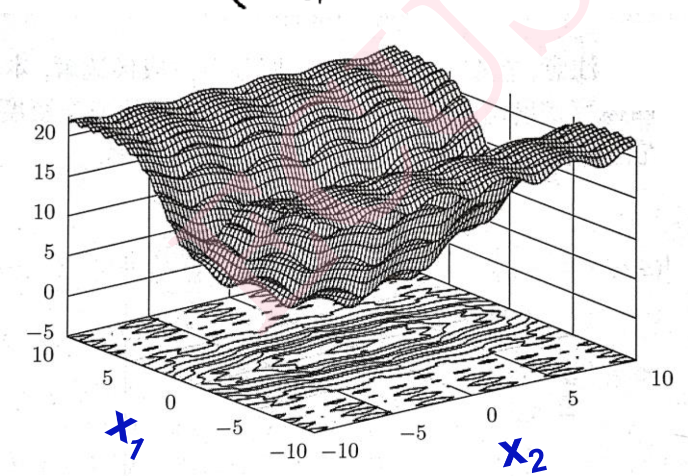
  - 对数冷却&高斯概率密度函数
  - 逆线性冷却&柯西概率密度函数

冷却调度

- 依赖于维数的冷却
  - 在实际应用甚至在某些基准问题中，不同维数下的适应度函数的形状很不一样，如Ackley函数的标量版：

$$f(x) = 20 + e - 20\exp\left(-0.2\sum_{i=1}^{n} y_i^2/n\right) - \exp\left(\sum_{i=1}^{n}(\cos 2\pi y_i)/n\right)$$

$$y_i = \begin{cases} x_i & \text{对奇数 } i \\ x_i/4 & \text{对偶数 } i \end{cases}$$



对于i取偶数值的x_i，伸缩意味着函数沿着这些维度“伸展”

冷却调度

- 依赖于维数的冷却
  - 对于不同维度上拓扑结构不同的函数，要在不同维度上用不同的冷却调度；如上述Ackley函数：偶数维度用较慢的冷却，奇数维度用较快的冷却
  - 在函数变化活跃的维度上，使用较快的冷却调度，会使算法沿着变化活跃的维度下降；采用慢的冷却速率会让它过多地跳来跳去
  - 对敏感度低（高温）的维度搜索要更积极，对敏感度高（低温）的维度搜索则不需要太积极

冷却调度

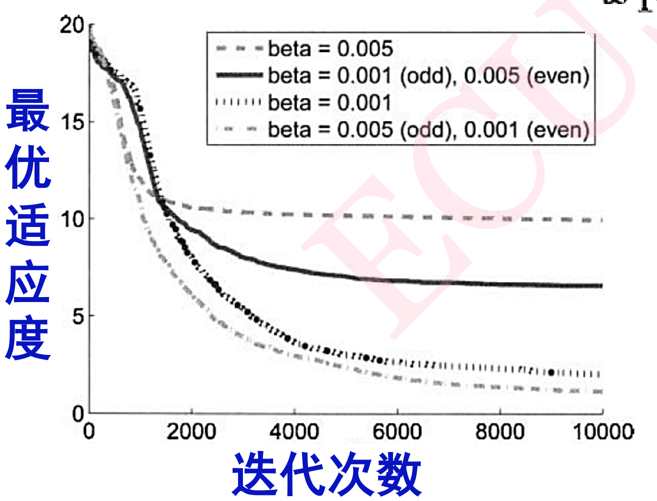
- 依赖于维数的冷却
  - 算法：最小化n元函数f(**x**)依赖于维度的模拟退火算法

T = 初始温度 > 0, i∈[1, n]
$\alpha_i(T_i)$ = 第i维冷却函数：i∈[1, n]：对所有T_i，$\alpha(T_i) \in [0,T_i]$
初始化最小化问题f(**x**)的一个候选解$\mathbf{x}_0=[x_{01}, x_{02}, ..., x_{0n}]$
While not (终止准则)
　　生成一个候选解$\mathbf{x}_1=[x_{11}, x_{12}, ..., x_{1n}]$
　　If f(**x**)<f($\mathbf{x}_0$) then
　　　　$\mathbf{x}_0 \leftarrow \mathbf{x}_1$
　　else
　　　　For i = 1,2,...,n
　　　　　　r←U[0,1]
　　　　　　If $r<\exp[(f(\mathbf{x}_0)-f(\mathbf{x}_1))/T_i]$ then
　　　　　　　　$x_{0i} \leftarrow x_{1i}$
　　　　　　End if
　　　　下一维度i
　　End if
　　$T_i \leftarrow \alpha_i(T_i)$, i∈[1, n]
下一次迭代

冷却调度

- 依赖于维数的冷却
  - 例：用依赖于维度的模拟退火算法优化20维经伸缩的Ackley函数，使用逆冷却函数，对于每一个维度：$T_{k+1,i} = T_{ki} /(1+\beta_i T_{ki})$，i是维度，k是模拟退火的迭代次数，$\beta_i$是第i维的冷却调度参数，$T_{ki}$是在第k次迭代第i维的温度。对于所有i，$T_{0i}$ =100，采用以$\mathbf{x}_0$为中心的高斯随机数在每次迭代生成一个新的候选解：

$$x_{1i} \leftarrow x_{0i} + N(0, T_{ki})$$



- 如果β太小(0.001)，冷却过程很慢，模拟退火算法会在搜索空间过多地跳来跳去而不去利用已经得到的好解
- 如果β太大(0.005)，冷却会过快，模拟退火算法易于陷入局部最小

本章内容

1. 自然退火

2. 简单的模拟退火算法

3. 冷却调度

4. 实施的问题

实施的问题

- 候选解的生成
  - 模拟退火算法中“生成候选解”
  - 随机生成
  - 让生成的候选解偏向当前的候选解x_0，如高斯分布：

$$x_{1i} \leftarrow x_{0i} + N(0, T_{ki})$$

- 重新初始化
  - 冷却调度对模拟退火的性能非常重要，如果让温度过快冷却，模拟退火会陷入局部最优
  - 当L次迭代没有找到更好的候选解，为增加探索可以重新初始化温度T_0

实施的问题

- 记录最好的候选解
  - 在基本模拟退火算法中，候选解x可能会替换当前的候选解x_0，即使x比x_0差
  - 精英策略
  - 用存档（archive）记录下搜索迄今为止的最好候选解：尽管在模拟退火的搜索中，差的候选解代替了好的候选解，但是迄今找到的最好候选解仍然被记录了下来
  - 算法结束时，返回存档中的解

结束