第 20 卷第 3 期 光电工程 Vol. 20, No. 3
1993 年 6 月 Opto-Electronic Engineering June., 1993

(3)
12-18

模拟退火法及其收敛性

TN2
029

陈小刚 林大键 孙国良
(中国科学院光电技术研究所，成都， 610209)

摘要 本文介绍了模拟退火法的起源和发展，并着重就可以获得最低能量状态的退火方案进行了讨论，证明了一类随机矩阵的稳定分布都收敛于具有最低能态的分布。

主题词 退火，计算机模拟，优化设计，收敛。

Generalized Simulated Annealing and Its Convergence

Chen xiaogang, Lin Dajian, Sun Guoliang

(Institute of Optics and El ctronics, Chinese Academy of Sciences, Chengdu, 610209)

Abstract In this paper, the origin and development of Generalized Simulated Annealing are introduced. The annealing schedule by which the lowest energy state may be attained is discussed, and the convergence of a class of stochastic matrices to the distribution with lowest energy state is shown.

Subject terms Annealing, Computer simulation, Optimum design, Convergence.

引 言

近年来，由于模拟退火法 [Generalized Simulated Annealing(GSA)] 能够有效地解决大规模的组合优化问题，重新引起了人们的重视并成功地应用到许多如旅行推销员一类的 NP 类数学问题上。在光学设计领域中，它以其具有能越过局部极小、搜索全局极小的能力，引起人们极大的兴趣，成为当前光学设计中最有发展前景的一种优化方法，并被认为是迈向光学设计智能化的重要一步。

陈小刚：男，1957 年 7 月生，1982 年毕业于四川大学光学专业，1986 年毕业于中国科学院光电技术研究所应用光学专业 (硕士)，1993 年毕业于中国科学院光电技术研究所应用光学专业 (博士)。

林大键：男，1935 年生，1960 年毕业于浙江大学精密机械专业。研究员，从事光学设计、曾参加“现代国防试验中的动态光学观测及测量技术”(获 1985 年国家科技进步特等奖) 中几项光测设备的光学系统设计。

孙国良：男，1937 年 8 月生，1960 年毕业于北京大学数学专业。研究员，从事计算机应用软件研究，是计算机辅助光学设计软件系统 (获 1988 年中国科学院科技进步二等奖) 的项目负责人。

收稿日期： 1992-07-08

1 模拟退火法的起源与发展

GSA 是离散优化问题中寻求最优解的迭代概率算法。不同于确定的局部搜索过程，它在迭代步骤中以某个概率接收对目标函数的破坏。这个概率决定于被称为温度的 T，并且当 $T \to 0$ 时趋于零。

这个将局部搜索与 Monte Carlo 优化技术联系起来的思想源于 Metropolis 等 (1953)，它极其类似于热力学中的冷却过程 — 当温度降到绝对零度时可能得到优化目标值，即最小能量状态。这个模型在选择邻域时假定了转移概率矩阵的某些对称条件，保证在固定温度下的有限分布近似于 Boltzmann 分布，并且在极限情况下该算法将以概率 1 选择全局最小。

GSA 法是在 1983 年由 Kirkpatrick 等重新发现并成功地应用于大规模的组合数学问题中以求在解题过程中获得有效的启发，例如旅行推销员一类的 NP 类问题等。其实际计算模型比 Metropolis 等最初提出的更具有一般性。其收敛性，由于其模型与热力学的模型相类同，是显而易见的。但是，即使是在 Metropolis 等提出的模型中，计算实验表明，如果温度下降太快，也不一定收敛到最优状态。所以 Geman 和 Geman(1984) ,Hayek(1985) 以及 Hanily 和 Federgrwn(1985) 研究了能保证收敛到最优态的退火过程并建立了能产生最好结果的模拟退火方案：

在固定“温度”下迭代足够久，再将控制参数降到下一级次。

直观表述是：在每个温度下都产生平衡态分布，期望这些平衡态分布收敛于最优解。用这个方法，通常相对少的不同温度级次就足够了。大量的实验报告给出了与此吻合的结果。

2 模拟退火法的一般描述

设 $E[\{x_i\}]$ 表示某一物质体系在微观状态 $\{x_i\}$ 下的内能，对于给定温度 T，若体系处于热平衡态时，$E\{x_i\}$ 服从 Boltzmann 分布

$$f = c(T)\exp\left(-\frac{E[\{x_i\}]}{kT}\right) \tag{1}$$

其中 k 为波尔兹曼常数。

T 下降，E 随之下降。若 T 下降得足够慢，则体系总可以保持热平衡态。当 T=0 时，E 将达到最小。这样的物质降温过程称为退火过程。

在计算机上实现模拟退火的过程如下：

随机选一初始状态 $\{x_i\}$，给体系一个小的扰动 (或破坏)$\{\Delta x_i\}$，计算内能增量

$$\Delta E = E[\{x_i + \Delta x_i\}] - E[\{x_i\}] \tag{2}$$

若 $\Delta E < 0$，说明内能降低，此扰动被接受；若 $\Delta E \geq 0$，此扰动以某个概率被接受。若扰动被接受，则用 $\{\Delta x_i + x_i\}$ 代替 $\{x_i\}$，否则再产生一个新的扰动。重复此过程以获得当前 T 下的平衡态。让 T 从一个足够高的值慢慢下降，直到 $T = 0$ 。便实现了模拟退火过程。$T = 0$ 时的状态 $\{x_i\}$，就是能量 $E[\{x_i\}]$ 最小的状态。

3 模拟退火法的收敛性理论

3.1 问题的提出

假设需要解决下述一般离散优化问题：

在具有能量 $E(1) < E(2) < ... < E(m)$ 的 m 个状态中，确定具有最小能量的状态。

进一步假设可以实现不可约 $m \times m$ 随机矩阵 $P = \{p_{ij}\}$，以使得当给定状态 i 时能以概率 p_{ij} 产生状态 j 的过程可行。模拟退火法是以 p 为基础的迭代 Monte Carlo 优化技术，它检查当前状态 i 的邻域，并以概率

$$\left[\begin{array}{ll} 1 & E(j) \le E(i) \\ r_{ij}(t) & E(j) > E(i) \end{array}\right. \tag{3}$$

接受 J 。其中 $0 < r_{ij}(t) < 1$，依赖于温度 $t > 0$，并满足

$$\lim_{t \to 0} r_{ij}(t) = 0 \tag{4}$$

在退火方案中，控制参数 $t_1 \ge t_2 \ge ... \ge t_n \ge ...$ 。

且
$$\lim_{n \to \infty} t_n = 0 \tag{5}$$

在迭代过程中采用这样的退火方案以寻求最小能量状态。

由于这个过程源于热力学中的冷却过程，所以一般选择接受概率的形式为：

$$r_{ij}(t) = \exp\left(-\frac{(E(j) - E(i))}{kT}\right) \tag{6}$$

于是可以构造不可约随机矩阵

$$A(t) = (a_{ij}(t)) \tag{7}$$

其中
$$a_{ij}(t) = \left[\begin{array}{ll} p_{ij} & i > j \\ p_{ij} \cdot r_{ij}(t) & i < j \\ 1 - \sum_{k \ne i} a_{ik}(t) & i = j \end{array}\right. \tag{8}$$

下面证明，具有转移概率矩阵 A 的非齐次马尔科夫过程以概率 1 达到最低能量状态。

3.2 随机矩阵稳定分布的收敛理论

在热力学的实践中人们得知，将被退火的工件在固定的温度下保持足够长的时间，使其内部达到热平衡，再将温度降到下一级次。如果在每个温度下退火时间都是足够久，最终可使工件的内部应力降到足够小，即达到最低能量状态。大量模拟退火的研究报告支持这种退火方案：

在固定“温度”下迭代足够长时间，再将控制参数降低到下一级次。

用这种方法，通常用较少的温度级次就足够了。下面从数学上就这种可以获得最低能量状态的退火方案进行了讨论，结模拟退火法搜索全局极小的理论予以了论证。它证明了一类随机矩阵的稳定分布都收敛于所有权都处于“最低能态”的分布，这个收敛理论只要求两个非常宽松的前提：

1. 所涉及的矩阵为不可约矩阵

2. 严格上三角阵趋于零，而严格下三角阵不变。

3.2.1 随机过程的稳定分布

考虑一系列随机过程，其中每次试验的结果，如果出现可列个两两互斥事件 $\{E_1, E_2, ...E_m\}$ 中的一个且只出现一个，则称这些事件为状态。如果 E_i 出现就称系统处在状态 E_i 。

令 $A=(a_{ij})$ 为一非负 (m×m) 矩阵，建立模矩阵 $A^+=(a^+_{ij})$,

$$\begin{cases} a^+_{ij}=1 & a_{ij}>0 \\ a^+_{ij}=0 & a_{ij}=0 \end{cases} \tag{9}$$

如果节点集合 $\{1,2,...,m\}$ 为一马尔科夫随机过程的状态集合，则 A 代表了其转移概率矩阵。故有：

$$\sum_{j}^{m} a_{ij}=1 \qquad a_{ij}\geq 0 \quad i=1,2,...,m \tag{10}$$

在随机过程理论中，有如下定理：

一有限的马尔科夫链，若存在一个正整数 m，使得状态空间的任何状态 i,j，有 $a_{ij}^{(m)}>0$，则：

$$\lim_{n\to\infty} A^{(n)}=\Pi \tag{11}$$

上式中的 Π 为一随机矩阵，它的各行都相等：

$$\Pi=\begin{bmatrix} \pi_1 & \pi_2 & ... & \pi_m \\ \pi_1 & \pi_2 & ... & \pi_m \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \pi_1 & \pi_2 & ... & \pi_m \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \pi \\ \pi \\ \vdots \\ \pi \end{bmatrix} \tag{12}$$

式中 π 是非负向量：

$$\pi=\{\pi_1,\pi_2,...,\pi_m\}\in R^m$$

定理有如下性质：

$$[1] \qquad \pi A=\Pi \tag{13}$$

$$[2] \qquad \sum_{j=1}^{m}\pi_j=1 \tag{14}$$

定理的意义是：

一个有限状态的马尔科夫链，当对任意的 i,j 都满足 $a_{ij}^{(m)}>0$ 时，当经过一段时间后，过程将达到平衡状态，即此后过程取某一个状态的概率不随时间变化。

如果 (11) 式成立，Π 就是齐次马尔科夫过程的极限分布，而且是唯一的极限分布。这个过程的状态集为 $\{1,2,...,m\}$，转移概率矩阵为 A 。

(11) 式称为遍历性。一个不可约的、非周期的、有限状态的马尔科夫链一定是遍历的。一个充要条件是 A 的某些对角元素 a_{ii} 严格为正。

考虑一类不可约 $(m\times m)$ 随机矩阵 $A(t)=a_{ij}(t')\ \in A$, $0<t<c$, 满足下列条件：

(i) $A^+(t)=A^+(t')$ 对所有的 $0<t<t'<c$

(ii) 如果 $i>j$, 则

$a_{ij}(t)=a_{ij}(t')$ 对所有的 $0<t<t'<c$

(iii) 如果 $i<j$, 则

$$\lim_{t\to 0} a_{ij}(t)=0$$

其意义是：在极限情况下，所有严格上三角阵部分都移到对角线上，而所有严格下三角阵部分保持不受影响。

下面将证明，在满足这组条件的前提下，$A(t)\in A$ 的唯一的稳定分布

$$\pi(t)=(\pi_1(t),\pi_2(t),...,\pi_m(t))$$

在极限情况下有：

$$\lim_{t\to 0}\pi(t)=(1,0,...,0) \tag{15}$$

3.2.2 证明

证 1: $j=m$ 时

由 $A(t)$ 的不可约性得知，对某些 $k<m, a_{mk}(t)\neq 0$,

且
$$\sum_{k=1}^{m} a_{mk}(t)=1$$

因此
$$\eta=1-a_{mm}(t)\neq 0$$

这里 $a_{mm}(t)$ 与 t 无关。

由假设条件，可找到一个 t_0 使得对所有的 $0<t\le t_0$ 有：

$$\sum_{i=1}^{m-1} a_{im}(t)<\varepsilon.\eta$$

由于 $\pi(t)$ 是 $A(t)$ 的稳定的分布

$$\begin{aligned}\pi_m(t)&=a_{1m}(t)\pi_1(t)+...+a_{m-1,m}(t)\pi_{m-1}(t)+a_{mm}(t)\pi_m(t)\\&\le\sum_{i=1}^{m-1} a_{im}\cdot\max(\pi_i(t))+a_{mm}(t)\pi_m(t)\\&\le\sum_{i=1}^{m-1} a_{im}.(t)+a_{mm}(t)\pi_m(t)\\&\le\varepsilon\eta+a_{mm}(t)\pi_m(t)\end{aligned}$$

$$\therefore\quad \pi_m(t)\le\varepsilon \tag{16}$$

证 2: $j=m-1$ 时

用 A 构造构造 $(m-1)\times(m-1)$ 不可约矩阵 A:

[1]. 将 m 列加到 $m-1$ 列上。

有：

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1,m-1} & + & a_{1m} & a_{1m} \\ \cdot & \cdots & & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdots & & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdots & & \cdot & & \cdot \\ a_{m-1,1} & \cdots & a_{m-1,m-1} & + & a_{m-1,m} & a_{m-1,m} \\ a_{m1} & \cdots & a_{m,m-1} & + & a_{mm} & a_{mm} \end{bmatrix}$$

[2a]　用 $\pi_{m-1}/(\pi_{m-1}+\pi_m)$ 左乘第 $m-1$ 行，
　　用 $\pi_m/(\pi_{m-1}+\pi_m)$ 左乘第 m 行，

[3a]　将 m 行加第 $m-1$ 行，

则
$$\overline{a}_{m-1,m-1}=\frac{\pi_{m-1}(a_{m-1,m-1}+a_{m-1,m})+\pi_m(a_{m,m-1}+a_{mm})}{\pi_{m-1}+\pi_m}$$

由于 A 不可约，所以 $\overline{A}$ 也不可约。因此有

$$\begin{aligned} \overline{\pi}(t)\overline{A}(t) &= \overline{\pi}(t) \\ \overline{\pi}_{m-1}(t) &= \overline{\pi}_1(a_{1,m-1}+a_{1m})+\ldots+\overline{a}_{m-1,m-1}\overline{\pi}_{m-1}(t) \\ &= \overline{\pi}_1(a_{1,m-1}+a_{1m})+\ldots \\ &\quad +[\pi_{m-1}(a_{m-1,m-1}+a_{m-1,m})+\pi_m(a_{m,m-1}+a_{mm})] \\ &\quad \frac{\overline{\pi}_{m-1}}{\pi_{m-1}+\pi_m} \end{aligned}$$

取 $\overline{\pi}_j(t)=\pi_j(t)$　　　　$j=1,2,\ldots,m-2$

$\overline{\pi}_{m-1}(t)=\pi_{m-1}(t)+\pi_m(t)$

则
$$\begin{aligned} \overline{\pi}_{m-1}(t) &= [\pi_1a_{1,m-1}+\ldots+\pi_{m-1}a_{m-1,m-1}+\pi_m a_{m,m-1}] \\ &\quad +[\pi_1a_{1m}+\ldots+\pi_{m-1}a_{m-1,m}+\pi_m a_{mm}] \\ &= \pi_{m-1}+\pi_m \end{aligned}$$

在步骤 (2a) 中，若 $\pi_{m-1}+\pi_m=0$，则因为 π 是非负向量，有

$$\pi_{m-1}=\pi_m=0$$

于是可将步骤 (2a) 和 (3a) 改为：

[2b]. 用 1/2 左乘第 m 行和第 $m-1$ 行

[3b]. 将 m 行加到第 $m-1$ 行

$$\overline{a}_{m-1,m-1}=\frac{a_{m-1,m-1}+a_{m-1,m}+a_{m,m-1}+a_{m,m}}{2}$$

同上，有

$$\begin{aligned}\overline{\pi}_{m-1}(t) &= (a_{1,m-1}+a_{1,m})\overline{\pi}_1+\ldots+(a_{m-1,m-1}+a_{m-1,m})\frac{\pi_{m-1}+\pi_m}{2}\\ &\quad+(a_{m,m-1}+a_{m,m})\frac{\pi_{m-1}+\pi_m}{2}\\ &= (a_{1,m-1}+a_{1,m})\overline{\pi}_1+\ldots+(a_{m-1,m-1}+a_{m-1,m})\pi_{m-1}+(a_{m,m-1}+a_{m,m})\pi_m\\ &= \pi_{m-1}(t)+\pi_m(t)\end{aligned}$$

$$\therefore \quad \overline{\pi}_{m-1}(t)=\pi_{m-1}(t)+\pi_m(t)$$

因此，对 $m>2$, 有

$$\lim_{t\to 0}\overline{\pi}_{m-1}(t)=\lim_{t\to 0}(\pi_{m-1}(t)+\pi_m(t))=0$$

重复此过程，有

$$\lim_{t\to 0}(\pi_2(t)+\ldots\pi_{m-1}(t)+\pi_m(t))=0$$

故式 (15)

$$\lim_{t\to 0}(t)=(1,0,\ldots,0)$$

得证。

结　论

由式 (11) 和 (15) 得知，在模拟退火法进行“退火”时，用在固定“温度”下迭代足够长时间，再将控制参数降低到下一级次的方案，当“温度”趋于零时，可获得最低能量状态。

参考文献

1 Hearn G K.Generalized simulated annealing optimization used in conjunction with damped least squares techniques.SPIE,1987;766

2 Hearn G K. Design optimization using generalized simulated annealing. SPIE,1987;818

3 Kirkkpatrick S,etc.Optimization by simulated annealing.Science,1983;220

4 Weller S W. Simulated annealing:What good is it?SPIE,1987;818

5 Shannon R R. The current future of lens design.SPIE,1989;1049

6 Hopkins Robert E. Optical design 1937 to 1988...Where to from here? Optical Engineering,1988;27(12)

7 瑞斯尼克 R、哈里德 D. 物理学，第一卷，第二册． 1988

8 胡海清． 应用数学文集．长沙：湖南科学技术出版社， 1988

9 陆大铨． 随机过程及其应用．北京：清华大学出版社， 1986