华南理工大学学报(自然科学版)
第19卷第4期 Journal of South China University of Technology Vol.19 No.4
1991年12月 (Natural Science) December 1991

关于退火算法的收敛性*

杨 帆 徐秉铮

(华南理工大学 无线电与自动控制研究所)

提 要

退火算法(Annealing Algorithm)是一种随机优化方法，它综合蒙特卡洛方法和确定式下山处理的优点来解决复杂的优化问题，使对解的搜寻在获得下山法的可靠性和速度的同时，尽量避免陷入局部最小的势阱。这一算法在货郎问题(TSP)、电路划分及布局布线，以及神经网络的训练过程等许多优化处理中得到了应用，并取得了比较成功的结果。本文分析了该算法的收敛性，并解释了退火处理中某些操作的原则。

关键词： 组合优化；模拟退火；目标函数；算法收敛性

退火算法的主要思想N. Metropolis等人于1953年提出的，但并不是针对优化领域中的问题。只是近年来，这种思想才被引入优化问题的研究中(S. Kirkpatrick等人，1982；V. Cerny，1984)。他们试图将蒙特卡洛法和确定式下山处理结合起来，用以解决复杂的优化问题，在获得下山法的可靠性和速度的同时，尽量避免陷入局部最小的势阱。

这一思想来自对玻璃体退火处理的分析，因而得名模拟退火法。一般认为，结晶体的品质与系统的能量有密切联系。当晶体的有序性强时，整个系统处于低能量的强稳态。在实际处理中，晶体是通过熔融玻璃体材料，然后逐步使其冷却而形成。在冷却过程中，温度的降低应足够缓慢以保证系统近似地常处于热平衡状态而不致形成过多的小集团。

容易看出，优化处理与退火过程有很多相似之处，附表是两者之间的主要类比。

附表 优化与退火的类比

优 化	退 火
最优解	基能态 (晶体)
局部优解	较低能稳态(玻璃体)
目标函数	系统能量
控制参数	温 度
解空间	系统组态

* 国家自然科学基金资助项目
此文来稿日期：1990年11月6日
中国图书资料分类号：TN 702

这种相似性使模拟退火法的应用成为可能。下面我们将进行算法的形式化，给出一个简明的算法收敛性证明，并解释某些操作的原则．最后以一实例来说明该算法存在的优越性。

1　退火算法

优化问题可抽象为求某个$f:X \to R$的最小值的问题。

其中R为实空间，X为具有有限点的离散空间。在优化问题中X相当大、与问题的大小成指数关系。如一个n城市的TSP，其解空间X有$(n-1)!$个点。

现在我们假定X中的每一点都是连通的。下面描述算法：

在第i步求解时，设当前解为$x_i \in X$，控制参数c_i非负，目标函数$f_i = f(x_i)$。从一个随机选择的初始解$x_0 \in X$开始，依照选定的参数c_0，dc_i和c_f等控制量作迭代操作，直至$c_i \leqslant c_f$。

1）产生当前解x_i的一个邻解x_p，作为下一时刻解x_{i+1}的候选；（x_p按某一分布从x_i的邻集中随机产生）；

2）令x_{i+1}为x_p的概率为$\min\{1,\exp((f_i - f_p)/c_i)\}$，为$x_i$的概率为上述概率之补；

3）令$c_{i+1} = c_i - dc_i$，$i = i+1$

其中dc_i可以等于0，即我们可以让系统在某个控制值上迭代多次。从上面算法中可以看到，所有的下山变换均被接受，而对上山变换来说，能量增值越小的变换越可能被接受。由于退火算法的上山变换功能，它避免了陷入局部最优的势阱。

2　算法的收敛性

对上面提到的求解优化问题，假定X空间中的状态能按其目标函数标号，即对状态$i \in X$记为1，2，$\cdots|X|$，使得当$i<j$时，$f_i<f_j$。于是对优化问题的求解转化为在合理的时间里搜寻f_1的过程，当然事先对这种按目标函数值排序的结果是未知的。

对任一状态$i \in X$，我们定义N_i为它的邻态集，其中的态均可由态i经一步转移而得到。为了以下讨论的方便，定义一个波动矩阵$P=\{p_{ij}\}$，这里p_{ij}表示产生j态为i态的下一态候选的概率，显然有$N_i = \{j | j \in X, p_{ij} > 0\}$。

假定对任两态i_0及i_f，均存在一个K态有限序列$j_1,\cdots j_K$，使得$i_0 = j_1$，$i_f = j_K$并且$p_{j_m j_{m+1}} > 1 (m = 1,2,\cdots,K-1)$，即假定$X$是连通的且$P$阵是不可约简的。

规定接受态$j \in N_i$为态i候选的概率为：

$a_{ij}(c) = \min\{1,\exp((f_i - f_j)/c)\}$，$c$为控制参数。

容易看出$a_{ij}(c)$具有如下性质：

i）　$a_{ij}(c) = 1$，　　当$c \geqslant 0$，$i>j$

ii）　$0<a_{ij}(c)<1$，　　当$c>0$，$i<j$

iii）　$a_{ij}(0) = 0$，　　当$c \to 0$，$i<j$

iv） $a_{ij}(c)=1$, 当$c\to\infty, i<j$

求解序列由具有转移矩阵 $T=\{t_{ij}\}$的一个马尔可夫过程产生，转移矩阵的元素为：($i,j=1,2,\cdots,|X|$)

$$t_{ij}(c)=\begin{cases} a_{ij}(c)p_{ij} & \text{当 } i\neq j \\ 1-\sum\limits_{k\neq i} a_{ik}(c)p_{ik} & \text{当 } i=j \end{cases}$$

$c>0$ 时，P 阵的不可约简性及 $a_{ij}(c)>0$ 保证了 T 矩阵的不可约简性。当 $c\to 0$时，T 阵演变为一个下三角阵，其主对角线上的元素 $t_{ii}(0)=1-\sum\limits_{k<i} p_{ik}$。特别地，当态 i 为局部最小时，有 $t_{ii}(0)=1$。接受上山变换的效果是保证了一条从每一局部最小通往全局最小的路径。

设 e_i 为 $R^{|X|}$空间中的第 i 个单位向量，于是当态 i_0 为局部最小时，有：

$$e_{i_0}T(0)=e_{i_0}$$

更特殊的是有 $e_1T(0)=e_1$，即全局最小和局部最小都是平衡态。

对一给定的 $c>0$，设 T 阵有一个归一化的平衡向量 $\pi(c)$满足 $\pi(c)T(c)=\pi(c)$。下面我们通过证明当 $c\to 0$ 时，$\pi(c)\to e_1$ 而不是任一其它局部最小，来说明退火算法有效的原因。先证明 $\pi(c)$的形式。

假定：波动矩阵 P 是对称的。

定理1：若 P 矩阵是不可约简的，$a_{ij}(c)$取形式

$$a_{ij}(c)=\begin{cases} \exp((f_i-f_j)/c) & \text{当 } f_i<f_j \\ 1 & \text{当 } f_i\geq f_j \end{cases}$$

则当 $c>0$时，对应于 $T(c)$的归一化平衡矢量为：

$$\pi(c)=\pi_1(c)(1,a_{12}(c),\cdots,a_{1|X|}(c)).$$

证明：平衡方程两边代入$\pi(c)$表达式，得：

$$\begin{aligned} \text{左式第 } i \text{ 项} &= \sum_j \pi_j t_{ji} \qquad (\pi_j=\pi_1 a_{1j}) \\ &= \sum_{j<i}\pi_j t_{ji}+\pi_i t_{ii}+\sum_{j>i}\pi_j t_{ji} \\ &= \sum_{j<i}(\pi_1 a_{1j})(a_{ji}p_{ji})+\pi_i t_{ii}+\sum_{j>i}(\pi_1 a_{1j})(a_{ji}p_{ji}) \\ &= \sum_{j<i}(\pi_1 a_{1i})(a_{ij}p_{ij})+\pi_i t_{ii}+\sum_{j>i}(\pi_1 a_{1i})(a_{ij}p_{ij}) \\ &= \sum_j \pi_i t_{ij} \end{aligned}$$

$$= \pi_i \cdot \sum_j t_{ij}$$

$$= \pi_i$$

= 右式第 i 项。

$\therefore \pi(c) = \pi_1(c)(1, a_{12}(c), \cdots, a_{1|X|}(c))$ 定理得证。

定理2：当 $c \to 0$ 时，$T(c)$的平衡态 $\pi(c)$ 收敛于 e_1，即：

$$\lim_{c \to 0} \pi(c) = \pi_1(c)(1, 0, 0, \cdots 0) = e_1$$

证明：由定理1得$\pi(c)$形式，对其求极限即得

$$\lim_{c \to 0} \pi(c) = e_1$$

定理2的意义是：在系统保持平衡（类似热物理中的热平衡）的前提下，当 c 逼近 0 时，系统能以任意接近1的概率搜索到 e_1。但应该说明的是，现在还无法确知这一收敛过程需要经历多少次状态转移。为了保证算法能在合理时间内结束并且不失去求解的可靠性，下面对一些参数的选取作以下规定：

1）c_0 的选取。为了使 $\pi(c_0)$ 接近于归整（即 $\pi_i = \pi_j, i \neq j$）必须使 $\exp((f_1 - f_j)/c)$ 接近于1（$j = 2, 3, \cdots, |X|$）。故选取$c_0 \gg U$，U为$(f_j - f_1)$的上确界，这是容易得到的。这类似于"溶融"过程；

2）dc 的选择：取 $c_{i+1} = c_i/(1 + \beta c_i)$，其中 $\beta \ll 1/U$，目的是为保证状态转换尽可能维持"热平衡"；

3）c_f 的选择：c_f 取决于解的容许失真 ε 与错误概率 α，当要求 $\alpha/(1-\alpha) > (|X| - 1)e^{-\varepsilon/c}$时，有：

$$c_f < \varepsilon/(\log(|X| - 1) - \log\alpha)$$

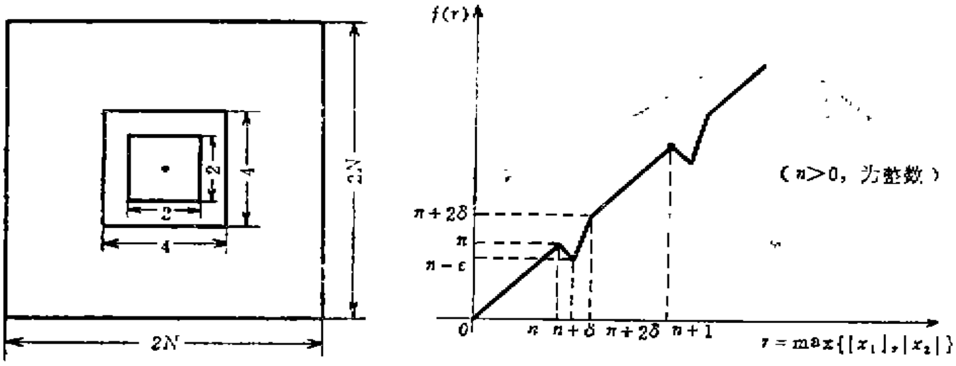
3 实例分析

为了改善求解的性能，通常的作法是选择不同起始点进行多次确定式下山搜索，然后选取其中的最优者作为问题的解。下面的例子能说明退火算法比上述求解策略具有优势。

设 $A \subset R^2$ 是中心在原点边长小于 $2N$ 的正方形区域（N 为大于 1 的正整数）。对任一点 $P \in A$，令(x_1, x_2)为其坐标，并令 $r = \max\{|x_1|, |x_2|\}$，即 P 至中心的距离的最大坐标投影。定义 $f: A \to R$ 为 r 的函数，其形式见附图。其中 $\varepsilon \ll \delta$。要求解的问题是寻找 f 在 A 上的最小值，显然解在原点取得。

现用两种方法来求解该问题。一种是通过随机选取初始点进行多次下山搜索；另一方法就是退火法。令搜索步长均为 δ，用 S 表示求得最小值所用的步数，$E(S)$表其数学期望，作为两者的评判标准之一。

方法一：下山搜索。随机地选取一个起始点 $p_0 \in A$，于是 $E(f(r_{p_0})) = 0(N)$（$E(\cdot)$表均值）。开始下山搜索可以得从 p_0 出发所能达到的极小点，设此时的极值为 $m(p_0)$。



附图 X及X上的$f: X\to R$

显而易见$m(p_0)=[r_{p_0}]-\varepsilon$或$m(p_0)=0$($[\cdot]$表示小于某实数的最大整数)，所以只有当起始点选择在区域$(-1,1)\times(-1,1)$中时，搜索才会达到真正的最小点$p_m=(0,0)$，因此有$E(S)=4N^2/\delta$。

方法二：退火法。随机选择一个起始点$p_0\in A$，同样有$E(f(r_{p_0}))=0(N)$。假设$\varepsilon\ll c\ll\delta$。在任一点$p_i\in A$，随机地选择（如等概方式）该点的四邻点之一作候选。设df为搜索运动到邻点后目标函数值的变化，若$df<0$则接受候选；当$df>0$时，则以概率$e^{-df/c}$来接受这一搜索。由于$df>0$时，df的取值只可能是$\varepsilon+2\delta$，ε或δ，考虑到以上对c的选取，得知$df=\varepsilon+2\delta$和δ时，$e^{-df/c}\to 0$，而$df=\varepsilon$时，$e^{-df/c}\to 1$，所以搜索能从局部最小中爬出。很容易看到退火法在区间$(n+\delta,n+1)$之间是以确定性进行搜索的，（这里$n>0$），需进行的搜索步数$=0(1/\delta)$。在局部最小点附近时，搜索爬出势阱所需的步数$=0(1)$。因此从起始点p_0到达全局最小点p_m的步数为$4([r_{p_0}]\cdot 0(1/\delta)+[r_{p_0}]\cdot 0(1))$，即$E(S)=0(N)$，而下山法的相应参数为$E(S)=0(N^2)$，显然退火法的搜索能力优于下山法。当问题的维数$d$增加时，这一优势将更加明显，因为此时$E(S_{下山})=0(N^d)$，而$E(S_{退火})=0(N)$仍维持在$N$的一次幂级上。

4 结 论

本文对退火算法的收敛性进行了简明的分析。举例说明了该算法较之确定式下山搜索的优越性，并对P阵对称情况证明了算法以概率1收敛至全局最优点，给出了控制参数的选取原则。尽管现在还无法确定算法的收敛行为，其易于应用的特点使之具有强大的吸引力。作者曾在电路划分处理中应用退火算法，取得了较满足的结果。相信退火算法会在更多的领域得到应用并取得成果。

参 考 文 献

〔1〕 S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt and M. P. Vecchi. Science, 1983, Vol. 220, No. 4598, PP671—680
〔2〕 P. Carnevali, L. Coletti and S. Patarnello. IBM J. Res. Develop. 1985, Vol. 29, No. 6, PP569—579
〔3〕 S. Kirkpatrick and M. P. Vecchi. IEEE Trans. on CAD, 1982, Vol. CAD—2, PP215—222
〔4〕 C. L. Liu and H. W. Leong, Proc. of ICCAD'85, PP226—228
〔5〕 F. Yang, Z. Q. Zhuang and Y. X. Dai, Proc. of ICCAS'89, PP175—177
〔6〕 杨帆. 中国科技大学硕士论文, 1988
〔7〕 A. 帕普力斯. 概率, 随机变量与随机过程. 北京, 高等教育出版社, 1983
〔8〕 杨帆, 庄镇泉. 第四届全国ICCAD年会会议文集, 1987

ON CONVERGENCE OF ANNEALING ALGORITHM

YANG Fan and Xu Bingzhen
(Institute of Radio and Automatic Control
South China Univ. of Tech.)

ABSTRACT

The annealing algorithm is a stochastic optimization method which has attracted attention because of its success with certain difficult problems, including NP-hard combinatorial ones such as the travelling salesman (TSP), circuit placement and routing. It has also been applied to the learning phase of Neural Network. In this paper, the convergence of this widely used algorithm is analysed and the criteria of some operations in annealing process are explained.

KEY WORDS: combinatorial optimization; simulated annealing; convergence of algorithm; objective function