# 模式识别的理论与方法 Pattern Recognition

裴继红

# Chapter 7 Stochastic Methods Part 1

(Sections 7.1-7.4)

# 本讲内容

模拟退火(Simulated Annealing)

• Boltamann网络的学习



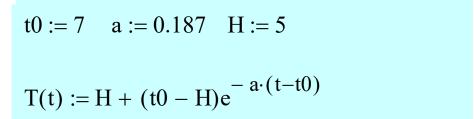
#### 状态与事物存在的关系

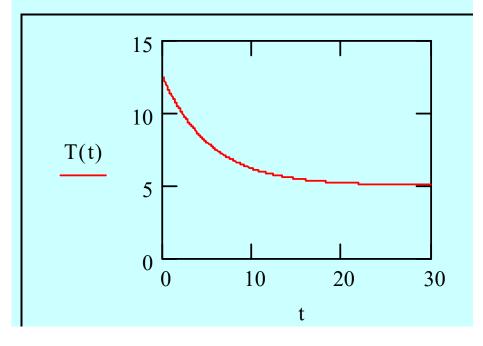
- 事物是由它内部的状态决定的
- 不同事物之间的差异表现在其状态不同
- 事物具有的内在状态空间的维数决定了其复杂性
- 状态决定了事物的存在
  - 宇宙、自然界、四季
  - 生命、生物、人类、社会
  - 分子、原子、能量
  - **—** .....



# 模拟退火算法的物理模型——固体退火

- 退火,即俗称固体降温
- 先把固体加热至足够高温, 使固体中所有粒子处于熵值 很高的无序状态,然后将温 度缓慢下降,粒子渐渐有序 (熵值下降)。
- 只要温度上升得足够高,冷却过程足够慢,则所有粒子最终会处于最低能态(最低熵值的状态)。







#### 物理退火的三个过程

#### 物理退火过程主要由以下三部分组成:

#### (1) 加温过程

- ▶ 其目的是增强粒子的热运动,使其偏离平衡位置。
- ▶ 当温度足够高时,固体将熔解为液体,从而消除系统原先可能存在的非均匀态, 使随后进行的冷却过程以某一平衡态为起点。
- ▶ 熔解过程实际是系统的熵增过程,系统能量也随温度的升高而增大。

#### (2) 等温过程

▶ 物理学的知识告诉我们,对于与周围环境交换热量而温度不变的封闭系统,系统状态的自发变化总是朝自由能减少的方向进行,当自由能达到最小时,系统达到平衡态。

#### (3) 冷却过程

▶ 目的是使粒子的热运动减弱并渐趋有序,系统能量逐渐下降,从而得到低能的晶体结构。



## Metropolis 准则

➤ Metropolis 等在1953年提出了重要性采样法,即以概率大小接受新状态。

具体而言,在温度 T 时,由当前状态 i 产生新状态 j,两者的能量分别为  $E_i$  和  $E_j$ ,若  $E_i < E_i$  则接受新状态 j 为当前状态;否则,计算概率  $p(\Delta E)$ 

$$p(\Delta E) = \exp[-(E_i - E_i)/kT] = \exp[-\Delta E/kT]$$

若 $p(\Delta E)$ 大于[0,1]区间内的某个随机数,则仍旧接受新状态j为当前状态;若不成立则保留i为当前状态,其中k为Boltzmann常数。

- ▶ 上述重要性采样过程通常称为Metropolis准则:
  - ✓ 在高温下可接受与当前状态能量差较大的新状态,
  - ✓ 而在低温下基本只接受与当前能量差较小的新状态,
  - ✔ 且当温度趋于零时,就不能接受比当前状态能量高的新状态。



## 玻尔兹曼(Boltzmann)分布

• 在物体的降温退火过程中,其粒子所处于的能量状态服从玻尔兹曼(Boltzmann)分布:

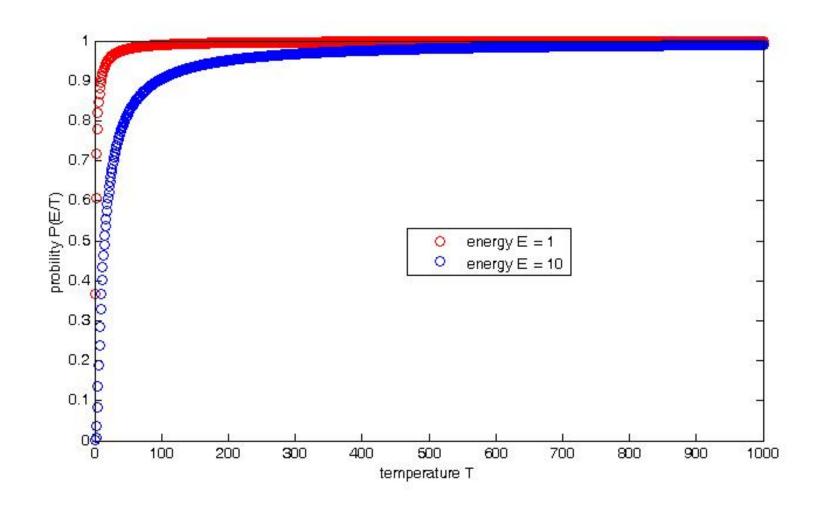
$$P(E) \propto e^{(-E/kT)}$$

其中,P(E)是系统的粒子处于能量E的状态的概率,k是玻尔兹曼常数,T为系统温度。

- 从玻尔兹曼分布规律可以看出:
  - ➤ 当温度T很高时,概率分布对一定范围内的能量E没有显著差别, 即物体处于高能状态与低能状态的**可能性差别不大**。
  - ▶ 随着温度降低,物体处于高能状态的可能性逐渐减少,最后当温度下降到充分低时,物体将以高概率处在低能状态。

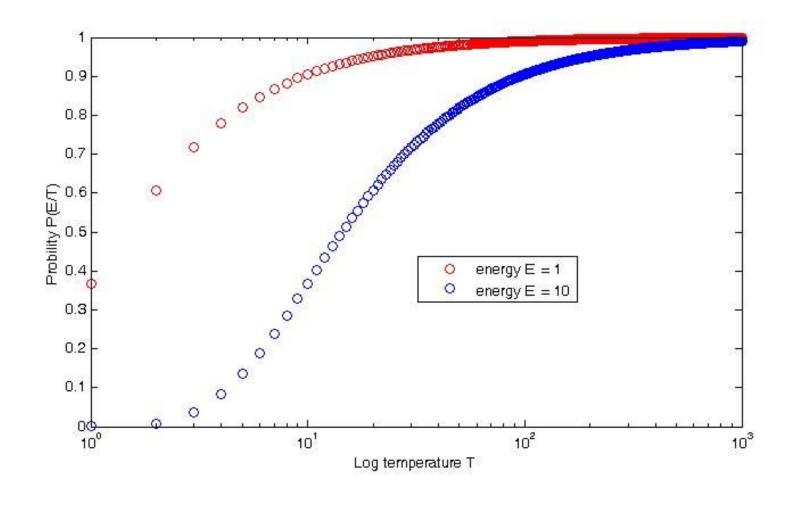


#### 玻尔兹曼分布 $P(E/T) = \exp[-E/T]$ 示意 (图中, E=1, 10; T =[1, 1000])





# 玻尔兹曼分布 $P(E/T) = \exp[-E/T]$ 示意 (图中, E=1, 10; 温度变量 T 取过对数, )





#### 模拟退火算法的提出

- ➤ 1983年 Kirkpatrick 等意识到组合优化与物理退火的相似性,并受到 Metropolis 准则的启迪,提出了模拟退火算法。
- ➤ 模拟退火算法是基于Monte Carlo 迭代求解策略的一种随机寻优算法,
  - ① 其出发点是基于物理退火过程与组合优化之间的相似性,SA由 某一较高初温开始,
  - ② 利用具有概率突跳特性的Metropolis抽样策略在解空间中进行随机搜索,
  - ③ 伴随温度的不断下降,重复抽样过程,最终得到问题的全局最优解



#### 模拟退火算法的基本思想

#### 对于优化问题:

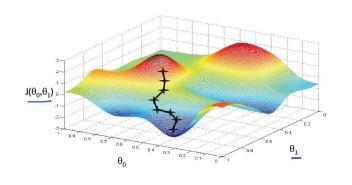
- ① 把优化问题的求解过程与统计热力学的热平衡问题进行类比,通过模拟高温物体退火过程的方法,试图找到优化问题的全局最优或近似全局最优解
- ② 调节优化参量,以使优化目标函数(对应于物体的能量)下降 ,同时定义一种假想温度(对应于物体温度)确定物体处于某一 能量状态的概率,用于表征系统的活动状况。
- ③ 允许随着参数的调整,目标函数可以偶尔向能量增加的方向发展(对应于能量有时上升),以利于跳出局部极小的区域,随着假想温度的下降(对应于物体的退火),系统活动性降低,最终稳定在全局最小所在的区域。

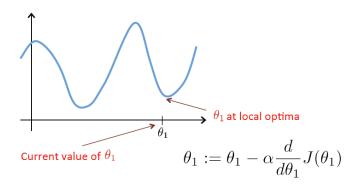




## 模拟退火算法与梯度下降法

- > 采用梯度下降法有可能只能达到局部最小
  - 假设网络能量初态处于  $W_{ij}(0)$  所对应的 E(0) 点。能量在下降过程中,若权值变化步长不足以跨过  $E_{min}$  与  $E_{min}$ \*之间的山峰,则网络能量最终将达到局部最小点  $E_{min}$ \*,而不能达到全局最小点 $E_{min}$ 。但是,梯度下降法的下降步长过大,则将使迭代不易收敛。

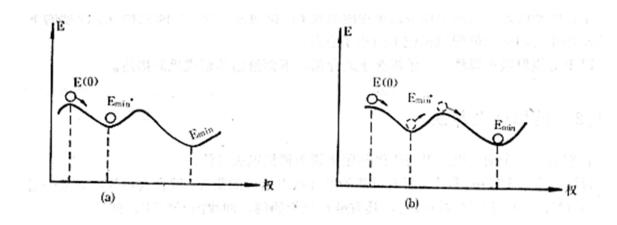




> 采用模拟退火算法可克服上述问题,找出全局最小。

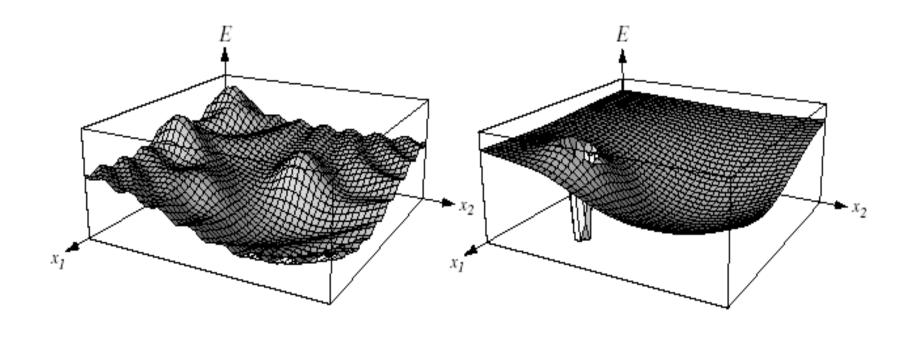
#### 能态变迁示意图

• 能量状态变迁示意图



- 在模拟过程中,初始温度和温度下降规律要合理选择
  - 温度选择过低,状态(小球)可能滞留于局部最小点而难以跳出。
  - 温度选择过高,状态(小球)可能在E<sub>min</sub>和E<sub>min</sub>\*来回跳动而难以稳定。
- 对多维情况,可将能量曲线扩展到能量曲面。





- 上左图,能量函数的形状很适合用模拟退火形式的优化方法求解。找全局极小点过程类似于一个小球在该曲面形状的地毯上一边跳动一边滚动。
- 上右图,病态"高尔夫球场"地形一般不适合使用模拟退火方式求解,因为 最低能量区域的面积非常小,且被一些局部高能区构型所阻隔。



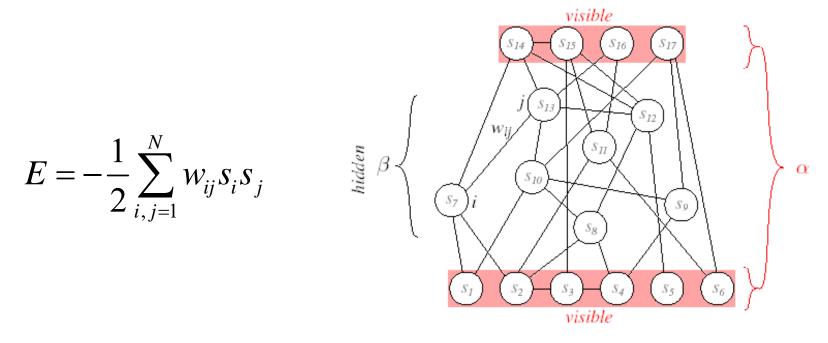
#### 模拟退火算法基本步骤

- 1. 首先在能量函数中定义一个假想温度T,一开始让T足够高,然后按某种规律逐渐下降。
- 2. 在任何一个温度 T 下,调节权值以使网络能量降低,若能量确实是降低的,则接受这种变化。
- 3. 若能量是上升的,则按照一定的概率决定是否接受认这种变化
  - ✓ 能量上升从局部区域来看是一种错误方向的运行,因为这种运行件随着网络能量的上升,
  - ✓ 但从全局来看,这种运行提供了跳出能量局部最小点,到达全局最小点的机会。





# 模拟退火算法举例



- 左上公式所表示的最优化问题可以看成是节点网络的形式,其每一个节点可以取  $s_i = +1$  或  $s_i = -1$  状态。每一对节点 I 和 I 之间由一个双向权 I 如 互联; 若节点间的权为I 0,则不画出。
- 由于节点间可以进行任意连接,因此其结构与多层网络不同。该优化问题就是要找到一个构型(即指定所有的 s<sub>i</sub> 状态),使得左上的能量公式取得最小值。此处,表示节点的圈中标出的是节点的状态,而不是节点函数。习惯上将这种网络称为 Boltzmann 网络。整个网络的每一个构型用符号(整数) y 表示。
- 在上面的图中,由于有17个节点,因此  $0 \le \gamma < 2^{17}$ 。当该网络用于模式识别时,输入输出节点称为可见节点,而剩余节点称为隐藏节点。可见节点和隐藏节点的状态分别用 $\alpha$ 和 $\beta$ 表示。在上图中,  $0 \le \alpha \le 2^{10}$  和  $0 \le \beta < 2^7$ .

#### 模拟退火(Simulated Annealing):

寻找最优构型的方法

基于退火原理寻找低能态构型:

- 对系统进行升温 (增加随机性).
- 系统在高能态搜索构型.
- 当温度逐渐下降时,以较大的几率找到最优构型.



#### 能量函数的定义

其基本思想是寻找可以使能量代价函数达到最小的  $s_i$ :

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} w_{ij} s_{i} s_{j}$$

系统中,某一个确定构型 7 具有的概率为:

$$P(\gamma) = \frac{e^{-E_{\gamma}/T}}{Z(T)}$$

上式中,分母是一个规范化因子,以保证公式表示的形式是一个概率

$$Z(T) = \sum_{\gamma'} e^{-E_{\gamma'}/T}$$



#### 随机模拟退火(SSA)算法

Begin 初始化 
$$T(k), k_{\max}, s_i(1), w_{ij}$$
  $i, j = 1, \dots, N$   $k \leftarrow 0$  do 循环  $k \leftarrow k+1$ 

do 循环 随机选取节点 i; 假设其状态为  $s_i (=1)$  计算系统能量函数,

$$E_a \leftarrow -1/2 \sum_{j}^{N_i} w_{ij} s_i s_j$$

改变节点  $s_i$  状态  $s_i = -s_i (=-1)$ , 再次计算能量函数

$$E_b \leftarrow -1/2 \sum_{j}^{N_i} w_{ij} s_i s_j$$

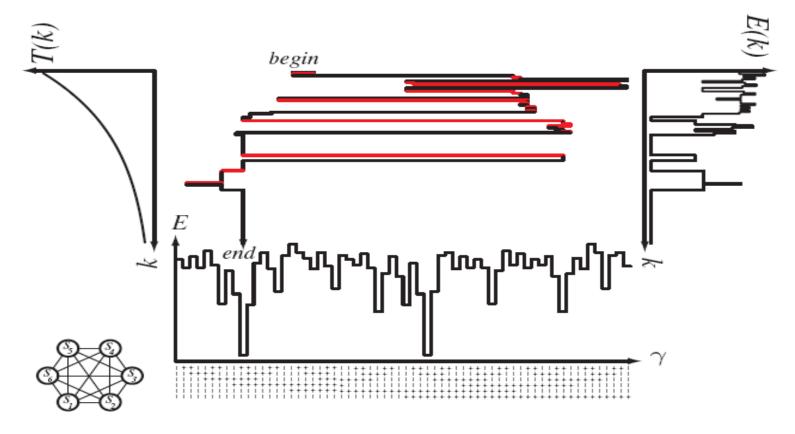
若  $E_b < E_a$  保留改变的状态  $s_i = -s_i (= -1)$ 

否则,用下面概率改变 s<sub>i</sub> 状态:

若 
$$e^{-(E_b-E_a)/T(k)} > Rand[0,1)$$
 则  $s_i = -s_i (=-1)$ 

Until (内层循环) 所有节点轮询多次 Until (外层循环) 满足停止准则 (例如, 能量非常低).





- 随机模拟退火(SSA)算法使用参数控制的随机性,通过控制参数(一般称为温度)T(k)在一个离散空间中搜索能量函数的最小点。
- 在上图所示的例中,网络节点N = 6; 其构型的状态分别用"+"和"-"符号表示,构型的总数共有2<sup>6</sup> = 64个。每一种构型的状态以符号形式示于图的下方。对于随机选择的一组权值,与构型相关的由前面的公式定义的能量示于图的上部。每一次跃迁对应于单个si的改变。(图中构型的排列方式为相邻的构型中,只有一个节点状态发生变化)。
- 由于系统的能量不会由于全体节点状态整体反号而发生变换,所以存在两个全局最小点。左上图显示了退火进度-温度随着跌代次数k而逐渐减小,中间的图示出了算法1产生的在跌代过程中构型的变换过程。在构型空间的轨迹中,红色表示能量上升的变迁,黑色表示那些能量下降的变迁。在退火的后期,不希望的变迁(红色)变得越来越少。右边的图示出了整体能量 E(k), 它减小到全局最小点。



# 设计模拟退火算法需要考虑的 一些基本问题

### 模拟退火实现过程中的三个基本因素

- 1. 怎样按某种概率过程**产生新的搜索状态**,而向该状态的 转移应不受能量曲面的限制。
- 2. 怎样根据当前温度及新状态与原状态在能量曲面的相应 位置,确立新状态的接受标准。
- 3. 怎样选择**初始温度T<sub>0</sub>**以及怎样更新温度,确定<mark>温度的下</mark>降过程。
- ▶ 上述三点影响模拟退火的收敛性及收敛速度,且影响退火 结束后以多大的概率使状态稳定在全局最小点。



#### 模拟退火算法的关键参数

模拟退火算法包括三个函数和两个准则,

- ▶ 状态产生函数、状态接受函数、温度更新函数
- ▶ 内循环终止准则、外循环终止准则
- ✓初温的选择对SA算法性能也有很大影响。

• 这些环节的设计将决定SA算法的优化性能。



#### 模拟退火算法: 状态产生函数

- ① 设计状态产生函数(邻域函数)的出发点应该是尽可能保证产生的候选解遍布全部的解空间。通常,状态产生函数由两部分组成:
  - 产生候选解的方式
  - 候选解产生的概率分布。



#### 模拟退火算法: 状态接受函数

- ② 状态接受函数一般以概率的方式给出。不同接受函数的差别主要在 于接受概率的形式不同。设计状态接受概率,应该遵循以下原则:
  - ▶ 在固定温度下,使目标函数值下降的候选解的接受概率要大于使目标函数值上升的候选解的接受概率;
  - ▶ 随温度的下降,使目标函数值上升的解的接受概率要逐渐减小;
  - ▶ 当温度趋于零时,只能接受目标函数值下降的解。
- 状态接受函数的是 SA算法实现全局搜索的最关键的因素,
- SA算法中通常采用min[1,  $exp(-\triangle E/T)$ ]作为状态接受函数。



#### 模拟退火算法: 温度更新函数

③ 温度更新函数,即温度的下降方式。用于在外循环中修改温度值。

目前,最常用的温度更新函数为指数退温函数。



#### 模拟退火算法: 初温

- ④ 初始温度、温度更新函数、内循环终止准则和外循环终止准则通常被称为退火历程(annealing schedule)。
  - ➤ 实验表明,初温越大,获得高质量解的几率越大,但花费的计算时间将增加。
- 初温的确定应折衷考虑优化质量和优化效率,常用方法包括:
  - ①均匀抽样一组状态,以各状态目标值的方差为初温。
  - ②随机产生一组状态,确定两两状态间的最大目标值差  $|\triangle_{max}|$  ,然后依据差值,利用一定的函数确定初温。譬如  $T_0$ =- $\triangle/\ln p_r$  ,其中  $p_r$  为初始接受概率
  - ③利用经验公式给出。



#### 模拟退火算法: 内循环终止准则

- ⑤ 内循环终止准则,或称Metropolis抽样稳定准则,用于决定在各温度下产生候选解的数目。
- 在SA算法中,收敛条件要求在每个温度下产生候选解的数目趋于无穷大,显然在实际应用算法时这是无法实现的。常用的抽样准则包括:
  - 检验目标函数的均值是否稳定;
  - 连续若干步的目标值变化较小;
  - 按一定的步数抽样。



#### 模拟退火算法:外循环终止准则

- ⑥ 外循环终止准则,即算法终止准则,用于决定算法何时结束。设置温度终值是一种简单的方法。
- SA算法的收敛性理论中要求温度终值趋于零,这显然不 合实际。通常的做法是:
  - 设置终止温度的阈值;
  - 设置外循环迭代次数;
  - 算法收敛到的最优值连续若干步保持不变;
  - 检验系统熵是否稳定





#### 如何将模拟退火运用到分类?

需要对网络进行学习。学习步骤为:

1. 训练权值 (在相对熵上进行梯度下降)

$$\Delta w_{ij} = \frac{\eta}{T} \left[ \underbrace{\mathcal{E}_{Q} \left[ s_{i} s_{j} \right]_{\alpha \ clamped}}_{learning} - \underbrace{\mathcal{E} \left[ s_{i} s_{j} \right]_{free}}_{unlearning} \right]$$

- 2. 分类过程
  - a. 输入单元被"钳位"到输入模式
  - b. 对其他单元进行"退火",以找到最小能量构型。
  - c. 则输出单元将包含预测的模式

