

关于模拟退火算法的报告

1900012469 地球与空间科学学院 周雨琢

【摘要】模拟退火算法是自然模拟算法的一种，它将物理学规律应用于计算机算法之中，能巧妙而高效地解决大规模组合优化问题。本文详细介绍了模拟退火算法的原理及具体步骤，结合旅行售货商问题展示了其具体应用，并分析了其优点与局限性，同时总结了几种对模拟退火算法的改进方案。

【关键词】模拟退火算法 旅行售货商问题 TSP 自然模拟 Metropolis 准则 组合优化

1 背景介绍

对于一些组合优化问题，如旅行售货商问题、背包问题，所有可能的组合的个数是指数递增的，使得传统的遍历所有可能性寻找最优解的算法难以实现。基于这一难题，随机寻优算法应运而生，其中就包括模拟退火算法。

模拟退火算法的思想最早由 N. Metropolis 等人于 1953 年提出。1983 年，S. Kirkpatrick 等人将此思想引入组合优化领域。它利用热力学中固体退火降温过程与寻求最优组合过程的相似性，采用迭代求解的策略，是一种能有效解决组合优化问题的随机寻优算法。

2 算法原理

2.1 物理退火过程

退火是冶金学中的一种晶体热处理工艺，指的是先将固体加热熔化，再将其缓慢冷却，以获得规整晶体的物理过程。

升温过程中，固体内能增大，粒子进入自由运动状态，固体从较为有序的结晶态转变为较为无序的液态，消除了固体中原来可能存在的非均匀状态；降温时，粒子逐渐形成低能态晶格，内能减小，转变为均匀固态，从而达到消除组织缺陷的效果。

只要降温过程进行得足够缓慢，物体在每一温度下达到平衡态的过程，都可以近似为封闭系统中的等温过程，遵循自由能减小的规律，在自由能最小时达到平衡。最终，固体会形成最低能态的基态。

此类在固体所有微观状态中寻找能量最小状态的过程，与组合优化问题中在解空间中寻找目标函数最小值的过程极为相似。

2.2 Metropolis 准则

以固体最小能量状态为能量零点，根据吉布斯分布律，当温度为 T 时，固体处于能量为 E_i 的微观态的概率为 $P_i = A \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)$ 。其中 A 为归一化常数， k 为玻尔兹曼常数， T 为温度。对于任意两能量值 E_1 、 E_2 ，固体处于这两个状态的概率之比为 $r = \frac{P_1}{P_2} = \exp\left(-\frac{E_1-E_2}{kT}\right)$ 。由此可见，固体处于低能态的概率更大，处于高能态的概率更小。

基于以上统计学规律，我们可以模拟物体趋近于平衡态的过程。

- (1) 假设物体初始状态为 i ，能量为 E_i ，现给其一微小扰动，使其状态改变为 j ，能量改变为 E_j 。
- (2) 若 $E_j < E_i$ ，则接受这一状态；若 $E_j > E_i$ ，则以 $r = \exp\left(-\frac{E_j-E_i}{kT}\right)$ 的概率接受这一状态。
- (3) 重复(2)中过程，同时逐渐缓慢减小温度。可以看出，温度高时，系统更容易接受 $E_j > E_i$ 的状态，而温度趋近于零时，不再接受此类状态。
- (4) 当重复多次固体都没有接受新状态时，视为已达到平衡，停止。

2.3 模拟退火

用固体退火过程来模拟计算机寻找最优解的过程。在所有可能的解的集合中，欲找到一个最优解，使目标函数 f 达到最小值，可以将问题的每个可能解类比为固体的一个微观状态，目标函数 $f(i)$ 类比为能量，通过算法过程模拟固体趋近平衡态的过程，控制温度逐渐减小，采取与 2.2 类似的趋近方法寻找最优解。

表一 模拟退火与物理退火

模拟退火	物理退火
解	状态
目标函数	能量
最优解	最低能量的状态
设置初始高温	升温
搜索	等温过程
温度参数下降	降温过程

2.4 算法模型

(1) 随机选取初始解 S ，设置初始温度 T ，终止温度 T_f ，每个温度下的迭代次数 L ，和温度减小幅度 α (α 略小于 1)。

(2) 计算 $f(S)$ 。

(3) 对 S 施加一微扰，使其变为 S' ，计算 $f(S')$ 。

(4) 若 $f(S') < f(S)$ ，则用 S' 代替 S ；若 $f(S') > f(S)$ ，则令 $r = \exp\left(-\frac{f(S')-f(S)}{kT}\right)$ ，在 $0 \sim 1$ 中随机生成一个数 θ ，若 $\theta < r$ ，则用 S' 代替 S ，否则保持 S 不变。

(5) 重复(2)~(4)过程。当重复次数达到 L 次，或若干次都没有产生新解时，进入第 6 步。

(6) 将温度降低为 $T' = \alpha T$ ，继续重复(2)~(5)过程，直到最终达到终止温度 T_f 。此时的解即可视为最优解。

3 用模拟退火算法求解 TSP 问题

TSP 问题，即旅行收货商问题，设共有 n 个城市（不妨设 $n = 10$ ），每两个城市之间的路程记为 $d(i, j)$ ，欲在所有不重不漏地经过每个城市的路线中，求最短的一条。

此问题中，解空间为可能的所有路线的集合，目标函数 f 为需要经过的总路程。随机生成一初始路线 S ，如：1 2 3 4 5 6 7 8 9 10，计算目标函数 f 。

接下来施加微扰：随机生成 1~10 中的两个数，如 2 和 7，交换原路线中的这两个城市，路线变为 1 7 3 4 5 6 2 8 9 10，计算目标函数的值 f' 。

接下来按 3 中所述规则，重复上述过程，同时控制温度逐渐冷却，直至找到符合条件的解。

4 算法优点与局限性

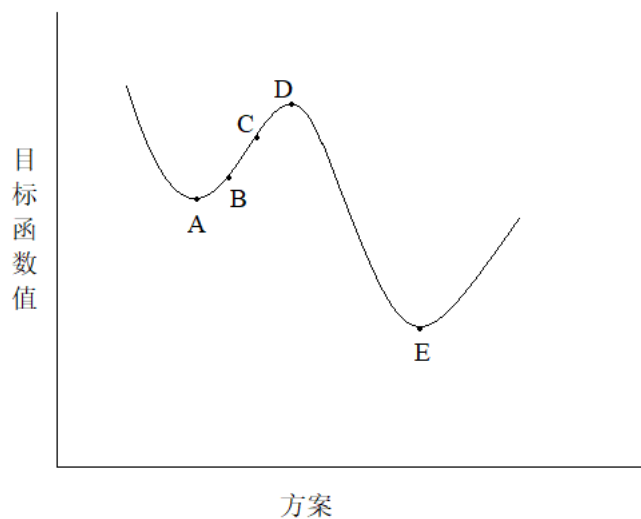
4.1 算法优点

1. 是一种解决组合优化问题的可行方法

模拟退火算法是一种随机优化算法，它避免了传统算法遍历所有可能解的做法，而是利用概率的思想，使出现最优解的概率逐渐变大，直至趋于全局最优，使解决规模较大的优化问题成为可能。

2. 能更有效避免陷入局部最小值

相比其他算法，如贪心算法，模拟退火算法更能有效避免陷入局部最小值。贪心算法是另一种求解最小值的方法，其做法是永远做出在当前看来是最好的选择，从而可能仅仅寻找到了局部最优值，而错过了全局最优值。而模拟退火算法有所不同，它能以一定的概率接收目标值高的状态，并不总往好的方向发展，有时也会暂时恶化解方案，使得即使算法落入了局部最优值的陷阱，经过足够长的时间也可以走出来。理论证明，当控制参数满足一定条件时，无论初始解如何，经过足够多次变换，算法一定能收敛于全局最优解。



如上图，A 为局部最优值，E 为全局最优值。若初始状态为 C，若采取贪心算法，则解会往 B 方向靠近，最终收敛于 A；若采取模拟退火算法，由于算法有一定概率接受恶化方案，有可能变为 D，最终收敛于全局最优值 E。

4.2 算法局限性

1. 初始温度难以确定

只有将初始温度 T_0 设置得足够高时，才能保证系统各状态等概率出现，从而避免陷入局部最优值的陷阱。虽然理论已求得 T_0 所需要的满足的公式，然而，在实际问题中， T_0 的具体值常常无法求出。这时，只能通过一些初步的预实验，根据统计量不断调整 T_0 。

2. 温度衰减参数难以确定

理论表明，要达到全局最优解，总迭代次数 k 必须足够大，且温度 T 的冷却速度反比于 $\ln k$ 。实际应用中，这么慢的下降速度是难以接受的。所以实际应用中，一般取 $T' =$

αT , $\alpha = 0.8 \sim 0.99$ 。这样的优点是求解时间短, 缺点是 α 的选取随具体问题而定, 不同的问题选取的 α 可能相差很大, 没有统一的确定方法, 而且 α 一旦算法开始执行就不能再更改。

3. 有可能丢失全局最优解

理想状态下, 当选取合适的参数, 进行足够多次数, 算法一定能收敛至全局最优解。然而, 现实情况下, 由于 α 取值的限制、运算次数的限制、初始温度确定的不准确, 仍可能出现丢失全局最优解的情况。

5 算法应用与发展

模拟退火算法作为一种较为有效的随机搜索算法, 已在许多领域中得到广泛的应用, 如 VLSI 设计, 神经网络计算机, 图像处理等等。同时, 它还用于解决许多组合优化问题, 如旅行收货商问题和背包问题等。

同时, 针对模拟退火算法的局限性与不足, 已提出许多改进方案。如, 改进温度衰减方案, 使其更适应特定问题的求解; 将模拟退火算法与贪心算法相结合, 先用贪心算法产生初始状态解, 再运用改进的模拟退火算法, 使用双存储, 是算法在进行的过程中不会丢失历史最优解; 增大扰动幅度, 例如在 TSP 问题中, 不仅调换路线中两个城市, 而是将这两个城市间的所有城市调换次序; 等等。

6 结语

模拟退火算法是一种有效的随机搜索算法。它来源于冶金学中的固体退火过程, 将热力学规律巧妙地运用于算法中, 利用概率的思想, 依托 Metropolis 准则, 使目标解以极大的概率最终出现在算法中。模拟退火算法能有效避免局部最小值陷阱, 解决规模较大的组合优化问题, 在多领域得到了广泛应用。但由于参数选取存在难度, 模拟退火算法仍存在一定局限性, 需要依据所要解决的具体问题进行具体的调整和改进。

参考文献

- 1 魏延, 谢开贵. 模拟退火算法. 蒙自师范高等专科学校学报, 1999, 1(4): 7~11.
- 2 李金旭, 黄悦悦. 求解 TSP 的贪心模拟退火算法. 河南工程学院学报(自然科学版), 2015, 21(1), 66~69.
- 3 徐小平, 朱秋秋. 求解 TSP 的改进模拟退火算法. 计算机系统应用, 2015, 24(12): 152~159.
- 4 姚新, 陈国良. 模拟退火算法及其应用. 计算机研究与发展, 1990, 7: 1~6.

5 布莱恩·克里斯汀, 汤姆·格里菲斯. 算法之美. 北京: 中信出版社, 2018.