

WIKIPEDIA

模拟退火

维基百科，自由的百科全书

模拟退火是一种通用概率算法，常用来在一定时间内寻找在一个很大搜寻空间中的近似最优解。模拟退火是S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt和M. P. Vecchi在1983年所发明。而V. Černý在1985年也独立发明此算法。

目录

简介

演算步骤

初始化

迭代过程

停止准则

退火方案

伪代码

参见

外部链接

简介

模拟退火来自冶金学的专有名词退火。退火是将材料加热后再经特定速率冷却，目的是增大晶粒的体积，并且减少晶格中的缺陷。材料中的原子原来会停留在使内能有局部最小值的位置，加热使能量变大，原子会离开原来位置，而随机在其他位置中移动。退火冷却时速度较慢，使得原子有较多可能可以找到内能比原先更低的位置。

模拟退火的原理也和金属退火的原理近似：我们将热力学的理论套用到统计学上，将搜寻空间内每一点想像成空气内的分子；分子的能量，就是它本身的动能；而搜寻空间内的每一点，也像空气分子一样带有“能量”，以表示该点对命题的合适程度。算法先以搜寻空间内一个任意点作起始：每一步先选择一个“邻居”，然后再计算从现有位置到达“邻居”的概率。

可以证明，模拟退火算法所得解依概率收敛到全局最优解。

演算步骤

初始化

生成一个可行的解作为当前解输入迭代过程，并定义一个足够大的数值作为初始温度。

迭代过程

迭代过程是模拟退火算法的核心步骤，分为新解的产生和接受新解两部分：

1. 由一个产生函数从当前解产生一个位于解空间的新解；为便于后续的计算和接受，减少算法耗时，通常选择由当前新解经过简单地变换即可产生新解的方法，如对构成新解的全部或部分元素进行置换、互换等，注意到产生新解的变换方法决定了当前新解的邻域结构，因而对冷却进度表的选取有一定的影响。
2. 计算与新解所对应的目标函数差。因为目标函数差仅由变换部分产生，所以目标函数差的计算最好按增量计算。事实表明，对大多数应用而言，这是计算目标函数差的最快方法。
3. 判断新解是否被接受，判断的依据是一个接受准则，最常用的接受准则是Metropolis准则：若 $\Delta t' < 0$ 则接受 S' 作为新的当前解 S ，否则以概率 $\exp(-\Delta t'/T)$ 接受 S' 作为新的当前解 S 。
4. 当新解被确定接受时，用新解代替当前解，这只需将当前解中对应于产生新解时的变换部分予以实现，同时修正目标函数值即可。此时，当前解实现了一次迭代。可在此基础上开始下一轮试验。而当新解被判定为舍弃时，则在原当前解的基础上继续下一轮试验。

模拟退火算法与初始值无关，算法求得解与初始解状态 S （是算法迭代的起点）无关；模拟退火算法具有渐近收敛性，已在理论上被证明是一种以概率1收敛于全局最优解的全局优化算法；模拟退火算法具有并行性。

停止准则

迭代过程的停止准则：温度 T 降至某最低值时，完成给定数量迭代中无法接受新解，停止迭代，接受当前寻找的最优解为最终解。

退火方案

在某个温度状态 T 下，当一定数量的迭代操作完成后，降低温度 T ，在新的温度状态下执行下一个批次的迭代操作。

伪代码

寻找能量 $E(s)$ 最低的状态 s

```
s := s0; e := E (s)           // 设定目前状态为s0, 其能量E (s0)
k := 0                        // 评估次数k
while k < kmax and e > emax    // 若还有时间 (评估次数k还不到kmax) 且结果还不够好 (能量e不够低) 则:
  sn := neighbour (s)          // 随机选取一邻近状态sn
  en := E (sn)                 // sn的能量为E (sn)
  if random() < P(e, en, temp(k/kmax)) then // 决定是否移至邻近状态sn
    s := sn; e := en           // 移至邻近状态sn
  k := k + 1                   // 评估完成, 次数k加一
return s                       // 回传状态s
```

参见

- 算法
- 旅行推销员问题
- 蚁群算法
- 遗传算法

外部链接

- 基于MATLAB实现的全局优化算法 (<https://web.archive.org/web/20090319230318/http://biomath.ugent.be/~brecht/downloads.html>): SIMPSA（SA和单纯的组合），洗牌复杂的演化（SCA）和粒子群优化（PSO）。

取自 “<https://zh.wikipedia.org/w/index.php?title=模拟退火&oldid=48086166>”

本页面最后修订于2018年1月31日 (星期三) 02:50。

本站的全部文字在知识共享 署名-相同方式共享 3.0协议之条款下提供，附加条款亦可能应用。（请参阅[使用条款](#)）Wikipedia®和维基百科标志是维基媒体基金会的注册商标；维基™是维基媒体基金会的商标。维基媒体基金会是按美国国内税收法501(c)(3)登记的非营利慈善机构。