第三章 模拟退火算法
simulated annealing

清华大学数学科学系
邢文训
wxing@tsinghua.edu.cn
Tel: 62787945
答疑：周四下午4：00-5：00

基本思想

- 思想来源于1953年Metropolis的相同概念。
- 1983年Kirkpatrick成功地应用在组合最优化问题。
- 是局部搜索算法的扩展，它不同于局部搜索之处是以一定的概率选择邻域中费用值大的状态。
- 从理论上来说，该算法被证明是一个全局最优算法。

主要内容

- 模拟退火算法及模型
- 马尔可夫链
- 时齐算法的收敛性
- 非时齐算法收敛性简介
- 实现的技术问题
- 应用实例——下料问题

3.1模拟退火算法及模型

应用问题

$$\min f(x)$$
$$s.t.\ g(x) \ge 0,$$
$$x \in D.$$

退火：金属物体在加热至一定的温度后，它的所有分子在状态空间*D*中自由运动。随着温度的下降，这些分子逐渐停留在不同的状态。在温度最低时，分子重新以一定的结构排列，分子停留在能量最低状态的可能性最大。

统计力学结论：在温度T，分子停留在状态*r*满足波兹曼(Boltzmann)概率分布

$$\Pr\{\overline{E} = E(r)\} = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E(r)}{k_B T}\right)$$

概率分布的特性

$$\Pr\{\overline{E} = E(r)\} = \frac{1}{Z(T)}\exp\left(-\frac{E(r)}{k_B T}\right) \qquad Z(T) = \sum_{s\in D}\exp\left\{-\frac{E(s)}{k_B T}\right\}$$

1) 当温度T相当高时，概率分布使得每个状态的概率基本相同，接近平均值1/ |D| ，|D|为状态空间D中状态的个数。

$$\Pr(\overline{E} = E_1) - \Pr(\overline{E} = E_2) = \frac{1}{Z(T)}\exp\left(-\frac{E_1}{k_B T}\right)\left[1-\exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}\right)\right]$$

当 $E_1 < E_2$ 时 $\Pr(\overline{E} = E_1) - \Pr(\overline{E} = E_2) > 0, \ \forall T > 0$

2) 在同一个温度，分子停留在能量小的状态的概率比停留在能量大的状态的概率要大。

$$\frac{d\Pr\{\bar{E}=E(r)\}}{dT}=\frac{\exp\left\{-\frac{E(r)}{k_BT}\right\}}{Z(T)k_BT^2}\left(E(r)-\frac{\sum_{s\in D}E(s)\exp\left\{-\frac{E(s)}{k_BT}\right\}}{Z(T)}\right)$$

$$\frac{d\Pr\{\bar{E}=E(r_{\min})\}}{dT}<0$$

3) *D*中最低能量的状态的概率分布关于温度T是单调下降的。

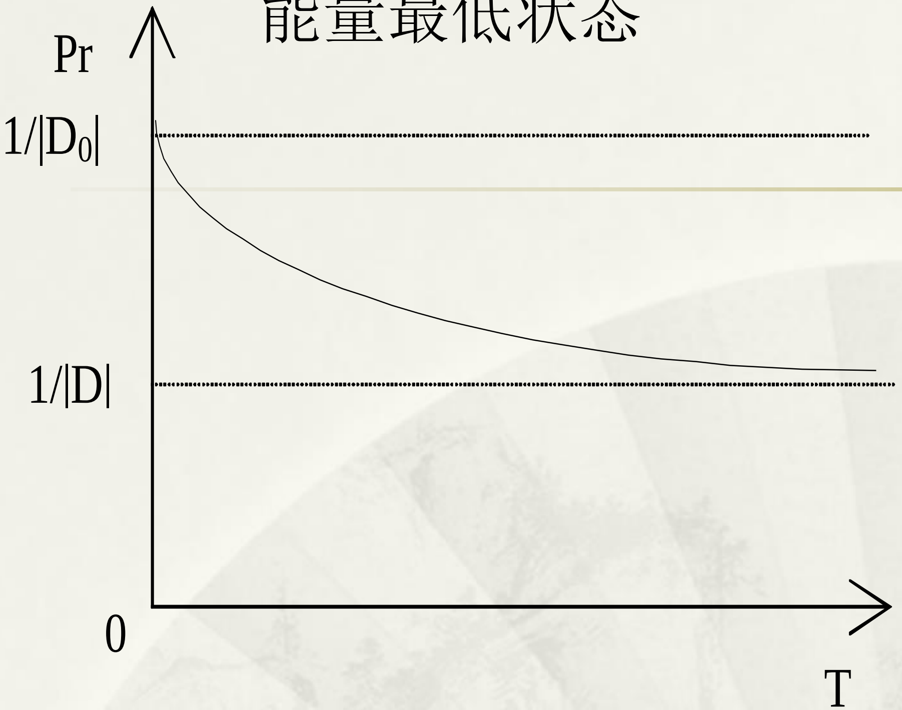
$$\Pr\{\bar{E}=E(r_{\min})\}=\frac{1}{Z(T)}\exp(-\frac{E(r_{\min})}{k_BT})=\frac{1}{|D_0|+R}$$

$$R=\sum_{s\in D:E(s)>E(r_{\min})}\exp(-\frac{E(s)-E(r_{\min})}{k_BT})\to 0,\ T\to 0$$

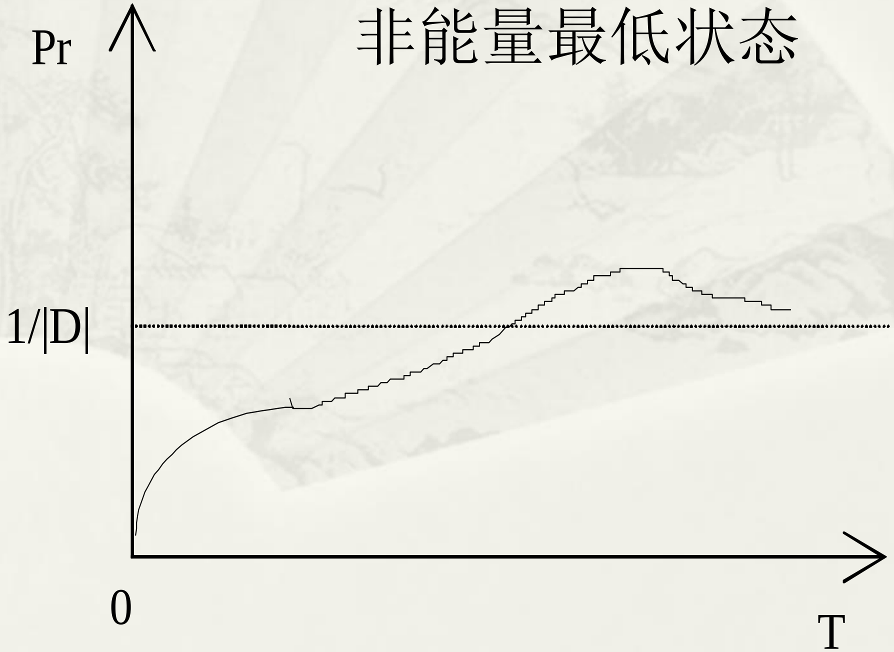
4）最低能量的状态集合记为D_0，当T趋向于0时，

$$\Pr\{\bar{E}=E(r_{\min})\}\to\frac{1}{|D_0|},\quad T\to 0$$

能量最低状态



非能量最低状态



观察四个能量点x=1,2,3,4

$$p(x)=\frac{1}{q(t)}\exp(-\frac{x}{t}) \qquad q(t)=\sum_{x=1}^{4}\exp(-\frac{x}{t})$$

在t=20,5,0.5三个温度点概率的变化。

	x=1	x=2	x=3	x=4
t=20	0.269	0.256	0.243	0.232
t=5	0.329	0.269	0.221	0.181
t=0.5	0.865	0.117	0.016	0.002

组合优化问题同金属物体退火类比

组合优化问题	金属物体
解	状态
最优解	能量最低的状态
费用函数	能量

模拟退火算法：

STEP1 任选一个初始解 i_0； $i := i_0$； k:=0； t_0 :=tmax（初始温度）；

STEP2 若在该温度达到内循环停止条件，则到 STEP3；否则，从邻域 N(i)中随机选一 j，计算 $\Delta f_{ij} = f(j) - f(i)$；若 $\Delta f_{ij} \le 0$，则 $i := j$，否则若 $\exp(-\Delta f_{ij}/t_k)$ >random(0,1)时，则 $i := j$；重复 STEP2；

STEP3 $t_{k+1} := d(t_k)$；k:=k+1；若满足停止条件，终止计算；否则，回到 STEP2。

模拟退火算法的数学模型描述

从*i*到*j*的产生概率(generation probability) ——
STEP2中从邻域N(*i*)中随机选一*j*

$$G_{ij}(t)=\begin{cases} 1/|N(i)|, & j\in N(i),\\ 0, & j\notin N(i).\end{cases}$$

接受概率(acceptance probability) ——STEP2中产生状态*j*后，接受*j*的概率

$$A_{ij}(t)=\begin{cases} 1, & f(i)\ge f(j),\\ \exp(-\Delta f_{ij}/t), & f(i)<f(j).\end{cases}$$

* 数学模型：在给定邻域结构后，模拟退火过程是从一个状态到另一个状态不断地随机游动，可以用马尔可夫(Markov)链描述这一过程。对给定的温度t，两个状态的转移概率(transition probability)定义为：

$$p_{ij}(t)=\begin{cases} G_{ij}(t)A_{ij}(t), & \forall j\neq i, \\ 1-\sum_{l=1,l\neq i}^{|D|} G_{il}(t)A_{il}(t), & j=i, \end{cases}$$

模拟退火算法主要可以分为两类。第一类为时齐算法，基本计算框架为：对每一个固定的t，计算对应的马尔可夫链，直至达到一个稳定状态，然后再让温度下降。第二类为非时齐算法，基本计算框架为：由一个马尔可夫链组成，要求在两个相邻的转移中，温度t是下降的。

马尔可夫链应满足的条件

- 可达性。无论起点如何，任何一个状态都可以到达。这样使我们有得到最优解的可能，
- 渐近不依赖起点。由于起点的选择有非常大的随机性，我们的目的是达到全局最优，因此，应渐近的不依赖起点。
- 分布稳定性。包含两个内容：其一是当温度不变时，其马尔可夫链的极限分布存在；其二是当温度渐近0时，其马尔可夫链也有极限分布。
- 收敛到最优解。当温度渐近0时，最优状态的极限分布和为1。

理论证明的主要思路

- 模拟退火算法归结为马氏链
- 寻求马氏链已有的结果

定理 非周期、不可约且时齐的马氏链是正常返的充分必要条件：

存在唯一平稳分布 $\{v_j \mid j=1,2,\cdots\}$，满足

$$v_j = \sum_{i=1}^{\infty} v_i p_{ij}^{(n)} = \sum_{i=1}^{\infty} v_i p_{ij}, \qquad v_j = \lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = \frac{1}{u_j} > 0,$$

其中， $u_j = \sum_{n=1}^{\infty} n f_{jj}^{(n)},$

$f_{jj}^{(n)}$ 为从状态j出发经过n步第一次回到j的概率。

- 什么是非周期、不可约和正常返？
- 在什么样的条件下，一步转移概率

$$p_{ij}(t) = \begin{cases} G_{ij}(t)A_{ij}(t), & \forall j \neq i, \\ 1 - \sum_{l=1, l\neq i}^{|D|} G_{il}(t)A_{il}(t), & j = i, \end{cases}$$

满足是非周期、不可约和正返的条件？

温度趋于0时，在什么样的条件下，可以达到全局最优？

非时齐算法又有什么样的结果？

全概公式和条件概率公式

- 设$\Omega=A_1\cup A_2\cup\ldots\cup A_n$且$A_i\cap A_j=\varnothing$，则
- $p(A|B)=p(AB)/p(B)$

- $P(B)=p(B|A_1)p(A_1)+p(B|A_2)p(A_2)+\ldots+p(B|A_n)p(A_n)$

3.2.马尔可夫链

随机变量序列 $\{X(k)\}_{k=0,1,2,\cdots}$

$X(k)=i$ 称在时刻 k 处于状态 i， $i\in D$ 。

D：状态空间。当D中的状态数有限时，有限状态空间。

马尔可夫链(简称马氏链)具有记忆遗忘特性：

$$P\{X(n)=j\mid X(1)=i_1, X(2)=i_2,\cdots,X(n-2)=i_{n-2},X(n-1)=i\}$$
$$=P(X(n)=j\mid X(n-1)=i),\qquad i_1,i_2,\cdots,i_{n-2},i,j\in D$$

简记 $p_{ij}(n-1)=P(X(n)=j\mid X(n-1)=i),$

一步转移概率矩阵 $P(n-1)=\left(p_{ij}(n-1)\right)_{|D|\times|D|}$

时齐(homogeneous)马氏链

$$p_{ij}(n-1)=p_{ij}(n),\quad \forall n$$

例：模拟退火对应的马氏链为时齐的

$$p_{ij}(t)=\begin{cases}G_{ij}(t)A_{ij}(t), & \forall j\neq i,\\ 1-\sum\limits_{l=1,l\neq i}^{|D|}G_{il}(t)A_{il}(t), & j=i,\end{cases}$$

$$G_{ij}(t)=\begin{cases}1/|N(i)|, & j\in N(i),\\ 0, & j\notin N(i).\end{cases}\qquad A_{ij}(t)=\begin{cases}1, & f(i)\geq f(j),\\ \exp(-\Delta f_{ij}/t), & f(i)<f(j).\end{cases}$$

n步转移概率 $$p_{ij}^{(n)}=P(X(n)=j\mid X(0)=i),$$

若存在n，使得 $p_{ij}^{(n)} > 0$，则称状态 i 可达状态 j，记成$i \to j$。若状态 i 和状态 j 满足$i \to j$ 且 $j \to i$，则称状态 i 和状态相通，记成$i \leftrightarrow j$。

定理 若$i \to j$， $j \to k$，则$i \to k$。

证明：由$i \to j$，则存在 n，使得 $p_{ij}^{(n)} > 0$。由 $j \to k$，则存在 m，使得 $p_{jk}^{(m)} > 0$。

$$p_{ik}^{(m+n)} = P(X(n+m) = k \mid X(0) = i)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} P(X(m+n) = k, X(n) = l \mid X(0) = i)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} P(X(m+n) = k \mid X(n) = l, X(0) = i) P(X(n) = l \mid X(0) = i)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} P(X(m) = k \mid X(0) = l) P(X(n) = l \mid X(0) = i)$$

$$\geq p_{ij}^{(n)} p_{jk}^{(m)} > 0$$

定义：从i到达j首达时刻的随机变量

$$T_{ij}=\min\{n\mid X(0)=i, X(n)=j, n\geq 1\},$$

它的概率为

$$\begin{aligned} f_{ij}^{(n)} &= P(T_{ij}=n\mid X(0)=i) \\ &= P(X(n)=j, X(m)\neq j, m=1,2,\cdots,n-1\mid X(0)=i)。\end{aligned}$$

迟早到达概率

$$f_{ij}=\sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)}$$

定理 $f_{ij}>0$ 的充分必要条件是 $i\to j$。

“充分性”

$$p_{ij}^{(n)}=P\{X(n)=j\mid X(0)=i\}=P\{T_{ij}\le n,X(n)=j\mid X(0)=i\}$$

$$=\sum_{l=1}^{n}P\{T_{ij}=l,X(n)=j\mid X(0)=i\}$$

$$=\sum_{l=1}^{n}P\{T_{ij}=l\mid X(0)=i\}P\{X(n)=j\mid T_{ij}=l,X(0)=i\}$$

$$=\sum_{l=1}^{n}P\{T_{ij}=l\mid X(0)=i\}P\{X(n)=j\mid X(l)=j,X(l-1)\neq j,\cdots,X(1)\neq j,X(0)=i\}$$

$$=\sum_{l=1}^{n}P\{T_{ij}=l\mid X(0)=i\}P\{X(n)=j\mid X(l)=j\}$$

$$=\sum_{l=1}^{n}f_{ij}^{(l)}p_{jj}^{(n-l)},$$

当 $p_{ij}^{(n)}>0$ 时，至少有一个 l 使得 $f_{ij}^{(l)}>0$，由此，得 $f_{ij}>0$。

$$T_{ij}=\min\{n\mid X(0)=i,X(n)=j,n\ge 1\},$$

必要性　若 $f_{ij}>0$，则存在 n，使得 $f_{ij}^{(n)}>0$，得到

$$p_{ij}^{(n)} \geq f_{ij}^{(n)} p_{jj}^{(0)} = f_{ij}^{(n)} > 0。$$

当 $f_{ii}=1$时，状态 i 称为常返的，当 $f_{ii}<1$时称为非常返的。

定理 状态 j 是常返的，则以概率 1，系统无穷次返回状态 j。状态 j 是非常返的，则以概率 1，系统只有有限次返回状态 j。

证明：记 $A_{ij}(m)$ 表示自状态 i 出发，系统通过 j 状态至少 m 次的概率。

记 $Y_{ij}(m)$ 为从状态 i 出发通过 j 状态至少 m 次的随机变量。

$$A_{ij}(m+1)=\sum_{l=1}^{\infty} P(T_{ij}=l, Y_{jj}(m) \mid X(0)=i)=\sum_{l=1}^{\infty} P(Y_{jj}(m) \mid T_{ij}=l) P(T_{ij}=l \mid X(0)=i)$$

$$=\sum_{l=1}^{\infty} A_{jj}(m) f_{ij}^{(l)} = A_{jj}(m) f_{ij}, \qquad A_{jj}(m)=A_{jj}(0)(f_{jj})^m = f_{jj}^m$$

$$A_{ij}(m+1)=f_{ij}(f_{jj})^m \qquad A_{jj}(m+1) \to \begin{cases} 1, & f_{jj}=1, \\ 0, & f_{jj}<1, \end{cases} \quad (m \to \infty)。$$

定义 $$u_i = \sum_{n=1}^{\infty} n f_{ii}^{(n)}$$

当 $u_i < \infty$ 时为正返，当 $u_i = \infty$ 时为零返。

如果 $p_{ii}^{(n)}$ 除 $n=t,2t,3t,\ldots$ 外均为 0，且 t(t>1 正整数)是满足条件的最大整数，称状态 i 具有周期(periodic)t。

不存在周期状态的Markov链称为非周期的。非周期的正常返状态称为遍历状态。

一个集合 C 是闭集的定义为：$\forall i \in C, j \notin C$，有 $p_{ij}^{(n)} = 0$。

对任意n成立。等价$p_{ij}=0\ \forall i\in C, j\notin C$, 除整个状态空间外，没有别的闭集的马氏链称为不可约的马氏链

$$P=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}, P^2=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}^2=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}, P^3=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}, P^4=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$P=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\\frac{1}{3}&\frac{1}{3}&\frac{1}{3}\end{pmatrix}$$

$$i=1, t=2$$

$$i=2, t=2$$

$$i=3, t=1$$

常返、非常返、正返、零返概念理解

当 $f_{ii}=\sum_{n=1}^{\infty} f_{ii}^{(n)}=1$ 时，状态 i 称为常返的，当 $f_{ii}<1$ 时称为非常返的。

当 $u_i=\sum_{n=1}^{\infty} n f_{ii}^{(n)}<\infty$ 时为正返，当 $u_i=\infty$ 时为零返。

* 常返与正返为两个不同的评价指标：经常回来和平均步数。
* 常返和非常返：是能否经常回来！
* 正返和零返：回到状态*i*的平均步数。
* 非常返可以正返！（宅客）
* 常返和非常返可以零返！（不孝顺的出国客）

简单例子

$$P=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

* 状态空间C={1,2,3}.
* C可约！C1={1，2}为一个闭集，C为闭集。
* 状态3：非常返f_{33}=1/3<1，正返u_i=1/3. 非周期。
* 状态1：常返$f_{11}=f^{(2)}_{11}$=1，正返u_i=2.
* 状态1，2：周期2

- 状态3
  - $f_{33} = f_{33}^{(1)} + f_{33}^{(2)} + f_{33}^{(3)} + \ldots = 1/3$
    - $f_{33}^{(1)} = p(X(1)=3 | X(0)=3) = 1/3$
    - $f_{33}^{(2)} = p(X(2)=3, X(1) \neq 3 | X(0)=3) = 0$
    - $f_{33}^{(3)} = p(X(3)=3, X(2) \neq 3, X(1) \neq 3 | X(0)=3) = 0$
  - $u_3 = 1 * f_{33}^{(1)} + 2 * f_{33}^{(2)} + 3 * f_{33}^{(3)} + \ldots = 1/3$
- 状态1：$f_{11} = f_{11}^{(1)} + f_{11}^{(2)} + f_{11}^{(3)} + \ldots = 1$
    - $f_{11}^{(1)} = p(X(1)=1 | X(0)=1) = 0$
    - $f_{11}^{(2)} = p(X(2)=1, X(1) \neq 1 | X(0)=1) = 1$
    - $f_{11}^{(3)} = p(X(3)=1, X(2) \neq 1, X(1) \neq 1 | X(0)=1) = 0$
  - $u_1 = 1 * f_{11}^{(1)} + 2 * f_{11}^{(2)} + 3 * f_{11}^{(3)} + \ldots = 2$
- 状态2同状态1.

定理 不可约、有限状态且时齐的马氏链是正常返的。

平稳分布(stationary distribution)：

概率分布$\{v_j \mid j=1,2,\cdots\}$，即$v_j \ge 0,\ j=1,2,\cdots,\ \sum_{j=1}^{\infty} v_j = 1$，如果对马氏链的一步转移

概率阵$P=(p_{ij})$满足$v_j = \sum_{i=1}^{\infty} v_i p_{ij}$，则称$\{v_j \mid j=1,2,\cdots\}$为马氏链的平稳分布。

定理 非周期、不可约且时齐的马氏链是正常返的充分必要条件：存在唯一平稳分布

$\{v_j \mid j=1,2,\cdots\}$，满足

$$v_j = \sum_{i=1}^{\infty} v_i p_{ij}^{(n)} = \sum_{i=1}^{\infty} v_i p_{ij}, \qquad v_j = \lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = \frac{1}{u_j} > 0,$$

其中，

$$u_j = \sum_{n=1}^{\infty} n f_{jj}^{(n)} > 0$$

时齐马氏链的一些条件

定理 有限状态的时齐马氏链是不可约的一个充分条件为：

任给两个状态 i 和 j，存在 n，使得 $p_{ij}^{(n)} > 0$。

证明：由条件，状态空间的任何一个真子集不形成闭集。反证法。

若形成闭集，则存在 C 和 $j \notin C$，使得 $\forall i \in C, j \notin C$，$i$ 与 j 是

不可达的，即 $p_{ij}^{(n)} = 0$，对任意 n 成立。这与条件矛盾。因此，

整个状态空间为一个闭集，是不可约的。

定理 若 i 和 j 相通，则它们或同为非周期的或同为周期的。

证明：由 $i \leftrightarrow j$，存在 $n \geq 1$ 和 $l \geq 1$，使得 $p_{ij}^{(n)} = a > 0$ 和 $p_{ji}^{(l)} = b > 0$。可得：

$$p_{ii}^{(l+m+n)} \geq p_{ij}^{(n)} p_{jj}^{(m)} p_{ji}^{(l)} = abp_{jj}^{(m)},$$

$$p_{jj}^{(l+m+n)} \geq p_{ji}^{(l)} p_{ii}^{(m)} p_{ij}^{(n)} = abp_{ii}^{(m)}。$$

再由周期的定义，若 i 的周期为 t，存在 m 是 t 的倍数，使得 $p_{ii}^{(m)} > 0$。得到

$$p_{ii}^{(l+n)} \geq p_{ij}^{(n)} p_{jj}^{(0)} p_{ji}^{(l)} = ab > 0,$$

则 $l+n$ 是 t 的倍数，得 $p_{jj}^{(l+m+n)} > 0$。当 m 不是 t 的倍数时，由 $l+n$ 是 t 的倍数，得 $l+m+t$ 不是 t 的倍数，得 $p_{jj}^{(m)} = 0$。总结上面的讨论，$l+n$ 是 t 的倍数，m 不是 t 的倍数时得 $p_{jj}^{(m)} = 0$，故状态 j 是周期的，其周期不小于 t。同法，当 j 是周期的，可知 i 是周期的。于是，它们或同为周期的或同不是周期的。

时齐算法应该具有的性质

第一，在每一个给定的温度 t，给出一步转移概率 $p_{ij}(t)$ 的一些限定条件，

得到平稳分布概率

$$v_j(t)=\lim_{n\to\infty}p_{ij}^{(n)}(t)=\lim_{n\to\infty}P(X(n,t)=j\mid X(0,t)=i)=\frac{1}{u_j}>0\,,$$

其中，$X(n,t)$表示在温度 t 时，马氏链第 n 步运动的随机变量。

第二，给出平稳分布应该满足的条件，使得：当温度渐近达到零度时，

平稳分布的极限存在，即要求 $\pi_j=\lim_{t\to 0}v_j(t)$。

第三，进一步要求平稳分布的极限具有全局最优性条件

$$\pi_j=\begin{cases}\dfrac{1}{|D_{OPT}|}, & j\in D_{OPT}\,,\\ 0, & j\in D\setminus D_{OPT}\,,\end{cases}$$

其中 D_{OPT} 为最优状态集合。

$$\lim_{t\to 0}\{\lim_{n\to\infty}P(X(n,t)\in D_{OPT})\}=1$$

定理 非周期、不可约且时齐的马氏链是正常返的充分必要条件：存在唯一平稳分布 $\{v_j \mid j=1,2,\cdots\}$，满足

$$v_j = \sum_{i=1}^{\infty} v_i p_{ij}^{(n)} = \sum_{i=1}^{\infty} v_i p_{ij}\ , \qquad v_j = \lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = \frac{1}{u_j} > 0\,,$$

其中，

$$u_j = \sum_{n=1}^{\infty} n f_{jj}^{(n)}$$

定理 有限状态的时齐马氏链是不可约的一个充分条件为：

任给两个状态 i 和 j，存在 n，使得 $p_{ij}^{(n)} > 0$。

定理 不可约、有限状态且时齐的马氏链是正常返的。

定理 若 i 和 j 相通，则它们或同为非周期的或同为周期的。

3.3 时齐算法的收敛性

定理 时齐算法的马氏链是不可约一个充分条件为：

$\forall i, j, t,$ 有 $A_{ij}(t) > 0$，

且存在 $q \geq 1, l_0, l_1, \cdots, l_q \in D, l_0 = i, l_q = j$，使得

$G_{l_k l_{k+1}}(t) > 0, k = 0,1,\cdots, q-1$。

证明：当 t 是给定时，对应的是有限的时齐马氏链，又由

$$
\begin{aligned}
p_{ij}^{(q)} &\geq p_{l_0 l_1} p_{l_1 l_2} \cdots p_{l_{q-1} l_q} \\
&= A_{l_0 l_1}(t) G_{l_0 l_1}(t) A_{l_1 l_2}(t) G_{l_1 l_2}(t) \cdots A_{l_{q-1} l_q}(t) G_{l_{q-1} l_q}(t) \\
&> 0,
\end{aligned}
$$

所以，i 可达 j。同理可证 j 可达 i。证明不可约结论成立。

定理 对给定的 $t>0$，若存在 $i \neq j \in D$，使得

$0 < A_{ij}(t) < 1, G_{ij}(t) > 0$，则不可约的马氏链是非周期的。

证明：

$$p_{ii}(t) = 1 - \sum_{l=1, l\neq i}^{|D|} A_{il}(t) G_{il}(t)$$

$$= 1 - \sum_{l=1, l\neq i, j}^{|D|} A_{il}(t) G_{il}(t) - A_{ij}(t) G_{ij}(t)$$

$$> 1 - \sum_{l=1, l\neq i, j}^{|D|} G_{il}(t) - G_{ij}(t)$$

$$= 1 - \sum_{l=1, l\neq i}^{|D|} G_{il}(t)$$

$$= G_{ii}(t) \geq 0,$$

此时，$p_{ii}(t) > 0$，于是，对任意状态 i 是非周期的。结论成立。

定理 若 $A(t)$和 $G(t)$满足：

(1) G(t)与 t 无关；

(2) $\forall i, j \in D$，都有$G_{ij} = G_{ji}$ 且存在$q \geq 1, l_0, l_1, \cdots, l_q \in D, l_0 = i, l_q = j$，使得

$$G_{l_k l_{k+1}}(t) > 0, k = 0,1,\cdots,q-1;$$

(3) $\forall i, j, k \in D, f(i) \leq f(j) \leq f(k)$，都有 $A_{ik}(t) = A_{ij}(t)A_{jk}(t)$；

(4) $\forall i, j \in D, f(i) \geq f(j)$，都有 $A_{ij}(t) = 1$；

(5) $\forall i, j \in D, t > 0, f(i) < f(j)$，都有 $0 < A_{ij}(t) < 1$；

则模拟退火的时齐算法对应的马氏链有平稳分布$v = (v_1, v_2, \cdots, v_{|D|})$，满足

$$v_i(t) = \frac{A_{i_0 i}(t)}{\sum_{j \in D} A_{i_0 j}(t)}, \forall i \in D,$$

其中，$i_0 \in D_{OPT}$。

证明：由(4)和(5)得到$\forall i, j, t$ 有 $A_{ij}(t)>0$。再由(1)、(2)和知时齐算法对应的马氏链是不可约的。当目标函数的所有值相同时，每一个解为最优解。否则，目标函数值不为一个值，选一个最优解和一个非最优解，由(2)推导出有限时齐的马氏链是非周期的。因此，平稳分布存在且唯一。现只需验证概率分布满足平稳分布的定义。

$$\sum_j v_j(t)p_{ji}(t)$$

$$=\sum_{j\neq i, f(j)\leq f(i)}\frac{1}{K}A_{i_0 j}(t)G_{ji}A_{ji}(t)+\sum_{j\neq i, f(j)>f(i)}\frac{1}{K}A_{i_0 j}(t)G_{ji}A_{ji}(t)+v_i(t)p_{ii}(t)$$

$$=\sum_{j\neq i, f(j)\leq f(i)}\frac{1}{K}A_{i_0 i}(t)G_{ij}+\sum_{j\neq i, f(j)>f(i)}\frac{1}{K}A_{i_0 j}(t)G_{ij}+v_i(t)p_{ii}(t)$$

$$=v_i(t)\sum_{j\neq i, f(j)\leq f(i)}G_{ij}+\sum_{j\neq i, f(j)>f(i)}v_j(t)G_{ij}+v_i(t)p_{ii}(t),$$

$$= v_i(t) \sum_{j\neq i, f(j)\leq f(i)} G_{ij} + \sum_{j\neq i, f(j)>f(i)} v_j(t) G_{ij} + v_i(t) p_{ii}(t),$$

$$v_i(t) p_{ii}(t) = v_i(t)(1 - \sum_{j\neq i, f(j)\leq f(i)} A_{ij}(t) G_{ij} - \sum_{j\neq i, f(j)>f(i)} A_{ij}(t) G_{ij})$$

$$= v_i(t) - v_i(t) \sum_{j\neq i, f(j)\leq f(i)} G_{ij} - \sum_{j\neq i, f(j)>f(i)} \frac{1}{K} A_{i_0 i}(t) A_{ij}(t) G_{ij}$$

$$= v_i(t) - v_i(t) \sum_{j\neq i, f(j)\leq f(i)} G_{ij} - \sum_{j\neq i, f(j)>f(i)} v_j(t) G_{ij},$$

$$v_i(t) = \sum_j v_j(t) p_{ji}(t)$$

$$p_{ij}(t)=\begin{cases}G_{ij}(t)A_{ij}(t), & \forall j\neq i,\\ 1-\sum_{l=1,l\neq i}^{|D|}G_{il}(t)A_{il}(t), & j=i,\end{cases}$$

$$A_{ij}(t)=\begin{cases}1, & f(i)\geq f(j),\\ \exp(-\Delta f_{ij}/t), & f(i)<f(j).\end{cases}$$

$A_{ij}(t)$满足(3)(4)(5)

$$G_{ij}(t)=\begin{cases}\dfrac{1}{L}, & \forall j\in N(i),\\ 0, & j\notin N(i),\end{cases}$$

满足(1)和(2)

$$G_{ij}(t)=\begin{cases}1/|N(i)|, & j\in N(i),\\ 0, & j\notin N(i).\end{cases}$$

不一定满足(2)

定理 在满足上定理五条件的基础上，若 $\forall i,j\in D, f(i)<f(j)\Rightarrow \lim_{t\to 0} A_{ij}(t)=0$，则有

$$\lim_{t\to 0} v_i(t)=\begin{cases}\dfrac{1}{|D_{OPT}|}, & i\in D_{OPT},\\ 0, & i\in D\setminus D_{OPT}。\end{cases}$$

定理 若 $A_{ij}(t), G_{ij}(t)$ 满足除(2)以外的四个条件，且任何两个状态

i 和 j 或相互为邻居或不为，且 $G_{ij}(t)$ 满足

$$\forall i\in D, G_{ij}=\begin{cases}\dfrac{1}{|N(i)|}, & j\in N(i),\\ 0, & j\notin N(i),\end{cases}$$ 状态空间 D 对邻域连通。

则平稳分布是 $$v_i(t)=\frac{|N(i)|A_{i_0 i}(t)}{\sum_{j\in D}|N(j)|A_{i_0 j}(t)}, \forall i\in D。$$

例 四个状态 1，2，3，4 的邻居分别为

N(1)={1,2}, N(2)={1,2,3,4}, N(3)={2,3,4}, N(4)={2,3,4}。

很容易验证，它们满足或互为邻居或互不为邻居的假设。需要注意：不满足 $G_{ij}=G_{ji}$，如 $G_{12}=\frac{1}{2}$ 和 $G_{21}=\frac{1}{4}$。

其他结果

Aarts E H L, van Laarhoven P J M. Simulated Annealing: Theory and Application. Dordrecht: D Reidel Publishing Company, 1987

发生概率为：$\exists |D|\times|D|$ 矩阵 Q 满足 平稳分布

$$\forall i, j\in D: Q_{ij}=Q_{ji};$$

$$\forall i\in D, j\in N(i): G_{ij}=\frac{Q_{ij}}{\sum_{l\in D}Q_{il}} \qquad v_i(t)=\frac{(\sum_l Q_{il})A_{i_0 i}(t)}{\sum_{j\in D}(\sum_l Q_{jl})A_{i_0 j}(t)}, \forall i\in D。$$

Ackley et al (1985)的接受概率为

$$A_{ij}(t) = \left(1 + \exp\left(-\frac{f(j) - f(i)}{t}\right)\right)^{-1}$$

平稳分布

$$v_i(t) = \frac{\exp\left(-\frac{f(i) - f_{OPT}}{t}\right)}{\sum_{j \in D} \exp\left(-\frac{f(j) - f_{OPT}}{t}\right)}, \forall i \in D。$$

以模拟退火算法谈学习方法

- 博：广泛了解数学知识，哪怕一知半解。
- 大：有大的野心，大的目标，做大的工作。
- 精：“精”的数学基础，“精”的个人学习能力，“精”准理解。
- 深：结合问题给出“深入”的结果。“深入”探讨。

3.4 非时齐算法收敛性简介

- 一步转移概率的形式为：

$$p_{ij}(k-1,k) = P(X(k) = j \mid X(k-1) = i))$$

$$= \begin{cases} G_{ij}(t_k)A_{ij}(t_k), & \forall j \neq i, \\ 1 - \sum_{l=1, l\neq i}^{|D|} G_{il}(t_k)A_{il}(t_k), & j = i, \end{cases}$$

$$t_{k-1} \geq t_k, \quad \lim_{k\to\infty} t_k = 0$$

一步转移概率矩阵为

$$P(k-1,k) = \left(p_{ij}(k-1,k)\right)_{|D|\times|D|}$$

非时齐算法应具有的条件

第一，因为非时齐算法的每步迭代温度在变化，因此需要给出一步转移概率 $p_{ij}(t)$ 的一些限定条件，即需要给出 $A(t_k)$ 和 $G(t_k)$ 的限定条件，使得非时齐马氏链能收敛到一个分布。

第二，温度渐近达到零度，即 $\lim_{k\to\infty} t_k = 0$。

给出保证达到全局最优的温度变化关系。

第三，总体要求 $\lim_{k\to\infty} P\{X(k,t_k)\in D_{OPT}\}=1$。

定义 若非时齐马氏链满足下列条件，则称为弱遍历(weakly ergodic)：

$$\forall i, j, l \in D,\ m \geq 1,$$

$$\lim_{k\to\infty}(p_{il}(m,k) - p_{jl}(m,k)) = 0。$$

定义 若存在向量 $v = (v_1, v_2, \cdots, v_{|D|})$，满足 $\sum_{i=1}^{|D|} v_i = 1,\quad \forall i, v_i \geq 0$，

且

$$\forall i, j \in D,\ m \geq 1,$$

$$\lim_{k\to\infty} p_{ij}(m,k) = v_j,$$

则非时齐马氏链称为强遍历(strongly ergodic)。

定理 非时齐的马氏链是强遍历的充分必要条件是马氏链是弱遍历且存在 $V(k)=(v_1(k),v_2(k),\cdots,v_{|D|}(k))$ 使得，

$V(k)P(k-1,k)=V(k)$，$\sum_{i=1}^{|D|}|v_i(k)|=1$，$\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{i=1}^{|D|}|v_i(k)-v_i(k+1)|<\infty$。

定理 在温度 t 时，一步转移概率中的 $A_{ij}(t)=\begin{cases}1, & f(i)\geq f(j),\\ \exp(-\dfrac{\Delta f_{ij}}{t}), & f(i)<f(j),\end{cases}$

$\forall i\in D, G_{ij}=\begin{cases}\dfrac{1}{|D|}, & j\in N(i),\\ 0, & j\notin N(i),\end{cases}$ 当存在 $k_0\geq 2$，使得 $\forall k\geq k_0, t_k\geq \dfrac{|D|\Delta f_{\max}}{\log k}$，其中，$\Delta f_{\max}=\max\{f(i)\,|\,i\in D\}-\min\{f(i)\,|\,i\in D\}$，则马氏链 $\{X(t_k)\}_{k=1,2,\cdots}$ 为强遍历。

温度下降的最快速度为 $$t_k=\frac{|D|\Delta f_{\max}}{\log k}$$

模拟退火算法：

STEP1 任选一个初始解 i_0； $i := i_0$； k:=0； t_0 :=tmax（初始温度）；

STEP2 若在该温度达到内循环停止条件，则到 STEP3；否则，从邻域 N(i)中随机选一 j，计算 $\Delta f_{ij} = f(j) - f(i)$；若 $\Delta f_{ij} \le 0$，则 $i := j$，否则若 exp($-\Delta f_{ij}/t_k$)>random(0,1)时，则 $i := j$；重复 STEP2；

STEP3 $t_{k+1} := d(t_k)$；k:=k+1；若满足停止条件，终止计算；否则，回到 STEP2。

3.5 时齐算法实现的技术问题

- 解的形式和邻域结构
- 温度参数的控制 (cooling scheduling)
  - 初始温度
  - 温度下降方法
  - 同一温度迭代次数
  - 终止温度与规则

解的形式和邻域结构

求 $f(x)=x^2$ 在区域 $0 \le x \le 127$ 最大值的实例，其中 x 为整数，采用 0-1 编码表示解，可以表示为

$$S=\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & 7 \\ * & * & \ldots & * \end{pmatrix},$$

其中，解 S 的上面一行表示 7 个位置，下面的*是 0-1 码，对应 x 的二进制码，解的一个邻域自然可以构造成

$$N(S)=\{S' \mid S\text{是一个}0-1\text{码且} \mid S-S' \mid = \sum_{i=1}^{7} \mid s_i - s_i' \mid \le k, k \ge 1\text{整数}\}。$$

TSP问题，可采用*n*个城市的一个排序表示问题的一个解。很直观可通过城市间不同位置交换构造邻域。

不可行解的处理?

* 共同特征
  * 每一个邻域所含的状态个数相同。
  * 解空间中的任何两个状态可达。
  * 由时齐算法的理论，只要接受概率满足一定的条件，一定以概率1收敛到全局最优解。
* 同样解的表达形式和邻域结构
  * 第一种表示形式应用到$0 \le x \le 100$时或背包问题时，可能出现不可行解。
  * 第二种表示形式应用到车间作业问题时，可能会出现死锁现象。
* 无法保证每个邻域中邻居都是可行解。
* 怎么办？

常用的两种方法

* 第一种是罚值法。
  * 将不可行解视为可行解，目标值为一个充分大的数（罚值）。
  * 使得问题转化为上面讨论的两个问题。
  * 原有的方法可以继续使用。
  * 罚值法处理不可行解时，一个主要缺陷是扩大了搜索区域，从而使计算时间增加。
* 第二种方法是研究解和邻域结构，从理论上保证模拟退火算法以概率1收敛到全局最优解。
  * 要求对问题有相当深入的了解。
  * 其难度比较大。

解表示形式的精简

- 以TSP的两种解表示形式讨论：图论的0-1表示和城市全排列的差异。

方法 1：TSP 解表示方法：若商人走(i,j)弧则 $x_{ij}=1$，否则

$x_{ij}=0$。定义域中一共有 $2^{n(n-1)}$ 个解。

方法 2：TSP 解表示方法：n 个城市的全排列 $(i_1,i_2,\ldots,i_n)$ 为

(1,2,…,n)的一个全排列。

假设每两个节点有弧相连，固定一个城市为始终点，任意一个解用城市的排列表示，则可行解数为$(n\text{-}1)!$。若采用对不可行解采用罚值法，则将搜索

$2^{n(n-1)}-(n-1)!$个不可行解。搜索空间扩大了$\dfrac{2^{n(n-1)}}{(n-1)!}$倍。

当 n=5 时，扩大倍数$\dfrac{2^{n(n-1)}}{(n-1)!}\approx 4.37\times 10^{4}$，当 n=10 时，扩大倍数

$\dfrac{2^{n(n-1)}}{(n-1)!}\approx 3.41\times 10^{21}$。

解形式选取注意事项

- 邻域的构造与计算时间相关
- 理论分析同实际应用的矛盾
- 对问题进行较深入的理论研究，构造比较精巧的邻域结构，节省计算时间
- 在大量的实际应用中，人们关注的是应用的效果，而不去研究问题的结构和收敛性就直接将算法套用于实际问题。
- 连续优化问题在给定解的精度后可以离散化。

时齐模拟退火算法设计基本原则

* 初始温度充分高
* 同一个温度达到每一个状态分布的稳定
* 温度下降应该足够慢
* 停止时温度足够低

温度参数的控制——**起始温度的选取**

* **起始温度t_0应保证平稳分布中每一状态的概率相等。**

$$\exp\left(-\frac{\Delta f_{ij}}{t_0}\right) \approx 1$$

$$t_0 = K\Delta_0,\ K\text{充分大的数}$$

$$\Delta_0 = \max(f(i) \mid i \in D\} - \min\{ f(i) \mid i \in D\}$$

* 数值计算估计方法

初始温度数值计算算法

STEP1 给定一个常量 T；初始温度t_0；χ_0；R_0=0；k:=1;

STEP2 在这个温度迭代 L 步（L 为一个给定的常数），分别记录模拟退火算法中接受和被拒绝的状态的个数，计算接受的状态数同迭代步数 L 的比率 R_k;

STEP3 当$|R_k—\chi_0|<\varepsilon$时，停止计算；否则，当 R_{k-1} 和 $R_k<\chi_0$时，则 k:=k+1，$t_0:=t_0+T$，返回 STEP2；当 R_{k-1} 和 $R_k\geq\chi_0$时，则 k:=k+1，$t_0:=t_0-T$，返回 STEP2；当 $R_{k-1}\geq\chi_0$ 且 $R_k\leq\chi_0$时，则 k:=k+1，$t_0:=t_0+T/2$，T:=T/2，返回 STEP2；当 $R_{k-1}\leq\chi_0$ 且 $R_k\geq\chi_0$时，则 k:=k+1，$t_0:=t_0—T/2$，返回 STEP2；

统计推断估计的方法

假设$\{f(i)\,|\,i\in D\}$是一个大样本空间，且服从正态分布，即$\{X=f(i)\,|\,i\in D\}$的密度函数为

$$g(x)=\exp(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2})\text{。}$$

从状态空间 D 中随机选样本容量为n的样本$\{X_l\,|\,l=1,2,\cdots,n\}$，样本均值统计量为

$$\overline{f(X,t)}=\frac{1}{n}\sum_{l=1}^{n}f(X_l),$$

样本方差统计量为 $$f^2(X,t)=\frac{1}{n-1}\sum_{l=1}^{n}(f(X_l)-\overline{f(X,t)})^2\text{。}$$

以 3σ原则，目标值以 99.97%落入(μ-3σ, μ+3σ)，简单的区间近似为

$$(\overline{f(X,t)}-3\sqrt{f^2(X,t)},\ \overline{f(X,t)}+3\sqrt{f^2(X,t)})\text{。}$$

估计值为： $$\Delta_0=6\sqrt{f^2(X,t)}$$

时齐算法的温度下降方法

(1) $t_{k+1} = \alpha t_k, k \geq 0$，其中 0<α<1。α越接近 1 温度下降的越慢。

(2) $t_k = \dfrac{K-k}{K} t_0$, 其中 t_0 为起始温度, K 为算法温度下降的总次数。

(3)以理论中的平稳分布 $\{v_i(t), i \in D\}$ 为依据，通过推导而得到。

$$\left\langle f(t) \right\rangle = \sum_{i \in D} f(i) v_i(t) \qquad \overline{f(t)} = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} f(X_l)$$

$$\left\langle f^2(t) \right\rangle = \sum_{i \in D} f^2(i) v_i(t) \qquad \overline{f^2(t)} = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} f^2(X_l)$$

定理 $A(t)$和 $G(t)$如模拟退火算法中定义，则

(1) $$\frac{d\langle f(t)\rangle}{dt}=\frac{\langle f^2(t)\rangle-\langle f(t)\rangle^2}{t^2},$$

(2) $\langle f(t)\rangle$为变量 t 的单调升函数，且$\langle f(t)\rangle \to f(i_{OPT}), t\to 0$。

(3)当$i\neq i_{OPT}$时，平稳分布$v_i(t)$在 t=0 的一个邻域内为 t 的单调升函数。

当$i=i_{OPT}$时，平稳分布$v_i(t)$为 t 的单调减函数。

在相邻温度，其平稳分布的变化相对稳定。

$$\forall i\in D,\ \frac{1}{1+\delta}<\frac{v_i(t_k)}{v_i(t_{k+1})}<1+\delta, k=0,1,\cdots$$

$$\exp\left(-\frac{f(i)-f(i_{OPT})}{t_k}\right)<(1+\delta)\exp\left(-\frac{f(i)-f(i_{OPT})}{t_{k+1}}\right)$$

$$t_{k+1}\left(1+\frac{t_k\log(1+\delta)}{f(i)-f(i_{OPT})}\right)>t_k$$

$$t_{k+1}(1+\frac{t_k\log(1+\delta)}{f(i)-f(i_{OPT})})>t_k$$

$\{f(i)\mid i\in D\}$ 的上下界用 $(-3\sigma(t_k)+\mu(t_k),\ \mu(t_k)+3\sigma(t_k))$ 近似。

$$t_{k+1}(1+\frac{t_k\log(1+\delta)}{6\sigma(t_k)})>t_k$$

$$\sigma^2(t_k)=\overline{f^2(t_k)}-(\overline{f(t_k)})^2$$

$$t_{k+1}=t_k(1+\frac{t_k\log(1+\delta)}{6\sigma(t_k)})^{-1}$$

Lundy和Mees采用基本相同的想法

$$\forall i \in D : \exp\left(\frac{(f(i) - f(i_{OPT}))(t_k - t_{k+1})}{t_k t_{k+1}}\right) < (1+\delta)$$

当 U 是一个 $f(i) - f(i_{OPT})$ 的上界，r 是一个充分小的正数，采用：

$$\frac{t_k - t_{k+1}}{t_k t_{k+1}} = \frac{r}{U}$$

降温规则

$$t_{k+1} = t_k \left(1 + \frac{r t_k}{U}\right)^{-1}$$

时齐算法每一温度的迭代长度规则

* 固定长度。
* 由接受和拒绝的比率控制迭代步数。
  * 当温度很高时，每一个状态被接受的频率基本相同，而且几乎所有的状态都被接受。此时，在同一温度应使迭代的步数尽量小。
  * 当温度渐渐变低时，越来越多的状态被拒绝。如果在此温度的迭代太少，则可能造成过早地陷入局部最优状态。比较直观和有效的方法是随着温度的下降，将同一温度的迭代步长增加。
  * 实现的一种方法是给定一个充分大的步长上限U和一个接受次数指标R，当在给定温度接受次数等于R时，在这一温度不再迭代而使得温度下降，否则，一直迭代到上限步数。
* 概率控制法
  * 以概率1跳出任何一个局部最优解

设状态 i 是一个局部最优状态， $p_{ii}(t)$ 为 i 状态一步转移不动的概率，n 步保持不动的概率是 $p_{ii}^n(t)$ 。于是温度 t 时状态 i 不转移的平均次数

$$\tilde{N}_i(t)=\sum_{n=1}^{\infty} n p_{ii}^n = \frac{p_{ii}}{(1-p_{ii})^2} \le \frac{1}{(1-p_{ii})^2}$$

$$p_{ii}(t)=1-\frac{1}{|N(i)|}\sum_{\substack{j\in N(i)\\ j\neq i}} \min\{1, \exp\left(-\frac{f(j)-f(i)}{t}\right)\}$$

$$\tilde{N}_i(t)\le \frac{1}{(1-p_{ii})^2}=\frac{|N(i)|^2}{\sum_{\substack{j\in N(i)\\ j\neq i}} \min\{1, \exp\left(-\frac{f(j)-f(i)}{t}\right)\}^2}$$

$$\tilde{N}_i(t)\approx \frac{|N(i)|^2}{\min\left\{1, \exp\left(-\frac{f_{\max}-f_{\min}}{t}\right)^2\right\}}$$

当温度较高时，跳出局部最优的平均次数为 $O(|N(i)|^2)$

当温度变低时，跳出局部最优的平均次数增加非常快，增加的速度与e$^{1/t}$ 同阶。

* **算法的终止原则**
  * **零度法。给定一个比较小的正数，当温度低于这个数时，算法停止。表示已经达到最低温度。**
  * **循环总数控制法** 。总的温度下降次数为一定值K，当温度迭代次数达到K时，停止运算。
  * 基于不改进规则的控制法。
  * 接受概率控制法。

* Lundy和Mees方法
  * 给定充分小的正数δ和ε，在达到终止温度应该满足

$$P(X(k) = i \wedge f(i) > f_{OPT} + \varepsilon \mid t = t_f) < \delta$$

$$P(X(k) = i \wedge f(i) > f_{OPT} + \varepsilon \mid t = t_f) \approx \sum_{i: f(i) > f_{OPT} + \varepsilon} v_i(t)$$

$$< (|D| - 1)\exp(-\frac{\varepsilon}{t}) < \delta,$$

$$t_f \le \frac{\varepsilon}{\log(|D| - 1) - \log \delta}$$

3.6 应用案例——下料问题 (cutting stock)

一、相关Bin Packing

- NP-hard
- FPTAS
- Heuristics
  - Next Fit (NF)
    - Pack a newly arriving item into a unique, so-called *active* bin. In case item does not fit into the active bin, the active bin is closed (and never used again) and an empty bin is opened and becomes the next active bin.
  - First-Fit (FF)
    - put each new item into the lowest indexed bin into which it will fit and start a new bin only if the item will not fit into any non-empty bin.

- Best Fit (BF)
- Worst Fit (WF)
- Almost Worst Fit (AWF)
- Harmonic Fit (HF)
  - the items are divided into the categories (½,1], (1/3.1/2],(1/4.1/3],…,(1/M,1/(M-1)], (0,1/M] according to their sizes, where M is some appropriately chosen integer constant. Items from each category are packed only with other items in the same category by using the NEXT-FIT method.

算法	NF	WF	FF	BF	AWF	HAR
渐近比（界）	2	2	1.7	1.7	1.7	1.691

W. Xing and F. Chen, A-Shaped Bin Packing: Worst Case Analysis via Simulation, JIMO, 2005

二、Variants

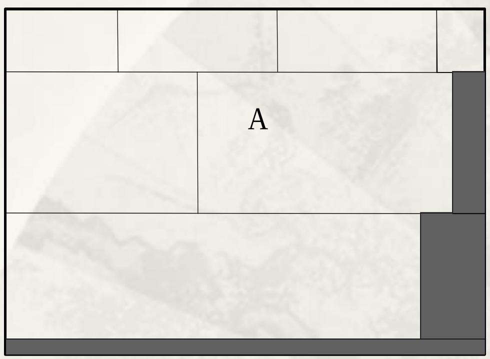
- On-line bin packing：箱子在线，物品在线
- Semi-on-line bin packing：知道部分信息
- Variable sized bin packing：箱子尺寸不一样
- Over-sized bin packing(Xing, 2002)：物品尺寸超过箱子尺寸
- A-shaped bin packing(Xing and Chen, 2005)：装箱物品有特殊要求
- Web advertisement bin packing：有时间间隔和长度要求
  - R. Bai and J. Xie, Int. J. Inform and Compt Sci. 2006

三、应用案例——下料问题 (cutting stock)

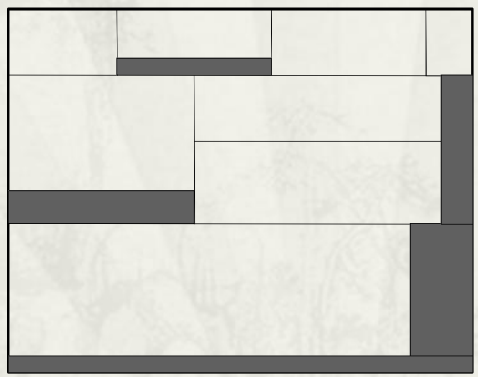
* 存在诸如玻璃、钢板、木材、纸张和制衣等的裁剪问题中。
* 原料的尺寸大于需求的尺寸，而需求的品种尺寸可以不相同，在满足所有需求的前提下，使得边角废料最小。
* 二维装箱问题（bin packing）
* 一维装箱问题的推广，因此，这个优化问题是NP难。

切割方式

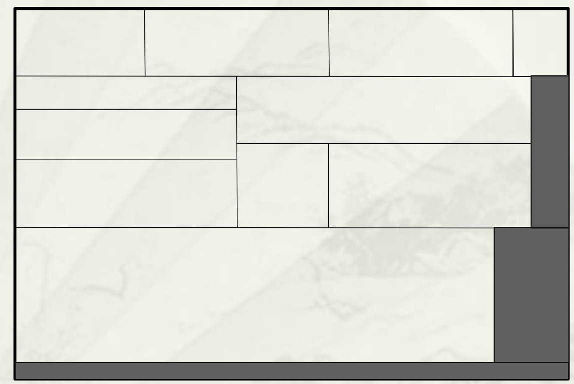
- 直线切割(guillotine cutting)
  - 保持切割线平行于原料的一个边线，一切到底，对截开的料继续采用这个规则。



2级切割

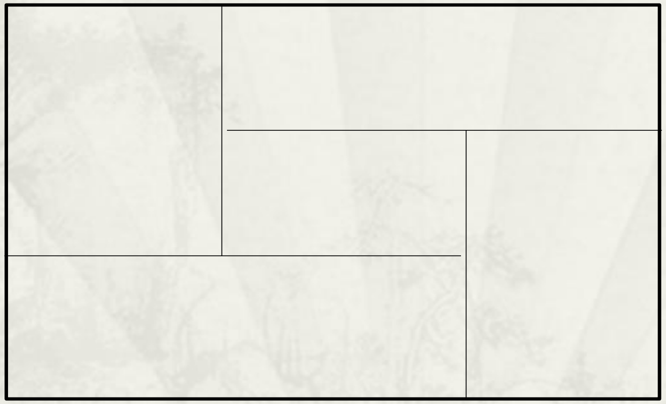


3级切割



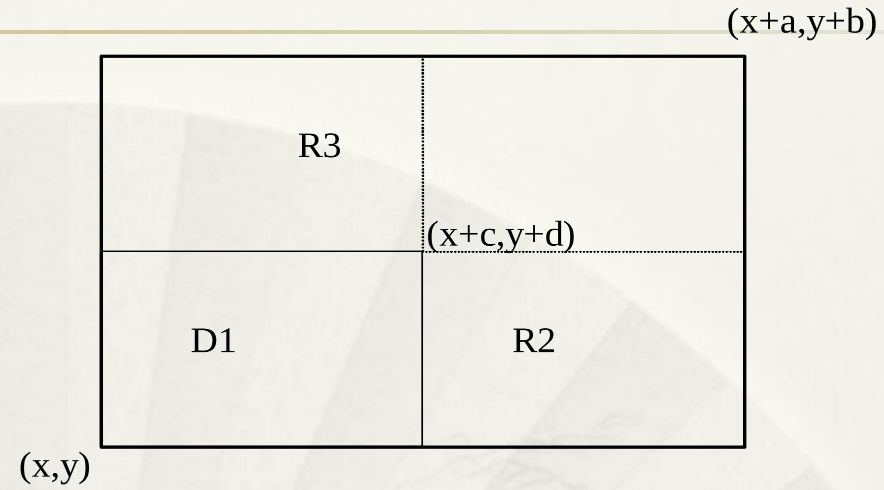
一般切割

套裁



解的表示形式

$$R1=[(x,y),(x+a,y+b)]$$



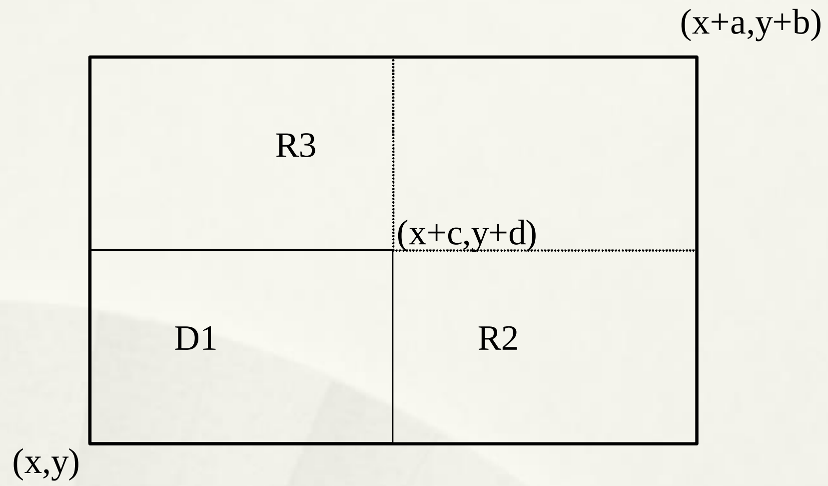
运算1：减法运算

D1的长宽尺寸分别为c和d，则下料后的剩余矩形为

$$\begin{aligned}&[(x,y),(x+a,y+b)]-[(x,y),(x+c,y+d)]\\&=\{[(x+c,y),(x+a,y+b)],[(x,y+d),(x+a,y+b)]\},\end{aligned}$$

$$R2=[(x+c,y),(x+a,y+b)]$$

$$R3=[(x,y+d),(x+a,y+b)]$$



运算2：公共部分运算

$$Com([(x1,y1),(x2,y2)],[(x3,y3),(x4,y4)])$$
$$=[(\max\{x1,x3\},\max\{y1,y3\}),(\min\{x2,x4\},\min\{y2,y4\})]。$$

$$Com(R2,R3)=[(x+c,y+d),(x+a,y+b)]。$$

继续计算

$$R2-com(R2,R3)=[(x+c,y),(x+a,y+d)]$$

$$R3-com(R2,R3)=[(x,y+d),(x+c,y+b)]$$

- 第一次下料后，出现两块矩形。若再进行一次下料，必须从中选定一块。当选中一块后，将未选用的块用减法运算去除公共部分，下一次还以矩形为原料继续下料。
- 在第K次切割完成后，一共剩余K+1个矩形，其中，K－1个除边界外互不相交，有两块有公共相交部分。
- 每次下料前，都有若干个独立的矩形和一对带有部分重合的相交矩形。以上的规则可以重复运用。
- 选哪一块下料？

- 给定产品的下料顺序，现在必须给出如何从诸多矩形中选择一个，及从何处下料。
- 料的裁剪方式（横放、竖放）。
- 依次可以计算余料的大小，即目标值。
- 优化问题就是确定一个最优的下料序。用模拟退火求解时，其邻域的结构可以模仿TSP中的2-opt来构造，交换两个产品的加工顺序。
- 问题：能否得到最优解？

下料的启发式规则

* （1）给定比较小的正数ε，当产品的长或宽同原料的长或宽不超过ε，选择满足这样条件的任一块矩形下料。

* （2）如果不存在（1）的原料，比较原料的长宽之和同产品长宽之和的差值的大小，从中选差值最小的原料。
* （3）对给定的数ε>0，在已下K块产品后，若余下的K+1块矩形原料中有长或宽不超过ε的，则删除这些原料块。

实现的技术细节

* 目标函数采用余料和同总用料的比率。由此可以估计目标值的上界是100%，即所有的料被浪费，下界是0%，表示无浪费。起始温度t_0 =KΔ，其中K=100，Δ=1 。

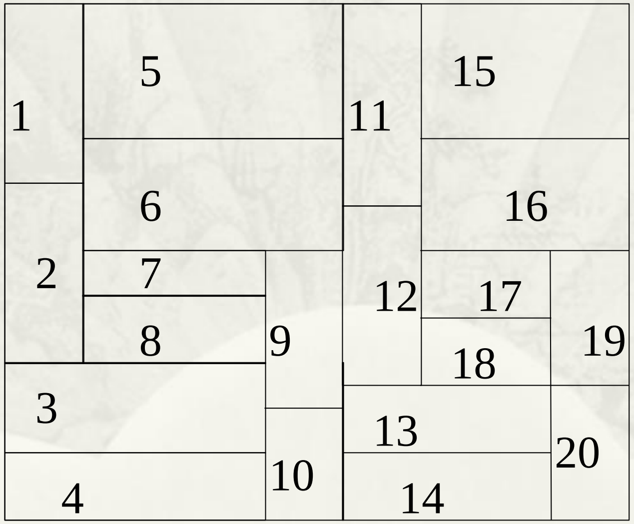
$$t_{k+1}=t_k(1+\beta t_k)^{-1} \qquad \beta=\frac{t_0-t_f}{Mt_0t_f}$$

t_f为一给定的值，M是温度可下降的最大次数。

起始温度t_0 =100， t_f =10，M=10,000。除了最多迭代M步的停止准则以外，再加上如果边角余料之和不超过开始时原料的5%，则停止计算。

计算结果

- 数据产生的参数
  - 原料分两种尺寸：400×200，400×400。
  - 产品料的种类从5--35个种类
  - 每一类产品料对两种尺寸各生成50个随机数据组。
  - 产生的原则是每组数据一定有余料为零的最优解。



原料400×200的模拟结果

产品料种类	测试数据组数	平均计算时间（单位：秒）	达到最优解的组数	平均的迭代步数
5	50	3.8	50	8
10	50	13.0	50	15
15	50	42.0	50	303
20	50	101.5	50	868
25	50	405.2	46	857
30	50	413.0	44	866
35	50	445.3	41	943

原料400×400的模拟结果

产品料种类	测试数据组数	平均计算时间（单位：秒）	达到最优解的组数	平均的迭代步数
5	50	2.3	50	4
10	50	9.3	50	12
15	50	44.0	50	230
20	50	221.0	47	522
25	50	389.3	45	855
30	50	432.1	41	941
35	50	442.0	42	921