

模擬退火法(Simulated Annealing)

模擬退火法是常用於解決最佳化問題中的其中一種近似解法，主要是根據統計熱力學的原理，模擬材料在進行退火的過程中，能自行達到最低溫狀態的現象，所發展出的一種全域最佳化的方法，這個方法由於搜尋簡單，且具有跳離區域最小值的能力，因此已成功的解決了許多最佳化設計的問題；但在執行模擬退火時，許多參數與被最佳化問題本身有相當的關聯，因此需針對不同的問題而做不同的選擇，如應用在數位影像中，數位影像資料需要極大的壓縮比，才可以應用在網際網路、即時通訊及視聽環境中。

運動估測法被用來找出在連續的影像資料中的大量冗餘資料，以區塊為主的運動估測法在實作上最簡單，因而成為最常使用的方法，但許多的快速區塊比對法中，很容易被區域最小值所困住，而使其重建之壓縮影像品質受到損害，而利用模擬退火法的特性，將可以跳脫區域最佳解，再運用影像中空間及時間相關性以及疊代次數的控制，結果則獲得較好的重建影像視覺品質，且有比傳統快速法使用較少之搜尋點數的優點[1]。

模擬退火法(simulated annealing, SA) [2-9]最早的想法是由 N. Metropolis 等人，在 1953 年所提出的蒙地卡羅(Monte Carlo) [10]演算法，因為它的簡單性與實用性，而被廣泛應用在各種最佳化問題中，主要的概念是把問題看成一個統計系統，而統計系統中的某一個溫度的狀態分佈，是滿足一個波茲曼(Boltzmann)分佈函數，因此在問題中尋找最佳解的時候，就是利用這個分佈函數來選取答案，而 Kirkpatrick 等人在 1983 年提出模擬退火法，並應用在最佳化問題中。

模擬退火法源自於模擬物質世界中材料的冷卻與結晶過程，在固態物理中，「退火」這個名詞是 Kirkpatrick 等人用 N. Metropolis 等人提出的蒙地卡羅演算法所發明的，「退火」代表一種物理過程，將固體加熱至足夠的高溫時，會從固態開始轉成液態，這個時候所有的分子會在液態物質中隨機的自由排列，隨著溫度的緩慢下降，這些分子就會逐漸到較低能量程度的結晶狀態來重新排列。

模擬退火法建構在物理模型上，它具備了兩個條件，第一，當溫度夠高時，系統的組態能自由變化，可以在能量表面自由移動或稱為做無規則行走(random walk)，也就是能夠自由選擇可行解；第二，當溫度變小時，系統的組態在能量表面移動將受到限制，並逐漸的向低能量的區域集中，在每一次的疊代過程中，

都是以目前解做為中心然後隨機產生新的鄰近解，當鄰近解的目標函數值比目前解的目標函數值較佳時，就以鄰近解取代目前解，如果產生的解比目前解差時，模擬退火法會利用機率函數和控制溫度參數來判斷是否接受新解，這也使得模擬退火法具有能力跳脫區域最佳解，透過降溫的動作來控制收斂的速度，隨著溫度的下降，接受較差解的機率也越來越小，當溫度降到低點時，僅接受較佳的解，進而達到收斂。

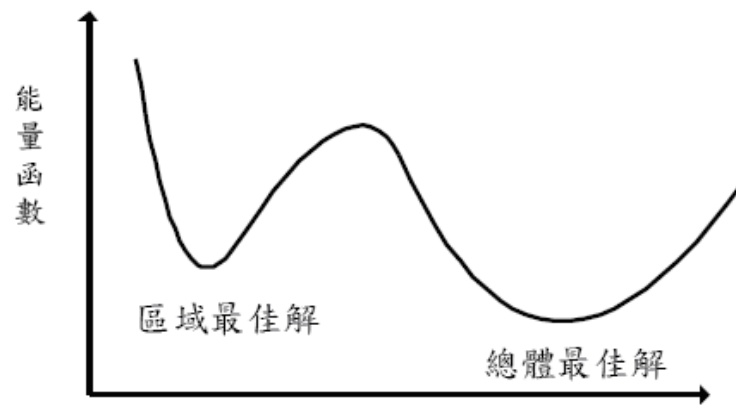


圖 1 模擬退火法示意圖

目前模擬退火法已被廣泛應用在旅行銷售員的問題(traveling salesman problem, TSP) [11-12]、路徑規劃問題、分派問題(allocation problem) [13]、排程問題(scheduling problem) [14]、彈性製造系統(flexible manufacturing system, FMS) [15-16]、結構設計、尋找影像邊界、醫學影像處理等。

模擬退火法引入一個溫度 T ，訂定一個退火程序(annealing schedule 或稱降溫程序)，包含的參數有起始溫度、降溫機制、冷卻率(或冷卻值)和終止條件，此一程序決定在每一個溫度所停留的時間，以及降溫的比例或是降溫的數值，而降溫的時機通常是在同一溫度，經過固定的疊代次數後就進行一次降溫，而能否成功的應用解決問題，關鍵就在於如何選擇適當的退火程序，此外，模擬退火法採用 Metropolis 接受法則，用來決定是否接受一個能量變動的改變，計算目前解的能量 E ，以目前解為中心隨機產生新的鄰近解並計算能量 E' ， $\Delta E = E' - E$ 為兩個解之間的能量差，根據下列的機率公式來決定是否接受鄰近解取代目前解：

$$P = \begin{cases} 1 & ,if \Delta E \leq 0 \\ e^{-\frac{\Delta E}{T}} & ,if \Delta E > 0 \end{cases} \quad (1)$$

模擬退火法簡單的操作方法如下：

1. 針對問題選定目標函數作為能量函數。
2. 決定初始參數，有起始溫度 T 、終止溫度、冷卻率(或冷卻值) α ，單一溫度疊代次數。
3. 設定起始疊代次數 $t=0$ ，產生初始目前解 X 。
4. 以目前解為中心隨機產生新的鄰近解 X' 。
5. 採用 Metropolis 接受法則，使用公式(1)來決定是否接受鄰近解為目前解，若接受則 $X = X'$ 。
6. 更新疊代次數 $t=t+1$ ，判斷是否達到設定之疊代次數，若是則進行降溫 $t=0$ ，而降溫的方式主要有兩種，一是 $T=\alpha\times T, \alpha\in[0,1]$ ，另一是 $T=T-\alpha, \alpha<0$ 。
7. 判斷溫度是否達到終止溫度，若否則回到 Step 3 重複執行。
8. 得到最後的解 X 。

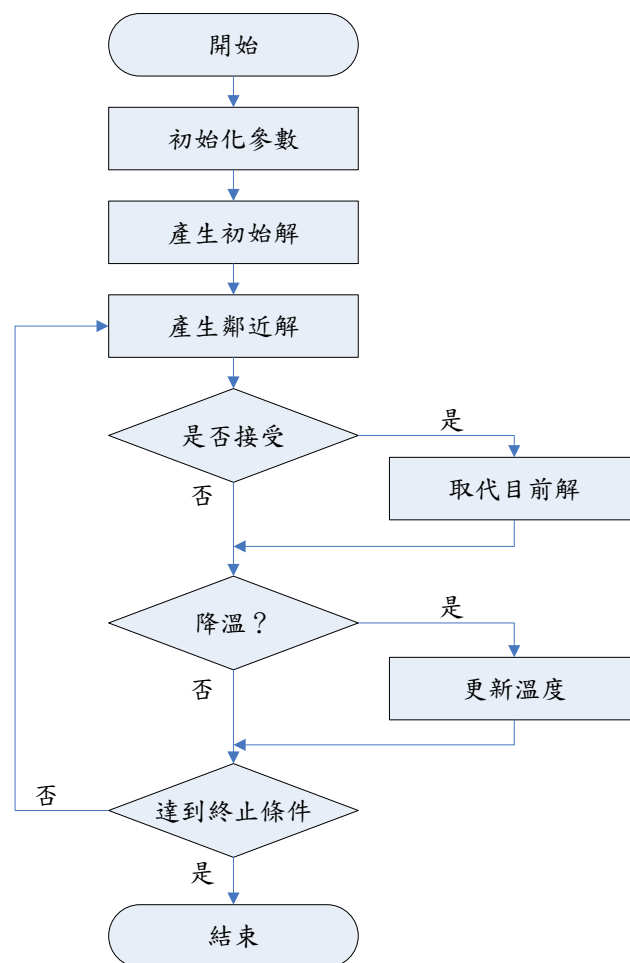


圖 2 模擬退火法流程圖

參考文獻

- [1] Mon-ChauShie, "Adaptive video block motion estimation methods," ee, ntu, Taiwan, 2000.
- [2] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, "Optimization by simulated annealing," *Science*, vol. 220, pp. 671-680, 1983.
- [3] Yao and Xin, "New simulated annealing algorithm," *International Journal of Computer Mathematics.*, vol. 56, no. 3-4, pp. 161-168, 1995.
- [4] V. Fabian, "Simulated annealing simulated," *Computers & Mathematics with Applications.*, vol. 33, no. 1-2, pp. 81-94, 1997.
- [5] Jorge Haddock and John Mittenenthal, "Simulation optimization using simulated annealing", *Computers & Industrial Engineering*, vol. 22, no. 4, pp. 387-395, Oct, 1992.
- [6] Yang, Fan, Zhuang, Zhenquan, Dai and Yingxia , "Using simulated annealing," *Proceedings of the International Conference on Circuits and Systems*, Nanjing, China , pp. 175, July, 1989.
- [7] L. Ingber, "Very fast simulated re-annealing," *Mathematical and Computer Modeling*, vol. 12, no. 8, pp. 967-973, 1989.
- [8] Hatay, Tolga, Toklu and Y. Cengiz, "Optimization of trusses using the simulated annealing method," *ARI Bulletin of the Istanbul Technical University*, vol. 54, no. 1, pp. 67-71, 2004.
- [9] Reyes, Edgar, N. Steidley and Carl, "Optimization using simulated annealing," *Northcon - Conference Record*, pp. 120-126, 1998.
- [10] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller and E. Teller, "Equations of state calculations by fast computing machines," *Journal of Chemical Physics* 21, pp. 1087-1092, 1953.
- [11] Twohig, Susan N. Aletan and Samuel O, "Traveling Salesman Problem," *Annual Computer Science Conference Proceedings, Washington, DC*, pp. 437, Feb, 1990.
- [12] Gao and Shang, " Solving TSP with simulated annealing algorithm," *Journal of East China Shipbuilding Institute*, vol. 17, no. 3, pp. 13, June, 2003.
- [13] Stella Sofianopoulou, "Simulated annealing applied to the process allocation problem," *European Journal of Operational Research*, vol. 60, no. 3, pp. 327-334, Aug, 1992.

- [14] Catoni and Olivier, "Solving scheduling problems by simulated annealing," *SIAM Journal on Control and Optimization*, vol. 36, no. 5, pp. 1539-1575, Sep, 1998.
- [15] Hutchinson George K. Wynne, Bayard E. "Flexible manufacturing system," *Industrial Engineering*, vol. 5, no. 12, pp. 10-17, Dec, 1973.
- [16] Carrie, A. S. Adhami, E. Stephens, A. Murdoch, I. C. "Introducing a flexible manufacturing system," *International Journal of Production Research*, vol. 22, no. 6, pp. 907-916, Nov-Dec, 1984.