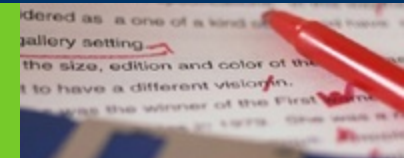




模拟退火模型

主讲人：泰山教育 小石老师

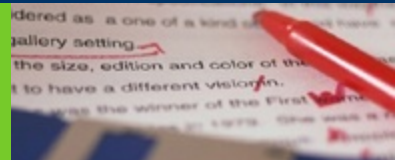
模型背景



什么是退火：

退火是指将固体加热到足够高的温度，使分子呈随机排列状态，然后逐步降温使之冷却，最后分子以低能状态排列，固体达到某种稳定状态。

模型背景



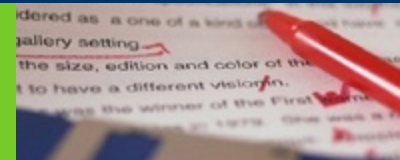
物理退火过程

加温过程——增强粒子的热运动，消除系统原先可能存在的非均匀态；

等温过程——对于与环境换热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；

冷却过程——使粒子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。

模型背景



热力学中的退火现象指物体逐渐降温时发生的物理现象：

温度越低，物体的能量状态越低，到达足够的低点时，液体开始冷凝与结晶，在结晶状态时，系统的能量状态最低。缓慢降温时，可达到最低能量状态；但如果快速降温，会导致不是最低能态的非晶形。

大自然知道慢工出细活：

缓缓降温，使得物体分子在每一温度时，能够有足够时间找到安顿位置，则逐渐地，到最后可得到最低能态，系统最稳定。

模拟退火算法思想

模仿自然界退火现象而得，利用了物理中固体物质的退火过程与一般优化问题的相似性从某一初始温度开始，伴随温度的不断下降，结合概率突跳特性在解空间中随机寻找全局最优解

组合优化问题	金属物体
解	粒子状态
最优解	能量最低的状态
设定初温	熔解过程
Metropolis抽样过程	等温过程
控制参数的下降	冷却
目标函数	能量

算法简介

设热力学系统 S 中有 n 个状态(有限个, 离散的), 状态 i 的能量为 E_i , 在温度 T_k 下, 经一段时间达到热平衡, 这时处于状态 i 的概率为:

$$P_i(T_k) = C_k \exp\left(-\frac{E_i}{T_k}\right)$$

则有如下关系:

$$E_i \downarrow \rightarrow P_i \uparrow$$

$$T_k \downarrow \rightarrow P_i \downarrow$$

如何确定 C_k ?

算法简介

Bolzman方程

$$P_i(T_k) = \frac{\exp\left(-E_i/T_k\right)}{\sum_{i=1}^n \exp\left(-E_i/T_k\right)}$$

$$\text{可见: } E_i \uparrow \Rightarrow P_i(T_k) \downarrow$$

$$T_k \downarrow \Rightarrow P_{i^*}(T_k) \rightarrow 1, \quad i^* \text{ 代表 } E_i \text{ 最小的那一个}$$

$$T_k \text{ 下的平均能量: } \bar{E}(T_k) = \sum_{i=1}^n E_i \cdot P_i(T_k)$$

$$T_k \downarrow \Rightarrow \bar{E} \rightarrow E_{i^*}$$

背景

温度 T_k 对 $P_i(T_k)$ 的影响

当 T_k 很大时, $\frac{E_i}{T_k} \rightarrow 0$

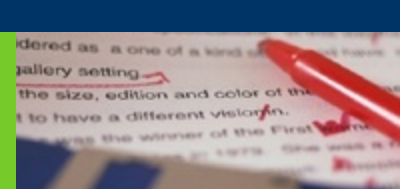
$P_i(T_k) \approx \frac{1}{n}$ 各状态的概率几乎相等

随着温度的下降 $P_i(T_k)$ 差别扩大

当 T_k 很小趋于0时, $\frac{E_i}{T_k} \rightarrow \infty$

当 $T_k \rightarrow 0$ 时, 以概率1趋于最小能量状态

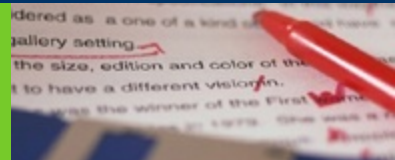
算法简介



模拟退火算法的模拟要求

- 1 初始温度足够高
- 2 降温过程足够慢
- 3 终止温度足够低

算法简介



模拟退火算法的计算步骤

- ① 初始化, 任选初始解, $i \in S$, 给定初始温度 T_0 , 终止温度 T_f , 令迭代指标 $k = 0, T_k = T_0$ 。

注: 选择 T_0 时, 要足够高, 使 $\frac{E_i}{T_k} \rightarrow 0$

- ② 随机产生一个邻域解, $j \in N(i)$, ($N(i)$ 表示 i 的邻域)
计算目标值增量 $\Delta f = f(j) - f(i)$

算法简介

③ 若 $\Delta f < 0$, 令 $i = j$ 转步④ (j比i好无条件转移) ; 否则产生 $\xi \in U(0,1)$, 若 $\exp\left(\frac{-\Delta f}{T_k}\right) > \xi$, 则令 $i = j$ (j比i好, 有条件转移)。

注: T_k 高时, 广域搜索; T_k 低时, 局域搜索

④ 若达到热平衡(内循环次数大于 $n(T_k)$)转步⑤, 否则转步②。

算法简介

- ⑤ $k = k + 1$ 降低 T_k ，若 $T_k < T_f$ 停止，否则转步②。

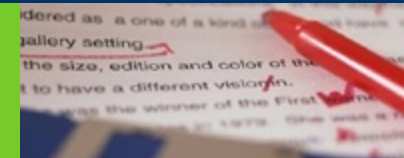
注：降低 T_k 的方法有以下两种

1. 较好的方法 $T_{k+1} = T_k \cdot r$ 其中 $r \in (0.95 - 0.99)$ 。

优点：简单易行

2. $T_{k+1} = T_k - \Delta T$

模拟退火算法对TSP问题的求解



旅行商问题，即**TSP问题**（**Travelling Salesman Problem**）又译为旅行推销员问题、货郎担问题，是数学领域中著名问题之一。假设有一个旅行商人要拜访 n 个城市，他必须选择所要走的路径，路径的限制是每个城市只能拜访一次，而且最后要回到原来出发的城市。路径的选择目标是要求得的路径路程为所有路径之中的最小值。

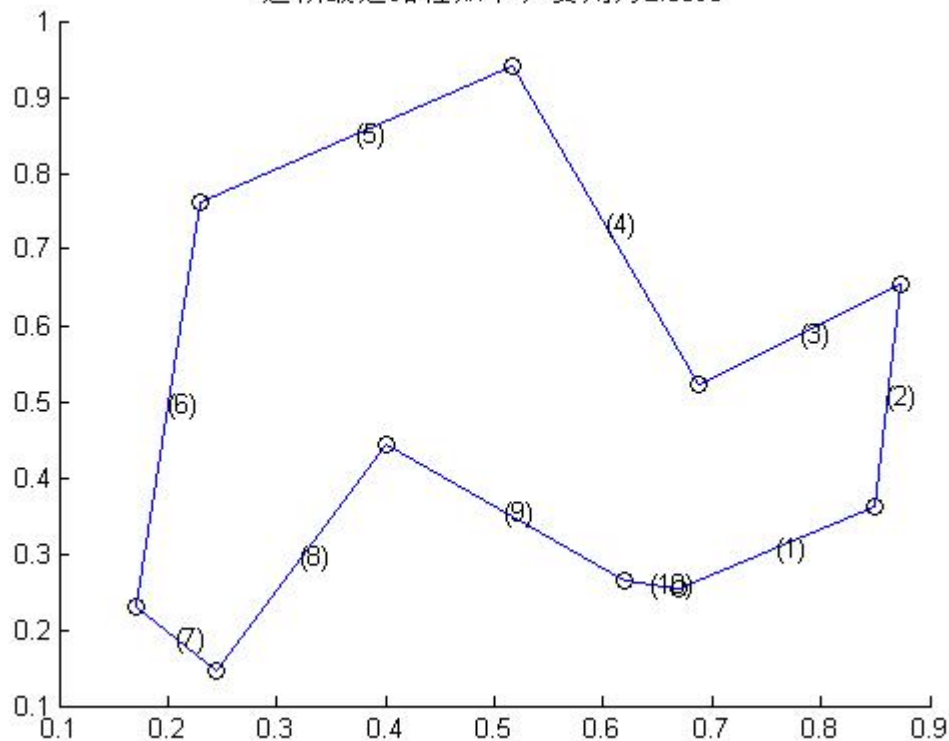
迄今为止，这类问题中没有一个找到有效算法。倾向于接受**NP完全问题**（**NP-Completeness**或**NPC**）和**NP难题**（**NP-Hard**或**NPH**）不存在有效算法这一猜想，认为这类问题的大型实例不能用精确算法求解，必须寻求这类问题的有效的近似算法。

模拟退火算法对TSP问题的求解

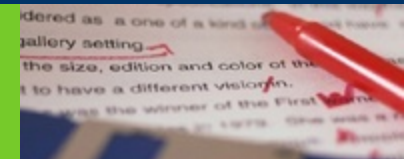
城市	X坐标	Y坐标	城市	X坐标	Y坐标
1	0.6683	0.2536	6	0.2293	0.7610
2	0.6195	0.2634	7	0.5171	0.9414
3	0.4000	0.4439	8	0.8732	0.6536
4	0.2439	0.1463	9	0.6878	0.5219
5	0.1707	0.2293	10	0.8488	0.3609

模拟退火算法对TSP问题的求解

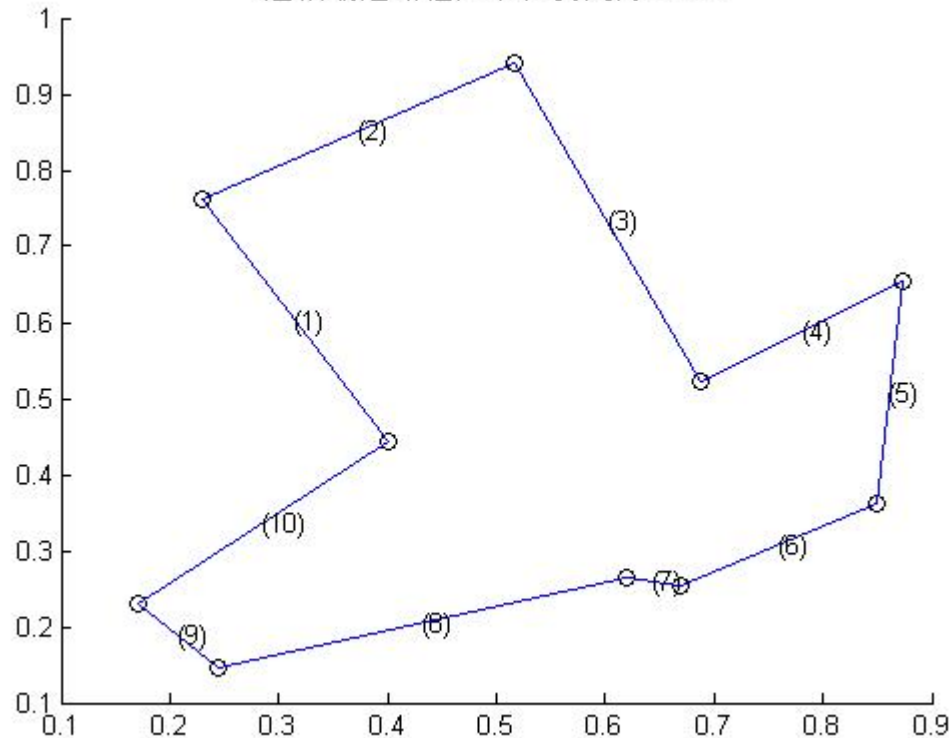
近似最短路径如下，费用为2.8393



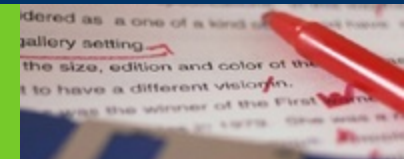
模拟退火算法对TSP问题的求解



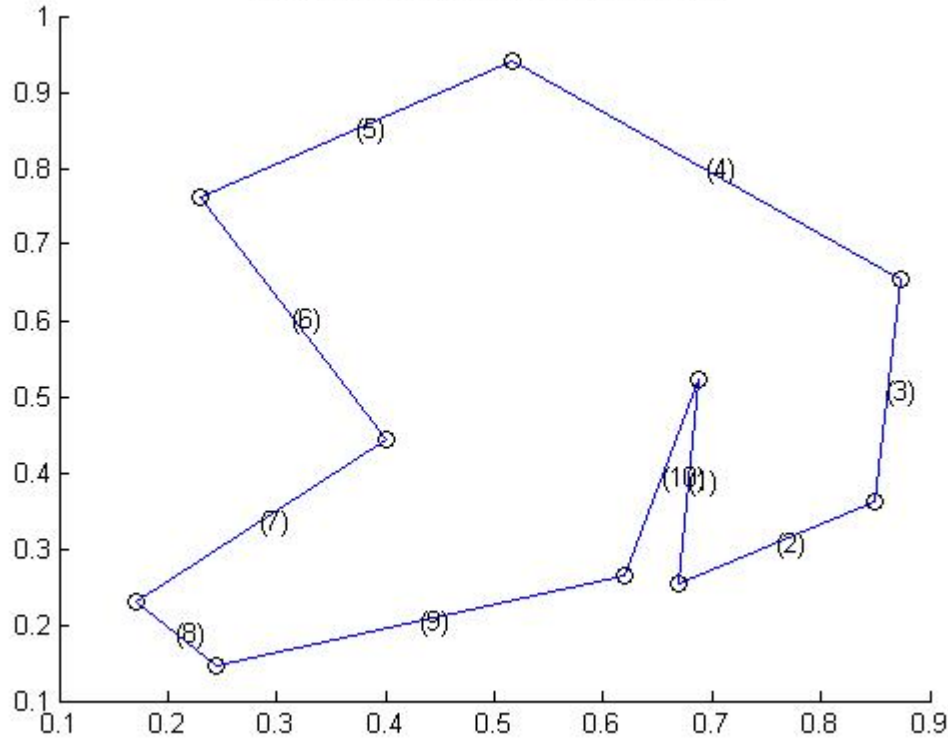
近似最短路径如下，费用为2.7517



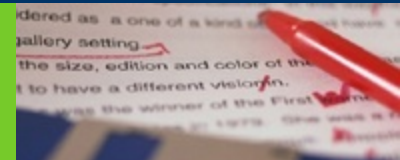
模拟退火算法对TSP问题的求解



近似最短路径如下，费用为3.0159



模拟退火算法对TSP问题的求解



TSP “旅行商问题”的应用领域包括：如何规划最合理高效的道路交通，以减少拥堵；如何更好地规划物流，以减少运营成本；在互联网环境中如何更好地设置节点，以更好地让信息流动等。



Thank You !