

# 基于弛豫模型的模拟退火算法温度设置方法

李元香 蒋文超 项正龙 张伟艳

(武汉大学计算机学院 武汉 430072)

**摘要** 本文基于模拟退火算法的弛豫时间模型和退火温度的理论估计,提出了动态自适应退火温度设置方法,将退火温度与问题的目标函数值关联.针对数值优化问题,借鉴数值计算中的正则化方法,由温度估计导出了带正则化补偿项的自适应温度设置公式.针对非数值优化问题,仿照 Metropolis 准则,依据温度估计给出了自适应温度设置的类 Metropolis 准则.两种自适应温度设置方法中均内含自适应回火机制,加强算法全局寻优的能力.进一步,提出了与温度设置方法相适应的模拟退火算法停止准则,用退火温度值作为算法停止与否的判据.而后,选取若干典型的测试问题进行了实验验证与分析.实验结果表明,自适应退火方法设置的温度与问题的目标函数值紧密关联,温度的变化能同步反映算法的搜索状态.实验结果也验证了提出的停止准则的有效性与适用性,同时也验证了理论分析和推断的正确性.

**关键词** 模拟退火算法;弛豫模型;温度设置;自适应回火;停止准则

中图法分类号 TP301 DOI号 10.11897/SP.J.1016.2020.02084

## Relaxation Model Based Temperature Setting Methods for Simulated Annealing Algorithm

LI Yuan-Xiang JIANG Wen-Chao XIANG Zheng-Long ZHANG Wei-Yan

(School of Computer Science, Wuhan University, Wuhan 430072)

**Abstract** Simulated annealing algorithm is a classical nature-inspired computational method of imitating physics, which has made outstanding achievements in researches of algorithm designing and applications. In traditional simulated annealing algorithm, updating formula of annealing temperature is definiteness by using a descent coefficient, which can be called the fixed setting method of annealing temperature. By the method, the algorithm is difficult to skip unnecessary search process and then causes waste of computational resource. And also, it often gives rise to local searching early. In order to improve searching performance of the algorithm and save computational resource, we propose adaptive annealing temperature setting methods based on the relaxation model of the simulated annealing algorithm and theoretical estimation of the annealing temperature, which sets the annealing temperature correlated with the problem's objective function values in this paper. Roughly, optimization problems can be divided into two categories, saying numerical optimization problems and non-numerical optimization problems. So as to solving a class of numerical optimization problems, an adaptive temperature setting formula with regular compensation term is derived from the temperature estimation by using the regularization method in numerical computations. As for non-numerical optimization problems, a Metropolis-like criterion for adaptive temperature setting is proposed by varying the estimation. Both adaptive temperature

setting methods contain adaptive tempering mechanisms, which strengthen the optimization ability and the exploration ability of the simulated annealing algorithm simultaneously. The experimental results of numerical test problems show that the temperatures setting by the adaptive annealing methods are closely related to the problem's objective function values, and the annealing temperature's changes can reflect the search state of the algorithm synchronously. The experimental results of non-numerical test problems also show that adaptive annealing temperature setting performs better than traditional annealing temperature setting. So to summarize, the experimental results show that adaptive annealing temperature method for simulated annealing algorithm is practicable and effective. Traditionally, stopping criteria of the simulated annealing algorithm is definitive and depend on a minimum temperature setting value in advance. That is, when the annealing temperature descends to the minimum temperature value the algorithm stops, which often increases invalid searches in the post period of the algorithm. In order to reducing unnecessary search process and saving computational resource, stopping criteria for the simulated annealing algorithm in solving the two classes of problems is proposed, which is suitable with those temperature setting methods. The adaptive temperature values can be used as the criteria for stopping the algorithm, for in the post period of the algorithm the adaptive temperature values will be small and approximately equal consecutively, that is the stopping moment. In experimental verification and analysis for the stopping criteria, we select some typical numerical optimization problems which include simple unimodal functions, multimodal functions, rotated and shifted complex functions. As for non-numerical problems, we select two classic NP-hard problems which are Traveling Salesman Problem and 0-1 Knapsack Problem. The experimental results show that the adaptive stopping criteria can halt the algorithm effectively and reduce unnecessary search process and save computational resource. Those experimental results also verify the correctness of theoretical analysis and inference. In the end, theoretical and experimental analysis show that adaptive annealing temperature setting method and stopping criteria proposed in this paper are appropriate for the simulated annealing algorithm.

**Keywords** simulated annealing algorithm; relaxation model; temperature setting; adaptive tempering; stop criterion

## 1 引言

当前,源于仿生和模拟自然规律的自然计算方法研究正方兴未艾,而学习和借鉴自然科学学科中的经典理论、模型和方法,运用于自然与演化计算的算法设计方法和理论分析的研究尚显不足.模拟退火算法就是一个经典的拟物类自然计算算法,核心思想是模拟金属热浴之后的缓慢降温(退火)达到能量最低态(即常温固态)的过程,以随机“跳阱”策略克服局部搜索法的缺陷,搜索优化问题的全局最优解<sup>[1]</sup>.该算法自 20 世纪 80 年代初提出以来<sup>[2]</sup>,首先应用于求解组合优化问题,特别是对典型的 NP 难题,旅行商问题(TSP)等的求解取得了显著成效.其后,该算法推广到系统建模与复杂数值优化问题的

求解,获得广泛的关注和应用,促使其理论和应用研究取得了长足的进展.现在,模拟退火算法已融入以群体搜索为特征的自然与演化算法的设计与应用之中<sup>[3-6]</sup>.

模拟退火算法有着明确的物理背景,它将优化问题的目标函数  $f$  的函数值比拟为物理系统的能量,模拟物理系统趋于能量最小态(平衡态)的过程,其灵魂就是 Metropolis 准则,以随机跳跃的方式驱动算法跳出局部最优的“陷阱”,保持搜索全局最优解的潜力,控制算法的退火和运行.该准则即是来自于经典的气体运动论与统计物理学中的 Gibbs 分布,它描述了物理(气体)系统宏观上处于平衡态时,各微观态出现的几率(即统计规律),是系统能量与温度的函数.以下算法 1 给出的是基本模拟退火算法.

**算法 1.** SAA(模拟退火算法).

1. INITIALIZE( $i_0, T_0, L_0$ )
2. BEGIN
3.  $k := 0; i := i_0; L_k := L_0;$
4. REPEAT
5.   FOR  $n := 1$  to  $L_k$  DO
6.    BEGIN
7.     GENERATE( $j$  from  $i$ );
8.     IF  $f(j) \leq f(i)$  THEN  $i := j;$
9.     ELSE IF
10.       $\exp\{[f(i) - f(j)]/T_k\} > \text{random}[0, 1)$
11.      THEN  $i := j;$
12.    ENDFOR;
13.    $k := k + 1;$
14. CALCULATE( $T_k$ );
15. CALCULATE( $L_k$ );
16. Until stop criterion
17. END;

算法 1 中第 10 行就是 Metropolis 准则, 其中,  $f$  是优化问题(以最小化问题为例)的目标函数,  $i$  称为问题的当前解,  $j$  是由当前解产生的新解.  $T_k$  称为退火温度,  $L_k$  是内层循环的次数, 按早期的理论分析称其为马尔科夫链长度, 它们是模拟退火算法中两个重要的参数,  $\text{random}[0, 1)$  表示取  $[0, 1)$  区间上均匀分布的随机数. 两个参数直接影响算法的搜索性能和求解时间, 结合随机“跳阱”策略, 构成模拟退火算法的核心, 简单有效.

早期的研究中, 在理论上基于随机过程理论将算法的搜索寻优看成随机过程, 建立其马尔科夫链模型进行收敛性分析, 得到概率意义下的收敛性定理<sup>[7-8]</sup>, 针对典型问题, 分析了模拟退火算法求解这些问题的时间复杂性<sup>[9-11]</sup>. 而大量的工作则是从实际应用出发的实验研究与分析, 获得有实用价值的经验知识, 对算法进行卓有成效地改进, 大大提高其求解效果, 如缓慢降温与退火时刻表的确定、回火退火策略等. 这些策略的运用通常需要观察算法的运行过程与性态, 并结合实际问题的特征, 从数值实验中获得有用的经验知识, 再应用于算法的设计和改进之中. 即从计算中认识问题, 把握问题特征, 由此提出与问题相适应的改进策略. 这与其后兴起的以遗传算法为代表的一类演化算法, 或者称为计算智能的思想一脉相承. 因此, 模拟退火算法及其改进策略渐渐融入以群体搜索为特征的演化算法之中, 依然焕发着新的活力, 有力地促进了演化算法的设计和应用研究<sup>[12-15]</sup>.

然而, 上述算法设计与改进的方法是基于以往的经验知识的总结, 与待求解的问题没有直接关系, 是经验知识的一般化运用, 没有针对性. 本文的意图是希望以建立的理论模型及以模型为基础导出的相关理论结果为指导, 结合算法的运行过程, 获得与问题相关的改进策略, 即同步、自适应的调整策略, 特别是对前述两个重要参数  $T_k$  和  $L_k$  的调整. 一方面深化模拟退火算法设计与分析的理论和应用研究, 另一方面, 以简单而经典的、具有明确物理背景的模拟退火算法为例, 推广应用于自然计算算法的设计与分析, 挖掘其物理学与动力学机理, 发展一类分析自然与演化算法的数学物理模型与方法, 再者, 抛砖引玉, 希望推动经典学科理论, 特别是数学物理的模型方法与自然计算思想和方法的有效融合<sup>[16-18]</sup>.

事实上, 最近我们沿着上述思路, 基于弹性力学原理建立了模拟退火算法的常微分方程动力系统模型<sup>[19]</sup>, 进而运用弹性力学中的极小位能原理(与统计物理中系统的能量最小态相对应)分析了模拟退火算法的收敛性和收敛速度. 在动力系统理论的框架下, 获得了有理论意义和对算法的设计与改进有实用价值的结果. 而后紧接着基于气体输运理论, 建立了模拟退火算法的弛豫时间模型<sup>[20]</sup>, 同时进行了算法时间复杂性分析, 从理论和实验分析两方面获得了时间复杂性较准确的分析表示方法. 上述模型和方法还可推广应用于对演化算法进行动力系统的建模与分析.

上述模型及其理论结果还有进一步深入分析、应用和完善的必要, 特别是从实验分析和验证的角度检验理论结果的适用性、可扩展性和可推广性. 在文献[20]中给出了退火温度和马尔科夫链长度的理论估计, 它们直接用待求解问题的目标函数值表示, 即与问题密切相关, 因而更有针对性. 在那里基于理论估计提出了马尔科夫链长度的动态设置方法, 进行了实验验证和分析, 表明了这种动态设置方法是可行性的, 且能明显地降低算法的时间复杂性. 因此, 本文是上述研究工作的继续, 重点是退火温度的理论估计及其动态自适应设置, 包括动态自适应温度设置、自适应回火机制和实验验证与分析等. 事实上, 退火温度控制着整个算法的进程, 本质上与时间复杂性相关. 因此, 本文也将仿照文献[20]中提出的停止准则和马尔科夫链长度动态设置等改进策略, 提出与问题相关的退火温度设置方法, 进一步, 提出与温度设置相适应的停止准则.

本文第 2 节, 简介在文献[20]中建立的模拟退

火算法的弛豫时间模型,退火温度的理论估计;第3节,根据理论估计,讨论模拟退火算法退火温度的设置方法,按照问题类型的不同,借鉴模仿不同的方法策略给出相应的设置方法,同时,仿照文献[20]中以马尔科夫链长度动态设置方法为依据的停止准则,提出与自适应退火温度相适应的停止准则;第4节,进行实验验证与分析,主要是退火温度自适应设置方法的实验分析与适用性检验,停止准则的实验分析与适用性检验;第5节是总结与讨论,总结本文的工作和需要进一步研究的问题,展望这类数学物理方法的进一步扩展,如推广应用到以群体搜索为特征的演化算法的设计、改进与分析等,讨论发展一类以数学物理模型为基础的自然计算方法的基本理论。

## 2 基于弛豫模型的退火温度估计

### 2.1 气体运输的弛豫方程

本小节简单回顾文献[20]中建立的弛豫时间模型,推导退火温度的理论估计式,以备后面讨论退火温度自适应设置之用。

设有气体系统  $S$ ,宏观上处于平衡态,环境温度  $T$  恒定,但微观上可以处于任何一个可达的微观态,因而,系统能量可变,用  $E_i$  表示系统处于微观态  $i$  时的能量,根据统计物理中的正则系综理论,系统处于微观态  $i$  的几率分布函数是下列 Gibbs 正则分布<sup>[21]</sup>,

$$p_i = \frac{1}{Z} \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right) \quad (1)$$

其中指数函数部分称为 Boltzmann 因子,  $k_B$  是 Boltzmann 常数,  $Z = \sum_i \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right)$  称为系综配分函数,  $\sum_i$  表示对所有可能的微观态求和。

气体运输研究建立的经典理论是 Boltzmann 积分-微分方程,它是从分子碰撞的理论假设导出分布函数满足的积分-微分方程<sup>[22-23]</sup>,是研究气体系统非平衡涨落与运输的基础,但不便于解析求解和分析。此后针对不同的具体研究对象,便出现了许多简化该方程的研究成果,其中有一个简便而且实用的简化方程由 Bhatragar、Gross 和 Krook 三人提出<sup>[23]</sup>。为了简化 Boltzmann 积分-微分方程,他们提出碰撞间隔理论,得到如下的弛豫方程,以他们的名字命名为 BGK 方程,如式(2)所示:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{p - p_0}{\tau} \quad (2)$$

它的含义是  $p - p_0$  按指数  $\exp(-t/\tau)$  的方式衰减,  $p_0$  表示气体系统平衡态的几率分布,而  $p$  是相对于平衡态的扰动态的几率分布,  $\tau$  称为弛豫时间。

气体系统总是自发地向平衡态趋近,这个过程就是弛豫过程,故  $\tau$  的含义就是气体系统从偏离平衡态的某扰动状态自发趋于某平衡态附近所需的时间。从微观上看,一个宏观可观测的平衡状态对应最多的微观态数,统称为最可几状态。环境温度为  $T$  时,系统的最可几状态就是能量最低态,设为  $E_0$ ,又设相应于一个能量最低态的任一扰动状态的能量为  $E$ ,显然,  $E \geq E_0$ ,  $E_0$  可视为常数。将几率分布函数式(1)代入弛豫方程(2),当环境温度不变,且气体系统处于近平衡态时,其能量  $E$  (随而分布函数  $p$ ) 对空间的变化不敏感,即与空间变量是弱相关的<sup>[21-23]</sup>,忽略这种弱相关性,而只关注时间变化导致的分布函数和能量的变化,则有

$$\frac{dE}{dt} = \frac{k_B T}{\tau} \left[ 1 - \exp\left(\frac{E - E_0}{k_B T}\right) \right] \quad (3)$$

这个形式推导将弛豫方程进一步简化为只与扰动态能量相关的常微分方程。进一步类比、理论推演和求解可得到模拟退火算法的弛豫时间模型及算法中非常重要的“退火温度”估计。

### 2.2 退火温度估计

将方程(3)应用于模拟退火算法,设求解的优化问题为  $\min_{i \in S} f(i)$ ,  $S$  为可行解的集合,此时能量  $E$  比拟为目标函数  $f$  的函数值,不失一般性可假定函数  $f$  的最小值为零,即  $\min_{i \in S} f(i) = 0$ 。设第  $k$  次退火时的退火温度为  $T_k$  (对应于方程(3)中的  $k_B T$ ),此时与气体系统平衡态能量相对应的是目标函数的局部极小值,也即第  $k$  次退火后获得的平稳解,设为  $f_k$ 。又设第  $k-1$  次退火后获得的平稳解为  $f_{k-1}$ ,从  $f_{k-1}$  变化到  $f_k$  所需的时间为  $\tau_k$ ,比拟为模拟退火算法在控制参数  $T_k$  时,第  $k$  次退火的弛豫时间,则方程(3)变为

$$\frac{df}{dt} = \frac{T_k}{\tau_k} \left[ 1 - \exp\left(\frac{f - f_k}{T_k}\right) \right] \quad (4)$$

方程(4)的导出是基于目标函数值  $f$  与气体系统能量的类比,故而它也应与空间变量弱相关。注意这里所说的“空间变量”只是一个虚拟概念,与函数本身的自变量无关,自变量的变化是由算法的退火搜索过程引起的,而在算法中退火过程就是一个时变过程,因此,自变量的变化正好映射了退火时间引起的函数值的变化。

事实上,模拟退火算法的运行及搜索优化解的

过程是按离散搜索步进行的,相应于控制参数  $T_k$  时的搜索步数  $L_k$ ,即为马尔科夫链长度.内层循环过程模拟的就是气体系统在温度恒定时向平衡态的弛豫过程,因此, $L_k$ 就是弛豫时间  $\tau_k$ 的离散化表示.于是,基于气体输运中碰撞间隔理论的 BGK 弛豫方程(2)导出了方程(4),即为模拟退火算法的弛豫模型.它给出了分析模拟退火算法时间复杂性的一个基本理论模型.以下的积分求解(整体分析)将给出退火温度的估计.

第  $k-1$  次退火结束后获得的平稳解  $f_{k-1}$ ,也是第  $k$  次退火开始时的起始解,对方程(4)在时间区间  $[0, \tau_k]$  上积分有

$$f_k - f_{k-1} = T_k \left[ 1 - \frac{1}{\tau_k} \int_0^{\tau_k} \exp\left(\frac{f-f_k}{T_k}\right) dt \right] \quad (5)$$

根据模拟退火算法的运行机制,此处理论上可以认为  $f$  是一个定义在区间  $[f_k, f_{k-1}]$  上的随机变量,设其概率密度分布为  $\rho(f)$ .

不可否认算法在实际运行时会有  $f > f_{k-1}$  的情形出现,特别是在第  $k$  次退火处于算法退火过程的前期尤其如此.但跟踪算法运行过程表明,算法在向后期的退火过程转变时,这种情形出现的概率会越来越小,以至到了后期的退火过程  $f > f_{k-1}$  就成了零概率事件.从另一方面理解,算法的某次“跳阱”而出现  $f > f_{k-1}$  的情形,也就相当于由这个  $f$  定义了一个新的  $f_{k-1}$ .

作了以上注解,再进一步考察方程(5),运用统计物理中的各态经历假说<sup>[21]</sup>,方程(5)右端中括号内第二项的时间平均等于空间平均.即

$$\frac{1}{\tau_k} \int_0^{\tau_k} \exp\left(\frac{f-f_k}{T_k}\right) dt = \int_{f_k}^{f_{k-1}} \rho(f) \exp\left(\frac{f-f_k}{T_k}\right) df \quad (6)$$

在统计物理中,各态经历假说也称为 Gibbs 系综平均假设,是平衡态统计物理学的基础<sup>[22]</sup>,它给出了时间到空间的转换.

由 Metropolis 准则,从当前解  $i$ (目标函数值为  $f(i)$ )产生的新解  $j$ (假设其函数值就是  $f$ )被接受的概率是

$$r_k = \exp\left(\frac{f(i)-f}{T_k}\right) \quad (7)$$

模拟退火算法的大量数值实验表明,在同一个控制参数  $T_k$  下,内层循环的每个搜索步新产生的解的接受概率  $r_k$  相差无几.从式(7)也可以看出  $r_k$  的大小主要由具有较高数量级的  $T_k$  决定,即  $r_k$  对新解的函数值  $f$  不敏感,也就是说在退火进程中,各个新解  $f$  被接受的概率几乎相等.若第  $k$  次退火运用

Metropolis 准则进行了充分的搜索,即  $L_k$  足够长,则从理论分析的角度可以近似地将  $f$  看成是区间  $[f_k, f_{k-1}]$  上均匀分布的连续型随机变量<sup>[24-25]</sup>,即有

$$\rho(f) = \frac{1}{f_{k-1} - f_k} \quad (8)$$

式(8)代入式(6)得

$$\frac{1}{\tau_k} \int_0^{\tau_k} \exp\left(\frac{f-f_k}{T_k}\right) dt = \frac{T_k}{f_{k-1} - f_k} \left[ \exp\left(\frac{f_{k-1}-f_k}{T_k}\right) - 1 \right] \quad (9)$$

为了演算简单明了,也不失理论上的一般意义,只将式(9)右端的指数函数作 Taylor 级数展开到 3 次方,代入式(5)整理后得

$$T_k = \frac{1}{3} (f_{k-1} - f_k) \quad (10)$$

舍弃了一个收敛级数  $\sum_{n=4}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n$ ,其中,  $x = \frac{f_{k-1} - f_k}{T_k}$ ,

还要说明的是系数  $\frac{1}{3}$  没有实质上的意义,在其后讨论温度设置时,可用一个合适常数代替.

式(10)从理论上给出了退火温度一个简单的估计式,它表明退火温度值的数量级与目标函数取值区间差值的数量级相当.式(10)是后面进行退火温度动态自适应设置的基础.但是,估计式(10)只有理论上的意义,在进行实际的问题求解时,  $f_{k-1} - f_k$  会有随机起伏.就算法设计而言,式(10)不足以给出退火温度的恰当设置,还需对它进行一些必要的修正和补充,甚至需要根据问题的特征作适当变形.

### 3 自适应温度设置与停止准则

#### 3.1 固定设置与回火策略

模拟退火算法研究的黄金时期是 20 世纪 80 年代到 21 世纪初的二十多年间,从算法改进的角度出发,研究的重点就是温度的设置策略.一方面,温度值的大小决定 Metropolis 准则作用的发挥,直接影响算法的搜索性能,另一方面,温度的缓慢下降(退火)控制整个算法的运行进程.那时,温度设置方法主要是依据一个简单递减式  $T_{k+1} = \beta T_k$ ,其中的  $\beta$  称为递减因子,取值范围是  $0.8 < \beta < 1$ ,以保证缓慢降温,降温太快会使算法过早进入局部搜索.也有研究者提出其他形式的温度递减式,但思想方法大体一致,因此,算法研究与实际应用中使用的还是这个简单的递减式.降温退火过程从设定的一个较高初始温度  $T_0$  开始,依  $\beta$  的大小或缓慢或稍快地徐

徐推进,即退火.

退火到温度很低时,实际上 Metropolis 准则对算法的运行已起不到“跳阱”的作用,即算法几乎不再接受差解而陷入局部搜索.于是就有回火策略的提出,模拟退火算法改进为回火退火算法.就是跟踪算法搜索过程,观察退火搜索在中后期的性态,判断算法是否陷入局部搜索,若是则设置为回火时刻升高温度,即回火以跳出局部搜索,这是模拟退火算法研究中一个重要的改进<sup>[1,28]</sup>.

上述温度设置方法可称为固定设置法,一旦取定了初始温度  $T_0$  和递减因子  $\beta$ ,以及最低终止温度  $T_{\min}$ ,如不设置回火时刻,退火过程就确定了,即算法的总退火步数是确定的,简单有效.即使使用回火策略,对整个算法进程的影响也不会很大,因为回火次数不能设置过多,频繁回火反而会扰乱算法的寻优进程,影响算法的求解效果和解的质量.但是,模拟退火算法中初始温度  $T_0$  的设置通常保守地取一个较大的值,与问题无关,更与算法的运行过程无关.温度的退火变化是一个“按部就班”式的递减过程,它控制算法的搜索进程,但与算法搜索的性态和运行状态没有联系,与目标函数值的变化无关.就算有回火策略,也只是跟踪考察算法的搜索状态是否陷入局部搜索,人为地插入几个时刻,适当地升高温度,使“按部就班”绕了几个弯,不会改变算法的既定进程.根据对实验研究和观察总结得出了一些经验知识和经验法则,回火温度值按经验法则设置,也与函数值的变化无关.即退火过程中温度的变化不能反映算法当前的运行状态,也不体现算法搜索过程的历史信息.

### 3.2 正则化补偿与自适应策略

已有 2.2 小节以弛豫模型为基础导出的退火温度估计式(10),本小节以此为依据,讨论温度设置的自适应方法,将算法的退火温度与目标函数值和历史退火温度关联,体现算法搜索的历史过程.具体地,还需要根据问题类型或特征对式(10)进行修正和补充,或正则化补偿,或给出自适应准则.以下就数值优化和非数值优化(组合优化)两类典型问题的求解,分别给出模拟退火算法温度设置的正则化补偿和自适应调整策略.在推导式(10)时,作了近似假设,舍弃了一个收敛级数,以便于理论分析,在理论上是合理的.但直接运用它进行退火温度的设置和实际问题求解时难以给出稳定的温度设置值,这就需要进行必要的修正和补充.一方面,补充舍弃的部分,更重要的是,由于随机性影响,直接运用式(10)

估计的  $T_k$  值会有较大的随机起伏.

对于数值优化问题,从数值计算稳定性的思想出发,必须在其后加上一个补充项,按照数值计算的术语称为正则化项,以保证估算  $T_k$  时的数值稳定性.因此,有退火温度自适应设置的一般形式,

$$T_{k+1} = \alpha |f_k - f_{k+1}| + \beta Q(T) \quad (11)$$

其中,  $\alpha$  和  $\beta$  为适当常数,  $Q$  就是正则化函数,可为此前几次退火温度(用  $T$  表示)的函数.

由于第  $k+1$  次退火尚未开始,因此对式(11)作一点修改,第  $k+1$  次的退火温度由第  $k-1$  次和第  $k$  次退火搜索的结果估算.式(11)中的正则化补偿可取为  $\beta T_k$ ,也就是一个简单的线性正则补偿项,即有

$$T_{k+1} = \alpha |f_{k-1} - f_k| + \beta T_k \quad (12)$$

上式中若取  $\alpha=0$  就是经典的固定设置法.进一步,为了反映历史退火过程(或称为温度惯性)的影响,式(11)中的正则化补偿项还可以取为线性叠加的形式,

$$\beta Q(T) = \sum_{i=2}^{k-1} \beta_i (\alpha |f_{i-1} - f_i|) \quad (13)$$

于是有

$$T_{k+1} = \alpha |f_{k-1} - f_k| + \sum_{i=2}^{k-1} \beta_i (\alpha |f_{i-1} - f_i|) \quad (14)$$

其中的  $f_k$  可取为  $f_{k_{\min}}$ ,为算法到第  $k$  次退火为止,记录的当前获得的最优值.  $\alpha$  为  $\Delta f = |f_{k-1} - f_k|$  的权重因子,体现函数值对温度的影响,对于不同的问题,可选取与函数值数量级相关的权因子,其后的数值实验表明取  $\alpha=10$  具有较好的普适性.  $\beta_i$  ( $\beta_i < 1$ ) 可称为惯性因子,用于控制退火过程的历史(即温度惯性)对当前退火温度的影响.历史温度惯性的影响是逐渐衰减的,因此,可先取定一个  $\beta$ ,令  $\beta_i = \beta^{k-i+1}$ .  $\beta$  越大,惯性的影响越大,反之,影响越小.与经典温度设置的固定设置法一样,  $\beta$  的取值范围是  $0.8 < \beta < 1$ .

进一步考察式(14),它既利用了当前的求解结果,也利用了退火过程的“历史信息”,即利用历史信息对退火温度进行预估和校正.当相邻两次退火搜索的目标函数值改变较小时,惯性项对温度设置起主要作用,相当于经典的常规降温,算法在当前点附近进行局部搜索;当相邻两次退火搜索的目标函数值改变较大时,函数值的变化,即  $\Delta f$  成为主项,惯性项起辅助作用.因此,设置式(14)的策略体现为算法运行前期保持较高的退火温度,扩大搜索范围,后期由惯性项做小幅度调整,以局部寻优为主.前半部

分控制模拟退火算法的探测行为,后半部分控制其开采或寻优行为,正好对应了演化算法中的“两 E”(Exploitation 和 Exploration)机制.此外,在算法运行的中后期也会呈现出自适应的回火行为.

对于非数值优化问题,由于其目标函数通常取正值,于是对式(10)作适当变形,求相邻两次退火温度估计的比值有

$$\frac{T_{k+1}}{T_k} = \frac{f_k - f_{k+1}}{f_{k-1} - f_k} \quad (15)$$

然而,式(15)是不能直接应用的.因为,一方面第  $k+1$  次退火开始时  $f_{k+1}$  还未知,另一方面常常会出现相邻两次退火搜索的结果几乎相等的情况,即  $f_{k-1} = f_k$ ,也就是分母为 0 的几率较大.

为此,对它作进一步近似和化简,若设将分子和分母的减数  $f_{k+1}$  和  $f_k$  均取为到目前获得的最好解  $f_{k_{\min}}$ ,则式(15)近似简化为

$$T_{k+1} = \frac{f_k}{f_{k-1}} T_k \quad (16)$$

式(16)是求解非数值优化问题时进行温度自适应设置的基础.同样由于随机性的影响,相邻两次退火获得的目标函数值并不一定有  $f_k < f_{k-1}$ ,也正因为如此,给我们提供了进行退火温度自适应设置的机会.为了保证退火温度总体上呈下降的趋势,同时也实现自适应回火策略,仿照 Metropolis 准则,给出如下的退火温度自适应设置方法.

先用式(16)计算  $T_{k+1}$ ,若  $T_{k+1} \leq T_k$ ,则  $T_{k+1}$  为第  $k+1$  次的退火温度,否则,当  $T_{k+1} > T_k$  时,运用类 Metropolis 准则决定,或者设置  $T_{k+1}$  是第  $k+1$  次的退火温度(即自适应回火),或者仍然保持  $T_k$  为第  $k+1$  次的退火温度,温度设置的类 Metropolis 准则描述为如下的算法 2.

**算法 2.** TempSet(温度自适应设置).

```

BEGIN
IF  $\frac{T_k}{T_{k+1} + \text{Tempering}^\gamma} > \text{random}[0,1)$ 
THEN{
 $T_{k+1} := T_{k+1}$ ;
 $\text{Tempering} := \text{Tempering} + 1$ ;
}
ELSE
 $T_{k+1} := T_k$ ;
ENDIF;
END

```

其中,  $\text{Tempering}$  记录整个算法的回火次数,初始值设置为  $\text{Tempering} = 0$ .

算法 2 中条件语句(类 Metropolis 准则)的含

义是:当  $T_{k+1} > T_k$  时,分母的第一部分表明它们的差值  $T_{k+1} - T_k$  越大,则回火的机会较小,这是为了避免到了算法退火搜索的中后期,回火出现一个异常的高温打乱算法的寻优进程.分母的另一部分是控制整个算法的回火次数,即已执行的回火次数越多则回火的机会较小,其作用与第一部分类似,防止频繁回火打乱算法的寻优进程.其后的数值实验表明,  $\text{Tempering}$  的指数  $\gamma$  合适的取值区间为  $[2, 6]$ ,不同取值反映不同的搜索性态,后面的实验表明 2.8 是一个较适中的指数.总体而言,随着退火次数的增加,再次回火的机会越来越小,也即算法后期主要执行局部寻优.这与式(14)对求解数值优化问题的温度设置殊途同归.

### 3.3 停止准则

在文献[20]中,我们以马尔科夫链长度的动态估计为基础,给出了一个实际有效的算法停止准则.理论分析和实验验证均表明,算法运行到了后期马尔科夫链长度的估计值和观测值几乎是一个不大的常数,此时与退火次数  $k$  无关,明显小于中前期退火过程的马尔科夫链长度.据此,停止准则设置为:连续若干次退火的马尔科夫链长度都很小,而且几乎相等,则算法终止.那里的停止准则虽然有效,但要进入算法的内层循环,不够直接.实际上,模拟退火算法的进程是由退火温度直接控制的,决定外层循环的次数.因此,本小节基于退火温度的自适应设置,讨论与温度相关的停止准则.

结合退火温度的自适应设置,退火温度总体呈下降趋势,这是设置停止准则的理论基础.于是,自然想到设定一个低温界限,当设置温度小于这个温度即可终止算法.但是,这里的设置方法不同于固定设置方法,退火温度不是单调下降,而是动态变化可高可低的,受随机性干扰和问题复杂性的影响,一次较低的退火温度设置值不足以有效终止算法.同样地,可仿照以小马尔科夫链长为依据的停止准则,即连续若干次退火的退火温度设置值都小于某个给定值,则算法终止.

具体而言,对于数值优化问题,取某个小数  $\Delta$ ,若连续  $m$  次退火都有温度设置值  $T_k < \Delta$ ,则算法终止.对于非数值优化问题,根据不同的温度设置方式稍作改变,但本质上是一样的.取某个小数  $\delta$ ,若连续  $m$  次退火温度设置都有相继两次温度值之差满足  $|T_{k+1} - T_k| < \delta$ ,则算法终止.这里的  $m$  根据问题规模和复杂性设定,而  $\Delta$  和  $\delta$  的选取与问题没有直接的相关性,根据所需要的求解精度设定.

## 4 实验验证与分析

本节主要对由弛豫模型推导出的模拟退火算法温度设置方法的有效性进行实验验证与分析,也对基于温度自适应设置方法提出的算法停止准则进行运用和检验。

### 4.1 测试问题与参数设置

选取 6 个典型的测试问题进行实验分析与验证。前四个是数值优化问题,分别是广泛使用的测试函数集 CEC2013 中的函数  $F_1$  (Sphere Function)、 $F_6$  (Rotated Rosenbrock's Function)、 $F_{12}$  (Rotated Rastrigin's Function)、 $F_{25}$  (Composition Function( $n=3$ , Rotated))<sup>[26]</sup>。依次记为  $f_1$ 、 $f_2$ 、 $f_3$ 、 $f_4$ ,它们的最小值分别为 -1400、-900、-300 和 1100。其中,  $f_1$  是简单的单峰函数,  $f_2$  和  $f_3$  是多峰函数,并含有翻转、平移的组合变换,  $f_4$  是复合函数,并具有不可分 (Non-separable) 的超非线性。表 1 给出了它们的表达式和自变量取值范围以及最优值。

表 1 数值优化测试问题

函数	表达式	自变量取值范围	最优值
$f_1$	$\sum_{i=1}^n x_i^2$	$[-100, 100]$	-1400
$f_2$	$f_6 \left( M \left( \frac{2.048(x-o_4)}{100} \right) + 1 \right) + F_6^*$	$[-100, 100]$	-900
$f_3$	$f_{12} \left( M \left( \frac{5.12(x-o_9)}{100} \right) \right) + F_{12}^*$	$[-100, 100]$	-300
$f_4$	$f_{25} \left( M \left( \frac{5.12(x-o_9)}{100} \right) \right) + F_{25}^*$	$[-100, 100]$	1100

第五、六个是非数值优化问题,以旅行商问题和 0-1 背包问题作为非数值优化的测试问题。旅行商问题是最典型的组合优化问题,也是著名的 NP 难题。简单描述如下:设有  $N$  个城市和距离矩阵  $D = [d_{i,j}]$ ,其中  $d_{i,j}$  表示城市  $i$  到城市  $j$  的距离 ( $i, j = 1, \dots, N$ ),问题是要找到遍访每个城市一次且恰好一次的一条回路,其路径长度为最短,此即为目标函数,记为  $f_5$ 。0-1 背包问题也是一个典型的 NP 完全问题。0-1 背包问题描述如下:设有  $n$  种物品,物品  $i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) 的重量为  $w_i$ ,价值为  $p_i$ ,假定所有物品的重量和价值都是非负的,背包所能承受的最大重量为  $W$ ,如果限定每种物品只能选择 0 或者 1 个,则称为 0-1 背包问题。形式地描述如下:在满足背包重量限制,即式(17)的条件下,最大化装入背包物品的总价值  $P$ ,即式(18),背包问题记作  $f_6$ 。

$$\sum_{i=1}^n w_i x_i \leq W, x_i = 0, 1 \quad (17)$$

$$\max P = \sum_{i=1}^n p_i, x_i = 0, 1 \quad (18)$$

实验验证的内容是,首先对 3.2 小节给出的自适应温度设置方法中的参数进行分析,验证它们的作用和取值范围;然后,与模拟退火算法经典的固定温度设置方法进行对比实验;再进行停止准则实验和收敛性分析。固定温度设置运用经典的递减式  $T_{k+1} = \beta T_k$ ,依经验法则取  $\beta = 0.95$ ,经验法则的停止准则就是退火温度达到一个下界  $T_{\min}$  时算法停止,实验中取  $T_{\min} = 1 \times 10^{-6}$ 。

算法新解的产生方法是,对于四个数值优化问题均采用文献[27]中提出的策略产生,每次随机扰动一个分量产生新解。TSP 问题新解的产生采用 2 链变换<sup>[28]</sup>,0-1 背包问题新解的产生采用随机抽取分量取反的方式。对于 TSP 问题,在进行对比实验和参数分析时分别取中等规模的 50 和 100 个城市进行实验;为表明理论分析推导与实验分析结果的可推广性,在进行停止准则和收敛性分析时,再加一个增大规模的 1000 个城市的实验;它们的城市坐标在  $[0, 1000] \times [0, 1000]$  的正方形内随机产生。对于 0-1 背包问题,每个物品的重量范围是  $[0, 100]$ ,价值范围是  $[0, 80]$ ,分别选取 50 和 100 个物品进行实验,背包的重量上限分别为 2000 和 4000。

求解数值优化问题的初始温度分别设置如下:  $f_1: T_0 = 10000$ ,  $f_2: T_0 = 1000$ ,  $f_3: T_0 = 50$ ,  $f_4: T_0 = 10000$ 。求解非数值优化问题时,对于中等规模问题,初始温度设置为  $T_0 = 1 \times 10^4$ ,大规模问题,  $T_0 = 2 \times 10^6$ 。依据文献[20]中的理论与实验分析,每次退火的马尔科夫链长度均有一个不大的上界,为简便起见统一设置为  $L_k = 1000$ 。

每个问题均在上述参数设置下算法独立运行 20 次,取 20 次运行结果的平均值作为求解结果。

### 4.2 温度设置实验与分析

#### 4.2.1 参数敏感性分析

对于求解数值优化问题,在 3.2 小节提出的温度正则化补偿设置公式,即式(14)中引入了一个新的参数  $\alpha$ ,前文述及,  $\alpha$  反映最近两次退火搜索的函数值之差对当前温度的贡献,同时也体现历次退火搜索对当前退火温度的惯性影响。这里首先实验分析  $\alpha$  对求解结果和算法收敛速度的影响,  $\alpha$  分别取值为 1、10、50 进行实验,选取的测试问题是  $f_2$  ( $n=10$ ) 和  $f_3$  ( $n=10$ ),  $\alpha$  取定一个值后,对每个问题的求解,算法执行 500 次退火搜索。

实验结果如图 1~图 4 所示,图中横轴为退火

迭代次数,即外层循环次数,纵轴表示函数值或退火温度值,在同一幅图中,用三种粗细线型分别标识  $\alpha$  的三个不同取值.从四幅图中均看到,函数值的收敛曲线和对应的温度变化曲线基本一致,这就验证了本文将退火温度与函数值关联的设置方法是可行的,也验证了基于弛豫模型导出的温度的理论估计式(10)和温度设置方法的正确性.

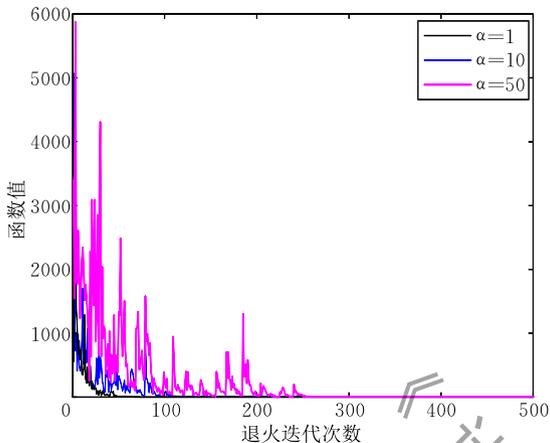


图 1  $f_2(n=10)$  参数分析的函数值收敛曲线对比

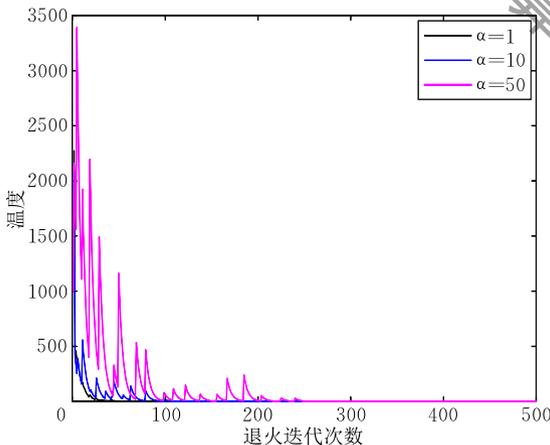


图 2  $f_2(n=10)$  参数分析的温度曲线对比

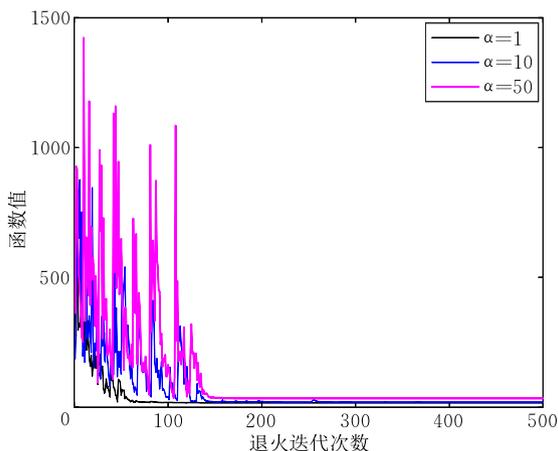


图 3  $f_3(n=10)$  参数分析的函数值收敛曲线对比

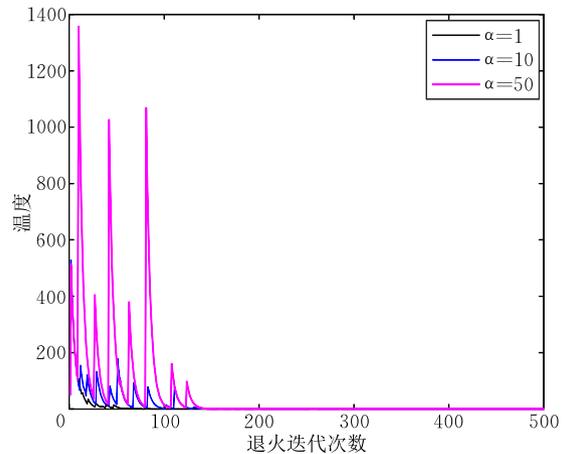


图 4  $f_3(n=10)$  参数分析的温度曲线对比

再对比每幅图上不同颜色的曲线,结果显示当  $\alpha=50$  时,函数值收敛曲线和温度曲线的波动幅度较大,尤其是在求解  $f_2(n=10)$  时,中期的波动幅度依旧较大,这就导致了算法收敛速度较慢,运行时间较长,但也表明拓宽了搜索区域,找到全局最优解的可能性加大;当  $\alpha=1$  时,函数值曲线和温度曲线都快速下降,表明算法收敛过快,容易过早陷入局部搜索;当  $\alpha=10$  时,函数值和温度曲线波动程度适中,算法的收敛速度和求解性能介于前面两者之间.这里的实验结果表明, $\alpha$  是一个在收敛速度和全局寻优之间进行权衡的参数, $\alpha$  小,收敛快速,但易过早陷入局部搜索; $\alpha$  大,则收敛慢,但可多次回火,搜索到全局最优的可能性加大.在后面进行的对比实验、停止准则实验和收敛性分析时,取较为适中的  $\alpha=10$ .

同样,在式(16)的基础上提出了求解非数值优化问题的类 Metropolis 准则温度自适应设置方法,即算法 2,其中也引入了一个新参数  $\gamma$ ,其主要意图是控制整个算法的回火次数,避免频繁回火影响寻优进程.这里选取测试问题  $f_5(n=100)$  和  $f_6(n=100)$  进行实验分析, $\gamma$  取定一个值后,每个问题的求解也是进行 500 次退火搜索,我们分别取  $\gamma=2$ 、 $\gamma=2.8$ 、 $\gamma=6$  进行实验.

实验结果如图 5~图 8 所示,图例说明同上,从 4 幅图中也看到,函数值的收敛曲线和对应的温度变化曲线基本一致.具体对比每幅图上的不同曲线表明,当  $\gamma=2$  时,算法的回火次数较多且幅度较大,同时算法收敛较慢;当  $\gamma=6$  时,算法的回火次数较少且幅度较小,算法收敛也较快,同样也易于陷入局部搜索,不利于全局寻优;当  $\gamma=2.8$  时,算法的回火次数适中,回火幅度恰当,算法的求解性能

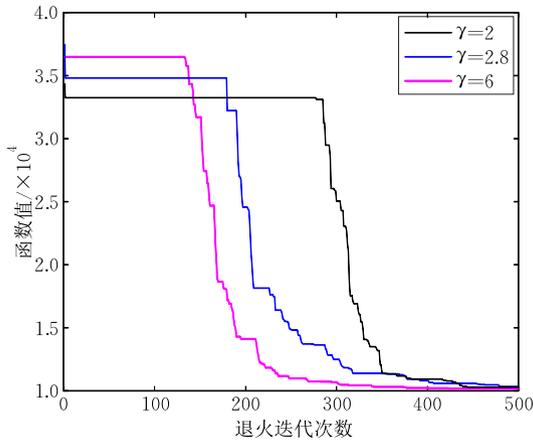


图 5  $f_5(n=100)$  参数分析的函数值收敛曲线对比

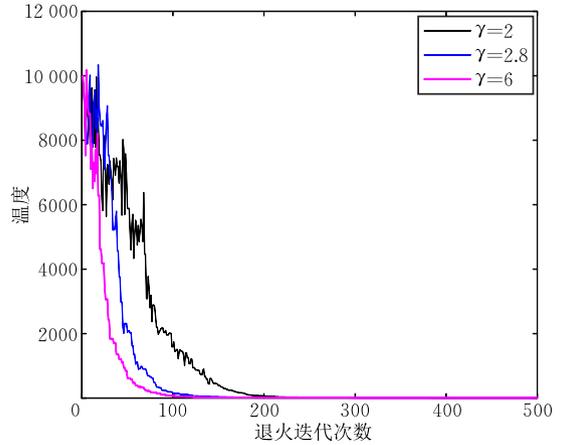


图 8  $f_6(n=100)$  参数分析的温度曲线对比

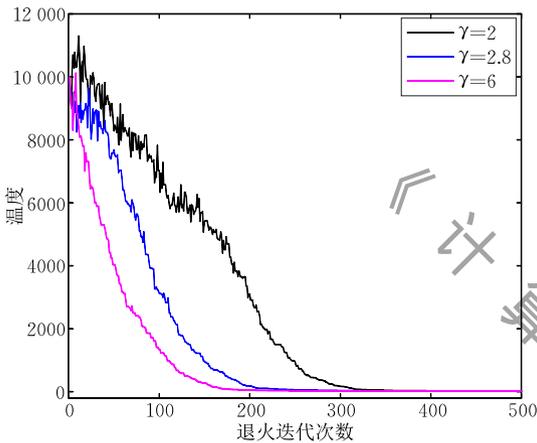


图 6  $f_5(n=100)$  参数分析的温度曲线对比

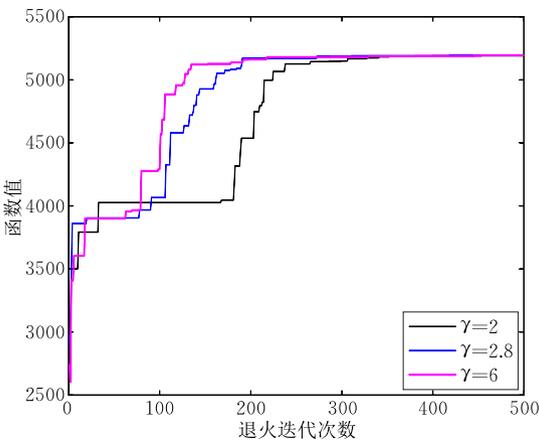


图 7  $f_6(n=100)$  参数分析的函数值收敛曲线对比

介于二者之间. 实验分析表明, 这里的  $\gamma$  与前面的  $\alpha$  具有同样的作用. 实际上, 我们开始只是简单地取  $\gamma=1$  进行实验(结果未绘于图中), 此时算法的整个搜索过程会频繁回火, 函数值也跟着振荡, 表明算法不能收敛. 因此, 实验结果与分析表明,  $\gamma$  较合适的取值范围在区间  $[2, 6]$  上. 在后面的实验中, 取  $\gamma=2.8$ .

#### 4.2.2 自适应退火与固定退火对比分析

模拟退火算法退火温度设置的经典经验法则是  $T_{k+1} = \beta T_k$ , 简称为固定退火方法<sup>[28]</sup>. 本小节按照 4.1 小节给定的参数设置和列出的测试问题, 分别用固定退火和自适应退火的模拟退火算法进行求解和对比分析. 首先是运用固定退火的模拟退火算法求解各个测试问题, 得到其目标函数的近似最优值, 再运用自适应退火的模拟退火算法进行求解, 以达到固定退火算法的求解结果精度为停止准则. 准则精度的误差限是, 所有数值优化问题误差限为  $1 \times 10^{-6}$ ,  $f_5(n=50)$  设为 10,  $f_5(n=100)$  为 20,  $f_6(n=50)$  设为 5,  $f_6(n=100)$  为 10, 即找到比固定退火的模拟退火算法更好的解, 或者在允许误差限内的解, 即终止算法. 然后, 分别统计各自的外层循环(退火迭代)次数和马尔科夫链总长度进行对比分析, 表 2 所示的就是两者在每个测试问题上的求解结果和马尔科夫链总长度的对比.

表 2 固定退火方法与自适应退火方法的马尔科夫链总长度对比

测试函数	固定温度设置法		自适应温度设置法		马尔科夫链总长度改进比率
	求解结果	马尔科夫链总长度	求解结果	马尔科夫链总长度	
$f_1(n=10)$	-1400.0	449000	-1399.905	318400	0.29
$f_2(n=10)$	-899.408845	405000	-895.550915	390400	0.04
$f_3(n=10)$	-277.902145	346000	-267.016315	281800	0.19
$f_4(n=10)$	1307.065	449000	1313.03	281800	0.37
$f_5(n=50)$	6840.5	494000	6794.97	291150	0.41
$f_5(n=100)$	11056.75	494000	11028.41	349900	0.32
$f_6(n=50)$	4044.85	449000	4043.0	330900	0.26
$f_6(n=100)$	5116.35	449000	5110.6	221650	0.51

从表中可以看出,对于数值问题,在达到允许精度的条件下,自适应退火方法的马尔科夫链总长度要少于固定退火方法的马尔科夫链总长度.再看非数值优化的 TSP 问题,自适应退火方法的寻优效果更好,无论是马尔科夫链总长度,还是求得的优化解,都比固定退火方法要好.对于 0-1 背包问题,二者优化求解的效果相当,但是比较马尔科夫链总长度可以看到,自适应退火方法还是要少于固定退火方法.

但是,必须指出固定退火的模拟退火算法在后期进行了过多的无效搜索,以致增加了马尔科夫链总长度.因为固定退火的温度与问题的目标函数不相关,所以,究其原因就是不知道应该退火到哪个温度可以终止算法,于是只能保守地取一个温度下限值  $T_{\min}$  作为终止条件,从而算法后期进行了过多的无效搜索.实际上,一旦取定初始温度  $T_0$  和终止温度  $T_{\min}$ ,算法的总退火步数就已确定,称为退火时刻表<sup>[28]</sup>.

而自适应退火方法设置的温度是与函数值相关联的,对比 4.2.1 小节参数分析实验的函数值曲线与温度曲线可以看出,算法运行到了退火搜索的中后期,它们的走势几乎一致.这里的对比分析表明,可以用自适应退火方法设置的温度有效地终止算法,消除算法后期的无效退火和搜索,降低算法的时间复杂性.

### 4.3 停止准则实验验证与分析

#### 4.3.1 停止准则的参数设置

3.3 小节根据温度的自适应设置方法,理论上导出了停止准则.上面初步的实验及其分析表明,自适应方法设置的温度可以用作模拟退火算法的停止准则,本小节将对其有效性进行实验验证和分析.相应于不同类型的问题,温度设置方法有所不同,停止准则也适当变换形式,其中的参数设置也略有不同.

但本质上是一样的,决定于问题的规模和对求解精度的要求.

对于数值优化问题,从式(13)和(14),以及其后的分析说明可知,当算法运行到后期,连续若干次退火,若  $f_k$  没有更新,温度设置式中只有第二项起作用,温度以某  $\eta$  ( $\eta < 1$ ) 因子衰减,也即退火温度在连续下降.因此,连续多次退火迭代没有搜索到更优解,温度值趋于 0,算法可终止.于是取一个合适的小数  $\Delta$  ( $\Delta < 1$ ) 为温度的下限值,当  $T_k < \Delta$ ,则算法停止,也即  $\Delta$  取得恰当,可取  $m=1$ ,后面的实验中取  $\Delta=0.01$ .

对于非数值问题,根据式(16)提出了类 Metropolis 准则的温度自适应设置方法,即算法 2.当模拟退火算法运行到后期,连续若干次退火迭代,而  $f_k$  没有更新时,温度也没有变化,即没有降温,算法进行到局部搜索,说明算法已经收敛(可能是局部收敛),此时可以终止算法.由于此处的温度值不一定趋于 0,因此,停止准则为  $T_{k+1} = T_k$ .准确地说,取一个充分小的数  $\delta$ ,当连续  $m$  次退火迭代有  $|T_{k+1} - T_k| < \delta$ ,则算法终止,实验中,取  $\delta = 1 \times 10^{-10}$ .而对于  $m$ ,3.3 小节中已说明它的取值应与问题的规模大小相关,为此取中等规模的 TSP 问题  $f_5$  ( $n=100$ ), $m$  取 2,3,5,7,10 进行实验对比分析.对  $m$  的每个取值算法运行 20 次,取 20 次运行结果的平均值为最终结果,为便于对比,固定退火的算法也进行同样的实验,如表 3 所示.与固定退火的算法对比可以看出  $m=2$  或  $m=3$  时显然不可取, $m=5$  时,函数值较小且马尔科夫链总长度也少, $m>5$  时,函数值会更小但马尔科夫链总长度增加很多.可以预计再加大  $m$ ,函数值还会有进一步的改进,但改进的幅度会越来越小,而马尔科夫链总长度的增幅会越来越大.因此,在其后的实验中,对于中等规模问题,取  $m=5$ ,大规模问题,取  $m=10$ .

表 3 参数  $m$  的实验对比

$f_5$ ( $n=100$ )	固定温度设置法	自适应温度设置法				
		$m=2$	$m=3$	$m=5$	$m=7$	$m=10$
函数平均值	11036.9	34461	31499.7	10490.37	10060.165	9672.585
马尔科夫链总长度平均值	449000	69350	140000	403000	747350	1531350

各个参数均已说明和设定,以下进行停止准则的实验和算法的收敛性分析.表 4 列出的是运用固定退火的模拟退火算法和自适应退火的模拟退火算法求解每个测试问题且各自独立运行 20 次的求解结果的统计平均和标准差估计.从中可以看出,对于数值优化

问题,基于自适应退火温度设置提出的停止准则能够在达到固定退火方法相近求解精度的情况下,有效终止算法,且马尔科夫链总长度明显减少.如在求解  $f_4$  ( $n=10$ ) 时,马尔科夫链总长度只需要固定退火方法的 25%,在其余 3 个问题上,退火迭代次数也有显著减少.

表 4 固定退火方法与自适应退火方法的统计分析对比

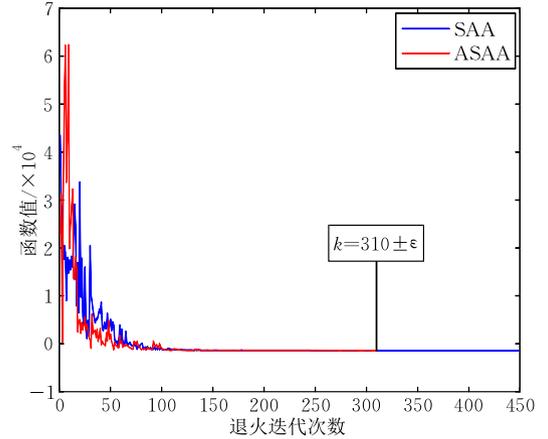
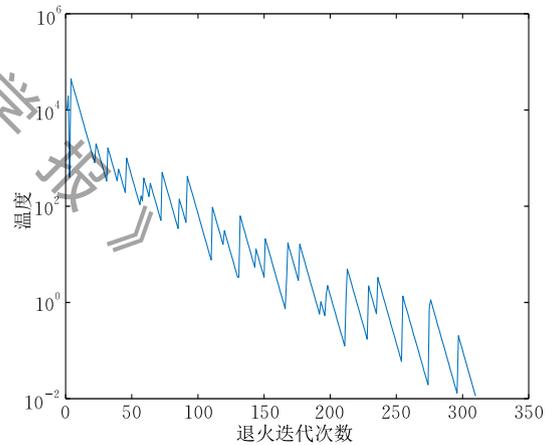
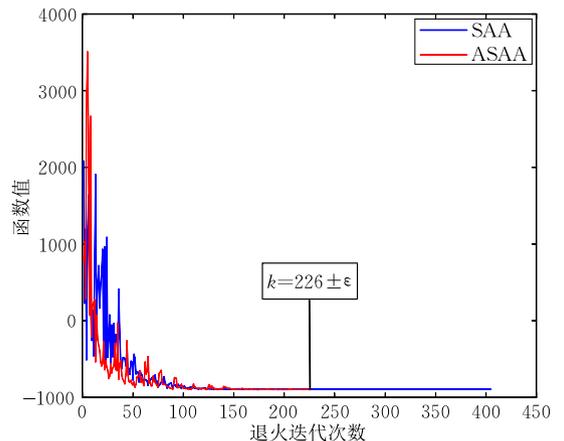
测试函数	固定退火方法			自适应退火方法		
	函数平均值	马尔科夫链总长度	标准差 $\sigma$	函数平均值	马尔科夫链总长度	标准差 $\sigma$
$f_1(n=10)$	-1400	449 000	0	-1399.815	298 100	0.113 670
$f_2(n=10)$	-899.651 365	405 000	0.336 784	-896.259 865	160 100	3.103 566
$f_3(n=10)$	-276.789 435	346 000	7.930 667	-270.287 04	127 700	5.991 292
$f_4(n=10)$	1307.645	449 000	3.364 907	1313.33	104 500	5.261 288
$f_5(n=100)$	11 090	494 000	626.878 741	10 416.655	395 700	740.018 345
$f_5(n=1000)$	100 007.4	553 000	3013.410 612	56 329.35	5 082 850	3695.738 175
$f_6(n=100)$	5026.35	449 000	288.878 279	5013	345 600	288.379 223

对于中等规模非数值优化问题,提出的停止准则也能够有效终止算法,与固定退火方法比较也能减少马尔科夫链总长度.如在求解  $f_5(n=100)$  时,自适应退火的模拟退火算法的目标函数平均值明显优于固定退火方法,且马尔科夫链总长度较之减少 20%.而对于大规模问题  $f_5(n=1000)$ ,固定退火方法退火搜索到一定程度就无法再优化,因为随着温度单调下降到最低时已陷入局部搜索,虽然可以采用回火策略,但是,需要人工设置几个回火时刻,也难以找准这样的时刻、回火次数和温度增加的幅度,通常是凭借经验法则进行设置.由于自适应退火方法内含自适应回火策略,能够保持搜索更优解的潜力,当然,增加了马尔科夫链总长度,这也是加大问题规模所必需的.

这里的统计对比分析,一方面表明本文提出的自适应温度设置方法和停止准则的稳定性和鲁棒性,另一方面也表明停止准则能够有效地消除退火后期的无效搜索,提高算法的求解效率.对较大规模的  $f_5(n=1000)$  的求解表明,自适应退火方法增强了模拟退火算法求解大规模问题的能力.

#### 4.3.2 算法收敛过程分析

图 9~图 22 分别描绘了自适应退火的模拟退火算法并运用停止准则求解各测试问题的函数值收敛曲线和温度曲线.为了便于比较,固定退火的模拟退火算法求解相应测试问题的函数值收敛曲线也绘于同一图中.其中图 10、图 16 和图 20 的温度曲线作了取对数尺度变换,加大温度值的幅度以便于显示温度的变化.算法参数设置如 4.1、4.2 和 4.3.1 小节所给出.图中纵轴表示函数值或者温度值,横轴表示退火迭代次数,即外层循环次数.图中标记的时刻值即为算法求解相应测试问题的停止时刻,也即  $k$  表示的是算法终止时外层循环的次数,其中  $\epsilon$  为一个较小的正整数.此外,用红色(ASAA)标记自适应退火算法的函数值收敛曲线,蓝色(SAA)标记固定退火算法的函数值收敛曲线.

图 9  $f_1(n=10)$  算法停止时刻图 10  $f_1(n=10)$  自适应退火的温度曲线图 11  $f_2(n=10)$  算法停止时刻

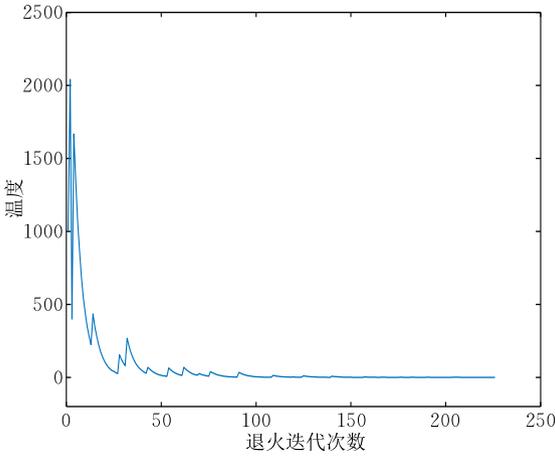


图 12  $f_2(n=10)$  自适应退火的温度曲线

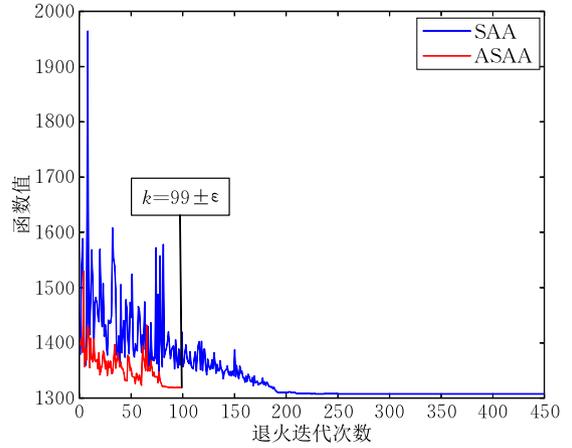


图 15  $f_4(n=10)$  算法停止时刻

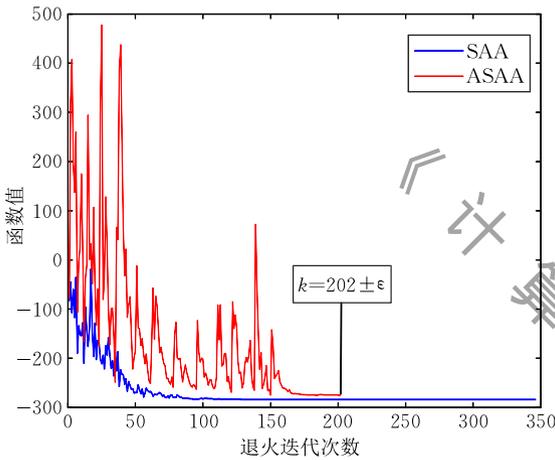


图 13  $f_3(n=10)$  算法停止时刻

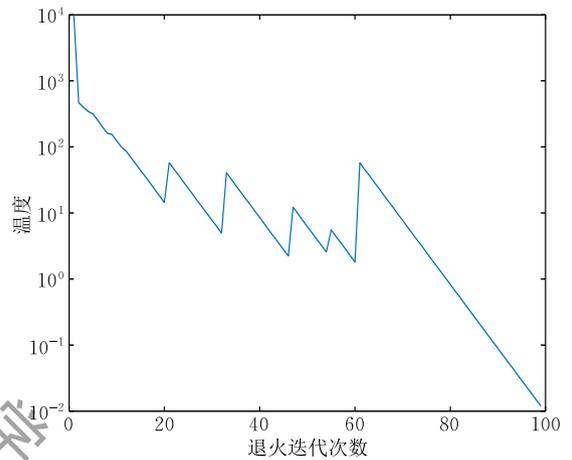


图 16  $f_4(n=10)$  自适应退火的温度曲线

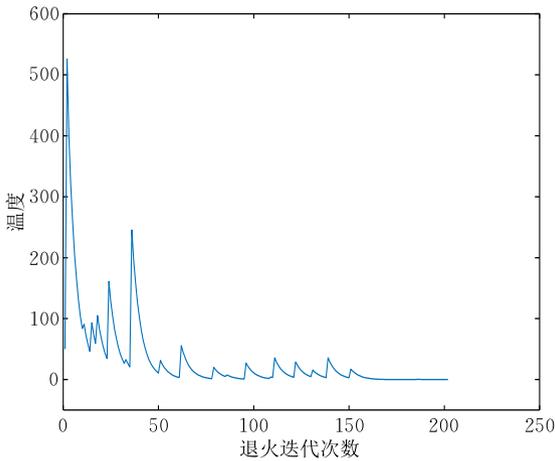


图 14  $f_3(n=10)$  自适应退火的温度曲线

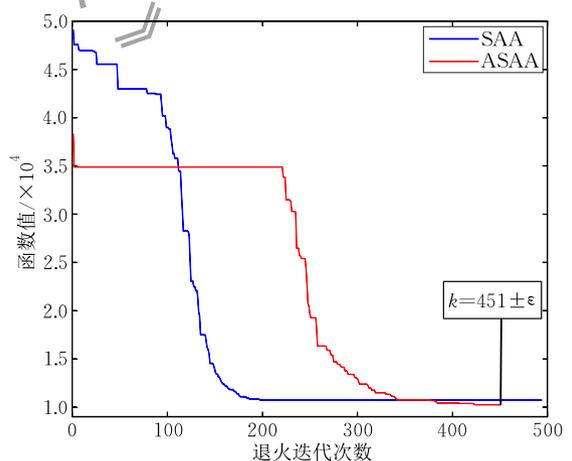
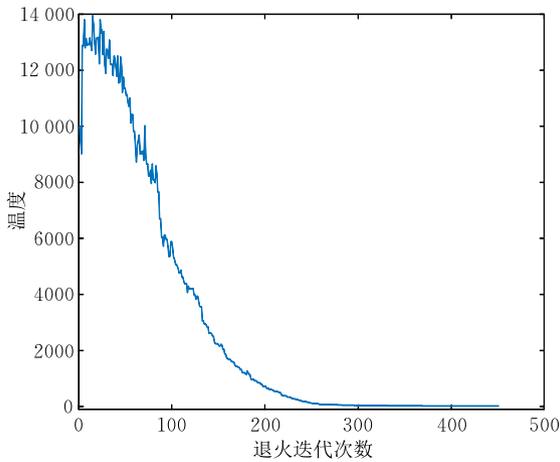
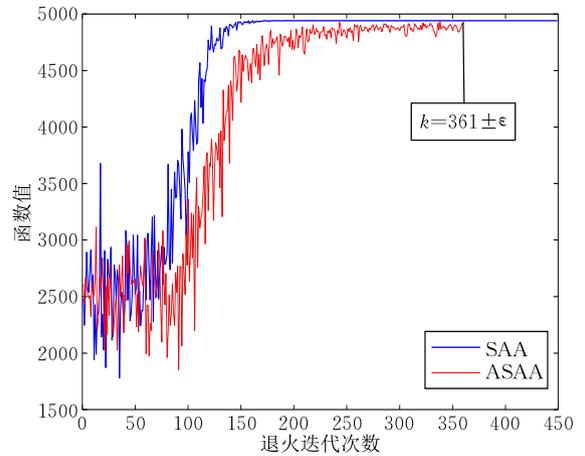
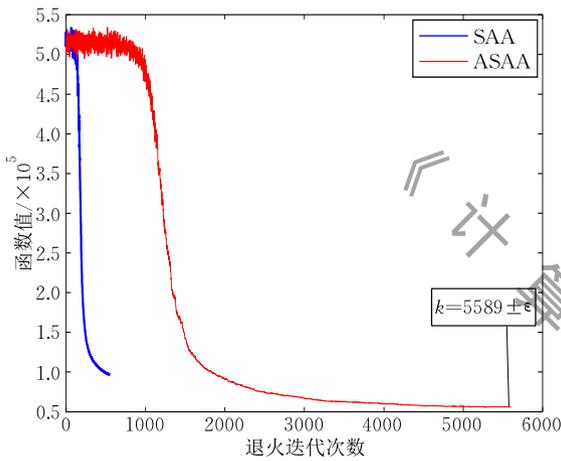
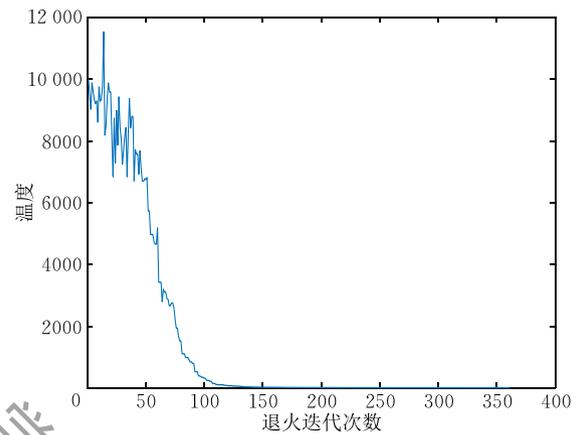
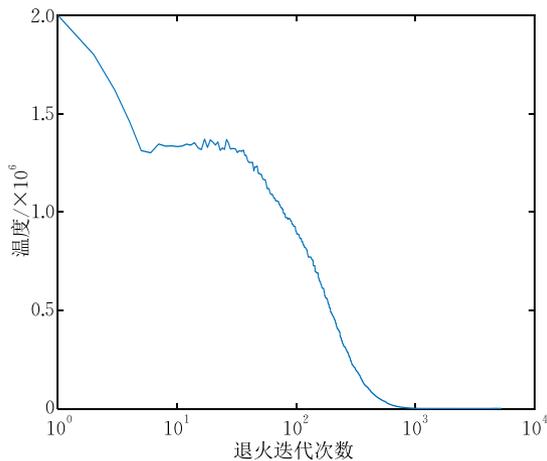


图 17  $f_5(n=100)$  算法停止时刻

考察数值优化问题,比较函数值曲线和温度曲线,可以发现函数值和温度值的波动基本同步,整体呈下降趋势.到了算法运行后期,函数值向最优解趋近,温度趋近于 0 值,直至满足停止准则,观察求解  $f_3(n=10)$  的两条曲线,此特性尤其明显.再观察函数数值收敛曲线的停止时刻,四个问题都是按给定的

误差界限,算法退火搜索收敛到了最小值附近停止,有效地消除了后期无效局部搜索.

对于中等规模的非数值优化问题,回火次数适中,温度平稳地波动,幅度恰当,同样整体呈下降趋势.到了中后期,温度的变化也与函数值的变化基本一致.特别是对 TSP 问题  $f_5(n=100)$  的求解,虽然

图 18  $f_5(n=100)$  自适应退火的温度曲线图 21  $f_6(n=100)$  算法停止时刻图 19  $f_5(n=1000)$  算法停止时刻图 22  $f_6(n=100)$  自适应退火的温度曲线图 20  $f_5(n=1000)$  自适应退火的温度曲线

不知其最优解,但收敛曲线中停止时刻得到的解优于固定退火算法的求解结果.这表明内含的自适应回火机制,扩大了算法的搜索范围,使其能找到更好的优化解,加大搜索到全局最优解的可能性,同时也有效地消除了无效搜索.

对于大规模问题,以  $f_5(n=1000)$  为例考察图 19,虽然固定退火的模拟退火算法很早就停止了,但是,是因为算法已进入局部搜索,再无“跳阱”以进一步优化下去的能力,这反映了固定退火方法的局限性.再看自适应退火的模拟退火算法,虽然退火迭代步数增加了很多,这是因为自适应温度设置方法内含的自适应回火机制,使算法对于大规模问题的求解还有继续寻优的能力,从表 4 可看出,对  $f_5(n=1000)$ ,它们 20 次优化求解的平均值之差为 43 678.这里的对比分析表明,退火温度自适应设置方法具有较好的适应性和可推广性.

以上对比分析以及前面的参数分析表明,自适应退火方法将温度的设置与待求解问题的目标函数值关联,使得算法与问题紧密联系,温度的变化同步反映算法的搜索状态,更具有针对性.从而,以自适应温度设置为基础提出的停止准则也与问题紧密关联,能给出恰当的算法终止时刻.理论分析和实验验证均表明了基于自适应温度设置的停止准则的有效性和适用性.

## 5 总结与展望

本文在前期建立的模型和研究工作的基础上,基于模拟退火算法的弛豫时间模型,对模型进行积分求解导出了退火温度的理论估计,据此提出了动态自适应退火温度设置方法,将退火温度与问题的目标函数值关联.针对数值优化问题,借鉴数值计算中的正则化方法,由温度估计导出了带正则补偿项的自适应温度设置公式.针对非数值优化问题,仿照 Metropolis 准则,依据温度估计给出了自适应温度设置的类 Metropolis 准则.两种自适应温度设置方法中,均内含自适应回火机制.进一步,提出了与它们相适应的模拟退火算法停止准则.而后,选取若干典型的测试问题进行了实验验证与分析.实验结果表明,动态自适应退火方法设置的温度与问题的目标函数值紧密关联,温度值的变化能同步反映算法的搜索状态,实验结果也验证了提出的停止准则的有效性 with 适用性.本文的研究工作也进一步证明,前期建立的弛豫时间模型不仅能指导马尔科夫链长度的动态设置,也能指导退火温度的自适应设置.验证了理论模型和推断分析方法的正确性,同时也表明了该模型是一个分析模拟退火算法时间复杂性的有效模型,具有推广价值.

必须说明,在退火温度估计的理论推导过程中作了一些假设和近似计算,但是,那些假设一方面有统计物理学基础,另一方面与模拟退火算法的运行性态相适应,具有合理性,近似计算也在可控的范围之内,因此,不失一般的理论意义.事实上,温度的理论估计实际应用于指导温度设置时,作了必要的修正和补充.通过实际求解测试问题,设计的实验方案及其求解结果也从多方面验证了这些假设的合理性,理论分析结果的正确性,对理论结果进行修正补充的必要性、合理性与适用性.

本文是对前期建立的理论模型和由此导出的理论结果的运用,但也仅仅是一个方面的理论用于指导算法的改进.从理论模型和实际应用出发还有进一步深入研究的必要,理论上,现有模型的推广或建立更适合于推广的模型,导出具有指导意义的理论结果;实验上,做更全面的分析,特别是两类自适应温度设置方法中的参数  $\alpha$  和  $\gamma$ ,还可以作更精细的实验研究,以期获得更佳的改进效果.更重要的是,发展这里的模型和理论应用于自然与演化计算的理论分析和算法设计之中.

虽然,模拟退火算法是一个简单的启发式拟物

算法,还受固有单点搜索的局限,但是,它的启发式策略简单有效,物理学背景清晰,本质上是一类自然计算算法.本文所研究的退火温度设置方法与问题的目标函数紧密关联,与经典模拟退火算法中的温度有着本质的不同,那里的退火温度通常是人为设定的,与问题无关.所以,这里的弛豫模型和温度估计方法,从原理上可以进一步推广.事实上,以群体搜索为特征的群智能算法,如演化算法等也属自然计算算法之列,它们的群体本身就可以比拟为气体运动系统,适合于用统计物理的模型和理论描述<sup>[16-18]</sup>,与模拟退火算法的数理基础相通.因此,基于弛豫模型的温度估计及其设置方法可以自然地推广到演化计算领域,融合于一类群智能算法的设计和理论分析之中.这些将是我们后续研究工作的重点之一.另一方面,模拟退火算法作为单点搜索的启发式算法,其搜索性能和求解效果自然不能与现代智能化算法相提并论.所以,现在几乎没有单独研究改进算法本身这方面的工作.但是,面向实际应用可以发挥它简单快速的轻骑兵优势,以少的代价获得可应用的方案<sup>[29-31]</sup>.因此,结合实际应用领域或其他学科领域的问题,设计与之相适应的模拟退火算法,发挥其简单快捷的优势也是一个有意义的应用研究方向.

## 参 考 文 献

- [1] Dowsland K A, Thompson J M. Simulated annealing. Handbook of Natural Computing. Berlin, Germany: Springer, 2012: 1623-1655
- [2] Kirkpatrick S, Gelatt C D, Vecchi M P. Optimization by simulated annealing. Science, 1983, 220(4598): 671-680
- [3] Zhan S, Lin J, Zhang Z, et al. List-based simulated annealing algorithm for traveling salesman problem. Computational Intelligence and Neuroscience, 2016, 20165(3): 1-12
- [4] Fu Wen-Yuan, Ling Chao-Dong. Brownian motion based simulated annealing algorithm. Chinese Journal of Computers, 2014, 37(6): 1301-1308(in Chinese)  
(傅文渊, 凌朝东. 布朗运动模拟退火算法. 计算机学报, 2014, 37(6): 1301-1308)
- [5] Xavier-de-Souza S, Suykens J A K, Vandewalle J, et al. Coupled simulated annealing. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B(Cybernetics), 2010, 40(2): 320-335
- [6] Geng X, Chen Z, Yang W, et al. Solving the traveling salesman problem based on an adaptive simulated annealing algorithm with greedy search. Applied Soft Computing, 2011, 11(4): 3680-3689
- [7] Lundy M, Mees A. Convergence of an annealing algorithm. Mathematical programming, 1986, 34(1): 111-124

- [8] Granville V, Krivánek M, Rasson J P. Simulated annealing: A proof of convergence. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 1994, 16(6): 652-656
- [9] Jansen T, Wegener I. A comparison of simulated annealing with a simple evolutionary algorithm on pseudo-Boolean functions of unitation. *Theoretical Computer Science*, 2007, 386(1-2): 73-93
- [10] Meer K. Simulated annealing versus Metropolis for a TSP instance. *Information Processing Letters*, 2007, 104(6): 216-219
- [11] Sasaki G H, Hajek B. The time complexity of maximum matching by simulated annealing. *Journal of the ACM*, 1988, 35(2): 387-403
- [12] Javidrad F, Nazari M. A new hybrid particle swarm and simulated annealing stochastic optimization method. *Applied Soft Computing*, 2017, 60(7): 634-654
- [13] Smith K I, Everson R M, Fieldsend J E, et al. Dominance-based multiobjective simulated annealing. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2008, 12(3): 323-342
- [14] Mafarja M M, Mirjalili S. Hybrid whale optimization algorithm with simulated annealing for feature selection. *Neurocomputing*, 2017, 260(5): 302-312
- [15] Torkaman S, Ghomi S M T F, Karimi B. Hybrid simulated annealing and genetic approach for solving a multi-stage production planning with sequence-dependent setups in a closed-loop supply chain. *Applied Soft Computing*, 2018, 71(11): 1085-1104
- [16] Mori N, Yoshida J, Tamaki H, et al. A thermodynamical selection rule for the genetic algorithm//*Proceedings of the IEEE International Conference on Evolutionary Computation*. Perth, Australia, 1995: 180-188
- [17] Li Yuanxiang, Zou Xiufen. A new dynamical evolutionary algorithm from statistical mechanics. *Journal of Computer Science and Technology*, 2003, 18(3): 361-368
- [18] Cornforth T W, Lipson H. A hybrid evolutionary algorithm for the symbolic modeling of multiple-time-scale dynamical systems. *Evolutionary Intelligence*, 2015, 8(4): 149-164
- [19] Li Yuan-Xiang, Xiang Zheng-Long, Xia Jie-Ning. Dynamical system models and convergence analysis for simulated annealing algorithm. *Chinese Journal of Computers*, 2019, 42(6): 1161-1173(in Chinese)  
(李元香, 项正龙, 夏界宁. 模拟退火算法的动力系统模型及收敛性分析. *计算机学报*, 2019, 42(6): 1161-1173)
- [20] Li Yuan - Xiang , Xiang Zheng - Long , Zhang Wei - Yan . A relaxation model and time complexity analysis for simulated annealing algorithm. *Chinese Journal of Computers*, 2020, 43(5): 796-811(in Chinese)  
(李元香, 项正龙, 张伟艳. 模拟退火算法的弛豫模型与时间复杂性分析. *计算机学报*, 2020, 43(5): 796-811)
- [21] Chen Ren- Lie. *Introduction to Statistical Physics*. Beijing: Higher Education Press, 1978(in Chinese)  
(陈仁烈著. *统计物理引论*. 北京: 高等教育出版社, 1978)
- [22] Huang Zu-Qia, Ding E-Jiang. *Transport Theory*. Beijing: Science Press, 2008(in Chinese)  
(黄祖洽, 丁鄂江著. *输运理论*. 北京: 科学出版社, 2008)
- [23] Chapman S, Cowling T G. *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*. 3rd Edition. London, UK: Cambridge University Press, 1970
- [24] Papoulis A, Pillai S U. *Probability, Random Variables and Stochastic Processes*. McGraw-Hill Companies, Inc. 2002
- [25] Zhang Bo, Zhang Jing-Xiao. *Application of Stochastic Processes*. Beijing: Tsinghua University Press, 2004(in Chinese)  
(张波, 张景肖著. *应用随机过程*. 北京: 清华大学出版社, 2004)
- [26] Liang J J, Qu B Y, Suganthan P N. Problem definitions and evaluation criteria for the CEC 2014 special session and competition on single objective real-parameter numerical optimization. *Computational Intelligence Laboratory, Zhengzhou University, Zhengzhou China and Technical Report*, Nanyang Technological University, Singapore, 2013
- [27] Jin Li-Xia, Tang Huan-Wen, Li Bin, et al. A simulated annealing algorithm for continuous functions and its convergence properties. *Mathematica Numerica Sinica*, 2005, 27(1): 19-30(in Chinese)  
(靳利霞, 唐焕文, 李斌等. 一类连续函数模拟退火算法及其收敛性分析. *计算数学*, 2005, 27(1): 19-30)
- [28] Aarts E, Korst J. *Simulated Annealing and Boltzmann Machines*. New York: John Wiley and Sons Inc. , 1988
- [29] Bouttier C, Gavra I. Convergence rate of a simulated annealing algorithm with noisy observations. *Journal of Machine Learning Research*, 2019, 20(1): 1-45
- [30] Leite N, Melcio F, Rosa A C. A fast simulated annealing algorithm for the examination timetabling problem. *Expert Systems with Applications*, 2019, 122(3): 137-151
- [31] Lee S, Kim S B. Parallel simulated annealing with a greedy algorithm for Bayesian network structure learning. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2019, DOI 10.1109/TKDE.2019.2899096



**LI Yuan-Xiang**, Ph. D. , professor. His main research interests include evolutionary computation and parallels computation, etc.

**JIANG Wen-Chao**, M. S. candidate. His main research interest is evolutionary computation.

**XIANG Zheng-Long**, Ph. D. candidate. His main research interests include evolutionary computation and search-based software engineering.

**ZHANG Wei-Yan**, Ph. D. candidate. Her main research interest is evolutionary computation.

## Background

Simulated annealing algorithm, proposed by Metropolis in 1953, has been achieved many results in algorithm design and application researches. Currently, with the decades of research and development, the theoretical researches for the algorithm on performance analysis and time complexity analysis are based primarily on the Markov chain theory in the random process, which obtains the total time complexity of specific problems. It is hard to get the interpretation of the operating mechanism and deduce instructional improved strategy. Due to mathematics and physics which have robust theories and rich methods, and modern complex dynamical systems such as dynamical systems and statistical mechanics are compatible with the evolutionary dynamics of evolutionary algorithms. These methods can be implemented to the theoretical analysis of nature inspired algorithms.

In this paper, the relaxation model, which built on the classical gas transport theory, especially the BGK relaxation equation, is proposed and established to model and analyze the simulated annealing algorithm. Thus, by comparing the searching process of the algorithm to the non-uniform gases, a dynamical system model was established for the algorithm before. By solving the model integrally a theoretical estimation

of annealing temperature was derived. Then, we propose adaptive annealing temperature setting methods based on the model, which set the annealing temperature correlated with the problem's objective function values. Additionally, a novel stop criterion for stopping the algorithm process is given. The numerical experiments show that the temperatures setting by the adaptive annealing methods are closely related to the problem's objective function values, and the temperature's changes can reflect the search state of the algorithm synchronously. And also verify the validity and applicability of the proposed stopping criteria and the correctness of theoretical analysis and inference.

The work is supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 61672391). The project is intended to study the mathematical-physical models for nature inspired computation and to design algorithms of nature inspired computation by using theory and methods of mathematics and physics. Up to now, the project team has proposed some useful models, by which we obtained meaningful results in theory and experiment for analyzing simulated annealing algorithm and evolutionary algorithms. And progress is partly made for this project.