第 7 卷 第 4 期　　光学 精密工程　　Vol. 7, No. 4
1999 年 8 月　　OPTICS AND PRECISION ENGINEERING　　August, 1999

文章编号 1004-924X(1999) 04- 0016- 06

全局优化算法
自适应模拟退火-遗传算法的研究

樊叔维　　张兴志
(中国科学院长春光学精密机械研究所　　长春 130022)

摘 要 对模拟退火法和遗传算法作了简要叙述,并深入分析了模拟退火法和遗传算法的寻优特性,指出了模拟退火法存在的不足及遗传算法的优良特性,从而引入了自适应模拟退火- 遗传算法,并定性分析了该算法的可行性。

关键词 模拟退火 遗传算法
中图分类号 O439　　文献标识码 A

1 模拟退火法的基本原理

模拟退火法(Simulated annealing, SA)是模拟热力学中经典粒子系统的降温过程,来求解规划问题的极值。当孤立粒子系统的温度以足够慢的速度下降时,系统近似处于热力学平衡状态,最后系统将达到本身的最低能量状态,即基态,这相当于能量函数的全局极小点。由于模拟退火法能够有效地解决大规模的组合优化问题,且对规划问题的要求极小,因此引起研究人员的极大兴趣。在光学设计领域中,该方法已成为一种极具发展前景的一种优化方法[1- 3],可以预料,该方法的成功应用将促使光学设计进一步向智能化发展。

模拟退火法的基本原理如下:

(1) 给定初始温度 T_0,及初始点,计算该点的函数值 $f(x)$。

(2) 随机产生扰动 Δx,得到新点 $x' = x + \Delta x$,计算新点函数值 $f(x')$,及函数值差 $\Delta f = f(x') - f(x)$。

(3) 若 $\Delta f \leqslant 0$,则接受新点,作为下一次模拟的初始点;

(4) 若 $\Delta f > 0$,则计算新点接受概率: $p(\Delta f) = \exp(-\frac{\Delta f}{K \cdot T})$,产生 [0, 1] 区间上均匀分布的伪随机数 r, $r \in [0, 1]$,如果 $p(\Delta f) \geqslant r$,则接受新点作为下一次模拟的初始点;否则放弃新点,仍取原来的点作为下一次模拟的初始点。

收稿日期: 1998-06- 25
修稿日期: 1999-01-10

以上步骤称为 Metropolis 过程。按照一定的退火方案逐渐降低温度, 重复 Metropolis 过程, 就构成了模拟退火优化算法, 简称模拟退火法。当系统温度足够低时, 就认为达到了全局最优状态。按照热力学分子运动理论, 粒子作无规则运动时, 它具有的能量带有随机性, 温度较高时, 系统的内能较大, 但是对某个粒子而言, 它所具有的能量可能较小。因此算法要记录整个退火过程中出现的能量较小的点。

在模拟退火优化算法中, 降温的方式对算法有很大影响。如果温度下降过快, 可能会丢失极值点; 如果温度下降过慢, 算法的收敛速度又大大降低。为了提高模拟退火优化算法的有效性, 许多学者提出了多种退火方案, 有代表性的有:

(1) 经典退火方式: 降温公式为: $T(t) = \frac{T_0}{\ln(1+t)}$; 特点是温度下降很缓慢, 因此, 算法的收敛速度也是很慢的。

(2) 快速退火方式: 降温公式为: $T(t) = \frac{T_0}{1+\alpha t}$; 这种退火方式的特点是在高温区, 温度的下降是比较快的, 而在低温区, 降温的速率较小。这符合热力学分子运动理论中, 某粒子在高温时, 具有较低能量的概率要比在低温时小得多, 因此寻优的重点应在低温区。式中 α 可以改善退火曲线的形态。

2　模拟退火方法存在的不足

通过分析模拟退火法的基本原理, 可知, 模拟退火法在一系列递减温度下产生的点列, 从理论上讲, 可以看作是一系列的马尔可夫链 (Markov Chains)。在某一温度下多次重复 Metropolis 过程, 目标函数值的分布规律将满足玻尔兹曼分布规律。如果系统温度以足够慢的速率下降, 玻尔兹曼分布就趋向收敛于全局最小状态的均匀分布。也就是说, 若按照一定的条件产生无限长的马尔可夫链, 模拟退火法就能保证以概率 1.0 收敛于全局极小点, 该结论已被文献[4] 证明。文献[4] 指出, 在某一温度下, 只要计算时间足够长, 也就是马尔可夫链足够长, 其起始点的函数值将以很高的概率低于终止点的函数值, 即求得全局最小点。

通过上面的分析可以看出, 模拟退火法主要存在以下不足:

(1) 尽管理论上只要计算时间足够长, 模拟退火法就可以保证以概率 1.0 收敛于全局最优点。但是在实际算法的实现过程中, 由于计算速度和时间的限制, 在优化效果和计算时间二者之间存在矛盾, 因而难以保证计算结果为全局最优点, 优化效果不甚理想。

(2) 在每一温度下很难判定是否达到了平衡状态, 即马尔可夫链的长度不易控制, 反应到算法上, 就是 Metropolis 过程的次数不易控制。

(3) 模拟退火算法中的两种退火方式, T 始终按照优化前给定的规律变化而没有修正, 这是不科学的。

为了解决模拟退火法存在的不足, 台湾学者 Feng-Tse Lin 等人曾提出了用遗传算法的优点来改进模拟退火算法的模拟退火-遗传算法。本文将在退火过程中综合考虑计算结果及搜索路径而确定 T 的取值方法的自适应模拟退火法与遗传算法相结合, 形成自适应模拟退火–遗传算法, 从而改进模拟退火算法本身所存在的不足。

3 自适应模拟退火-遗传算法

3.1 遗传算法

在这里我们需要简单介绍一下遗传算法。遗传算法(Genetic Algorithm, GA)是一种随机性优化算法,最初是由美国密执根大学 J. H. HOLLAND 教授于 1975 年提出来的。它的突出特点在于包含了与生物遗传及进化很相似的步骤,如遗传,变异,选择等,遗传算法的详细介绍请参看相关文献[5]。它的优化步骤可以简单表示如图 1。

遗传算法与传统的优化算法相比,具有以下特点:

(1) 该算法是利用目标函数本身的信息建立寻优方向,而不是利用其导数信息建立寻优方向,因此它对优化设计问题的限制较少,仅要求问题是可计算的。

(2) 遗传算法利用概率转移规则,可以在一个具有不确定性的空间上寻优。与一般的随机型优化方法相比,遗传算法不是从一点出发沿一条线寻优,而是在整个解空间同时开始寻优搜索,因此可以有效地避免陷入局部极小点,具备全局最优搜索性。

(3) 在该算法中,由于群体中每各个体的搜索是独立进行的,因此算法具有内在的并行计算特性。

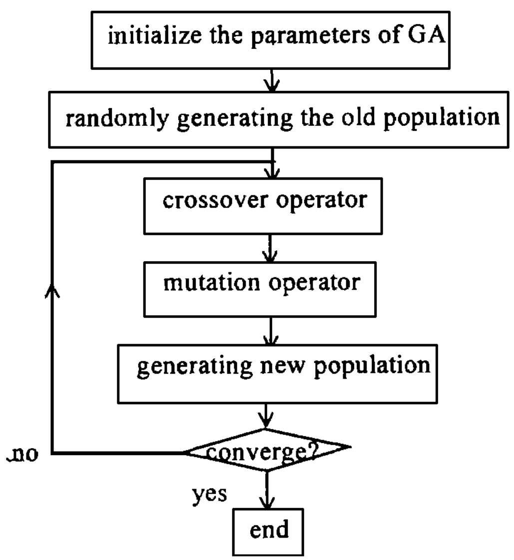

Fig.1 Genetic algorithm

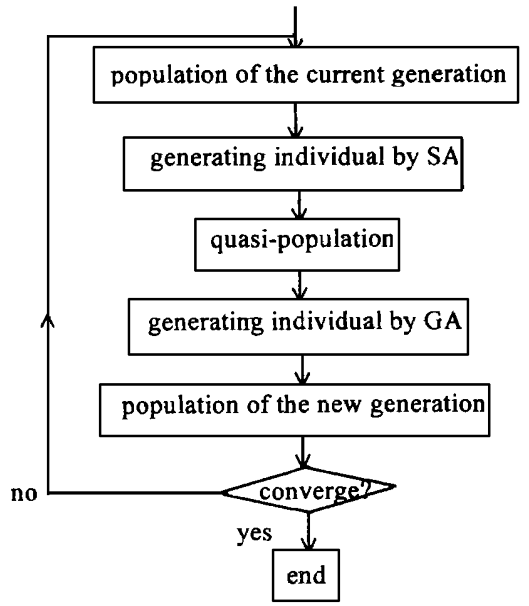

Fig.2 Simulated annealing-genetic algorithm

3.2 自适应模拟退火– 遗传算法的基本思想

模拟退火-遗传算法的过程可以用图 2 表示。该算法包括了两个过程:模拟退火机制的搜索过程及遗传规则的进化过程。在第一个过程中,在某一个温度下,从当前一代群体中任选取一组个体,这些个体就代表了不同的寻优方向。为了找到更优的解,在搜索空间中遇到爬山的情况时采用一种启发式方法来指导搜索方向。在每个温度下,被这些搜索方向访问过的个体,

就加入到候选群体中, 候选群体产生后, 退火过程就结束了。

完成候选群体后, 第二个过程就是要按照遗传规则进行进化。这里选用的遗传规则主要有遗传, 变异等。通过对候选个体进行一系列的遗传操作后, 就得到进化后的一代群体。一般来说, 新的一代群体的平均函数值比前一代要小许多。

至此就完成了该算法的一个循环, 然后通过降低温度后, 开始另外一个循环, 直至算法收敛。

前面指出传统的模拟退火算法中的两种退火方式, T 始终按照优化前给定的规律变化而没有修正, 这是不科学的。自适应模拟退火方法中 T_{i+1} 的确定考虑了 T_i 下的计算结果和搜索路经, 其思想详见文献[6]。

3.3　自适应模拟退火-遗传算法的可行性分析

由于该算法是随机型算法, 目前理论上还未能证明该算法能以概率 1.0 收敛于全局极小点, 在这里我们只作定性分析。

模拟退火法在某一温度下产生的有限长度的马尔科夫链如图 3 所示, 它只有一个起始点, 一个终止点。终止点的函数值比起始点可能高, 也可能低, 它与计算时间有关。当循环次数增加(马尔科夫链的长度增加) 时, 终止点函数值低的概率就增大。

在模拟退火– 遗传算法中, 马尔科夫链的长度, 是由群体中个体的数目决定的。首先, 从当前一代中选取一个目标函数值较低的个体作为当前点, 按移代策略产生一个新点。若该新点按照玻尔兹曼准则被接受, 那么该新点不仅成为当前点, 而且亦成为候选种群中的个体; 否则, 就要从当前一代中按概率重新选取一个点作为新的当前点, 继续产生新点。

在某一温度下, 按照此方法产生的马尔科夫链如图 4 所示, 从图上可以看出, 它与模拟退火法产生的马尔科夫链的不同之处主要是有多个起始点、多个终止点。这样, 从多个不同点进行寻优, 就容易跳出局部极小点, 找到全局最优点。另外, 合理的种群个数也解决了马尔科夫链的长度问题(不必再要求无限长度) 。这样大大提高了找到全局最优解或近似全局最优解的概率, 同时也使计算时间控制在合理的范围内, 实际的计算结果也证明了上述观点。

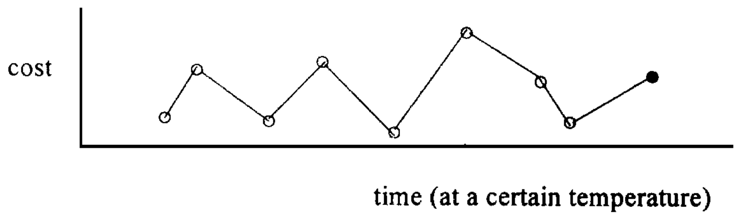

Fig. 3　A Markov chain generated by SA

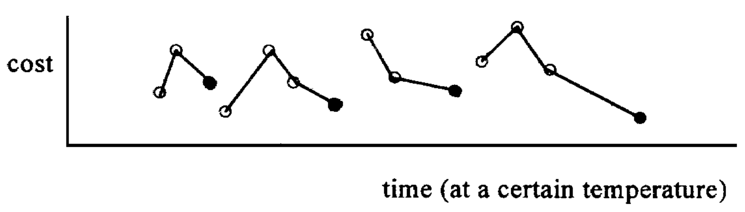

Fig. 4　A Markov chain generated by SA-GA

算法中采用启发式方法来指导寻优搜索方向,该方法的思想及算法中参数的选取方法以及算例另文发表。本文给出了应用模拟退火法及自适应模拟退火-遗传算法求解多极值检验函数 Camel 函数极小值的结果,表明该方法较模拟退火方法有很大的改进,取得好的优化效果。

例:求 Camel 函数 $f(x,y) = (4-2.1x^2+x^4/3)x^2+xy+(-4+4y^2)y^2$ 的最小值。

Camel 函数的理论全局最小点为(0.0898, -0.7126),最小值为:-1.0316284。

求解结果:

模拟退火法:

最小点为: $x = 0.0911977, y = -0.734221$,最小值为: $f(x,y) = -1.02773$

自适应模拟退火-遗传算法:

最小点为: $x = 0.08789, y = -0.71286$,最小值为: $f(x,y) = -1.031613$

4 结 束 语

模拟退火方法在光学设计领域中已得到了广泛的应用,但该方法本身存在的不足使其在实际应用中难以保证计算结果的最优性,将遗传算法与模拟退火方法有效地结合起来,并在退火过程中综合考虑了计算结果及搜索路径,形成自适应模拟退火-遗传算法,其寻优性能将优于模拟退火方法。

参 考 文 献

1 Dams M P, Dowling R J, et al. Efficient optical elements to generate intensity weighted sport arrays: design and fabrication. Appl Opt, 1991, 30(19): 2685-2691

2 Kim M S, Feldman M R, Guest C C. Optimum encoring of binary phase-only filters with a simulated annealing algorithm. Opt Lett, 1989, 14(11): 545-547

3 Yang G G. Optimal design of high efficiency optical interconnection system with a simulated annealing algorithm. Third International Conference on Holographic Systems, Components, Edinburgh, UK, Sept. 1991. 45-49

4 Stuart G, Donald G. Stochastic Relaxation Gibbs Distributions, and the Buyesian restoration of images. IEEE Trans On PAMI, 1984, PAMI-6, 6: 721-741

5 Goldberg E. Genetic algorithm in search, optimization and machine learning. Addison-Wesley, Reading, Mass, 1987

6 汪友华, 颜威利. 自适应模拟退火法在电磁场逆问题中的应用. 中国电机工程学报, 1995, 15(4): 234~238

Study of the Global Optimal Method Self-adaptation Simulated Annealing genetic Algorithm

FAN Shu-Wei, ZHANG Xing-Zhi
(Changchun Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130022)

Abstract

The basic principle of simulated annealing method and genetic method are described and the optimal characteristic of the two methods are studied in detail. The imperfection of simulated annealing and perfection of genetic method are pointed out. Then the refined method , self-adaptation simulated annealing- genetic algorithm is presented.

Key Word: Simulated annealing, Genetic algorithm

樊叔维　女, 1968 年生, 1989 年毕业于西安交通大学, 1997 年在该校获得博士学位。现为中国科学院长春光机所博士后。