

文章编号:1000-582X(2003)10-0120-04

基于均匀布点的模拟退火算法*

张志远

(四川达州师范高等专科学校, 四川 达州 635000)

摘要:把实验设计中的均匀设计思想引入模拟退火,提出了一种基于均匀设计变量的模拟退火优化方法。该方法根据均匀设计原理在优化模型的设计变量空间内均匀分布一系列点,然后将可行域内的上述系列布点作为优化计算的系列初始点,并运用模拟退火算法,分别开始进行优化计算,得到优化模型的一系列局部最优点。最后,比较所有局部最优点的最优值,即认为在一定程度上获得了该优化问题的全局最优解。该算法可求取非线性多峰函数的全局最优解。编制了计算程序,给出了计算实例,计算结果表明该设计方法是可行的。

关键词:均匀布点;模拟退火;全局最优解

中图分类号:TH122

文献标识码:A

1982年,Kirkpatrick等人首先意识到固体退火过程与组合优化问题之间存在的类似性,Metropolis等人对固体在恒定温度下达到热平衡过程的模拟也给他们以启迪:应该把Metropolis准则引入到优化过程中来。最终他们得到一种对Metropolis算法进行迭代的组合优化算法,这种算法模拟固体退火过程,称为模拟退火算法^[1]。固体退火过程的物理图像和统计性质是模拟退火算法的物理背景;Metropolis接受准则使算法脱离局部最优的“陷阱”;而冷却进度表的合理选择是算法应用的前提。

随着该算法的发展,引起了越来越多的学者的关注,其应用领域也变得非常广泛。特别是应用在神经网络中,促使了该学科的发展。近年来,许多学者都成功地模拟退火应用于工程大规模复杂问题的优化,取得了令人满意的效果,是现代智能搜索优化算法的主要方法之一^[2-6]。

1 模拟退火算法的基本原理

1.1 固体退火过程

固体退火过程是先将固体加热至熔化,再逐步冷却使之凝固成规则晶体的热力学过程,属于热力学与统计物理研究的范畴。在加热固体时,固体粒子的热运动不断增强,随着温度的升高,粒子与其平衡位置的

偏离越来越大。当温度升至溶解温度后,固体的规则性被彻底破坏,固体溶解为液体,粒子排列从较为有序的结晶态变为无序的液态,这个过程称为溶解。溶解过程的目的是消除系统中原先可能存在的非均匀状态,使随后进行的冷却过程以某一平衡态为始点。溶解过程与系统的熵增过程相联系,系统能量也随温度升高而增大。

冷却时,液态粒子的热运动逐渐减弱,随着温度的逐步降低,粒子运动渐趋有序。当温度降至结晶温度后,粒子运动变为围绕晶体格点的微小振动,液体凝固成固体的晶态,这个过程称为退火。退火过程之所以必须“逐步”进行,是为了使系统的熵值不断减小,系统能量也随温度降低趋于最小值。冷却时若急剧降低温度,则将引起淬火效应,即固体只能冷凝为非均匀的亚稳态,系统能量也不会达到最小值。这一过程可以用封闭系统的等温过程来描述,根据Boltzmann有序原理,退火过程遵循应用于热平衡封闭系统的热力学定律——自由能减少定律。

1.2 Metropolis 准则

固体在恒定温度下达到热平衡的过程可以用Monte Carlo方法进行模拟。Monte Carlo方法的特点是算法简单,但必须大量采样才能得到比较精确的结果,因而计算量很大。从物理系统倾向于能量较低的

* 收稿日期:2003-06-04

基金项目:国家863计划(2001AA602012-03A)

作者简介:张志远(1964-),男,四川省遂宁人,四川达州师范高等专科学校副校长、副教授,博士研究生,主要从事工程物理和油气井工程等研究工作。

状态,而热运动又妨碍它准确落入最低态的物理图像出发,采样时着重取那些有重要贡献的状态,则可以较快地达到较好的效果。1953 年, Metropolis 等人提出重要性采样法,以下述方法产生固体的状态序列:

先给定以粒子相对位置表征的初始状态 i , 作为固体的当前状态, 该状态的能量是 E_i 。然后用摄动装置使随机选取的某个粒子的位移随机地产生一微小的变化, 得到一个新状态 j , 新状态的能量是 E_j 。如果 $E_j < E_i$, 则该新状态就作为“重要”状态。如果 $E_j > E_i$, 则考虑到热运动的影响, 该新状态是否“重要”状态, 要依据固体处于该状态的几率来判断。根据 Gibbs 正则分布, 固体处于状态 i 和 j 的几率的比值等于相应的 Boltzmann 因子的比值, 即:

$$r = \exp\left(\frac{E_i - E_j}{kT}\right) \quad (1)$$

r 是一个小于 1 的数。用随机数发生器产生一个 $[0, 1]$ 区间的随机数 ξ , 若 $r > \xi$, 则新状态 j 作为重要状态, 否则舍去。若新状态 j 是重要状态, 就以 j 取代 i 成为当前状态, 否则仍以 i 为当前状态。再重复以上新状态的产生过程。在大量迁移 (固体状态的变换称为迁移) 后, 系统趋于能量较低的平衡状态, 固体状态的概率分布趋于 Gibbs 正则分布。

由式(1)可知, 高温下可接受与当前状态能差较大的新状态为重要状态, 而在低温下只能接受与当前状态能差较小的新状态为重要状态。这与不同温度下热运动的影响完全一致。在温度趋于零时, 就不能接受任一 $E_j > E_i$ 的新状态 j 了。上述接受新状态的准则称为 Metropolis 准则, 相应的算法称为 Metropolis 算法, 这种算法的计算量显著减少。

1.3 模拟退火算法

设优化问题的一个解 i 及其目标函数 $f(i)$ 分别与固体的一个微观状态 i 及其能量 E_i 等价, 令随算法进程递减其值的控制参数 t 担当固体退火过程的温度 T 的角色, 则对于控制参数 t 的每一取值算法持续进行“产生新解—判断—接受/舍弃”的迭代过程就对应着固体在某一恒定温度下趋于热平衡的过程, 也就是执行了一次 Metropolis 算法。与 Metropolis 算法从某一初始状态出发, 通过计算系统的时间演化过程, 求出系统最终达到的状态相似, 模拟退火算法从某个初始解出发, 经过大量解的变换后, 可以求得给定控制参数值时优化问题的相对最优解。然后减小控制参数 t 的值, 重复执行 Metropolis 算法, 就可以在控制参数 t 趋于零时, 最终求得优化问题的全域最优解。由于固体退火必须“逐步”降温, 才能使固体在每一温度下都达到热平衡, 最终趋于能量最小的基态, 控制参数的值也必须缓慢衰减, 才能确保模拟退火算法最终趋于优化问题的全域最优解集。

模拟退火算法用 Metropolis 算法产生优化问题解的序列, 并由与 Metropolis 准则对应的转移概率 P_i 。

$$P_i(i \Rightarrow j) = \begin{cases} 1, & \text{当 } f(i) \leq f(j) \\ \exp\left(\frac{f(i) - f(j)}{t}\right), & \text{当 } f(i) > f(j) \end{cases} \quad (2)$$

确定是否接受从当前解 i 到新解 j 的转移, 式(2)中的 $t \in R^+$ 表示控制参数。开始让 t 取较大的值 (与固体的溶解温度相对应), 在进行足够多的转移后, 缓慢减小 t 的值 (与“逐步”降温相对应), 如此重复, 直至满足某个停止准则时算法终止。因此, 模拟退火算法可视为递减控制参数值时 Metropolis 算法的迭代。模拟退火算法的一般框架参见图 1 所示。

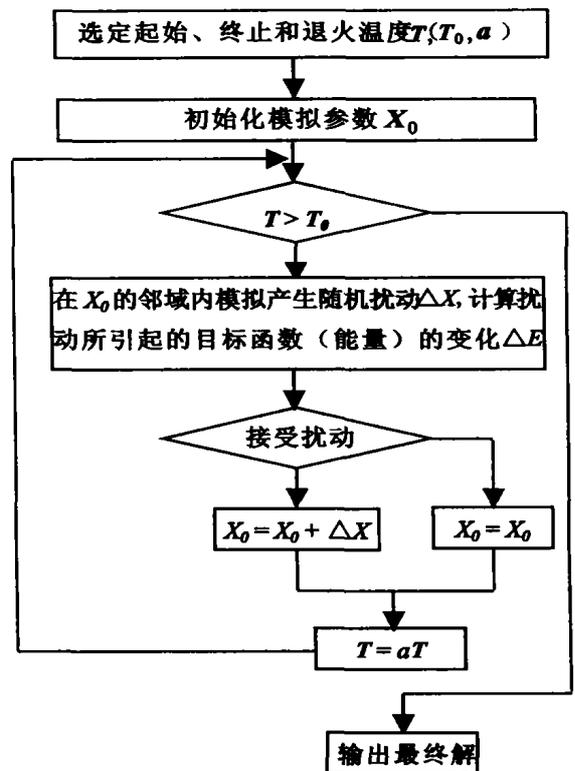


图 1 模拟退火算法框架图

2 基于均匀布点的模拟退火算法

上述的各种改进方法虽然在不同程度上提高了解的质量, 但解的质量与所用的时间仍是一对矛盾。如果单纯改进冷却进度表是不能从根本上解决问题的, 较好的办法是通过算法的并行较大幅度地提高效率。为此, 近几年来, 又提出了一些将模拟退火算法的思想和其它的启发式搜索算法相结合的混合启发式算法。比如: 将模拟退火和混沌优化相结合产生了“基于混沌变量的模拟退火优化方法”; 将模拟退火和遗传算法相结合产生了“基于遗传算法的退火优化方法”等。这些算法避免了模拟退火算法的收敛速度较慢和运行时

间较长的缺点,同时又避免了自身算法的某些不足。大大地提高了优化效率和全域最优解的质量。在此,笔者提出了将均匀设计的思想引入模拟退火的一种优化方法,经试算,该算法提高了收敛效率,解的质量也明显提高,能搜寻到工程优化问题的全域最优解。

2.1 算法的特点

均匀设计^[7-9](Uniform Design)是由我国数学家王元和方开泰首次提出的,他们将数论方法应用于实验设计,以均匀分散为准则,使试验点均匀地分布在试验范围内,使每个试验点都有充分的代表性。这样,均匀设计的试验点比正交设计的试验点分布得更均匀。又由于不再考虑“整齐可比性”,因而大大减少了试验次数。

模拟退火(SA)的概率突跳性使得该算法有避免局部极小的能力,但算法并不具有并行性,每一时刻又保留一个解,没有冗余和历史信息,虽然可通过控制温度在一定程度上控制算法性能,但优化过程中若退温过快会遗失优良解,而且使得算法需要很长的寻优时间。

将均匀设计的思想引入模拟退火后,用均匀设计方法为模拟退火算法产生每次优化的初始点,使得初始点的分布尽量均匀。然后,利用模拟退火算法在一定条件下可以保证以接近1的概率收敛到全域极小点,使得搜索到全域最优解成为了可能。而且,克服了模拟退火算法在执行过程中,每次只保留一个当前解的缺点,因而提高了算法的收敛速度。保留了每次优化的最好信息,保证了最优解的稳定性,提高了解的质量。

2.2 算法的实现

基于均匀布点的模拟退火算法的基本思想是:在均匀设计的基础上产生多个初始计算方案,然后采用一种并行计算策略,通过区间估计不断缩小搜索范围,直至满足收敛条件为止。

对于连续变量的优化问题,算法是这样实现的:首先,选取一种退火模式,即选取一组退火参数的取值及它们的变化规则。在定义域 D_0 内产生 u 个均匀设计点集 $(x_1^1, x_2^1, \dots, x_u^1)$ 作为初始计算点,同时进行模拟退火计算,那么可得到 u 个计算结果,记为 $(\xi_1^1, \xi_2^1, \dots, \xi_u^1)$,相应的目标函数值依次为 f_1, f_2, \dots, f_u 。显然它们可视为独立同分布的随机向量,我们认为优化问题的全域极小点 $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_u^*)$ 可以合理近视为 $(E\xi_1^*, E\xi_2^*, \dots, E\xi_u^*)$ 。为了不断缩小搜索区间对其作如下区间估计处理:

$$\bar{\xi}^i = \frac{1}{u} \sum_{j=1}^u \xi_j^i, s^{i^2} = \frac{1}{u} \sum_{j=1}^u (\xi_j^i - \bar{\xi}^i)^2 \quad (3)$$

经过上述步骤得到的区域记为 D_1 ,则 $D_1 \subset D_0$ 且以概率 $(1-\alpha)\%$ 包含全域极小点 $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_u^*)$,这样可以在新的区域 D_1 上进行新一代的并行计算,具体计算

步骤如下:

Step 1 在 D_k 上产生 u 个均匀设计点集 $(x_1^k, x_2^k, \dots, x_u^k)$ 作为第 k 代种群的迭代初始点;

Step 2 应用模拟退火算法进行并行计算,得到 u 个结果 $(\xi_1^k, \xi_2^k, \dots, \xi_u^k)$;

Step 3 按区间估计分别对所得结果的取值范围进行收缩,得到 D_{k+1} ;

Step 4 检验下列收敛条件

$$\frac{\|\bar{x}^{(k+1)} - \underline{x}^{(k+1)}\|}{\|\underline{x}^{(k+1)}\|} \leq \varepsilon \quad (4)$$

是否满足,这里 ε 为预先给定的精度, \bar{x} 指点 x 在定义域 D 内的上界, \underline{x} 指点 x 在定义域 D 内的下界。若收敛条件满足则输出 $(\xi_1^i, \xi_2^i, \dots, \xi_u^i)$ 作为 $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_u^*)$ 的近似值;否则转Step1。

2.3 算法的性能测试

该实例选自文献[10]。在精密机械系统的小型离心调速器的设计中,对片簧式离心调速器参数进行优化。固定在片簧端部的重锤随中心轴以转速 n 一起转动,在离心惯性力作用下,重锤与股轮之间产生摩擦力,形成对中心轴的摩擦阻力矩,带动股轮旋转,以便进行调速。要求合理设计调速器的有关尺寸,在保证产生一定摩擦阻力矩条件下使摩擦股轮半径最小。

1) 确定设计变量。

为保证产生一定的摩擦力矩条件下股轮半径最小,目标函数应以摩擦力矩与股轮半径之间的函数关系来表示,其摩擦力矩公式为:

$$M_f = \frac{W\rho\pi^2fn^2}{450g}r - \frac{240Ffr}{4l^3 - a(l-a)}EJ \quad (5)$$

式中, W 为重锤重量(N); ρ 为静止状态下重锤重心距中心轴的半径(mm); n 为中心轴转速(rpm); f 为重锤与股轮间的摩擦系数; g 为重力加速度(mm/s^2); r 为股轮内半径(mm); F 为片簧变形量(mm); l 为片簧总长(mm); a 为片簧固定端与调节套的距离(mm); E 为片簧材料的弹性模量(MPa); J 为片簧横截面惯性矩(mm^4)。取 $f = 0.1, \rho = kr, J = bh^3/12$ 。

该设计问题共有8个设计变量,即:

$$X = [x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8]^T = [W, k, n, F, h, l, b, a]^T$$

2) 建立目标函数。

根据摩擦力矩公式可得出以股轮半径 r 表示的目标函数:

$$F(X) = r = [A + (A^2 + 4B)^{1/2}]/4.476 \times 10^{-7}x_1x_2x_3^2$$

$$A = 40000x_4x_5^3x_7/[4x_6^3 - x_8(3x_6 - x_8)],$$

$$B = M_f(2.238 \times 10^{-7}x_1x_2x_3^2) \quad (6)$$

3) 确定约束条件。

① 根据片簧的弯曲强度条件,取弯曲应力 $[\sigma] = 550 \text{ MPa}$,得:

$$60\,000(x_6 - x_8)x_4x_5 / [2x_6^3 - \frac{x_8}{2}(3x_6 - x_8)^2] \leq 550$$

② 由于结构的限制,各设计变量有以下取值范围约束:

$$0.015 \leq x_1 \leq 0.03, 0.6 \leq x_2 \leq 0.9, 8\,000 \leq x_3 \leq 12\,000, 0.5 \leq x_4 \leq 3,$$

$$0.15 \leq x_5 \leq 0.3, 28 \leq x_6 \leq 35, 4 \leq x_7 \leq 8, 8 \leq x_8 \leq 20$$

上述优化模型是一个 8 维的约束优化问题。

应用该算法求解此问题时,在目标函数的定义域区间内产生 100 个点(用均匀设计法产生),模拟退火的初始温度 T_0 由下式 $T_0 = (\max f_3^{(i)} - \min f_3^{(i)}) / \ln Pr_0$ 确定,其中 $\max f_3^{(i)}$, $\min f_3^{(i)}$ 分别为第 i 次循环代的目标函数的最大值和最小值,选取 $Pr_0 = 0.6$;在降温策略中取 $\gamma = 0.997$ (参考文献[1])。

4) 优化结果。

设所要求的摩擦力矩为 $M_f = 21(\text{N} \cdot \text{mm})$,根据所编程序进行均匀布点,逐个进行优化,计算出模型的全局最优解为 $X^* = [0.03, 0.9, 12\,000, 0.5, 0.15, 35, 4, 8]^T$,全局最优值为 $F(X^*) = r^* = 4.912\,82$ 。而按照传统的优化方法所得的结果为: $X^* = [0.029, 0.886, 11\,893, 0.695, 0.226, 33.8, 7, 12]^T$, $F(X^*) = r^* = 5.083\,1$ 。显然,本文算法优于传统算法,可以认为得到了全局最优解。

3 结 论

笔者基于均匀设计思想提出了一种均匀布点模拟

退火优化算法。根据均匀设计原理在优化问题的可行域内均匀布点,然后以这些点作为初始点,运用模拟退火分别搜索迭代,求出各自的最优解,并进行比较,认为比较后得到的最优值就是全局最优解。该方法编制程序简单,计算精度高,与传统的优化方法相比,可以解决复杂性态函数的全局最优化问题,计算结果完全能够满足工程应用的要求。

参考文献:

- [1] 康立山,谢云. 非数值并行算法(第 1 册)——模拟退火算法[M]. 北京:科学出版社,1994,1-53.
- [2] 王凌,郑大钟. Meta-heuristic 算法研究进展[J]. 控制与决策,2000,15(3):257-262.
- [3] 王子才. 基于混沌变量的模拟退火优化方法[J]. 控制与决策,1999,14(4):381-384.
- [4] 王凌,郑大钟. 一类 GASA 混合策略及其收敛性研究[J]. 控制与决策,1998,13(6):669-672.
- [5] 吴志远. 基于遗传算法的退火精确罚函数非线性约束优化方法[J]. 控制与决策,1998,13(2):136-140.
- [6] 何霆. 基于 SA 的混合演化算法及其应用研究[J]. 控制与决策,2000,15(4):504-506.
- [7] 方开泰. 均匀设计与均匀设计表[M]. 北京:中国科学出版社,1992,1-80.
- [8] 方开泰. 均匀设计—数论方法在实验设计的应用[J]. 应用数学学报,1980,3(4):363-372.
- [9] 方开泰,郑胡灵. 均匀性的新度量—最大对称差准则[J]. 应用概率统计,1992,8(1):10-16.
- [10] 张济川. 机械最优化设计及应用实例[M]. 北京:新时代出版社,1990.63-72.

A Simulated Annealing Arithmetic Based on Uniform Design

ZHANG Zhi-yuan

(Daxian Teachers College, Da zhou, Si chuan, 635000)

Abstract: Some ideas of uniform design in the test design are introduced into Simulated Annealing Arithmetic and a new method of design based on uniform design is discussed. The global optimal solutions of nonlinear multi-peak function can be found by this method. A series of uniformly distributed points are generated by the principle of the uniform design in variable design space. These points are regarded as a series of start points of the optimization model. The Simulated Annealing Arithmetic is chosen to compute and a series of local minimum values can be gained. Before compared with each other, the best value of all local minimum values can be found out, the value is thought as the global minimum in some degree. According to the method, a program is compiled and an example of design is implemented. The result of the example testifies that the method is feasible.

Key words: uniform distributed point; simulated annealing; global optimization

(编辑 姚 飞)