

## 什么是模拟退火算法

很多人工智能算法可以归结为对某一函数  $f(x)$  的优化任务，其中  $x$  为需要优化的变量。模拟退火算法是受金属退火现象的启发而得到的一种函数优化方法。

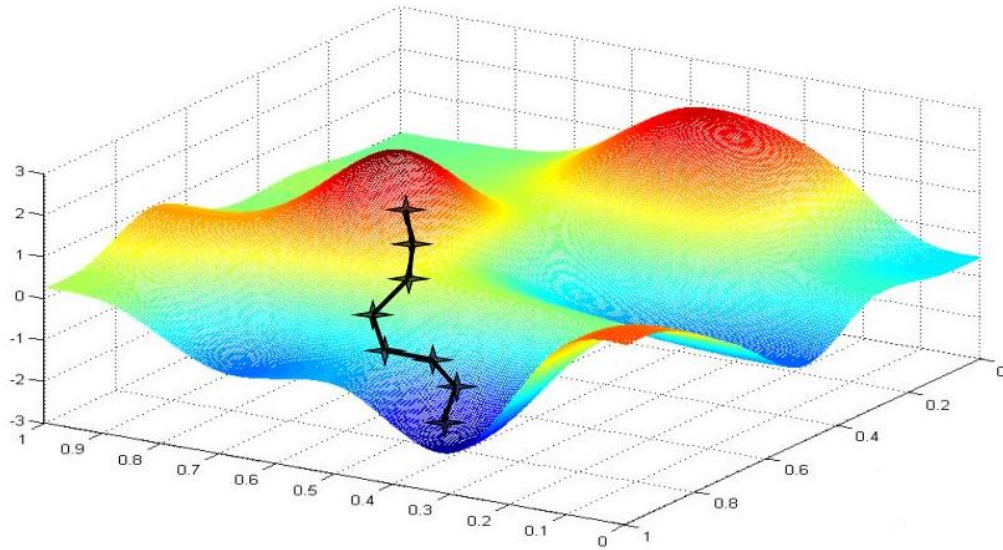


图 1：爬山法可以到达一个山峰，但不能保证到达最高山峰[1]。

在讨论退火算法之前，我们首先介绍一种称为“爬山法”的优化算法。这一方法将  $f(x)$  想象成山的高度，对  $f(x)$  的优化过程相当于爬山过程。如图 1 所示，设想一个在山脚下的盲人，他想要爬上最高峰，问题是他看不到山峰的全局情况，唯一能做的是用手中的拐杖探索自己周围几米的距离，判断哪边高哪边低。为了爬上山顶，他选择了一种方法：每到一个位置，他都用手中的拐杖探索坡起最大的方向，然后试着往这个方向走一步，之后再探索。这样一步一步探索下去，最终总会走到山顶。这一方法称为“爬山法”。

如果只有一个山峰，爬山法必然可以爬到最高峰，对应  $f(x)$  最大。但是如果有多座山峰，就未必能爬到最高峰了，如图 1 所示。虽然这个小山峰也是不错的，但毕竟和我们想爬到最高峰的目标还有差距。如何解决这一问题呢？计算机科学家们想到了物理学中一种称为“退火”的特殊现象，受此启发设计了一种称为“模拟退火”的算法，取得了很好的效果。

什么是退火呢？比如一根钢丝，被加热到很高的温度后再让它慢慢冷却，冷却后的钢丝将会变得更柔软。其原因是经过这样处理的钢材更趋向于能量平稳状态，从而减少了内部缺陷，这一过程称为退火[4,5]。根据热力学的研究结果，如果钢丝的初始温度足够高，温度下降的足够缓慢，则当温度趋近于绝对 0 度时，退火后的钢丝将处于能量最低的状态[3]。退火过程的一个特点是，在温度降低过程中，材料所处的能量并不是持续下降的，而是会以概率  $e^{-\frac{\Delta E}{KT}}$

跳到一个更高的能量状态，其中  $T$  是绝对温度， $K > 0$  是波尔兹曼常数， $\Delta E$  是当前能量与下

一状态的能量之差。可以看到，温度越高，越可能跳到一个较高能量状态。

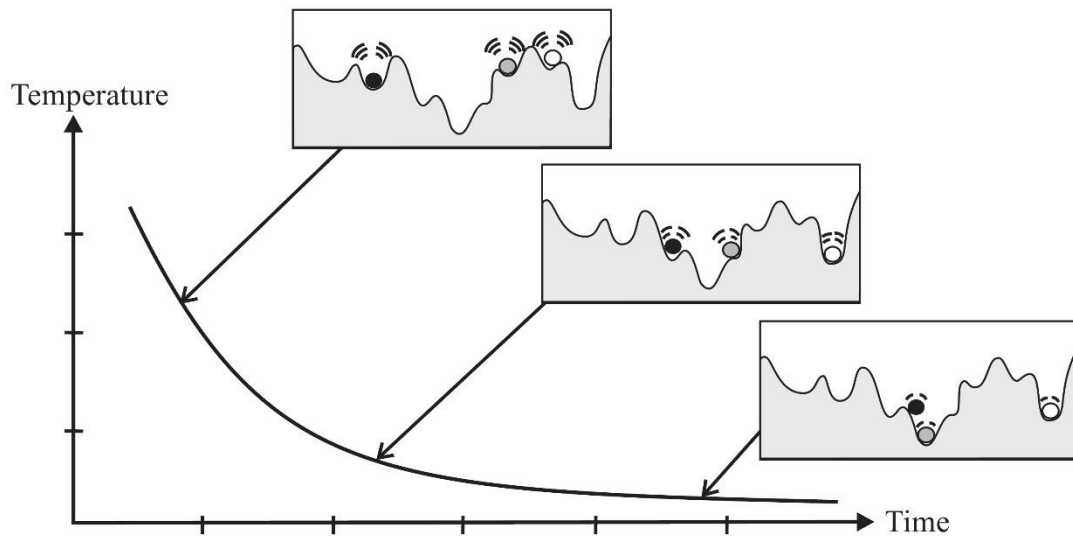


图 2: 退火过程中，当温度较高时可以跳出能量陷阱；当温度较低时，会约束在当前能量附近[2]。每个小球上面的曲线表示下一次采样时的随机性。可以看到，当温度较高时，小球可以跳出当前能量低谷。

我们利用退火过程来改造爬山法，这种算法被称为模拟退火算法[3]。为说明方便，将爬山改为向低谷搜索，即求目标函数  $f(x)$  的最小值。在该算法中，每次搜索不仅向能量更低的方向探索，还保留一定概率向能量较高的方向探索。这样就引入了一个随机性，使得我们可以跳出当前的“能量陷阱”，进入到另一个可能更好的能量低谷中。

具体而言，我们将目标函数  $f(x)$  看作是能量函数，用虚拟温度  $t$  代替  $KT$ 。开始时给  $t$  一个足够大的值， $x$  取一个随机值作为初始状态。算法首先保持温度  $t$  不变，随机的产生一个状态  $x'$ 。如果该状态的能量  $f(x')$  低于当前能量  $f(x)$ ，即  $f(x') < f(x)$ ，则接受该状态；如果  $f(x') > f(x)$ ，并不马上拒绝，而是以概率  $e^{\frac{\Delta f}{t}}$  接受该状态，其中  $\Delta f = f(x) - f(x')$ 。如果该状态没有被接受，则保持原状态。上述采样过程反复运行，达到稳定后即模拟了金属在温度  $t$  下的平稳状态。达到该平稳状态后，我们降低温度  $t$ ，并在新的温度下重复上述运行过程。不断降低温度  $t$ ，当  $t$  足够低（趋近 0）时即得到优化的  $x$ 。

模拟退火算法属于随机算法，每次的运行结果可能不一样。选择合适的退火方案，则算法将以概率 1 得到最优解[6]。模拟退火算法和遗传算法有一定相似性，都是通过“尝试”来优化解的质量[7]。不同之处在于，遗传算法是通过群体演化方式寻找最优解，而模拟退火算法通过个体的状态优化寻找最优解。

1. Hill Climbing Algorithms (and gradient descent variants) IRL, <https://umu.to/blog/2018/06/29/hill-climbing-irl>
2. Sergio Ledesma, Jose Ruiz and Guadalupe Garcia, Simulated Annealing Evolution, <https://www.intechopen.com/books/simulated-annealing-advances-applications-and->

hybridizations/simulated-annealing-evolution

3. Kirkpatrick, S.; Gelatt Jr, C. D.; Vecchi, M. P. (1983). "Optimization by Simulated Annealing". *Science*. 220 (4598): 671–680

4. Robert E.Reed-Hill、 Reza Abbaschian. physical metallurgy principles

5. [https://zh.wikipedia.org/wiki/%E9%80%80%E7%81%AB#cite\\_note-effrey04-2](https://zh.wikipedia.org/wiki/%E9%80%80%E7%81%AB#cite_note-effrey04-2)

6. Mitra D, Romeo F, Sangiovanni-Vincentelli A. Convergence and finite-time behavior of simulated annealing[J]. *Advances in applied probability*, 1986, 18(3): 747-771.

7. Eiben A E, Aarts E H L, Van Hee K M. Global convergence of genetic algorithms: A Markov chain analysis[C]//International Conference on Parallel Problem Solving from Nature. Springer, Berlin, Heidelberg, 1990: 3-12.