文章编号: 1001-0920(2004)02-0183-04

随机优化问题一类基于假设检验的模拟退火算法

王 凌, 郑大钟
(清华大学 自动化系, 北京 100084)

摘 要: 针对随机优化问题的不确定性, 提出一类基于假设检验的模拟退火算法. 该方法通过多次评价来合理估计解的性能, 利用假设检验减少重复性搜索, 采用突跳性搜索避免局部极小, 并通过温度控制调节突跳能力. 数值仿真研究了假设检验、性能估计、噪声幅度对算法性能的影响, 其结果验证了该方法的有效性和鲁棒性.

关键词: 随机优化; 假设检验; 模拟退火
中图分类号: TP18 **文献标识码**: A

Simulated annealing approach based on hypothesis test for stochastic optimization problems

WANG Ling, ZHENG Da-zhong
(Department of Automation, Tsinghua University, Beijing 100084, China. Correspondent: WANG Ling, E-mail: wangling@mail. Tsinghua. edu. cn)

Abstract: According to the non-deterministic property of stochastic optimization problems, a class of simulated annealing approach based on hypothesis test is proposed. In the approach, reasonable estimated performance is provided by multiple evaluations, and repeated search is decreased by hypothesis test. The case of being trapped in local minimum can be avoided by jumping probability. The jumping ability can be adjusted by controlling the temperature. The effects of hypothesis test, the performance estimation and the magnitude of noise on the performance of the approach are studied, and the effectiveness and robustness of the proposed approach are demonstrated.

Key words: stochastic optimization; hypothesis test; simulated annealing

1 引 言

随机优化问题通常缺少结构信息, 存在不确定因素, 一次评价仅给出决策量的一次非准确性能估计, 且有时难以得到优化目标的精确解析表达式. 另外, 优化决策空间通常很大, 且往往是连续量、离散量和逻辑量共存, 优化涉及多目标, 并存在多极小, 以致于很难高效实现全局优化. 因此, 对随机优化问题的研究已成为国际学术界的重要课题[1], 高效鲁棒优化算法的设计则是其中的关键内容之一.

近年来, 智能优化算法在理论界和工程领域均得到广泛重视[2], 但绝大多数是针对确定性优化问题. 对于随机优化问题的不确定性, Bayer[3] 提出了噪声环境下进化算法待研究的若干理论问题, Mohamed 等[4]最近提出一种基于排名和选择的模拟退火方法.

本文从统计学的角度出发, 提出一类通用的基于假设检验[5]的模拟退火(SA)方法, 即在均值比较的基础上, 结合假设检验来减少重复性搜索, 同时利

收稿日期: 2002-10-24; **修回日期**: 2002-12-11.
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(60204008, 60374060); 973 计划(2002CB312200).
作者简介: 王凌(1972—), 男, 江苏武进人, 副教授, 博士, 从事智能优化理论和方法的研究; 郑大钟(1935—), 男, 浙江绍兴人, 教授, 博士生导师, 从事 HDS 和优化调度的研究.

用模拟退火方法的可控突跳性避免搜索过程陷入局部极小. 通过仿真研究了假设检验、性能估计、噪声幅度对算法性能的影响, 并验证了所提出方法的有效性和鲁棒性.

2 假设检验

随机优化问题通常可描述为

$$\min_{\theta} J(\theta) = \min_{\theta} E[L(\theta, \xi)]. \tag{1}$$

其中: θ 为决策量(解), ξ 为随机噪声, $L(\theta, \xi)$ 和 $J(\theta)$ 分别为 θ 的一次性能估计和期望值.

随机优化问题进行不同解的优劣比较时, 首先要较准确地估计解的性能, 这通常需要进行多次独立仿真. 若对 θ_i 进行 n_i 次独立随机仿真, 则其均值和方差的无偏估计分别为

$$\bar{J}_i = \bar{J}(\theta_i) = \sum_{j=1}^{n_i} L(\theta_i, \xi)/n_i, \tag{2}$$

$$\sigma_i^2 = \sum_{j=1}^{n_i} [L(\theta_i, \xi) - \bar{J}_i]^2/(n_i - 1). \tag{3}$$

由大数定理知[5], 当 $n_i \to \infty$ 时, 期望性能的估计 $\hat{J}(\theta_i) \sim N(\bar{J}_i, \sigma_i^2/n_i)$. 显然, 正确估计性能值的收敛速度不超过 $1/\sqrt{n_i}$.

考虑两个决策量 θ_1 和 θ_2, 其性能估计 $\hat{J}(\theta_1)$ 和 $\hat{J}(\theta_2)$ 为两独立随机变量, $\hat{J}(\theta_1) \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$, $\hat{J}(\theta_2) \sim N(\mu_2, \sigma_2^2)$, 其中 μ_1 和 μ_2 的无偏估计分别为 $\bar{J}_1 \equiv \sum_{j=1}^{n_1} L(\theta_1, \xi)/n_1$, $\bar{J}_2 \equiv \sum_{j=1}^{n_2} L(\theta_2, \xi)/n_2$. 记零假设 H_0 为 $\bar{J}_1 = \bar{J}_2$, 备择假设 H_1 为 $\bar{J}_1 \neq \bar{J}_2$.

若 σ_1^2 和 σ_2^2 已知, 则 H_0 的拒绝域为[5]

$$|\bar{J}_1 - \bar{J}_2| \geq z_{\alpha/2}(\sigma_1^2/n_1 + \sigma_2^2/n_2)^{1/2} = \tau \tag{4}$$

其中: α 为显著性水平, $\Phi(z_{\alpha/2}) = 1 - \alpha/2$.

若 σ_1^2 和 σ_2^2 未知, 但 n_1 和 n_2 充分大(一般大于 50 即可), 则 H_0 的拒绝域可简化为[5]

$$|\bar{J}_1 - \bar{J}_2| \geq z_{\alpha/2}(s_1^2/n_1 + s_2^2/n_2)^{1/2} = \tau \tag{5}$$

其中: σ_1^2 和 σ_2^2 分别采用其无偏估计

$$s_1^2 = \sum_{j=1}^{n_1} [L(\theta_1, \xi) - \bar{J}_1]^2/(n_1 - 1),$$

$$s_2^2 = \sum_{j=1}^{n_2} [L(\theta_2, \xi) - \bar{J}_1]^2/(n_2 - 1).$$

若 $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma^2$, σ^2 未知, 则 H_0 的拒绝域为[5]

$$|\bar{J}_1 - \bar{J}_2| \geq t_{\alpha/2}(n_1 + n_2 - 2)\{[(n_1 - 1)s_1^2 + (n_2 - 1)s_2^2]/(n_1 + n_2 - 2)\}^{1/2} \times ((n_1 + n_2)/(n_1 n_2))^{1/2} = \tau \tag{6}$$

因此, 如果 $|\bar{J}(\theta_1) - \bar{J}(\theta_2)| < \tau$, 则可认为二者的性能在统计意义上不存在显著差异, 否则认为二者性能存在显著差异. 即若 $\bar{J}(\theta_1) - \bar{J}(\theta_2) \geq \tau$, 则认为 θ_2 性能在统计意义上优于 θ_1(针对极小化问题); 若 $\bar{J}(\theta_1) - \bar{J}(\theta_2) \leq -\tau$, 则认为 θ_1 性能在统计意义上优于 θ_2. 对于特定优化问题, 通常假设所有决策解理论上的性能方差相同, 因此可用式(6) 进行假设检验. 考虑到问题的多极小性, 纯粹基于假设检验的趋化性搜索易陷入局部极小, 因此可考虑利用 SA 的突跳性.

3 基于假设检验的模拟退火算法

基于上述假设检验思想, 在求解随机优化问题的迭代过程中, 若新旧解的性能在统计意义上不存在显著差异, 则可认为没有产生不同性能的解, 从而可保留旧状态以减少重复搜索; 如果新解性能在统计意义上优于旧解, 则接受新解作为新的当前状态; 如果新解性能在统计意义上劣于旧解, 则可采用传统 SA 概率接受的方式接受新解以避免搜索过程陷入局部极小. 由此, 本文在传统 SA 算法的基础上, 提出随机优化问题的一类基于假设检验的 SA 算法, 其具体步骤如下:

Step 1: 随机产生一组初始解 θ_k, $k = 1, 2, \cdots, K$, 通过多次评价估计各解的性能 $\bar{J}_k$ 及其方差 s_k^2. 令其中的最优解(估计性能最小的解) 为 θ^*, 记其性能估计和方差分别为 $\bar{J}^*$ 和 s_*^2, 并记初始解中最差的估计性能为 $\bar{J}_w$. 令初始温度 $t = (\bar{J}^* - \bar{J}_w)/\ln p_r$, 其中 p_r 为初始最低接受概率.

Step 2: 令当前解 θ_1 为 θ^*, 其性能估计 $\bar{J}_1 = \bar{J}^*$, 性能方差 $s_1^2 = s_*^2$.

Step 3: 若算法终止条件满足, 则输出最优解 θ^* 及其估计性能; 否则, 继续以下步骤.

Step 4: 由当前解 θ_1 产生一个新解 θ_2, 并通过多次评价来估计新解的性能 $\bar{J}_2$ 和方差 s_2^2.

Step 5: 对当前解 θ_1 和新解 θ_2 进行第 2 节的假设检验. 若零假设成立, 即式(6) 不成立, 则返回 Step 4; 否则, 继续以下步骤.

Step 6: 若接受概率 $\min\{1, \exp[-(\bar{J}_2 - \bar{J}_1)/t]\}$ 大于(0, 1) 之间的随机数, 则以新解 θ_2 作为新的当前解 θ_1; 若新解优于最优解, 则令其为新的最优解 θ^*; 否则, 保持原先的当前解 θ_1.

Step 7: 若抽样终止条件成立, 则转 Step 8; 否则, 转 Step 4.

Step 8: 下降温度参数, 并返回 Step 3.

可见, 上述方法具有如下特点: 1) 保留了传统 SA 算法的通用性和概率突跳性, 已有的 SA 优化操作和参数设计[2] 完全可采用; 2) 针对问题的随机性增加了假设检验环节以减少重复性搜索; 3) 通过多次评价给出了较合理的性能估计; 4) 由于初态的随机性, 数量足够多时可体现整个解空间的状态分布情况, 所以基于一组随机解并定义 p_r 来确定初温, 考虑各状态的相对性能, 可赋予不同状态合适的突跳概率, 在一定程度上避免了初温选取的盲目性[6].

另外, 为了在优化度和效率间起到较好的折衷效果, 其他环节采用如下方式: 1) 温度下降方式可采用指数退温策略, 即 $t = \lambda t$, 退温速率 $\lambda \in (0, 1)$; 2) 抽样终止条件采用 M_1 固定步数法; 3) 算法终止条件设置为最优解在连续 M_2 步退温期间不变; 4) 对于函数优化, SA 的状态产生函数可采用性能较好的 Cauchy 扰动发生器[7], 即 $x' = x + \alpha\zeta$, ζ 为服从 Cauchy 分布 $C(0, 1)$ 的随机数, 步长 α 通常取 0.1. 另外, 为保证解的可行性, 若新解越界则重新产生.

4　数值仿真与分析

采用非凸的二维随机 Rosenbrock 函数进行数值仿真研究, 该函数可描述为

$$L(x_1, x_2, \xi) = 100(x_1^2 - x_2)^2 + (1 - x_1)^2 + \eta\xi, \quad |x_1, x_2| \le 2.048$$

其中: η 为噪声幅度, ξ 为随机噪声, 在此令其服从均值为零方差为 1 的高斯分布 $N(0, 1)$. 显然 $E[L(x_1, x_2, \xi)]$ 的最优解为 (1, 1), 其性能为 0.

首先, 令算法不进行假设检验, 性能估计采用 1 次评价, 即传统的 SA 算法. 令 $\eta = 0.01$, $K = 20$, $p_r = 0.1$, $\lambda = 0.9$, $M_1 = 50$, $M_2 = 30$. 20 次随机仿真解的分布如图 1 所示.

其次, 不采用假设检验环节, 但性能估计采用 10 次评价, 其他算法参数同上. 20 次随机仿真解分布如图 2 所示.

最后, 对本文提出的方法进行研究, 即采用假设检验环节, 性能估计采用 10 次评价, 其他算法参数同上. 20 次随机仿真解的分布如图 3 所示. 将噪声幅度增加至 0.05, 基于 10 次评价和 20 次评价, 本文算法解的分布分别如图 4 和图 5 所示.

下面以多极小随机 Schaffer 函数进行仿真研究, 该函数描述如下:

$$L(x_1, x_2, \xi) = (\sin^2(x_1^2 + x_2^2)^{1/2} - 0.5)/[1 + 0.001(x_1^2 + x_2^2)]^2 - 0.5 + \eta\xi, \quad |x_1, x_2| \le 2.048$$

其中: η 为噪声幅度, ξ 为服从 $N(0, 1)$ 分布的高斯随机噪声. 显然 $E[L(x_1, x_2, \xi)]$ 的最优解为 (0, 0), 其性能为 -1.

采用假设检验环节, 性能估计采用 20 次评价, 其他算法参数同上, 噪声幅度为 0.01, 本文方法和

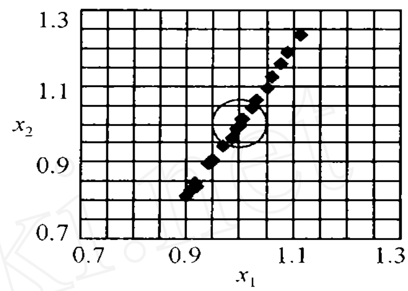

图 1　无假设检验和 1 次评价 SA 的优化结果

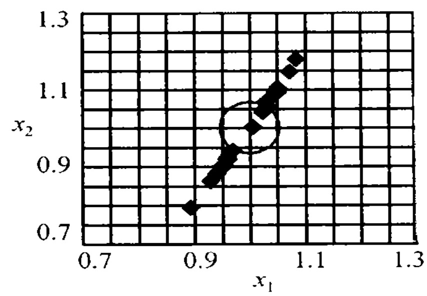

图 2　无假设检验和 10 次评价 SA 的优化结果

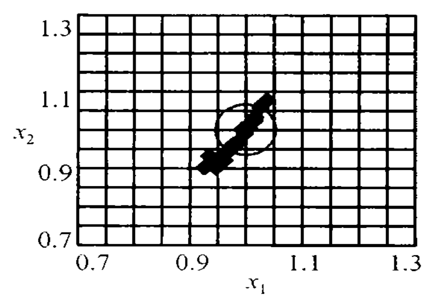

图 3　带假设检验和 10 次评价 SA 的优化结果($\eta = 0.01$)

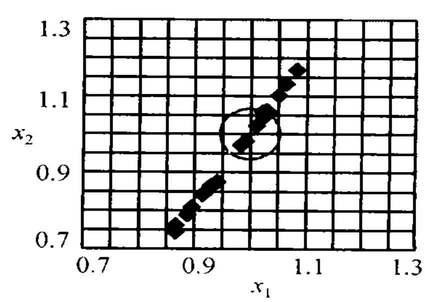

图 4　带假设检验和 10 次评价 SA 的优化结果($\eta = 0.05$)

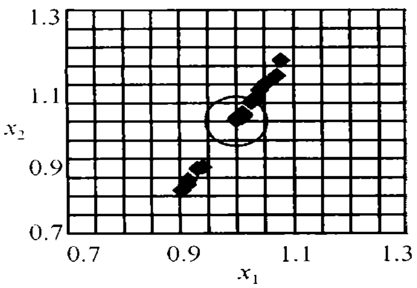

图 5 带假设检验和 20 次评价 SA 的优化结果(η= 0.05)

传统 SA 方法各 20 次随机仿真解的分布如图 6 和图 7 所示

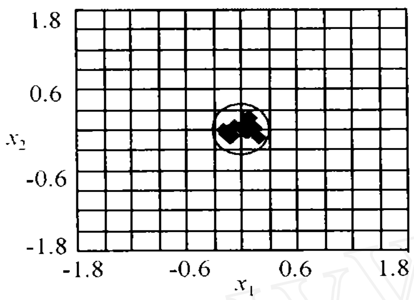

图 6 基于假设检验 SA 对 Schaffer 函数的优化结果

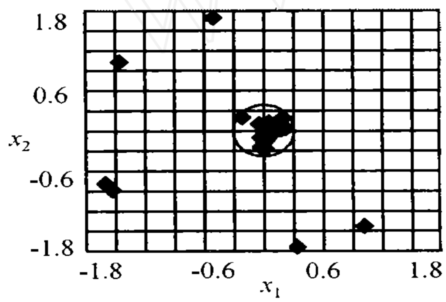

图 7 传统 SA 对 Schaffer 函数的优化结果

基于上述仿真结果, 可得到本文方法的如下结论: 1) 具有较好的鲁棒性, 多次随机仿真的结果均与理论上的最优解较近, 而传统 SA 方法的结果往往与理论上的最优解较远(图 1 与图 3 对比, 图 6 与图 7 对比). 2) 通过设置假设检验环节可减少重复性搜索, 从而提高了算法的优化质量和可靠性以及搜索到最优解的频度(图 2 与图 3 对比). 3) 在噪声幅度较大的情况下, 通过增加评价次数仍可保证本文方法取得较好的优化性能(图 4 与图 5 对比). 4) 保留了传统 SA 的全局搜索能力, 对非凸、多极小等函数仍可取得较满意的全局优化质量

考虑到问题的随机性和算法的搜索效率, 优化过程中评价次数通常不能太大(尤其是仿真优化问题[1], 否则会因性能估计时间大于搜索时间而降低优化效率), 但是由于本文方法的鲁棒性, 可在算法搜索结束后对优化解作进一步的多次评价, 以便更准确地估计其性能 需要指出的是, 若评价次数较少, 则可结合序优化的思想进行搜索, 因为"序比值易确定"且"序以指数收敛"[8].

5 结 语

本文提出一类通用的基于假设检验的 SA 方法, 在均值比较的基础上, 结合假设检验来减少重复性搜索, 并利用 SA 的可控突跳性来避免搜索过程陷入局部极小, 数值仿真研究验证了所提方法的有效性和鲁棒性 进一步的工作包括, 理论上研究本文方法的收敛性, 针对随机组合优化问题推广研究该类方法

参考文献(References):

[1] 王凌, 张亮, 郑大钟. 仿真优化研究进展[J]. 控制与决策, 2003, 18(3): 257-262
(Wang L, Zhang L, Zheng D Z. Advances in simulation optimization[J]. *Control and Decision*, 2003, 18(3): 257-262)

[2] 王凌. 智能优化算法及其应用[M]. 北京: 清华大学出版社, 2001.

[3] Beyer H G. Evolutionary algorithms in noisy environments: Theoretical issues and guidelines for practice [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2000, 186(2-4): 239-267.

[4] Ahmed M A, Alkhamis T M. Simulation-based optimization using simulated annealing with ranking and selection[J]. *Computers and Operations Research*, 2002, 29(4): 387-402

[5] 盛骤, 谢式千, 潘家毅. 概率论与数理统计[M]. 北京: 高等教育出版社, 1990.

[6] Wang L, Zheng D Z. An effective hybrid optimization strategy for job-shop scheduling problems[J]. *Computers and Operations Research*, 2001, 28(6): 585-596.

[7] 王凌, 郑大钟. 基于 Cauchy 和 Gaussian 分布状态发生器的模拟退火算法[J]. 清华大学学报, 2000, 40(9): 109-112
(Wang L, Zheng D Z. Simulated annealing with the state generator based on Cauchy and Gaussian distributions[J]. *J of Tsinghua University*, 2000, 40(9): 109-112)

[8] Ho Y C. An explanation of ordinal optimization: Soft computing for hard problems[J]. *Information Science*, 1999, 113(3-4): 169-192