

文章编号: 1001-0920(2004)02-0226-04

## 有限计算量下模拟退火算法的参数序优化

张亮, 王凌, 郑大钟  
(清华大学自动化系, 北京 100084)

**摘要:** 针对模拟退火算法作为一类全局随机搜索算法, 其理论收敛条件难以严格实现, 有限计算量下的算法性能在实际应用时对参数有严重的依赖性, 并且确定合适参数的经验或试验方法缺少系统性等问题, 提出将有限计算量下模拟退火的最优参数确定问题视为随机优化问题, 并基于序优化和最优计算量分配技术研究出一种确定最优参数组合的系统性方法. 典型调度问题的仿真结果验证了该方法的可行性和有效性.

**关键词:** 模拟退火; 最优参数; 序优化; 最优计算量分配

**中图分类号:** TP18      **文献标识码:** A

## Parameter ordinal optimization for simulated annealing with limited computational efforts

ZHANG Liang, WANG Ling, ZHENG Da-zhong

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

**Abstract:** The determination of optimal SA parameters with limited computation efforts is viewed as a stochastic optimization problem, and then a systematic procedure based on ordinal optimization and optimal computing budget allocation is developed to determine the most reasonable parameter combination. Simulation results based on scheduling benchmarks demonstrate the feasibility and effectiveness of the method.

**Key words:** simulated annealing; optimal parameters; ordinal optimization; optimal computing budget allocation

### 1 引言

模拟退火(SA)算法理论上可以概率 1 收敛到全局最优解,但在实际应用中往往无法满足算法收敛需要的所有条件.有限计算量下的算法性能对参数,尤其是退火历程有严重的依赖性<sup>[1]</sup>.因此,选择适当的算法参数对算法性能起着非常重要的作用,而目前的经验或试验方法明显缺少合理性、可靠性和系统性. Park<sup>[2]</sup>提出一种单纯形方法, Wang<sup>[3]</sup>提出一种基于响应曲面的方法, Boite<sup>[4]</sup>则给出了遗传规划,但他们很少考虑算法参数确定问题的随机性,没有用算法性能的统计信息来衡量算法参数组合的

### 性能

本文将 SA 最优参数的选取问题描述为随机优化问题,进而基于序优化(OO)<sup>[5,6]</sup>和最优计算量分配(OCBA)技术<sup>[7]</sup>提出一种确定最优参数组合的系统性方法.基于典型调度问题的仿真结果验证了该方法的可行性和有效性.

### 2 模拟退火描述与实现

典型 SA 步骤通常可描述如下:

- 1) 随机产生初始状态  $S$ ;
- 2) 给定初温  $t_0$ , Metropolis 抽样次数  $L$ , 退温率  $\lambda$  等参数, 令  $k = 0$ ;

收稿日期: 2002-12-09; 修回日期: 2003-02-20

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(60204008, 60374060); 国家 973 基础研究项目(2002CB 312200).

作者简介: 张亮(1982—),男,北京人,硕士生,从事智能序优化理论与方法的研究;王凌(1972—),男,江苏武进人,博士,副教授,从事混合优化理论与方法的研究.

3) 重复下列步骤  $L$  次:

从  $S$  的邻域中随机产生状态  $S'$ ;

令  $\Delta = c(S') - c(S)$ , 其中  $c(\cdot)$  表示优化目标函数;

若  $\Delta < 0$ , 令  $S = S'$ ; 若  $\Delta \geq 0$ , 以概率  $\exp(-\Delta/t_k)$  使  $S = S'$ ;

4) 若达到最大仿真量, 则输出  $S$  并终止算法; 否则令  $t_{k+1} = \lambda t_k, k = k + 1$  并返回 3)。

理论上, SA 可以概率 1 收敛于全局最优解, 但这需要足够大的初始温度、0 终止温度、合适的退温函数以及抽样过程来实现。实际应用时, 即计算量有限时, 初温、降温策略、抽样次数等参数对算法性能有着很大的影响。鉴于算法的通用性, 它可应用于任何优化问题, 对于置换 flow shop 调度问题<sup>[9]</sup>, SA 可采用如下方案实现: 采用工件排序作为编码; 以最大完成时间作为优化目标, 即 makespan; 状态产生方式可选用互换、逆序或插入操作, 本文选用互换操作, 即随机交换解个体中两个不同工件在加工顺序中的位置;  $L$  值可根据问题规模的不同而设定; 固定算法中产生新状态的总数  $N$  (即对目标函数的总评价次数或总计算量), 依此作为算法终止准则。若给定  $t_0, L$  和  $\lambda$ , 则算法中总共进行  $N/L$  次退温, 显然算法的性能将依赖于这些参数。

### 3 序优化和最优计算量分配

考虑随机优化问题

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

其中:  $\theta$  为有限解空间中的解,  $L(\theta, \xi)$  为解  $\theta$  的一次抽样性能评价,  $\xi$  为噪声,  $J$  为  $L(\theta, \xi)$  的期望, 即  $\theta$  的真实性能评价。由于随机因素的存在, 通常需要通过

多次独立仿真来以  $\bar{J}_i = \frac{1}{T_i} \sum_{j=1}^{T_i} L(\theta, \xi_{ij})$  作为  $J_i$  的估计, 其中  $T_i$  为对  $\theta$  的独立仿真次数,  $J_i$  的方差  $\sigma_i^2 = \text{Var}[L(\theta, \xi)]$  通过仿真中得到的样本方差进行估计。

$T_i$  越大,  $\bar{J}_i$  对  $J_i$  的估计越准确, 但准确估计的收敛速度只能是  $O(1/\sqrt{T_i})$ 。

序优化<sup>[5]</sup> 基于“序”比“值”容易确定和“软化目标”的思想, 在节省计算量的同时大大提高算法的收敛性能。Dai<sup>[6]</sup> 证明了序优化中联合概率 (所得解集中真正包含足够好解的概率或称正确选择概率  $P(CS)$ ) 以指数速度收敛于 1。  $P(CS)$  一般可通过 Monte Carlo 仿真试验进行估计<sup>[5]</sup>, 但计算量仍很大, 由此 Chen<sup>[7]</sup> 提出了一种估计  $P(CS)$  的有效方法:

$$P(CS) = P\{J_b < J_i, i = 1, 2, \dots, K\},$$

$$j = 1, 2, \dots, T; i = 1, 2, \dots, K\} =$$

$$P\left\{\bigcap_{i=1, i \neq b}^K (\tilde{J}_b < \tilde{J}_i)\right\} = 1 - \bigcap_{i=1, i \neq b}^K P\{\tilde{J}_b > \tilde{J}_i\} =$$

$$1 - \prod_{i=1, i \neq b}^K e^{-\delta_{b,i}^2/2\sigma_{b,i}^2/\sqrt{2\pi}t}, \quad (1)$$

其中,  $\tilde{J}_i \sim N(\bar{J}_i, \sigma_i^2/T_i), \bar{J}_b = \min_i \bar{J}_i, \delta_{b,i} = \bar{J}_b - \bar{J}_i, \sigma_{b,i}^2 = \sigma_b^2/T_b + \sigma_i^2/T_i, K$  为可行解总数

OO 通常将给定的仿真量均分给各状态, 因而实现一定的正确选择概率需要较大的仿真计算量, 而 OCBA 技术<sup>[7]</sup> 则可通过合理分配仿真计算量 (即对关键或好的解分配较多的仿真量, 而不重要的解则分配较少的仿真量) 来取得更大的正确选择概率, 或在取得一定正确选择概率基础上大大减少计算量, 也就是说 OCBA 解决了如下问题:

$$\begin{aligned} & \max P(CS), \\ & \text{s.t. } N_1 + N_2 + \dots + N_k = T, N_i \leq N; \\ & \text{or } \min \sum_{i=1}^k N_i, \\ & \text{s.t. } P(CS) \geq P^*, \end{aligned} \quad (2)$$

其中:  $T$  为总仿真次数 (计算量),  $P^*$  为给定正确选择概率

**定理 1<sup>[7]</sup>** 给定总仿真次数 (计算量)  $T$ , 并将其分配给  $K$  个可行解, 其性能估计分别为  $\bar{J}(\theta_1), \bar{J}(\theta_2), \dots, \bar{J}(\theta_k)$ , 相应的有限方差为  $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_k^2$ , 令  $\delta_{b,i} = \bar{J}_b - \bar{J}_i, \bar{J}_b = \min_i \bar{J}_i$ , 则  $T$  且

$$\begin{cases} T_j = \left(\frac{\sigma_j/\delta_{b,j}}{\sigma_b/\delta_{b,b}}\right)^2, i = j = b; \\ T_b = \sigma_b \left(\sum_{i=1, i \neq b}^k T_i^2/\sigma_i^2\right)^{1/2} \end{cases} \quad (3)$$

成立时 APCS 最大

### 4 SA 的参数序优化

仅考虑 SA 参数  $t_0, L$  和  $\lambda$ , 假设它们分别有  $N_T, N_L$  和  $N_\lambda$  种选择, 则共有  $K = N_T \times N_L \times N_\lambda$  种不同参数组合。鉴于 SA 有限的计算量和随机性, 其性能完全依赖于参数, 因此可将其最优参数组合的确定问题视为随机优化问题, 进而用 OO 和 OCBA 的思想来确定。具体而言, SA 的各参数组合 ( $t_0, L$  和  $\lambda$ ) 可视为随机优化问题的一个可行解, 于是可行解总数为  $K = N_T \times N_L \times N_\lambda$  将计算量  $T_i$  分配给解  $\theta$  就是对  $\theta$  所对应的参数组合独立执行  $T_i$  次仿真, 而一次仿真代表独立运行 SA 算法 1 次, 记  $\bar{J}$  和  $\sigma^2$  为多次仿真得到的性能估计和方差。具体算法如下:

Step 1: 令  $l = 0, T_1^l = T_2^l = \dots = T_k^l = n_0$ , 即每个可行解均做  $n_0$  次独立仿真;

Step 2: 若  $\sum_{i=1}^K T_i > T$ , 则结束算法, 否则继续;

Step 3: 令增加仿真总量为  $\Delta$ , 由定理 1 中式 (3) 得到  $T_1^{l+1}, \dots, T_k^{l+1}$ ;

Step 4: 对解  $\theta$  实施  $\max(0, T_i^{l+1} - T_i^l)$  次附加仿真,  $i = 1, 2, \dots, K$ , 令  $l = l + 1$  并返回 Step 2

通过对所有参数组合运行上述算法, 即可获得最佳参数组合, 同时也得到了相应参数组合下算法的性能. 由于遵循了 OO 的序比较和软化目标的思想以及 OCBA 的计算量合理分配, 因此最优参数组合可以获得较高的置信度. 为保证均值和方差的初始估计, 算法中  $n_0$  不应取值过小, 以防止在比较过程中出现“早熟”现象.  $\Delta$  过大, 会导致计算量的浪费; 过小, 则会导致多次重复执行 Step 3, 通常推荐取  $n_0 = 5 \sim 20, \Delta = 5 \sim K/10$

### 5 数值仿真与分析

选取文献[9]中 7 个不同规模的置换 flow shop 调度问题进行研究, 并与平均分配仿真量的方法进行比较. 对各问题, 参数  $t_0$  的可选范围为 {200, 500, 1 000, 3 000},  $L$  的可选范围为 {30, 50, 100, 150},  $\lambda$  的可选范围为 {0.90, 0.95, 0.99}, 即共有 48 种参数组合. 对于各算例, 限定每次 SA 运行的总评价次数为  $N = 20\ 000$ , 取  $n_0 = 10, \Delta = 10$ , 总仿真次数  $T = 48 \times 50 = 2\ 400$ . 表 1 给出了采用本文方法得到的最优参数组合, 图 1 显示了求解 Rec01 问题时各参数组合所分配的仿真次数, 且图 1 中参数组合序号是按其平均性能排序的, 即平均性能最优者序号为 1, 最差者为 48.

由结果可见, 本文方法能够根据在线数据合理地将仿真量分配给各参数组合, 同时得到最佳参数较准确的性能评价. 另外, 表 2 给出了平均分配仿真

表 1 本文方法得到的各算例的最优参数组合

问题	$n$	$m$	$t_0 \times 10^3$	$L$	$\lambda$	平均性能
Rec01	20	5	0.5	150	0.99	1 354.2
Rec07	20	10	0.5	150	0.95	1 685.3
Rec13	20	15	0.5	50	0.99	2 122.5
Rec19	30	10	3	100	0.99	2 360.5
Rec25	30	15	0.5	100	0.95	2 827.4
Rec31	50	10	3	50	0.95	3 488.8
Rec37	75	20	3	150	0.99	5 840.1

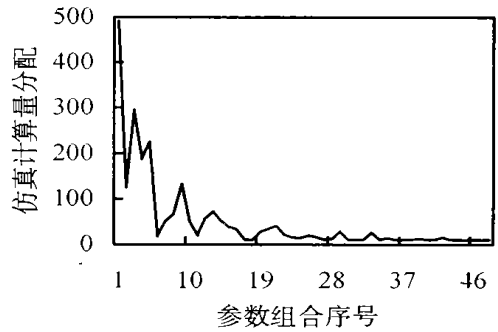


图 1 OCBA 运行中的仿真量分配

量策略所得的最优参数组合, 即各参数组合均分配 50 次独立仿真; 表 3 列出了用本文方法得到的最优参数组合在平均分配计算量策略下得到的性能指标. 显然, 在相同的总仿真计算量下, 平均分配法与本文方法所得的最优参数组合有时并不相同. 即使对同一参数组合, 两种方法得到的性能指标也有差异. 但在确定最优参数的过程中, 由于 OCBA 技术能够合理地分配仿真量, 因此提高了寻优的置信度; 而平均分配策略无法针对个别参数组合增加仿真量来提高估计的置信度, 所以本文方法在处理 SA 参数确定问题中所得的结果更为可靠. 与传统的 SA 参数确定方法相比, 本文方法由于将问题表述为随机优化问题, 并应用了 OO 和 OCBA 技术, 提高了求解最优参数组合的效率, 同时得到了更好的结果.

表 2 平均分配策略所得的最优参数组合

问题	$n$	$m$	$t_0 \times 10^3$	$L$	$\lambda$	平均性能
Rec01	20	5	3	100	0.99	1 354.1
Rec07	20	10	0.5	100	0.90	1 683.4
Rec13	20	15	0.5	30	0.90	2 121.0
Rec19	30	10	1	100	0.99	2 359.5
Rec25	30	15	1	30	0.90	2 825.1
Rec31	50	10	1	150	0.95	3 485.8
Rec37	75	20	0.5	150	0.95	5 844.0

表 3 本文方法获得最优参数在平均分配策略下的性能

问题	$n$	$m$	$t_0 \times 10^3$	$L$	$\lambda$	平均性能
Rec01	20	5	0.5	150	0.99	1 356.6
Rec07	20	10	0.5	150	0.95	1 685.2
Rec13	20	15	0.5	50	0.99	2 123.5
Rec19	30	10	3	100	0.99	2 362.6
Rec25	30	15	0.5	100	0.95	2 828.8
Rec31	50	10	3	50	0.95	3 487.6
Rec37	75	20	3	150	0.99	5 847.4

因此, 本文方法是一种合理、可靠和系统的最优参数确定方法, 而且可推广应用于其他优化算法

另外, 由表 1 可得到关于最优参数组合的一些特点, 即较高的初温可保证算法具备足够的概率突跳能力, 较慢的退温速率可保证算法的退温历程接近稳态。同时, 在有限计算量条件下, 即总评价次数( $N$ )固定的情况, 算法需要在同一温度下的抽样数( $L$ )和退温次数( $N/L$ )两者间作出权衡, 仿真结果显示, 一般 $L$ 不能取值过小以保证在温度稍高时能使 Metropolis 抽样接近稳态

## 6 结 语

本文将 SA 的最优算法参数确定问题表述为一个随机优化问题, 并提出基于序优化和最优计算量分配技术的系统性方法。基于典型算例的仿真结果和比较, 验证了该方法的有效性和可靠性。进一步的工作是将该方法推广到其他优化算法的参数与操作择优的问题

### 参考文献(References):

- [1] 王凌. 智能优化算法及其应用[M]. 北京: 清华大学出版社, 2001.
- [2] Park M W, Kim Y D. A systematic procedure for setting parameters in simulated annealing algorithms[J]. *Computers and Operations Research*, 1998, 25 (3): 207-217.

- [3] Wang T Y, Wu K B. A parameter set design procedure for the simulated annealing algorithm under computational time constraint [J]. *Computers and Operations Research*, 1999, 26(7): 665-678
- [4] Bolte A, Thonemann U W. Optimizing simulated annealing schedules with genetic programming [J]. *European J of Operational Research*, 1996, 92(2): 402-416
- [5] Ho Y C, Sreenivas R, Vakili P. Ordinal optimization of discrete event dynamic systems [J]. *Discrete Event Dynamic Systems*, 1992, 2(2): 61-88
- [6] Dai L. Convergence properties of ordinal comparison in the simulation of discrete event dynamic systems [J]. *J of Optimization Theory and Applications*, 1996, 91(2): 363-388
- [7] Chen C H, Lin J, Yucusan E, et al. Simulation budget allocation for further enhancing the efficiency of ordinal optimization [J]. *Discrete Event Dynamic Systems*, 2000, 10(3): 251-270
- [8] Mitra D, Romeo F, Sangiovanni-Vicentelli A. Convergence and finite-time behavior of simulated annealing [J]. *Advances in Applied Probability*, 1986, 18(4): 747-771
- [9] Reeves C R. A genetic algorithm for flow shop sequencing [J]. *Computers and Operations Research*, 1995, 22(1): 5-13

(上接第 225 页)

结果表明, 最小二乘支持向量机可以用于非线性控制系统辨识, 多层动态自适应搜索技术确定了最优支持向量机参数, 从而获得精确的非线性控制系统辨识结果。同时, 多层动态自适应搜索方法也可适当推广到其他类型支持向量机参数优化中。

### 参考文献(References):

- [1] Vapnik V N. *Statistical Learning Theory* [M]. New York: John Wiley, 1998
- [2] Chang C-C, Hsu C-W, Lin C-J. The analysis of decomposition methods for support vector machines [J]. *IEEE Trans on Neural Networks*, 2000, 11(4): 1003-1008
- [3] Suykens J A K, Vandewalle J. Least squares support vector machine classifiers [J]. *Neural Processing Letters*, 1999, 9(3): 293-300

- [4] 王立新. 自适应模糊系统与控制——设计与稳定性分析 [M]. 北京: 国防工业出版社, 1995: 39-56
- [5] 朱家元, 张恒喜. 基于支持向量机的 R&D 项目中止决策研究 [J]. *计算机科学*, 2002, 29(9): 440-442  
(Zhu Jia-yuan, Zhang Heng-xi. R&D project termination decision based on support vector machines [J]. *Computer Science*, 2002, 29(9): 440-442)
- [6] Zhu Jia-yuan, Ren Bo, Zhang Heng-xi, et al. Time series prediction via new support vector machines [A]. *IEEE in Proc of ICMLC 2002* [C]. Beijing, 2002: 364-366
- [7] Zhu Jia-yuan, Zhang Heng-xi, Guo Ji-lian, et al. Data distributions automatic identification based on SOM and support vector machines [A]. *IEEE in Proc of ICMLC 2002* [C]. Beijing, 2002: 340-344