

99,26(1)

确定性退火

自然法则

模拟退火方法

①

1-4

计算机科学 1999 Vol. 26 No. 1

## 按自然法则计算的一个新分支:确定性退火技术

A New Branch of Physical Computation: Deterministic Annealing Technique

杨广文· 李晓明· 郑纬民· 王鼎兴·

(清华大学计算机科学与技术系 北京 100084)\* (北京大学计算机系 北京 100871)\*\*

**Abstract** Deterministic annealing is an important branch of physical computation. In this paper, the authors have discussed the physical background and mathematical description of deterministic annealing. Two applications of deterministic annealing is given, and the key points of the applications are put forward. Future research direction about deterministic annealing is proposed.

**Keywords** Physical computation, Deterministic annealing, Equilibrium state, Free energy

## 1. 引言

按自然法则计算就是将大量的自然科学领域的思想与方法应用于其传统领域之外的其它领域,将原思想、方法的本质提取出来,用于解决新领域中的问题。按自然法则计算主要用来解决一些复杂系统问题,所谓复杂系统它包含众多的相互作用的因素,各因素间的交互作用随着时间、空间及周围环境的变化而变化,而周围环境又是随着时间而变化的。这样的系统,能够适应自己的环境,如生物进化,学习与神经处理,智能计算机等均为复杂系统。

从数学角度来看,按自然法则计算是求解全局最优解的一种拟自然方法。按自然法则计算是在承认自然科学的特殊性的同时追求其普遍性的一门学问,它以计算和计算机科学为研究对象,追求事物的本质规律,并力图给出问题的自然模型。它是通过数学的、模型化的方法将其它学科具有普遍意义的规律引入计算机科学,构成新的计算模型。

随着计算机计算能力的增强,按自然法则计算所能模拟的复杂系统的规模将随之增加, Fox 指出:“一些传统方法(如离散优化方法),它们的计算时间复杂性是问题规模的指数形式,而按自然法则计算的复杂性往往是线性的,随着计算机性能的改进,对于具有指数形式复杂性的算法,仅能有一些小的影响,而对于具有线性形式复杂性的算法,将会发生一场革命”。因此,按自然法则计算的理论与应用研究

具有广阔的前景。

利用统计物理的退火过程,美国加州理工学院 K. Rose 博士于 1990 年首先提出确定性退火技术<sup>[1]</sup>,它是按自然法则计算的一重要分支<sup>[2]</sup>。它根据退火过程,将求解优化问题的最优点转化为求一系列随温度变化的物理系统的自由能函数的极小,它能够使算法避开局部极小而得到全局极小,具有广阔应用的前景,并且在模式识别、向量量化、图象处理与数据压缩领域得到了广泛的应用<sup>[3,5,6,7]</sup>。但是,对该技术的物理背景及数学描述没有进行详细的分析,从而不能保证解的有效性,对应用缺乏有力的理论指导,文[8]对确定性退火技术物理背景及解的性质进行了研究,本文在对确定性退火技术进行描述的基础上,给出了该技术的应用条件及一些应用实例,并提出了一些亟待解决的问题。

## 2. 确定性退火技术的基本思想

退火作为一自然过程,已成功地应用于一些求解全局最优的优化问题,如有效的模拟退火方法<sup>[9]</sup>。对于一固体物质,将其加热,固体粒子的热运动不断增强,随着温度的上升,粒子与其平衡位置的偏离越来越大,当温度升至熔解温度后,固体的规则性被彻底破坏,固体熔解为液体,粒子的排列从较有序的结晶态转变为无序的液态,这就是熔化过程,熔化过程的目的是消除系统中原来可能存在的非均匀状态。熔化后的物质,它的粒子可自由运动,各向均匀分

布。

冷却时,液体粒子的热运动逐渐减弱,随着温度的徐徐下降,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,逐渐形成低能态的晶格。当温度下降充分缓慢,使系统在每一温度下都达到平衡态,最终当温度为零时,达到固体的基态。

退火过程中系统在每一温度下达到平衡态的过程,可以用封闭系统的等温过程来描述,根据 Boltzmann 有序性原理,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:“对于与周围环境交换热量而温度保持不变的封闭系统,系统状态的自发变化总是朝着自由能减少的方向进行,当自由能达到最小值时,系统达到平衡态”。

一个系统的平衡态可用 Gibbs 分布来表示,当温度足够高,系统完全熔化后,系统的每一微观态出现的几率是相等的,即满足均匀分布,在每一固定温度,自由能  $F$  作为“热力学势”所得到的极小值,对应于系统的平衡态,系统将会自发地趋向平衡态。

确定性退火技术,正是基于上述退火过程。

对于求解一极小化问题

$$\min E = E(x) \quad (2.1)$$

这里  $x$  可以是连续的、离散的或混合的,  $E(x)$  可看作是某一系统的能量。由于  $E(x)$  一般非凸,目前还没有十分有效的方法求解  $E(x)$  的全局最优点。将极小化问题(2.1)看作是求解一物理系统能量极小的状态。首先构造一自由能函数  $F(x, T)$ 。由以上分析,在某一温度下,系统状态的变化总是朝着自由能减少的方向进行,当系统达到平衡态时自由能函数达到极小。当温度达到固体熔化温度时,构成系统的粒子各向均匀分布,平衡态(自由能函数极小的态)服从均匀分布。随着温度的不断下降,平衡态服从 Gibbs 分布,且概率集中于一个小的低能态子集,当温度趋于零时,对应于全局低能态结构的概率为 1。确定性退火技术,就是在每一温度  $T$ ,以系统在  $T = T + \Delta T$  时自由能函数极小的状态  $x_{\min}(T + \Delta T)$  作为初始点,通过求解  $\min F(x, T)$  的极小点来模拟系统达到平衡态的过程。

由以上分析,我们将求解  $E(x)$  的极小转化为求解一系列随温度变化的自由能函数  $F(x, T)$  的极小,进一步如果我们要求  $F(x, T)$  至少满足下述条件:

(1) 当  $T = \infty$  时,  $F(x, \infty)$  关于  $x$  的全局极小极易求出(如  $F$  为关于  $x$  的凸函数,则利用传统的优化方法极易求出全局最优);

(2) 当  $T = 0$  时,  $F(x, 0) = E(x)$ 。

对于优化问题  $\min F(x, \infty)$ ,由假设条件,按传统的优化方法极易求出全局最优点,随着  $T$  的减小,  $\min F(x, T)$  的全局最优点不断变化,当温度的变化  $\Delta T$  很小时,有理由认为  $\min F(x, T)$  与  $\min F(x, T + \Delta T)$  的全局最优点  $x_{\min}(T)$  与  $x_{\min}(T + \Delta T)$  很接近,即可认为  $\min F(x, T)$  的全局最优点位于  $\min F(x, T + \Delta T)$  的全局最优点所在的局部极小区域内,故在温度  $T$ ,可以  $x_{\min}(T + \Delta T)$  作为初始点求解为  $\min F(x, T)$ ,连续变化  $T$ ,当  $T$  变化合理时,有理由认为  $\lim_{T \rightarrow 0} x_{\min}(T)$  为  $E(x)$  的全局最优点。

确定性退火技术的解题思路,可用图 1 来描述。从图中看出,确定性退火技术的求解过程,是从温度很高时自由能函数的全局最优点(容易求出)连续变化到温度为零时原优化目标函数的全局最优点的过程。文[7]证明了当自由能函数连续且在每一温度下全局极小点唯一时,全局极小点为温度的连续映射。

确定性退火方法的求解过程是首先确定自由能函数  $F(x, T)$ ,满足前面提出的两个条件,然后按照下列过程求解问题:

(1) 取足够大的  $T_0, k=0$ ,求解优化问题:

$$\min F(x, T_k)$$

设最优解为  $x_{\min}(T_k)$

(2)  $T_{k+1} = cT_k (0 < c < 1)$ ,以  $x_{\min}(T_k)$  为初始解,

求解

$$\min F(x, T_{k+1})$$

设最优解为  $x_{\min}(T_{k+1})$

(3) 判断收敛准则是否满足。若满足,则停,  $x_{\min}(T_{k+1})$  为最优解;否则,转(4)

(4)  $k = k + 1$ , 转(2)

确定性退火技术一方面是一退火过程,可用来求解全局最优解,另一方面又不同于模拟退火算法用 Metropolis 抽样准则来模拟系统的平衡态,而是在固定温度下利用确定的优化方法求解自由能函数的极小(利用一特味的初始点进行迭代)对系统的平衡态进行模拟。因此,利用确定性退火技术的求解方法要比模拟退火算法的速度要快。不过,这一技术的实现过程中,自由能函数  $F(x, T)$  的构造及退火过程的控制是要解决的关键问题。

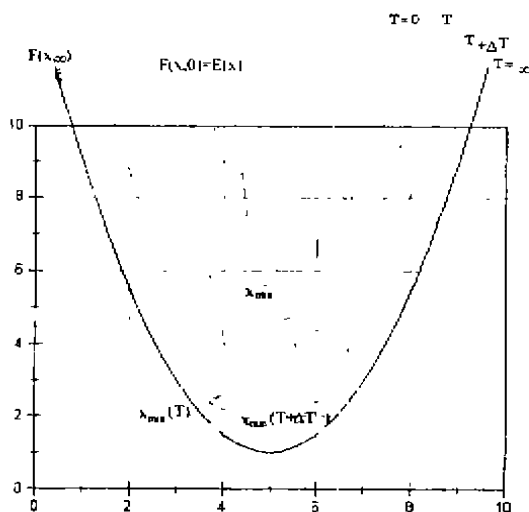


图1 确定性退火技术的解题思路描述

### 3. 温度控制对解的影响

作为一退火过程,若系统从熔化各向均匀的状态出发,使温度不断下降,进一步假定退火温度下降足够缓慢,则系统在每一温度下都达到使自由能函数极小的平衡态,最终达到固体的基态,若冷却温度变化很快,则将引起淬火效应,固体只能冷凝为非均匀的平衡态,系统的能量也不会达到最小值。

根据退火过程这一物理背景,确定性退火技术中控制参数温度  $T$  的下降速度,直接影响解的优劣,当温度下降十分缓慢,解的性能比较好,但计算工作量很大。若温度下降速度比较快,则解的性能差。虽然文[8]已证明,自由能函数的最优值及最优点连续变动到能量函数的全局最优值和全局最优点,但是如果下降温度变化剧烈,就不能保证每一温度下按传统方法求解  $F(x, T)$  的极小正好是全局极小点,更谈不上最终达到系统的自由能函数的全局最优点所对应的基态,即能量函数  $E(x)$  的全局极小点。

因此,温度参数的控制,对确定性退火技术应用起着很大作用,如何合理地选择温度参数的下降规律,有待进一步研究。

### 4. 确定性退火技术的应用

#### 4.1 在聚类问题中的应用

聚类问题可描述为将一给定的数据集分成一些子集,每一子集尽可能具有相同的性质。设  $Z = \{z_1,$

$z_2, \dots, z_N\}$ , 将  $Z$  聚类,已知类数为  $M, C_1, C_2, \dots, C_M$  为  $M$  类,一般有  $C_i \cap C_j = \emptyset (i \neq j), \bigcup_{i=1}^M C_i = Z$ 。设  $x_i (i=1, 2, \dots, M)$  为  $C_i$  的代表元(或中心),  $z \in C_i$  当且仅当  $d(z, x_i) \leq d(z, x_j) (\forall j) (当 d(z, x_i) = d(z, x_j) 且 i < j, 则时, z \in C_i)$  (其中  $d(z, x_i)$  为  $z$  与  $x_i$  的距离)。

聚类问题可描述为求  $x = (x_1, x_2, \dots, x_M)$  使得

$$D = \sum_{i=1}^M \sum_{z \in C_i} d(z, x_i)$$

取极小。

上述问题为一非凸优化问题,目前还没有有效的求解方法,下面用确定性退火技术来求解。将该聚类问题看作为一物理系统,定义自由能函数  $F$ :

$$E(x, T) = \begin{cases} \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \sum_{z \in C_i} d(z, x_i) & T = +\infty \\ -T \sum_{i=1}^M \ln \left( \sum_{z \in C_i} e^{-\frac{1}{T} d(z, x_i)} \right) & 0 < T < +\infty \\ \sum_{i=1}^M v_i d(z, x_i) & T = 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

其中  $v_i = \begin{cases} 1 & x \in C_i \\ 0 & \text{其它} \end{cases}$ , 可证  $F(x, T)$  在  $E, \mathbb{R}^M [0, +\infty)$  上连续。若进一步假定  $d(z, x_i)$  为关于  $x_i$  的凸函数,则当  $T = +\infty$  时  $F(x, T)$  为  $x$  的凸函数;当  $T = 0$  时,  $F(x, 0)$  即为(4.1)式的目标函数。由此可见,自由能函数  $F(x, T)$  满足确定性退火技术的要求,故我们可将聚类问题转化为一系列与温度有关的优化问题,按确定性退火技术的方法对它进行求解。

#### 4.2 在 TSP 中的应用

设  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$  为  $n$  维欧氏空间的一集合,表示旅行商问题的城市集,  $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_N\}$  为对应于  $X$  的  $n$  维欧氏空间的一向量参数集。定义从  $X$  到  $Y$  的一一映射  $f: X \rightarrow Y, f(x_i) = y_i$  当且仅当  $d(x_i, y_j) < d(x_i, y_k) (\forall k \neq j)$  或者  $d(x_i, y_j) \leq d(x_i, y_k) (\forall k)$ , 且  $j$  为满足等式的下标最小者,定义集合  $V = \{v_{ij}\}; v_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{若 } f(x_i) = y_j \\ 0 & \text{其它} \end{cases}$

考虑极小化问题:

$$\min \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N v_{ij} d(x_i, y_j) + \sum_{j=1}^N d(y_{j-1}, y_j)$$

其中  $y_0 = y_N$ 。直观上讲,当上述目标函数的最优值第一项为零,而第二项达到最小时,我们得到了 TSP 的一最优解。若  $x_i = y_j$ , 则  $x_i$  为售货员走的第  $j$  个城市,下面利用确定性退火技术来求解 TSP。

定义自由能函数:

$$F(Y, T) = -T \ln \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{-\frac{1}{T} d(x_i, y_j)} + \frac{1}{T+1} \sum_{i=1}^N d(y_{i-1}, y_i)$$

假定  $d(x, y)$  对于  $y$  为凸函数, 则当  $T \rightarrow \infty$  时, 可推得

$$F(Y, \infty) = \lim_{T \rightarrow \infty} F(Y, T) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N d(x_i, y_j)$$

它为关于  $Y$  的凸函数, 由传统的优化方法极易求出全局最优点。当  $T=0$  时,

$$F(Y, 0) = \lim_{T \rightarrow 0} F(Y, T) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N v_i d(x_i, y_j) + \sum_{i=1}^N d(y_{i-1}, y_i)$$

可见  $F(Y, T)$  作为自由能函数满足确定性退火技术要求, 而且利用确定性退火技术的整个求解过程能保证最终结果为目标函数的第一项为零, 而第二项达到最小。因此, 我们把求解 TSP 转化为求解随温度变化的自由能函数的极小问题。

## 5. 进一步工作

本文讨论了确定性退火技术的物理背景及算法的数学描述。作为按自然法则计算的重要分支, 该技术在模式识别及人工智能等领域必将起到重要的作用。但目前对该技术的研究还不够深入, 还有许多要解决的问题。例如, 如何将一优化问题与一物理系统建立起联系, 构造出对应于物理系统的自由能函数? 退火过程如何控制? 利用该技术得到的解随温度连续的更宽松条件是什么?

对确定性退火技术的进一步研究, 主要应该集中在三个方面。第一, 对确定性退火技术的理论进行

进一步研究, 讨论解的性质, 给出该技术应用的宽松条件; 第二, 基于目前的研究成果, 对确定性退火技术进行进一步的应用, 去解决一些科学与技术领域中与其相关的重要问题; 第三, 推广确定性退火技术的应用, 解决其它一些重要问题, 如一般非凸优化问题、一些 NP 难题等。

由于对不同的问题, 它与物理系统建立的联系不同, 因此, 确定性退火技术中自由能函数的选取也不同, 从而试图给出自由能函数的一般选取方法将是十分困难的。不过, 随着理论的不完善和应用的不断推广, 确定性退火技术将具有广阔的应用前景。

## 参考文献

- 1 Fox G C. Physical computation: Concurrency: Practice and Experience, 1991, 3(6): 627~653
- 2 董占球, 等. 一类智能计算思想: 按自然法则计算. 计算机科学, 1996, 23(3): 14~16
- 3 Rose K, et al. Statistical mechanics and phase transitions in clustering. Physical Review Letters, 1990, 65: 945~948
- 4 Rose K, et al. A deterministic annealing to clustering. Pattern Recognition letter, 1990, 11: 589~594
- 5 Rose K, et al. Vector quantization by deterministic annealing. IEEE Trans. on Information Theory, 1992, 38(4): 1249~1257
- 6 Rose K. A mapping approach to rate-distortion computation and analysis. IEEE Trans. on Information Theory, 1994, 40(6): 1939~1952
- 7 Rose K, et al. Entropy-constrained tree structured vector quantizer design. IEEE Trans. on Image Processing, 1996, 5(2): 393~398
- 8 杨广文, 等. 确定性退火技术. 计算机学报, 1998, 21(8)
- 9 Kirkpatrick S, et al. Optimization by simulated annealing. Science, 1983, 220: 671~680

(上接第 13 页)

客户机程序, 将 Netscape 的 Live3D 和 SGI 的 Cosmo Player 软件集成, 以实现 Netscape Communicator Internet 浏览器的新一代插件程序。此计划将给开发者提供一个跨平台、高性能 VRML 2.0 客户机程序。它将具备统一的用户界面、统一的 JavaScript 描述语言和统一的 Java API, 可同时用于 Windows、Macintosh 和多种 UNIX 操作系统。该项技术将有望创造一种新的应用: 将二维和三维显示“无缝”地结合起来。

**小结** 标记语言的发展和完善, 为基于 Internet/Intranet 的应用领域、应用规模、复杂性及开发生产率方面的发展提供了最大的方便。我们在开拓 Internet/Intranet 技术给我们带来的无限前景时, 应关注标记语言。

## 参考文献及相关网址

- 1 A Brief History of the Development of SGML SGML Users' Group, June, 1990
- 2 HTML 4.0 Specification W3C Working Draft, Sept 17, 1997
- 3 Special Edition Using HTML, 2nd Edition, chap17, Que Corporation, 1996
- 4 XML, Java, and the future of the Web. Jon Bosak, Sun Microsystems, March 10, 1997
- 5 XML White Paper. Microsoft Corporation, June 23, 1997
- 6 Extensible Markup Language (XML), W3C Working Draft, Nov 17, 1997
- 7 <http://home.netscape.com/>, <http://SGMLsource.com/>, <http://sunsite.unc.edu/>, <http://vrm1.wired.com/>, <http://webpace.sgi.com/>, <http://www.w3.org/>, <http://www.microsoft.com/>, <http://www.ncsa.uiuc.edu/General/VRML/>