

# 模拟退火组合优化法在模式识别中的若干应用

徐 雷

(北京大学数学系)

## 摘 要

本文将用于求解组合优化问题的模拟退火法引入聚类分析、属性关系图同态、分段曲线拟合和特征选择等模式识别问题。(1) 提出了一类新的聚类分析算法——模拟退火聚类法；(2) 给出了一种模拟退火图同态的方案和实现算法——ALISOM；(3) 详细地讨论了如何应用模拟退火组合优化法进行分段曲线拟合和特征选择。

**关键词:** 模拟退火法, 模式识别, 聚类分析, 图同态, 特征选择.

## 一、引 言

近年来, S. Kirkpatrick 等人<sup>[1,2]</sup>另辟了一条求解组合优化问题的新途径, 它通过模拟退火过程, 寻找到全局最优解. 目前, 这种模拟退火法已被成功地应用于 TSP, VLSI 设计和计算机设计等问题, 并在许多不同的领域有应用前景, 引起了广泛注意和兴趣.

在聚类分析、特征选择、属性关系图同态、分段曲线拟合、边缘检测和纹理分析等许多模式识别问题中存在着组合优化问题, 且不少具有指数型复杂度. 本文下面先简介模拟退火组合优化法, 然后介绍将模拟退火法引入求解前述的四个典型模式识别问题所得到的一些结果.

## 二、模拟退火组合优化法

设  $E[\{x_i\}]$  表示某一物质体系在微观状态  $\{x_i\}$  (为一组状态变量, 如粒子的速度和位置) 下的内能, 对于给定温度  $T$ , 若体系处于热平衡状态时,  $E[\{x_i\}]$  服从 Boltzmann 分布:

$$f = c(T)e^{-\frac{E[\{x_i\}]}{kT}}, \quad c(T) = 1/\sum_i e^{-\frac{E[\{x_i\}]}{kT}}. \quad (1)$$

其中  $k$  为 Boltzmann 常数.  $T$  下降, 内能  $E$  将随之下降, 若  $T$  下降的足够慢, 则体系

可总保持热平衡态,使其内能在该温度下达最低,当  $T = 0^\circ\text{K}$  时,内能  $E$  将达最小值,此时  $\{x_i\}$  称为 Ground 态,这样的物质降温过程称为退火过程。

Metropolis 抽样用来在计算机上模拟某一温度  $T$  下的热平衡态: 随机地选一初始状态  $\{x_i\}$ , 然后随机地对体系给一个小的扰动  $\{\Delta x_i\}$ , 计算内能增量

$$\Delta E = E[\{x_i + \Delta x_i\}] - E[\{x_i\}]. \quad (2)$$

若  $\Delta E < 0$ , 此扰动被接受; 若  $\Delta E \geq 0$ , 此扰动以概率  $e^{-\Delta E/kT}$  被接受. 若扰动被接受, 则用  $\{x_i + \Delta x_i\}$  替代原  $\{x_i\}$ , 否则, 再产生一个新的扰动..., 如此重复下去, 所得到的  $\{x_i\}$  状态序列将满足式(1)分布。

进一步地, 让  $T$  从一个足够高的值慢慢地下降, 对于每个  $T$ , 用 Metropolis 抽样使状态达到热平衡, 一直到  $T = 0$ , 便实现了计算机模拟退火过程,  $T = 0$  时的状态  $\{x_i\}$  便是 Ground 态, 此时  $E[\{x_i\}]$  达最小值。

模拟退火组合优化法的思想是: 将每种组合状态看做为  $\{x_i\}$ , 目标函数看做为内能  $E$ , 令  $T$  为控制参数, 用上述模拟退火过程, 令  $T$  逐渐减小直到零, 求得目标函数的最优值。

模拟退火法的基本步骤如下:

初始化: 任给初始状态  $\{x_i\}$ , 计算  $E[\{x_i\}]$ , 取初始  $T^{(0)}$  值。

步一: 产生随机扰动  $\{\Delta x_i\}$ , 按式(2)计算  $\Delta E$ 。

步二: 若  $\Delta E < 0$ , 转步四, 否则产生  $[0, 1]$  区间上的一个均匀分布随机数  $\xi$ 。

步三: 若  $e^{-\frac{\Delta E}{T}} \leq \xi$ , 转步一。

步四: 用  $\{x_i + \Delta x_i\}$  取代原  $\{x_i\}$ ,  $E \leftarrow E + \Delta E$ 。

步五: 在此  $T$  下, 检验 Metropolis 抽样是否稳定, 若不稳定, 转步一。

步六: 以某一方式取  $T' < T$ , 令  $T \leftarrow T'$ 。

步七: 退火过程是否基本结束, 是, 停止; 否则, 转步一。

模拟退火法是否能达  $E$  的最小值, 取决于  $T^{(0)}$  足够高和  $T$  下降得充分慢, 以及对于每个  $T$  下的 Metropolis 抽样是否达到稳定和结束退火时  $T$  是否足够低; 但是, 这几点对于计算复杂性的影响正好相反. 该方法特点是优化程度高(即得到的解接近全局最优的程度高), 算法的通用性强, 可用于各种组合优化问题, 占内存少, 且适当控制上面各参数, 计算量也可比一般的启发式算法小或相当。

### 三、模拟退火聚类分析法

聚类分析是统计模式识别的主要方法之一. 对样本集  $\mathbf{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  (一般情况下,  $x_i$  为矢量), 进行聚类, 形成若干类, 就是做分割  $\mathbf{X} = C_1 \cup C_2 \dots \cup C_m$  ( $C_i \cap C_j = \emptyset$ , 当  $i \neq j$ ), 简记  $\mathbf{C}$ , 并用某距离准则  $d(\mathbf{C})$  求  $\mathbf{X}$  的一个最佳分割  $\mathbf{C}^* = C_1^* \cup C_2^* \dots \cup C_m^*$ , 使  $d(\mathbf{C}^*) = \text{Min } d(\mathbf{C})$ . 显然, 聚类问题是一个典型的组合优化问题, 枚举量为指数型的

$$S(n, m) = \frac{1}{m!} \sum_{j=1}^m (-1)^{m-j} \binom{m}{j} j^n. \quad (3)$$

目前已有的聚类算法种类繁多,主要不同点在于两个方面,一是准则  $d(\cdot)$  不同,常用的准则有若干种<sup>[3]</sup>,其中最常用的是最小平方距离准则;二是枚举方式不同,目前的聚类算法的枚举方式一般都是启发式的,它们可有效地减少计算量,但这类算法常可能得到局部最优解,另外其计算结果依赖于初始分割。

参见节二,把每一个分割  $\mathbf{C}$  看成为状态  $\{x_i\}$ , 准则  $d(\mathbf{C})$  看成为  $E[\{x_i\}]$ , 则模拟退火法可用来进行聚类分析,且由不同的准则,用已有各种启发式聚类算法的枚举方式来实现扰动  $\{\Delta x_i\}$ , 不难构造出一类相应的新的模拟退火聚类算法。这里仅具体地比照常用的 Kmeans 法,即利用其准则和枚举方式,给出一种新的模拟退火聚类算法:

步一: 随机地给一个分割  $\mathbf{C} = \mathbf{C}^{(0)} = C_1 \cup C_2 \cdots \cup C_m$ , 即每个样本取  $C_1, C_2, \cdots, C_m$  之一作为其标签。按下式计算  $d = d_1(\mathbf{C}^{(0)})$ , 并取初值  $T = T^{(0)}, k = 0$  和  $l = 0$ 。

$$d_1(\mathbf{C}) = \sum_{j=1}^m \sum_{x_i \in C_j} \|x_i - \bar{x}(j)\|^2, \bar{x}(j) \text{ 为 } C_j \text{ 类的样本均值.}$$

步二: 若  $l > l_{GM}$  (给定阈值), 则  $T \leftarrow \lambda T (0 < \lambda < 1)$ 。若  $T < T_{\min}$  (给定阈值), 算法结束。

步三:  $k = k + 1$ , 若  $k > n$ , 则  $k \leftarrow k - n$ 。

步四: 查验  $x_k$  的类标签, 设此标签为  $C_i$ , 再产生一个在  $[1, 2, \cdots, m]$  上均匀分布的随机整数  $j$  (若  $j = i$  则重新产生  $j$ ), 然后利用 Kmeans 法的枚举特点, 按下式简单地计算  $\Delta d$ :

$$\Delta d = \frac{m_j}{m_j + 1} \|x_k - x_j\|^2 - \frac{m_i}{m_i - 1} \|x_k - x_i\|^2. \quad (4)$$

其中  $m_i, m_j$  为  $C_i, C_j$  中的样本个数。

步五: 若  $\Delta d > 0$ , 产生  $[0, 1]$  区间上的均匀随机数  $\xi$ , 且若  $e^{-\frac{\Delta d}{T}} < \xi$ ,  $l = l + 1$ , 转步二。

步六: 将  $x_k$  由  $C_i$  中取出放入  $C_j, d \leftarrow d + \Delta d, l = 0$ , 转步二。

为了说明模拟退火聚类算法的优点, 我们将 Kmeans 法与 ALKmeans 法进行了比较。实验的做法是: 用计算机产生许多组实验样本数据, 每组数据对应于一次实验; 在每次实验中, 分别用两种算法对该组数据进行聚类。多次实验结果表明, 当初始温度  $T^{(0)}$  选得比较高和温度下降因子  $\lambda$  选择得比较合适时, ALKmeans 的解基本上总是优于 Kmeans 的解。限于篇幅, 这里略去具体实例和结果图表, 详见文献[3]。

#### 四、用模拟退火法进行属性关系图同态

在机器视觉中, 用属性关系图(简记为 ARGs) 来描述和分析图象显示出其特有的优点<sup>[4,5]</sup>, ARGs 也被成功地用于分布式计算机系统。所谓图同态就是寻找一种有效的算法, 在某一给定的图距离准则的意义下, 进行两 ARGs 的匹配, 从而实现对模式分析、识别和解释。本节运用模拟退火技术, 提出一种新的图同态算法, 它具有简单、通用、有效等特点; 尤其适用于两个 ARGs 的节点都很多的场合。

对于图  $G = (V, E)$  和  $G' = (V', E')$ ,  $V, V'$  为节点集, 分别为  $V = (n_1, n_2, \dots, n_N)$  和  $V' = \{n'_1, n'_2, \dots, n'_M\}$ ,  $E, E'$  为边集, 分别为  $E = \{e_1, e_2, \dots, e_p\}$  和  $E' = \{e'_1, e'_2, \dots, e'_q\}$ . 假定  $G$  和  $G'$  之间的所有节点到节点、边到边的变换已由某种方式规定, 令  $0 \leq d(n, n') < +\infty$  (或  $0 \leq d(e, e') < +\infty$ ) 表示将节点  $n$  (或边  $e$ ) 变换为  $n'$  (或边  $e'$ ) 的代价, 且允许  $n, n'$  (或  $e, e'$ ) 为空节点或空边.

将图  $G$  与  $G'$  同态, 就是将两图中的节点一对一地配对, 显然会有许多种配对方式, 对于任一种方式, 其总匹配代价为所有  $d(n, n'), d(e, e')$  之和. 共有可能方式如下:

$$S(N, M) = M(M-1)(M-2)\cdots(M-N+1) = \frac{M!}{(M-N)!} \quad (5)$$

我们的目的是找出总代价最小的那种方式做为  $G$  与  $G'$  的同态结果. 记与  $G$  中节点  $n_i$  配对的  $G'$  中的节点为  $n'_{p(i)}$ ,  $p(i) \in [1, M]$ , 且  $p(i) \neq p(j)$  当  $i \neq j$ , 于是, 一种匹配方式可记为  $P = [p(1), p(2), \dots, p(N)]$ , 所有的匹配方式构成集合  $\mathbf{P}$ ; 再记两个节点  $n_i, n_j$  之间的边  $e_i \in E$  为  $e_i = e(n_i, n_j)$ , 则与  $e_i$  配对的  $G'$  中的边为  $e(n'_{p(i)}, n'_{p(j)})$  (简记  $e'_{ij}$ ); 这样, 图  $G$  与  $G'$  的匹配问题可形式地表达为如下问题:

求  $P^* \in \mathbf{P}$ , 使  $d(P^*) = \text{Min } d(P), \forall P \in \mathbf{P}$ ,

$$d(P) = \alpha \sum_{i=1}^{N+1} d(n_i, n'_{p(i)}) + (1-\alpha) \sum_{i=1}^{N+1} d(e_i, e'_{ij}) \quad (6)$$

其中,  $d(n_{N+1}, n'_{p(N+1)})$  为  $V'$  中所有的  $n'_j, \forall j \in \{1, 2, \dots, M\} - P$  节点变换为空  $\phi$  的代价之和,  $d(e_{p+1}, e'_{ij})$  为  $E'$  中所有的未与  $E$  中的边相配对的边被变换为空的代价之和.  $0 < \alpha < 1$  为权系数. 且  $d(e_i, e'_{ij}) = d(e_i, \phi)$ , 若  $e'_{ij} \notin E'$ , 即  $G'$  的  $n'_{p(i)}$  和  $n'_{p(j)}$  之间不存在边.

由式(5)和(6)看出, 图同态是一个具有指数型计算复杂度的组合优化问题. 若把每一种匹配方式  $P = [p(1), p(2), \dots, p(N)]$  看做为状态  $\{x_i\}$ , 匹配总代价  $d(P)$  看做为内能  $E[\{x_i\}]$ , 则模拟退火优化法可以用来进行图同态, 它可克服一般启发式搜索算法在图的节点数很大时所遇到的困难.

这里, 给出模拟退火图匹配算法——ALISOM 如下:

初始化: 在  $[1, 2, \dots, M]$  中随机地选取  $N$  个整数, 做为  $P = [p(1), p(2), \dots, p(N)]$  得初始匹配  $P$ , 按式(6)计算初始  $d = d(P)$ , 由  $P$  调用 SUB2 计算初始  $T^{(0)}$ .

步一: 置  $d_0 = d, \bar{d}_i = d, \sigma_i^2 = 0$ , 且给定  $\delta, r$  等值;

步二:  $i \leftarrow i + 1$ , 由  $P, r$  调用 SUB1, 得  $P', \Delta d$ ; 若  $\Delta d \leq 0$ , 转步四, 否则产生  $[0, 1]$  上的均匀分布随机数  $\xi$ ;

步三: 若  $e^{-\frac{\Delta d}{T}} \leq \xi$ , 转步二;

步四:  $P \leftarrow P', d \leftarrow d + \Delta d, \bar{d}_i \leftarrow \frac{i\bar{d}_i + d}{i+1}, \sigma_i^2 \leftarrow \frac{i\sigma_i^2 + d^2}{i+1}$ ;

步五: 若  $i < M$ , 转步二;

步六:  $T \leftarrow T / \left(1 + \frac{\ln(1+\delta)}{3\sigma_i} T\right)$ ;

步七: 由  $d, \bar{d}_i, \sigma_i^2, T$  等调用 SUB3, 判定退火过程是否停止, 否, 置  $i = 0$ , 转步二.

其中, SUB1, SUB2, SUB3 为三个子程序, SUB1 的作用是估计初始高温  $T^{(0)}$ , SUB2 的作用是随机扰动, 由当前匹配方式  $P$  产生新的匹配方式  $P'$ , 并计算增量  $\Delta d = d(P') - d(P)$ , SUB3 的作用是判断退火过程是否停止, 这里省略. 由于篇幅所限, 关于模拟退火法用于图同态, 这里给出的仅是粗略的简介.

## 五、模拟退火法在模式识别中的其它应用

### 1. 分段曲线拟合

给定一组离散数据点  $(t_i, f_i), i = 1, 2, \dots, N$ , 我们需要寻找一个“平滑”函数  $g(t)$ , 使如下平方误差  $E_2$  (或其它误差准则) 取最小:

$$E_2 = \sum_{i=1}^N [f_i - g(t_i)]^2. \quad (7)$$

构造  $g(t)$  的一个有效办法是将  $[t_1, t_2, \dots, t_N]$  分成  $m (\ll N)$  个子区间, 在每个子区间上使用不同的函数  $s_1(t), s_2(t), \dots, s_m(t)$ , 使以下误差最小:

$$E_2 = \sum_{i=1}^m \sum_k [f_k - s_i(t_k)]^2. \quad (8)$$

这一过程通常称为分段曲线拟合, 常用的  $s_i(t)$  有线性函数和多项式样条函数. 成功地进行分段曲线拟合的一个关键是将数据点  $[t_i, f_i]$  分成  $m$  个组(子区间)一般地说, 有  $C_N^{m-1}$  种可能的分法, 我们希望选择的是使式(8)取最小值的那一种分法. 显然, 这问题也可看成一个组合优化问题, 故模拟退火方法可望用来有效地求解这问题.

现以  $s_i(t)$  为线性函数为例, 看如何用模拟退火法处理此问题. 参见节二可知, 这里只需将如何产生一个小的扰动  $\{\Delta x_i\}$  和如何有效地计算增量  $\Delta E$  这两点讨论清楚便可, 现讨论如下:

首先, 随机地将数据  $[t_i, f_i]$  分成  $m$  个组, 然后, 等概率地在  $[1, 2, \dots, m-1]$  中选择一个整数  $j$ , 取出第  $j$  组的最后一个数据点, 放入第  $j+1$  组的第一点位置上, 由此得到一个新的分组. 易知  $\Delta E$  仅与第  $j$  组和第  $j+1$  组的误差有关, 因此,  $\Delta E$  可以如下计算:

设对于第  $j$  组和第  $j+1$  组的数据点分别为:  $(t_1, f_1), (t_2, f_2), \dots, (t_k, f_k)$  和  $(t_{k+1}, f'_{k+1}), (t_{k+2}, f'_{k+2}), \dots, (t_r, f'_r)$ . 有

$$\begin{aligned} \Delta E = & \left( \sum_{i=1}^{k-1} [f'_i - s_j(t_i)]^2 + \sum_{i=k}^r [f'_i - s_{j+1}(t_i)]^2 \right) \\ & - \left( \sum_{i=1}^k [f'_i - s_j(t_i)]^2 + \sum_{i=k+1}^r [f'_i - s_{j+1}(t_i)]^2 \right). \end{aligned}$$

这里,  $s_j(t_i) = a_j t_i + b_j, s_{j+1}(t_i) = a_{j+1} t_i + b_{j+1}$ , 进一步地,  $a_j, b_j, a_{j+1}, b_{j+1}$  还可由公式方便地求出. 例如

$$a_j = \frac{\sum_{i=1}^k f_i \sum_{i=1}^k t_i - k \sum_{i=1}^k t_i f_i}{c_j}, \quad b_j = \frac{\sum_{i=1}^k t_i f_i \sum_{i=1}^k t_i - \sum_{i=1}^k f_i \sum_{i=1}^k t_i}{c_j},$$

$$c_j = \left( \sum_{i=1}^k t_i \right)^2 - k \sum_{i=1}^k t_i^2.$$

## 2. 特征选择

令  $S_N = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$  表示具有  $N$  个特征变量的原特征集,  $S_m$  为  $S_N$  的具有  $m$  个特征变量的子集, 这样的子集共有  $C_N^m$  个. 特征选择的目的是寻找一个子集  $S_m^*$ , 使某一给定可分离性准则达最大:

$$F(S_m^*) = \text{Max}_{\forall S_m \subset S_N} F(S_m). \quad (9)$$

显然, 特征选择问题是一个典型的组合优化问题, 故也可望用模拟退火方法来求解它.

类似于分段曲线拟合问题, 这里, 我们也只讨论如何产生随机扰动  $\{\Delta x_i\}$  和计算增量  $\Delta F$ .

1) 随机扰动. 首先在  $S_N$  中任选  $m$  个变量构成特征子集  $S_m$ , 然后, 分别随机地在  $S_m$  中取出一个变量  $x$  和在  $S_N - S_m$  中取出一个变量  $y$ , 交换  $x$  和  $y$ , 再放入各自的子集, 由此得到一个新的子集  $S'_m$ .

2) 计算  $\Delta F$ . 许多特征选择准则都具有基本形式:  $F = \mathbf{x}_m^t \Sigma_m^{-1} \mathbf{x}_m$ . 其中,  $\mathbf{x}_m$  是一个  $m$  维矢量,  $\Sigma_m$  是一个  $m \times m$  正定矩阵. 我们现以此为例, 讨论如何计算  $\Delta F$ .

假设对于子集  $S_m$ , 有

$$\mathbf{x}_m = [x_1 x_2 \cdots x_{m-1} a]^t = [\mathbf{c}_m : a]^t, \quad \mathbf{c}_m = [x_1 x_2 \cdots x_{m-1}],$$

$$\Sigma_m = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \cdots & \sigma_{1a} \\ \vdots & & \vdots \\ \sigma_{a1} & \cdots & \sigma_{aa} \end{bmatrix} \doteq \begin{bmatrix} \Sigma_{m-1} & Y_a \\ Y_a^t & \sigma_{aa} \end{bmatrix}, \quad \Sigma_{m-1} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \cdots & \sigma_{1,m-1} \\ \vdots & & \vdots \\ \sigma_{m-1,1} & \cdots & \sigma_{m-1,m-1} \end{bmatrix}.$$

其中  $Y_a = [\sigma_{a1} \sigma_{a2} \cdots \sigma_{a,m-1}]^t$ ,  $a$ ,  $\sigma_{ai}$ ,  $\sigma_{ia}$  对应于特征变量  $x$ .

类似地, 假设对于  $S'_m$ , 有

$$\mathbf{x}'_m = [x_1 x_2 \cdots x_{m-1} b]^t = [\mathbf{c}_m : b]^t,$$

$$\Sigma'_m = \begin{bmatrix} \Sigma_{m-1} & Y_b \\ Y_b^t & \sigma_{bb} \end{bmatrix}, \quad Y_b = [\sigma_{b1} \sigma_{b2} \cdots \sigma_{b,m-1}]^t.$$

其中  $b$ ,  $\sigma_{bi}$ ,  $\sigma_{ib}$  对应于特征变量  $y$ .

因此  $\Delta F = \mathbf{x}'_m{}^t \Sigma'_m{}^{-1} \mathbf{x}'_m - \mathbf{x}_m^t \Sigma_m^{-1} \mathbf{x}_m$ , 进一步地, 由关于矩阵求逆的一个重要公式, 有

$$S_k^{-1} = \begin{bmatrix} S_{k-1}^{-1} + \frac{1}{d} S_{k-1}^{-1} Y Y^t S_{k-1}^{-1} & -\frac{1}{d} S_{k-1}^{-1} Y \\ -\frac{1}{d} Y^t S_{k-1}^{-1} & 1/d \end{bmatrix}.$$

这里,

$$S_k = \begin{bmatrix} S_{k-1} & Y \\ Y^t & s_{kk} \end{bmatrix}, \quad d = s_{kk} - Y^t S_{k-1}^{-1} Y.$$

我们有

$$\mathbf{x}_m^t \Sigma_m^{-1} \mathbf{x}_m = \mathbf{c}_m \Sigma_{m-1}^{-1} \mathbf{c}_m^t + (\delta_b - b)^2 / d_b. \quad (10)$$

这里

$$\delta_b = \mathbf{c}_{m-1} \Sigma_{m-1}^{-1} Y_b, \quad d_b = \sigma_{bb} - Y_b^t \Sigma_{m-1}^{-1} Y_b.$$

$\mathbf{x}_m^t \Sigma_m^{-1} \mathbf{x}_m$  的形式同式 (10), 不同的只是只需将式中的所有的字母“ $b$ ”(包括下标)都换成“ $a$ ”。

$\mathbf{x}_m^t \Sigma_m^{-1} \mathbf{x}_m$  和  $\mathbf{x}_m^t \Sigma_m^{-1} \mathbf{x}_m$  的第一项是一样的, 故在计算  $\Delta F$  时将抵消, 而它们的其它项的计算只涉及简单的  $m-1$  维向量和  $(m-1) \times (m-1)$  维矩阵的乘法。

与著名的 B & B 特征选择算法<sup>[7]</sup> 相比, 模拟退火法除了其有效性这个特点外, 另一个突出优点是不需要考虑阶次高于  $m$  的矩阵和它的逆阵, 这很适合于  $N$  很大以致矩阵常常是奇异的场合, 这时 B & B 将失效。

## 六、小 结

用于求解组合优化问题的模拟退火方法被引入求解若干模式识别问题。本文首先简介了模拟退火组合优化方法, 然后, 分别就聚类分析、属性关系图同态、分段曲线拟合和特征选择等问题讨论了模拟退火法的应用, 并且给出了有关的模拟退火实现算法, 还对一部分问题进行了计算机模拟实验。本文的分析、讨论和实验表明模拟退火组合优化方法是一个很有效的通用方法, 在模式识别中存在着较广泛的应用前景(例如, 除了本文指出的应用外, 还可能应用于边缘检测、图象恢复、纹理分析等问题)。

感谢程民德教授和石青云教授的有关指导。

## 参 考 文 献

- [1] Kirkpatrick, S., et al, Optimization by Simulated Annealing, *Science*, **220**, 4598 (1984), 671—680.
- [2] Kirkpatrick, S., Optimization by Simulated Annealing: Quantitative Studies, *J. Statis. Phys.* **34**(1984), 975—986.
- [3] 徐雷, 一类新的聚类分析算法: 模拟退火法, 将在《模式识别与人工智能》杂志上发表。
- [4] Tsai, W. H. and Fu, K. S., Error Correcting Isomorphisms of Attributed Relational Graphs for Pattern Analysis, *IEEE Trans. SMC-9*, No. 12., Dec., 1979.
- [5] Tsai, W. H. and Fu, K. S., Subgraph Error-Correcting Isomorphisms for Syntactic Pattern Recognition, *IEEE Trans. SMC-13*, (1)1983, 48—62.
- [6] Helmuth Spath, Cluster Analysis Algorithm For Data Reduction & Classification of Objects, Ellis Horwood Lim., 1980.
- [7] Narendra, P. M., et al, A Branch and Bound Algorithm for Feature Subset Selection, *IEEE Tr. C-26*, 1977, 917—922.
- [8] Aarts, E. H. L., et al, Statistical Cooling: A General Approach To Combinatorial Optimization Problems, *Philips J Res.*, **40**, (4) 1985, 193—226.

## SOME APPLICATIONS OF SIMULATED ANNEALING TO PATTERN RECOGNITION

Xu Lei

(*Beijing University*)

### ABSTRACT

Simulated annealing technique for solving combinatorial optimization problems has been applied to cluster analysis, isomorphisms of attributed relational graphs, piecewise curve fitting and feature selection. (1). A class of new clustering algorithms by simulated annealing are presented. (2). The problem of isomorphisms of attributed relational graph is treated by annealing simulation. An annealing isomorphism algorithm ALISOM is presented. (3). The applications of simulated annealing technique to piecewise curve fitting and feature selection are discussed in detail.

**Key words** —— Simulated annealing; pattern recognition; cluster analysis; graph isomorphism; feature selection.