

Simulated Annealing

Marcone Jamilson Freitas Souza^{1,2,3}

Puca Huachi Vaz Penna¹

¹ Departamento de Computação

¹ Programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação

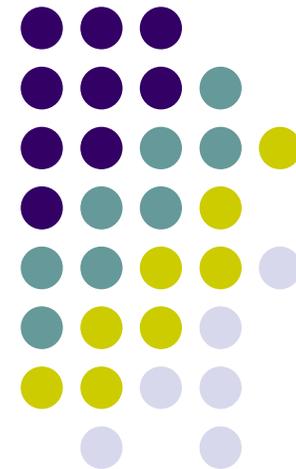
Universidade Federal de Ouro Preto

² Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e
Computacional / CEFET-MG

³ Programa de Pós-graduação em Instrumentação, Controle e
Automação de Processos de Mineração / ITV/UFOP

www.decom.ufop.br/prof/marcone, www.decom.ufop.br/puca

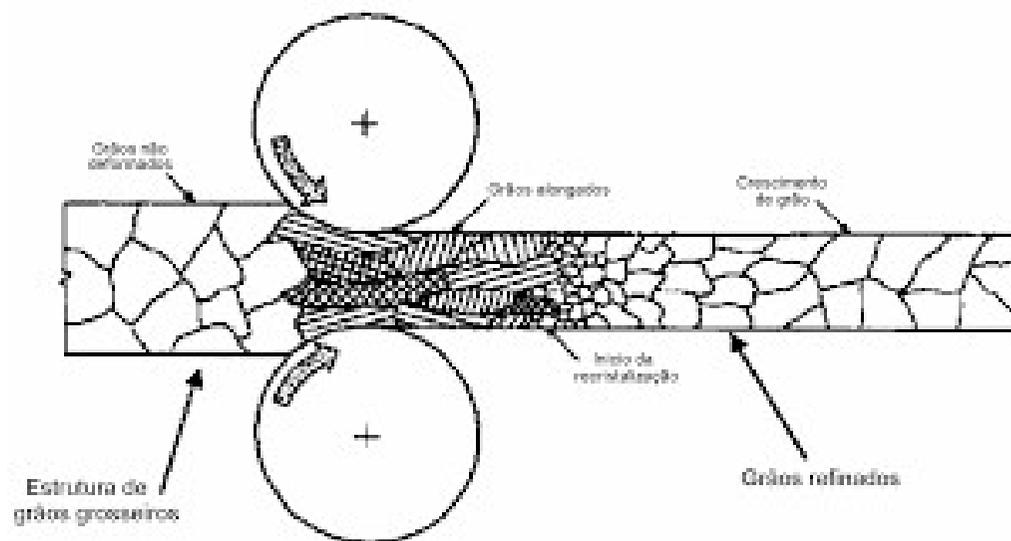
E-mail: {marcone,puca}@ufop.edu.br





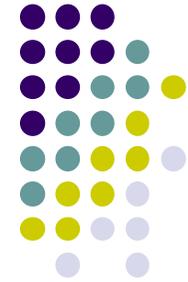
Fundamentação do método

- Proposto por Kirkpatrick *et al.* (1983)
- Simula o processo de recozimento de metais
 - Operação realizada após o processo de laminação a quente



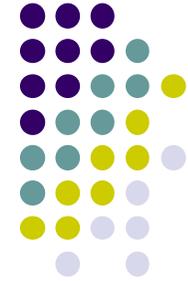
Fonte: https://www.google.com/imgres?imgurl=x-raw-image%3A%2F%2F%2F463a1464a750403144816148471bfbd200041984d517dab7617d9b092fada1e7&imgrefurl=https%3A%2F%2Fwww.maxwell.vrac.puc-rio.br%2F8660%2F8660_3.PDF&tbid=MUBQp2QUOKY-tM&vet=12ahUKEwi8wPzf-oHsAhWmG7kGHXS5D8sQMygcegUIARDXAQ..i&docid=a0Rx3G0NjK76OM&w=1351&h=726&itg=1&q=figuras%20de%20lamina%C3%A7%C3%A3o%20a%20quente&ved=2ahUKEwi8wPzf-oHsAhWmG7kGHXS5D8sQMygcegUIARDXAQ

Fundamentação do método



- Após a laminação a quente o material é submetido ao processo de recozimento
- O metal é aquecido a uma temperatura elevada e resfriado lentamente
- Durante o recozimento, o material passa por vários estados possíveis
- Num tempo suficientemente longo os átomos da estrutura passam por todos os seus estados acessíveis e se acomodam na posição de menor energia interna

Fundamentação do método



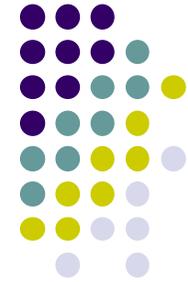
- Se o resfriamento é suficientemente lento obtêm-se uma estrutura cristalina livre de imperfeições (estado de baixa energia)
- Resfriamento lento conduz a produtos mais estáveis, estruturalmente fortes, de menor energia
- Resfriamento rápido conduz a produtos meta-estáveis, de maior energia interna

Fundamentação do método



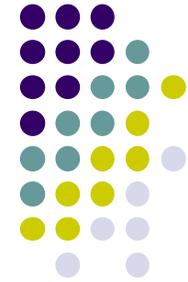
- Analogia com um problema combinatório:
 - Os estados possíveis de um metal correspondem a soluções do espaço de busca
 - A energia em cada estado corresponde ao valor da função objetivo
 - A energia mínima (se o problema for de minimização ou máxima, se de maximização) corresponde ao valor de uma solução ótima local, possivelmente global
- O *Simulated Annealing* aplica o Algoritmo de Metrópolis *et al.* (1953) em um esquema de redução gradual da temperatura

Fundamentação do método (problema de minimização)

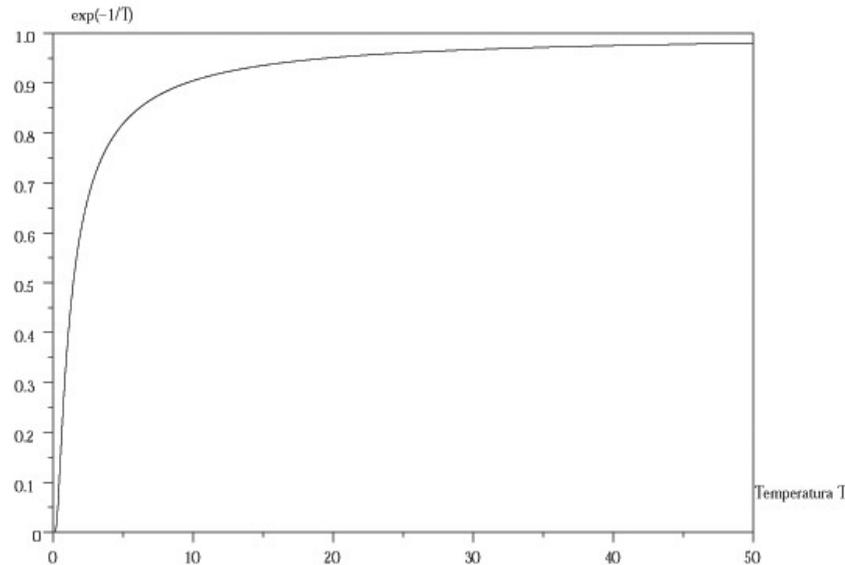


- Funcionamento do Algoritmo de Metrópolis *et al.* (1953):
 - A cada iteração, um novo estado é gerado a partir do estado corrente por uma modificação aleatória neste
 - Considerando um problema de minimização, se o novo estado é de energia menor que o estado corrente, esse novo estado passa a ser o estado corrente
 - Se o novo estado tem uma energia maior que o estado corrente em Δ unidades, a probabilidade de se mudar do estado corrente para o novo estado é:
 - $e^{-\Delta/(kT)}$, sendo k = constante de Boltzmann e T = temperatura corrente
 - Este procedimento é repetido até se atingir o equilíbrio térmico

Probabilidade de aceitar um movimento de piora em um problema de minimização



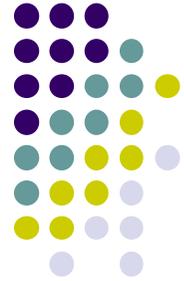
- Baseada na fórmula: $P(\text{aceitação}) = e^{-\Delta/T}$
- $\Delta = f(s') - f(s) = \text{variação de custo ao se mover de uma solução } s \text{ para uma solução } s'$
- $T = \text{temperatura corrente}$



- Temperatura $\uparrow \Rightarrow$ Probabilidade de aceitação \uparrow
- Temperatura $\downarrow \Rightarrow$ Probabilidade de aceitação \downarrow

Descrição do método

Simulated Annealing



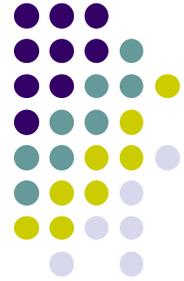
- Algoritmo de Metrópolis *et al.* (1953) é empregado numa sequência de temperaturas decrescentes para gerar soluções de um problema de otimização
- O processo começa com um temperatura T elevada e a cada valor de T geram-se soluções até que o equilíbrio àquela temperatura seja alcançado
- A temperatura é então diminuída e o processo prossegue até o congelamento (ou seja, quando não se obtêm mais uma diminuição de custo)

Algoritmo *Simulated Annealing*



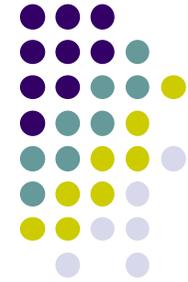
```
procedimento  $SA(f(\cdot), N(\cdot), \alpha, SA_{max}, T_0, s)$ 
1   $s^* \leftarrow s;$            {Melhor solução obtida até então}
2   $IterT \leftarrow 0;$        {Número de iterações na temperatura T}
3   $T \leftarrow T_0;$         {Temperatura corrente}
4  enquanto ( $T > 0$ ) faça
5      enquanto ( $IterT < SA_{max}$ ) faça
6           $IterT \leftarrow IterT + 1;$ 
7          Gere um vizinho qualquer  $s' \in N(s);$ 
8           $\Delta = f(s') - f(s);$ 
9          se ( $\Delta < 0$ )
10             então
11                  $s \leftarrow s';$ 
12                 se ( $f(s') < f(s^*)$ ) então  $s^* \leftarrow s';$ 
13             senão
14                 Tome  $x \in [0, 1];$ 
15                 se ( $x < e^{-\Delta/T}$ ) então  $s \leftarrow s';$ 
16             fim-se;
17         fim-enquanto;
18          $T \leftarrow \alpha \times T;$ 
19          $IterT \leftarrow 0;$ 
20     fim-enquanto;
21      $s \leftarrow s^*;$ 
22     Retorne  $s;$ 
fim SA;
```

Prescrição para determinar a temperatura inicial



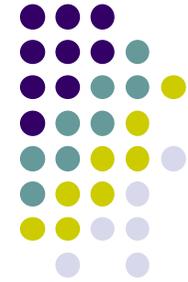
- Pelo valor da função de avaliação:
 - A temperatura inicial é o valor da maior função de avaliação entre várias prospecções
 - Ideia para definir a temperatura inicial pelo valor da função de avaliação:
 - Gerar uma solução inicial qualquer e determinar o valor de sua função de avaliação
 - Repetir o procedimento anterior várias vezes
 - Definir como temperatura inicial o MAIOR valor encontrado dentre todas as avaliações

Prescrição para determinar a temperatura inicial



- Por simulação:
 - A temperatura inicial é aquela na qual a taxa de aceitação (γ) é alta, isto é, próxima a 1
 - Tipicamente, uma taxa de aceitação γ é alta quando $\gamma \cong 0,95$
 - Ideia para definir uma temperatura inicial por simulação:
 - Partir de uma solução inicial qualquer e de uma temperatura inicial qualquer baixa (T_0)
 - Efetuar S_{Amax} iterações do Simulated Annealing nessa temperatura
 - Se ao final dessas S_{Amax} iterações, forem aceitos $\gamma \times S_{\text{Amax}}$ movimentos, então a temperatura atual é alta o suficiente para iniciar o processo de recozimento; caso contrário, aumentar a temperatura por um fator $\beta \geq 1$
 - Tipicamente, $\beta \cong 2$

Prescrição para determinar a temperatura inicial



```
procedimento TemperaturaInicial( $\beta, \gamma, SA_{max}, T_0, s$ )
1   $T \leftarrow T_0$ ;           {Temperatura corrente}
2   $Continua \leftarrow TRUE$ ;
3  enquanto ( $Continua$ ) faça
4       $Aceitos \leftarrow 0$ ; {Vizinhos aceitos na temp. T}
5      para  $IterT = 1$  até  $SA_{max}$  faça
6          Gere um vizinho qualquer  $s' \in N(s)$ ;
7           $\Delta = f(s') - f(s)$ ;
8          se ( $\Delta < 0$ )
9              então
10                  $Aceitos \leftarrow Aceitos + 1$ ;
11             senão
12                 Tome  $x \in [0, 1]$ ;
13                 se ( $x < e^{-\Delta/T}$ ) então  $Aceitos ++$ ;
14             fim-se;
15         fim-para;
16         se ( $Aceitos \geq \gamma \times SA_{max}$ )
17             então  $Continua \leftarrow FALSE$ ;
18             senão  $T \leftarrow \beta \times T$ ;
19         fim-se;
20 fim-enquanto;
21 Retorne  $T$ ;
fim TemperaturaInicial;
```



Prescrições

- Resfriamentos mais comuns:
 - Geométrico, isto é, a próxima temperatura é a temperatura atual deflacionada por uma constante entre 0 e 1:
 - $T_k \leftarrow \alpha T_{k-1}; \alpha \in (0,1)$
 - α mais próximo de 1 indica resfriamento mais lento
 - $T_k = \frac{T_{k-1}}{1+\gamma\sqrt{T_{k-1}}}; \forall k \geq 1; \gamma \in (0,1)$
 - γ mais próximo de zero indica resfriamento mais lento
- Temperatura final:
 - $T_{\text{final}} =$ zero da máquina
 - $T_{\text{final}} = 0.01$ (ou 0.001)
 - Após um certo número de iterações sem melhora



Prescrições

- S_{Amax} = Número máximo de iterações em uma dada temperatura:
 - Proporcional à dimensão do problema
 - *School Timetabling*:
 - $S_{Amax} = k \times p \times t \times h$
 - p = número de professores
 - t = número de turmas
 - h = número de horários
 - k = constante a ser calibrada
 - *Crew Scheduling*:
 - $S_{Amax} = k \times m \times n$
 - m = número de tripulações
 - n = número de tarefas
 - k = constante a ser calibrada
 - *Caixeiro Viajante*:
 - $S_{Amax} = k \times n$
 - m = número de cidades, k = constante a ser calibrada

Prescrições

- Os valores dos parâmetros mais adequados são dependentes do problema e da instância

