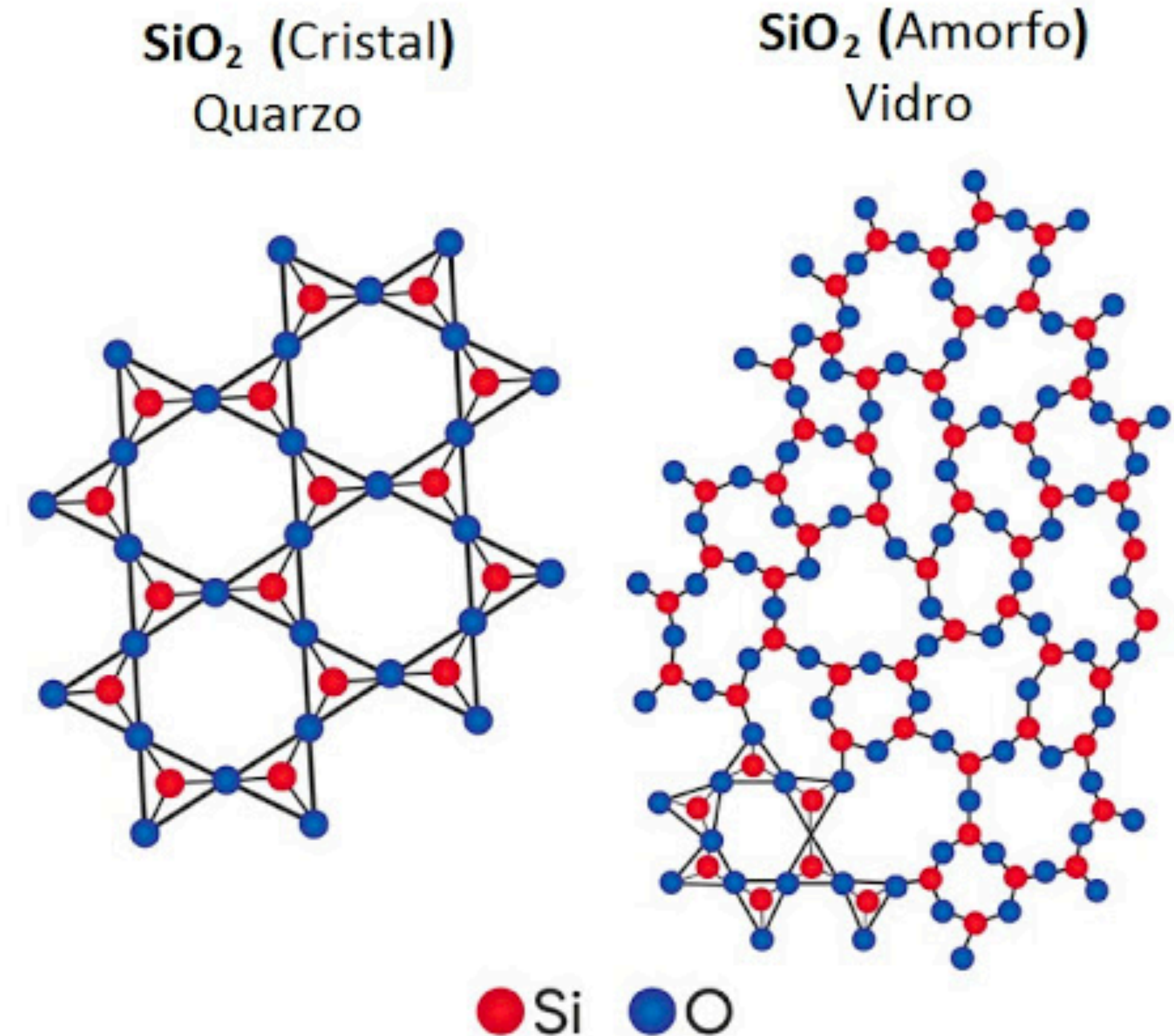


# Simulated Annealing

# Estrutura Cristalina

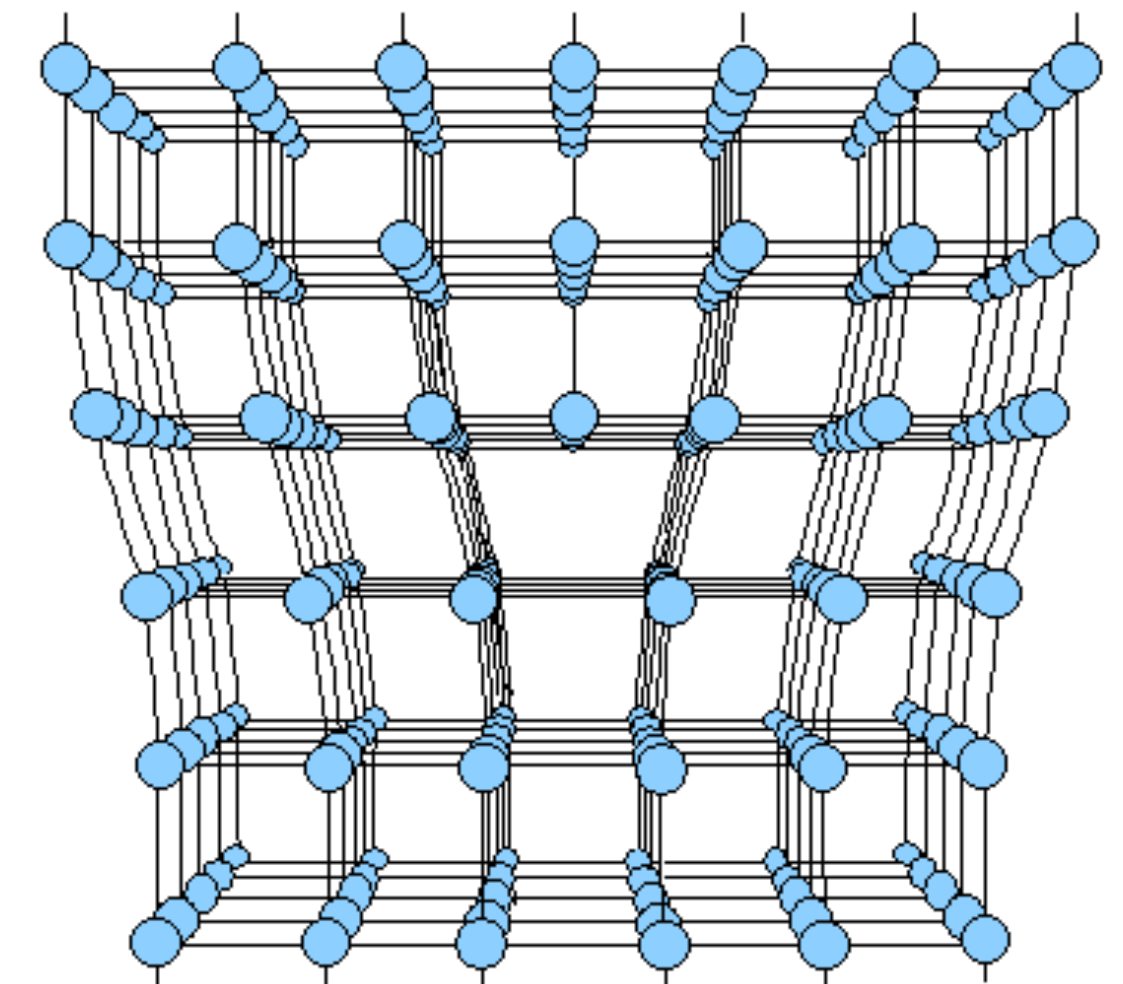
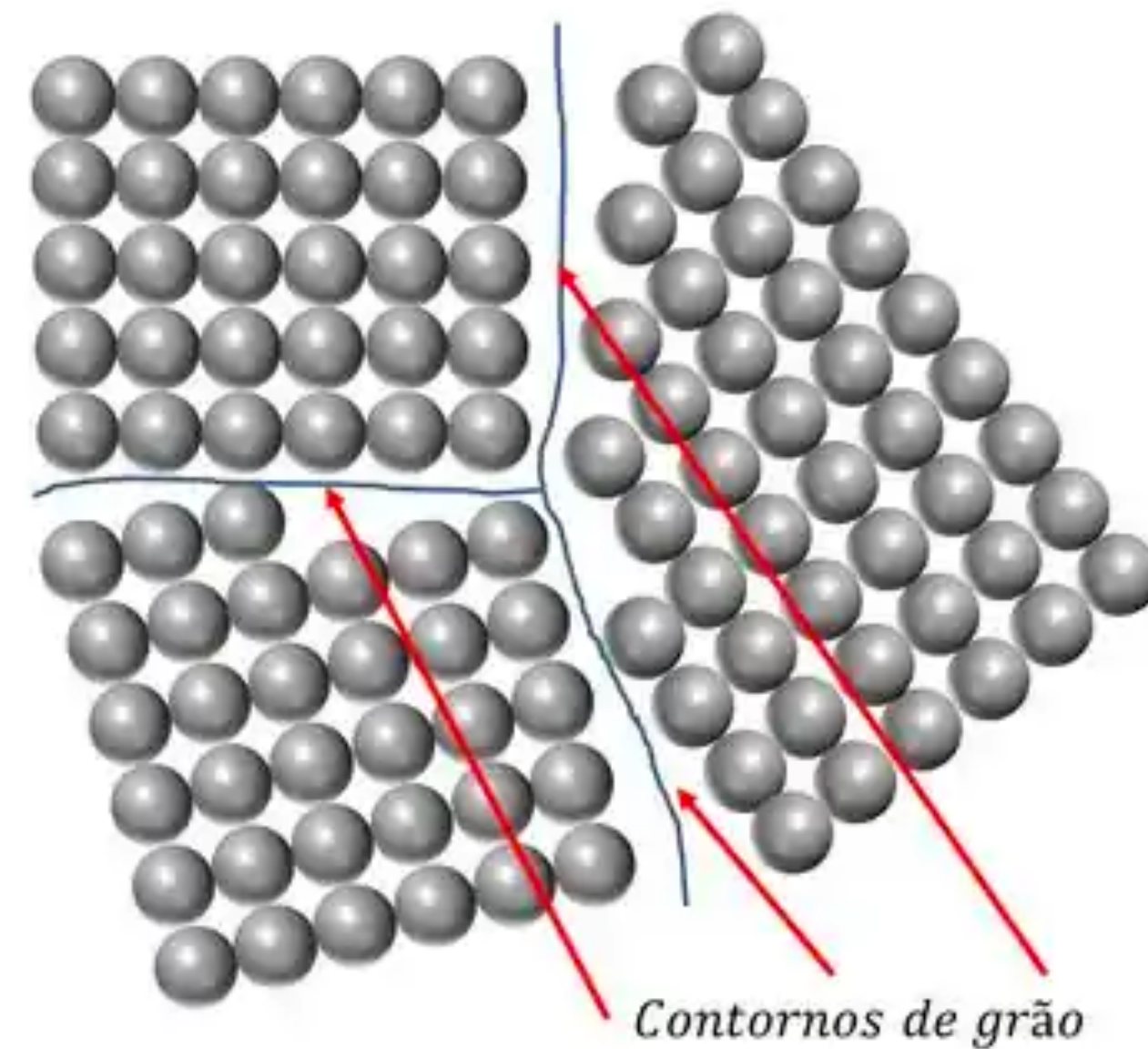
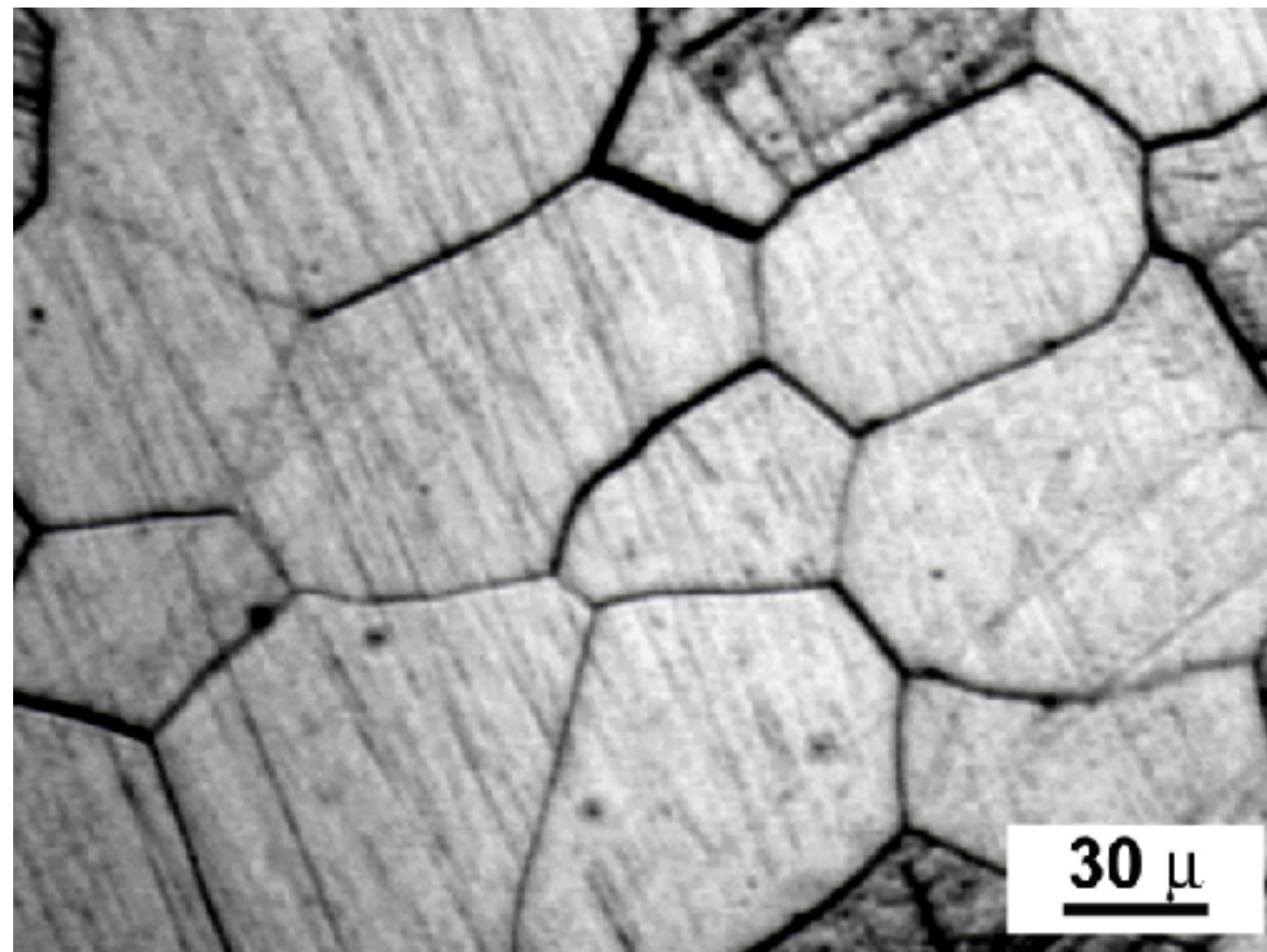
- Os sólidos são classificados em **Cristalinos** e **Amorfos**.
- **Sólidos cristalinos** são compostos por átomos, moléculas ou íons que se arranjam de forma periódica, apresentando ordenamento de longo alcance.
- **Sólidos amorfos** não apresentam ordenamento de longo alcance. Podem apresentar ordenamento de curto alcance.





# Estrutura Cristalina

- Devido à competição entre ordem e desordem mediada pela temperatura ( $F = U - TS$ ), surgem **grãos cristalinos** e defeitos como **deslocações**

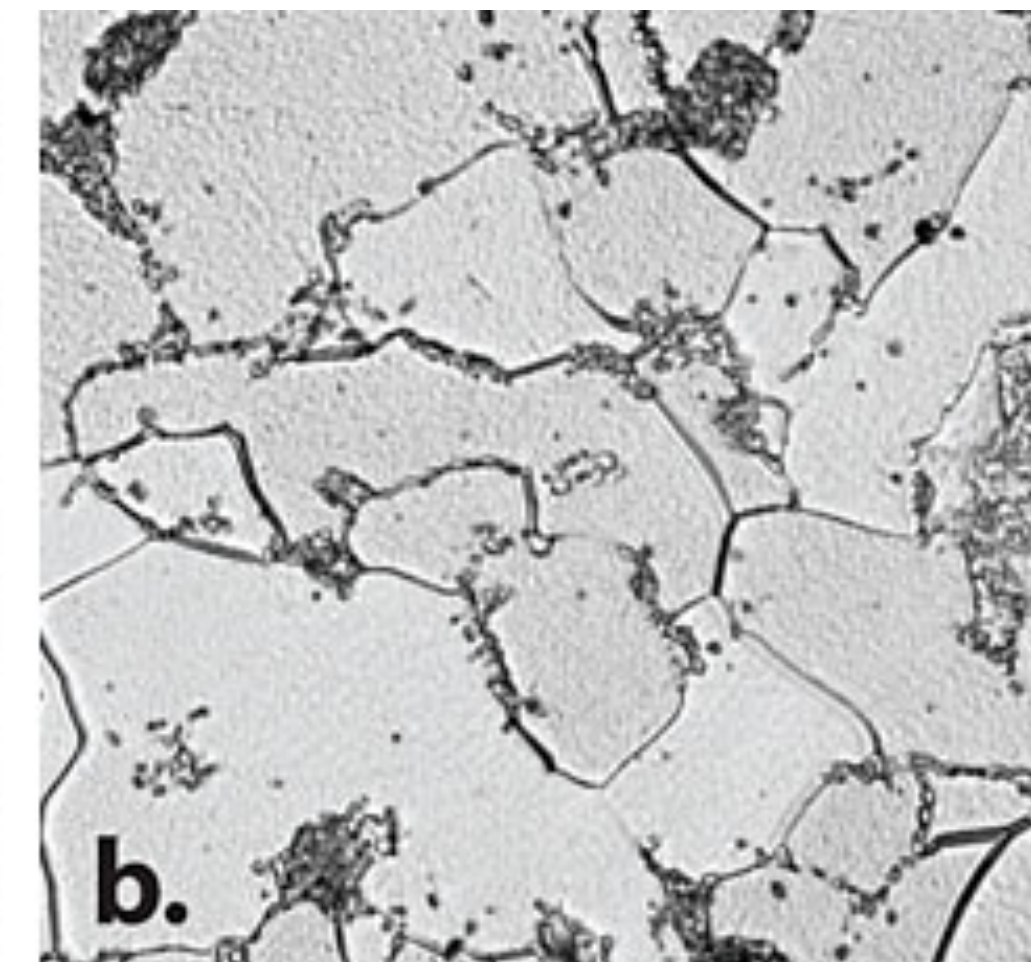
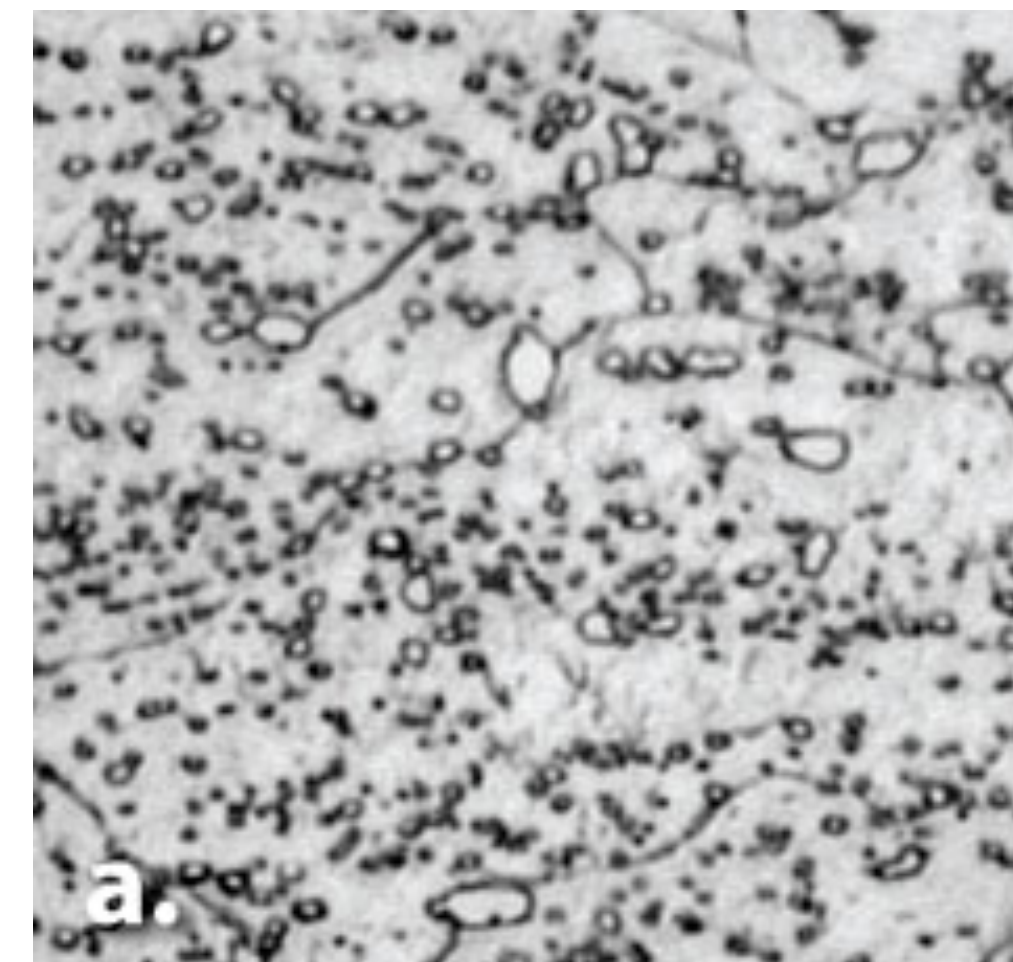
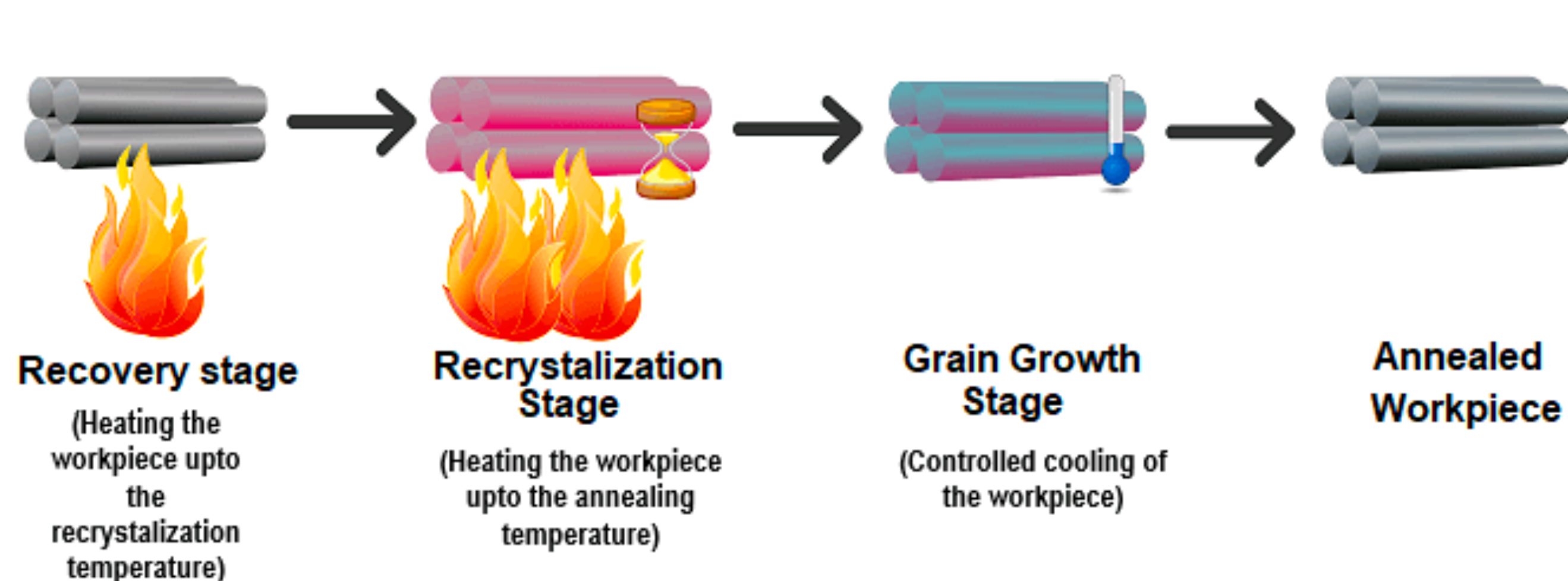


- Tratamentos térmicos e/ou mecânicos podem modificar a estrutura cristalina e a distribuição de grãos e defeitos, modificando as propriedades mecânicas do material (maleabilidade, dureza, ductilidade, rigidez, etc)



# Annealing (Recozimento)

- Técnica em Metalurgia que permite modificar a estrutura cristalina e, consequentemente, as propriedades mecânicas de metais através de um tratamento térmico
- O material é aquecido, até próximo ou acima da temperatura de fusão e resfriado lentamente, modificando assim suas propriedades
- Idealmente, reduzindo a temperatura de forma lenta e controlada até temperaturas muito baixas, seria possível obter um **monocristal**, minimizando a energia interna do material



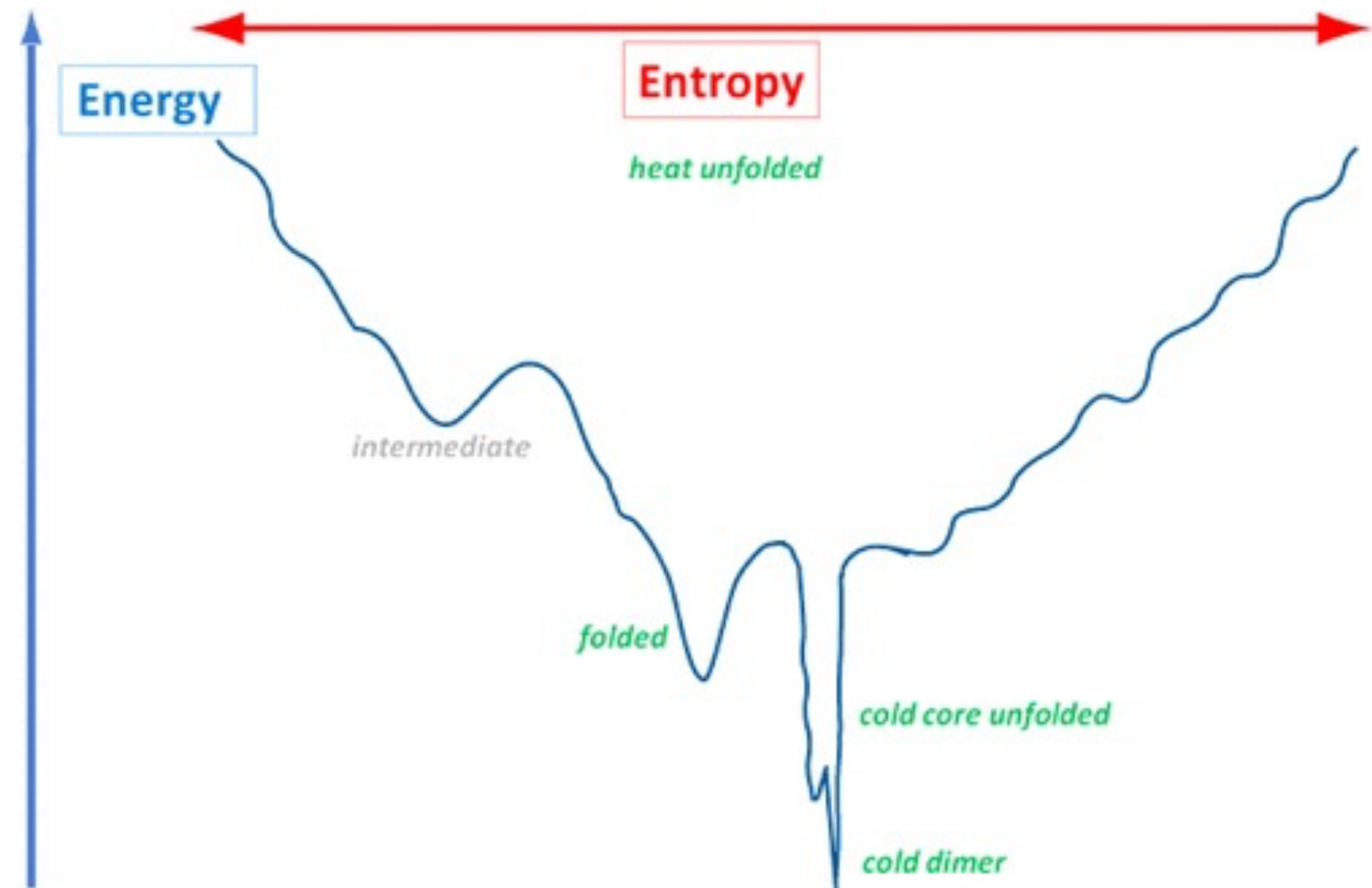
# Simulated Annealing

- Método estocástico de otimização inspirado no processo de annealing da metalurgia
  - Utiliza o algoritmo de Metropolis, simulando o sistema partindo de uma temperatura alta e resfriando-o lentamente
  - $F = U - TS$
  - Em altas temperaturas o termo de entropia é mais relevante, permitindo explorar todo espaço de configurações
  - Em baixas temperaturas o termo de energia interna deve ser minimizado
  - Neste processo a energia é minimizada e esperamos que o estado de menor energia seja atingido ao final da simulação

# Simulated Annealing

- Devemos definir uma função a ser minimizada (Energia)
- Estabelecer a temperatura inicial (alta suficiente para explorar o espaço de configurações)
- Definir um protocolo de redução da temperatura
- Verificar se a solução encontrada é consistente (repetir o experimento)

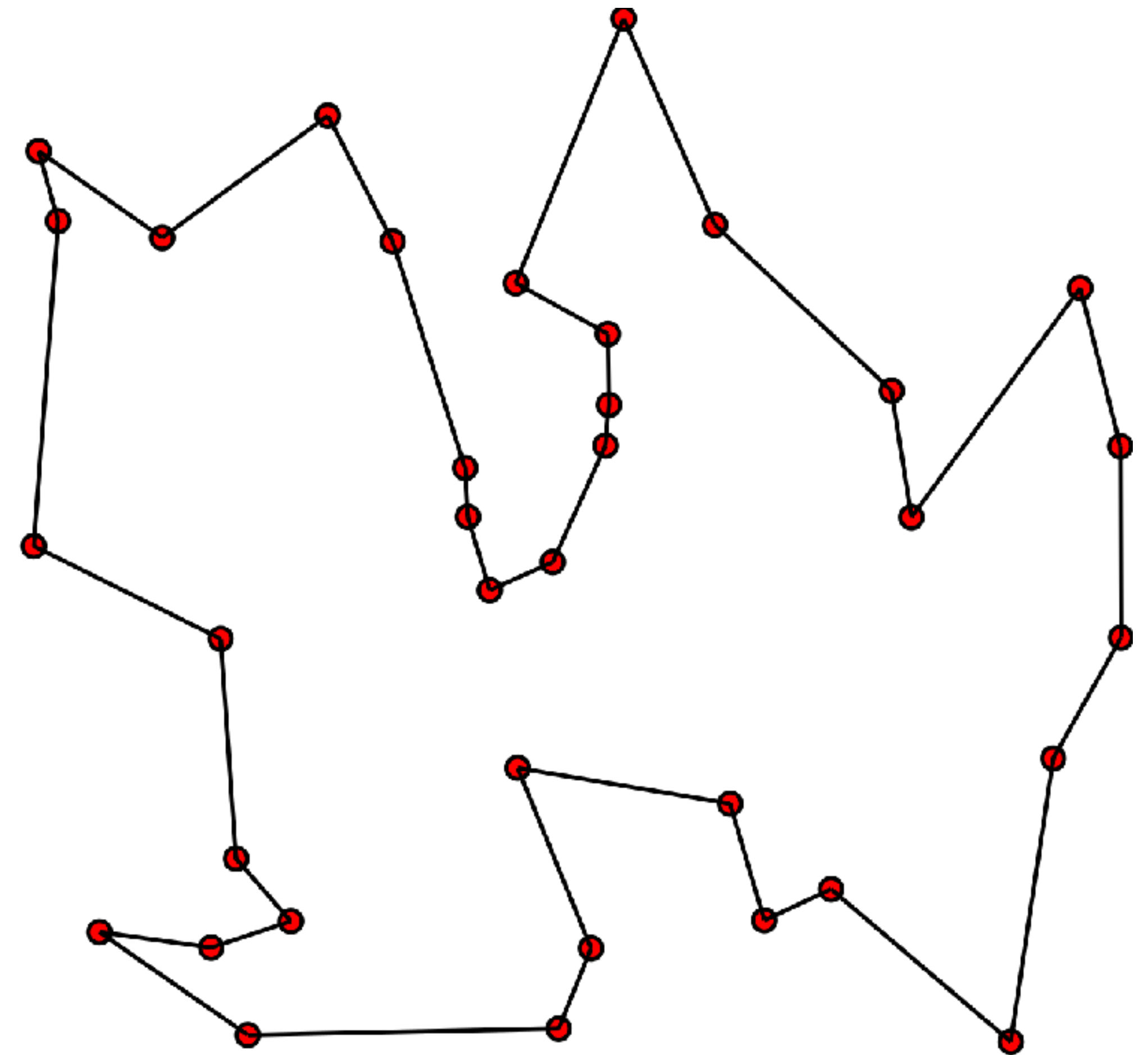
Paisagem de energia (Energy Landscape)





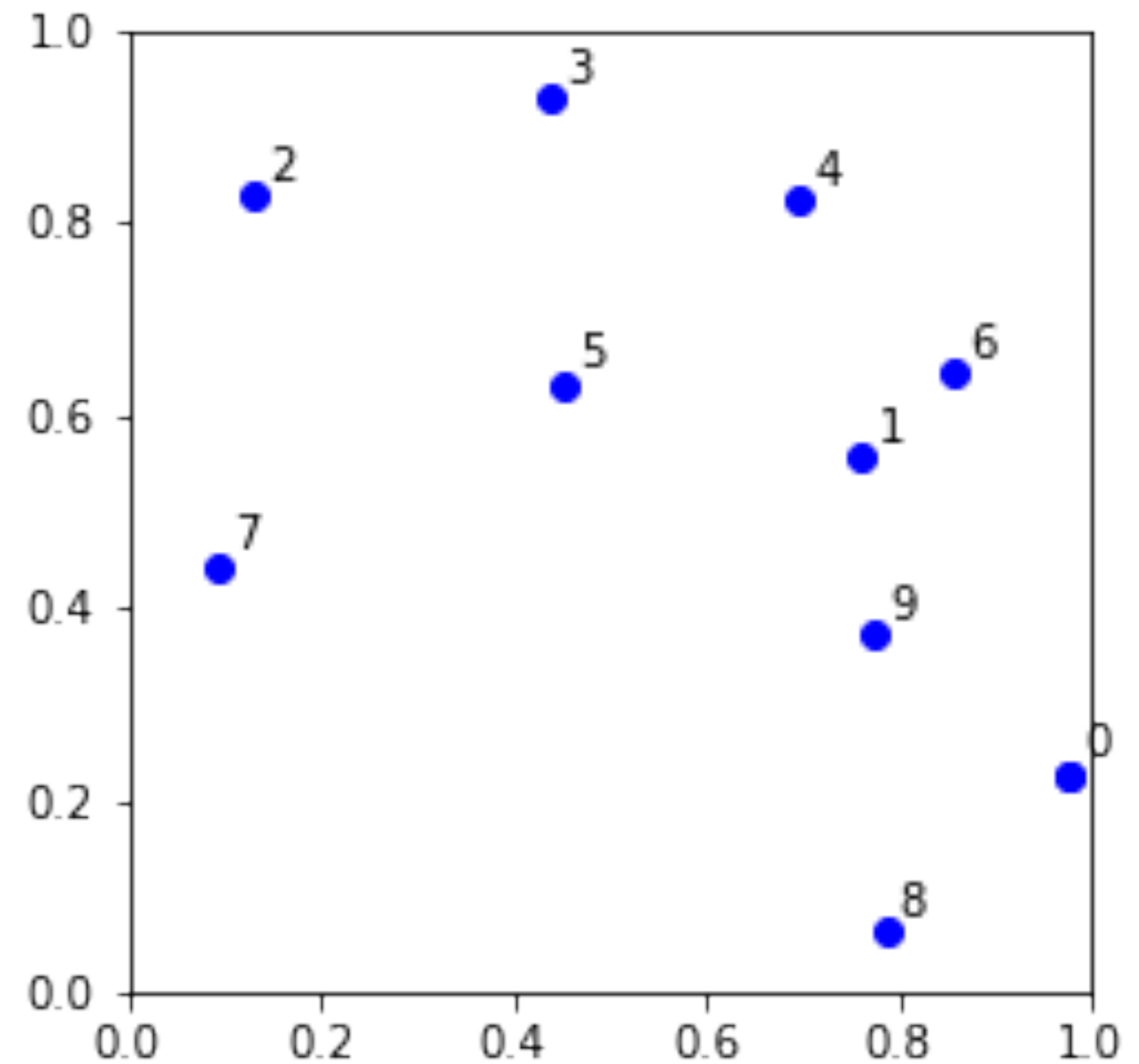
# O Problema do Caixeiro Viajante (TSP)

- Dado um conjunto de cidades, devemos encontrar o **menor caminho** que passe uma única vez por cada cidade e retorne à cidade inicial
- A grandeza minimizada é a **distância total percorrida** (fará o papel da **energia** no algoritmo de Metropolis)



# O Problema do Caixeiro Viajante (TSP)

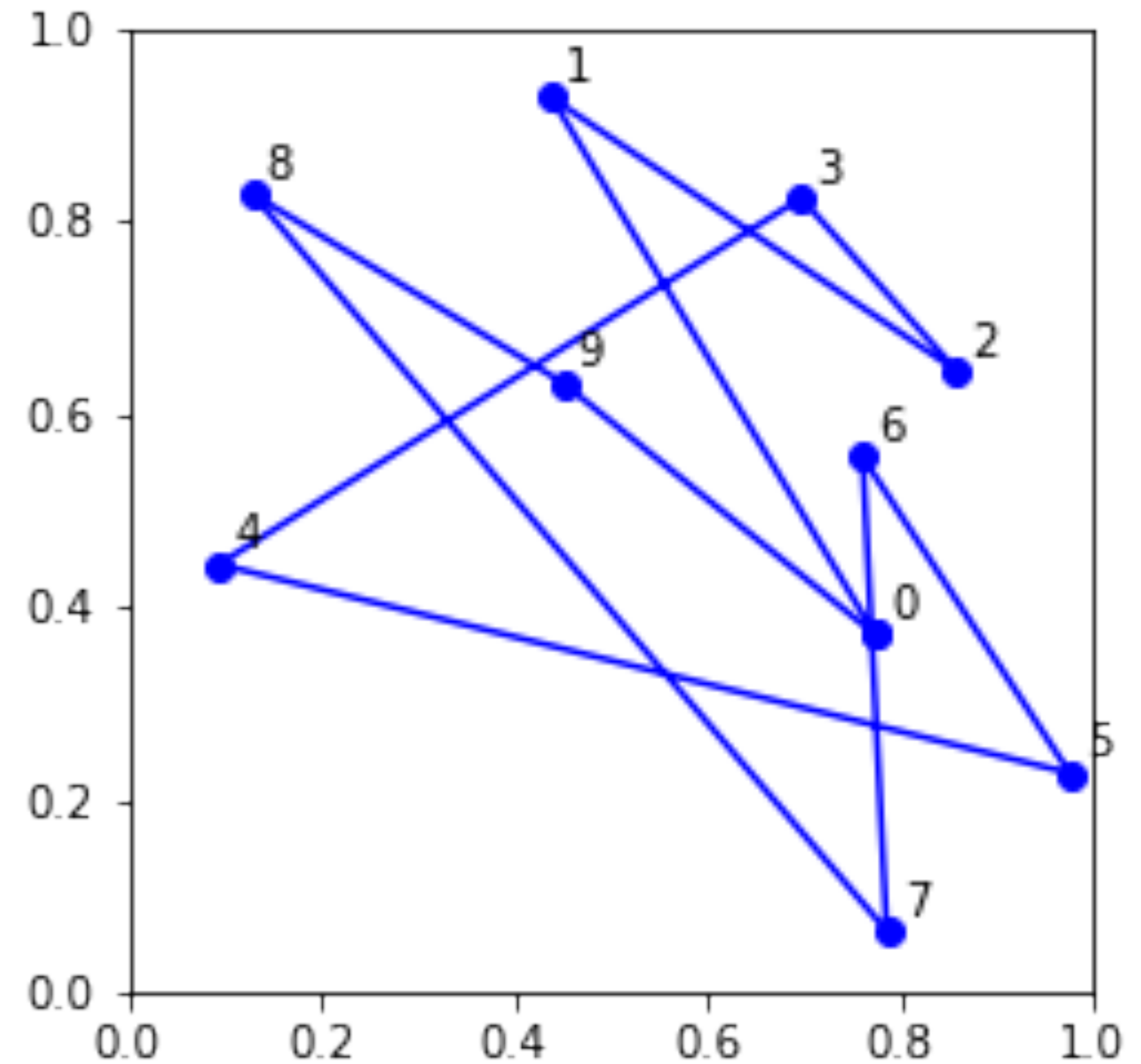
- Escolheremos  $N$  pontos aleatoriamente no intervalo  $(0,1)$
- O Caminho inicial pode ser na própria ordem em que os pontos foram escolhidos





# O Problema do Caixeiro Viajante (TSP)

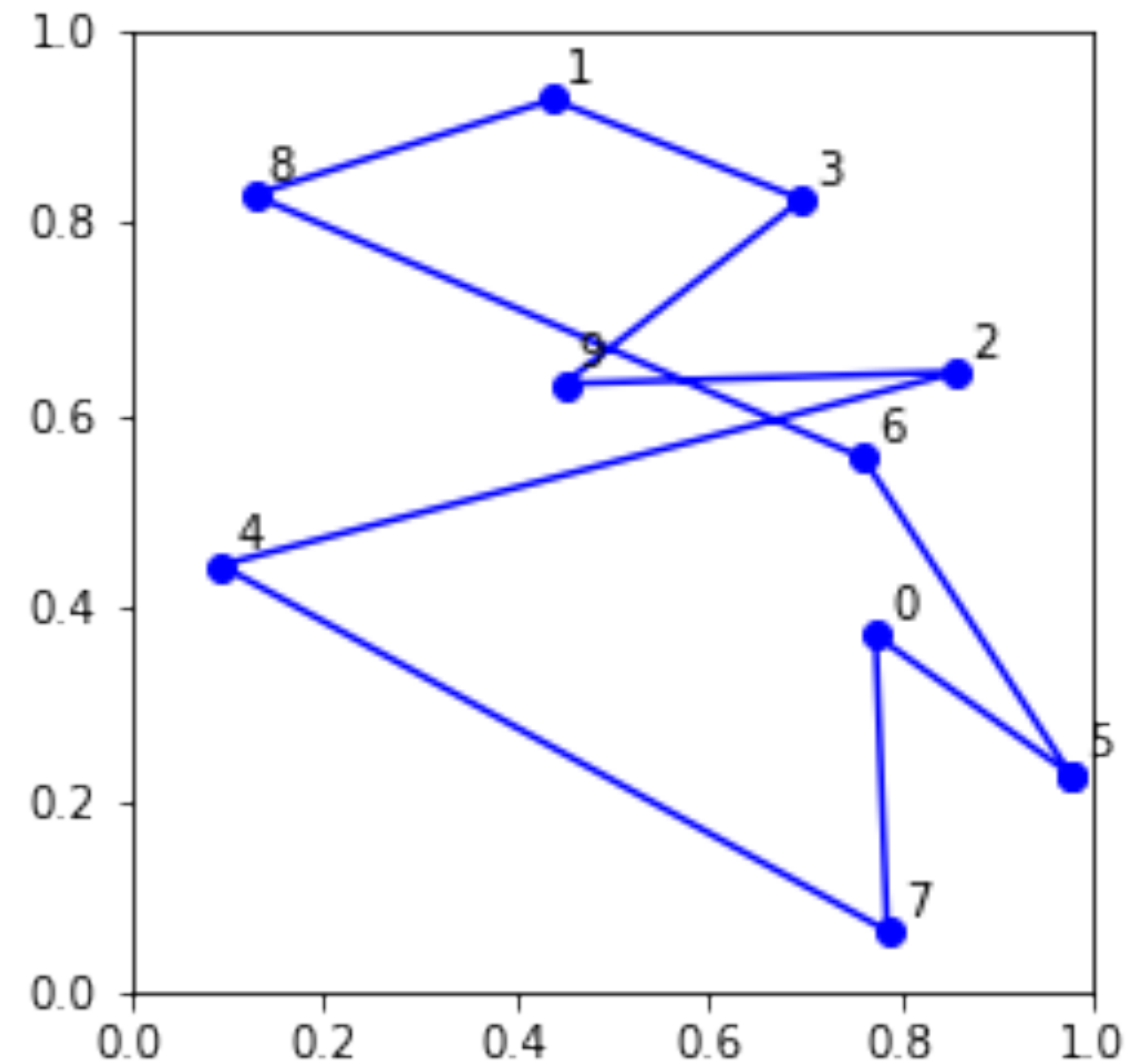
- Escolheremos  $N$  pontos aleatoriamente no intervalo  $(0,1)$
- O Caminho inicial pode ser na própria ordem em que os pontos foram escolhidos



# O Problema do Caixeiro Viajante (TSP)

- Proposta de modificação do caminho

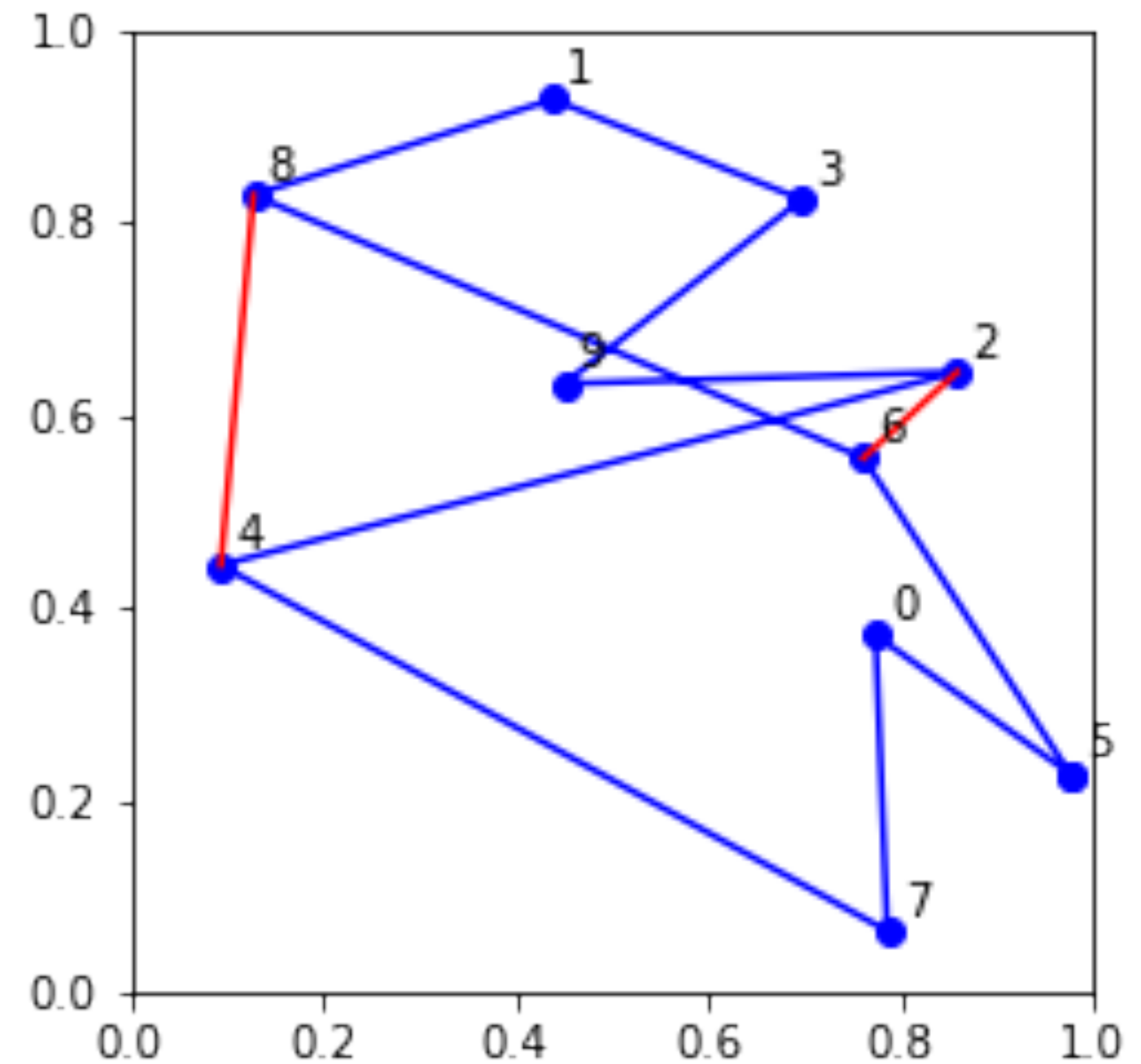
índice	caminho inicial	caminho final
0	5	5
1	6	6
2	8	2
3	1	9
4	3	3
5	9	1
6	2	8
7	4	4
8	7	7
9	0	0



# O Problema do Caixeiro Viajante (TSP)

- Proposta de modificação do caminho

índice	caminho inicial	caminho final
0	5	5
1	6	6
2	8	2
3	1	9
4	3	3
5	9	1
6	2	8
7	4	4
8	7	7
9	0	0

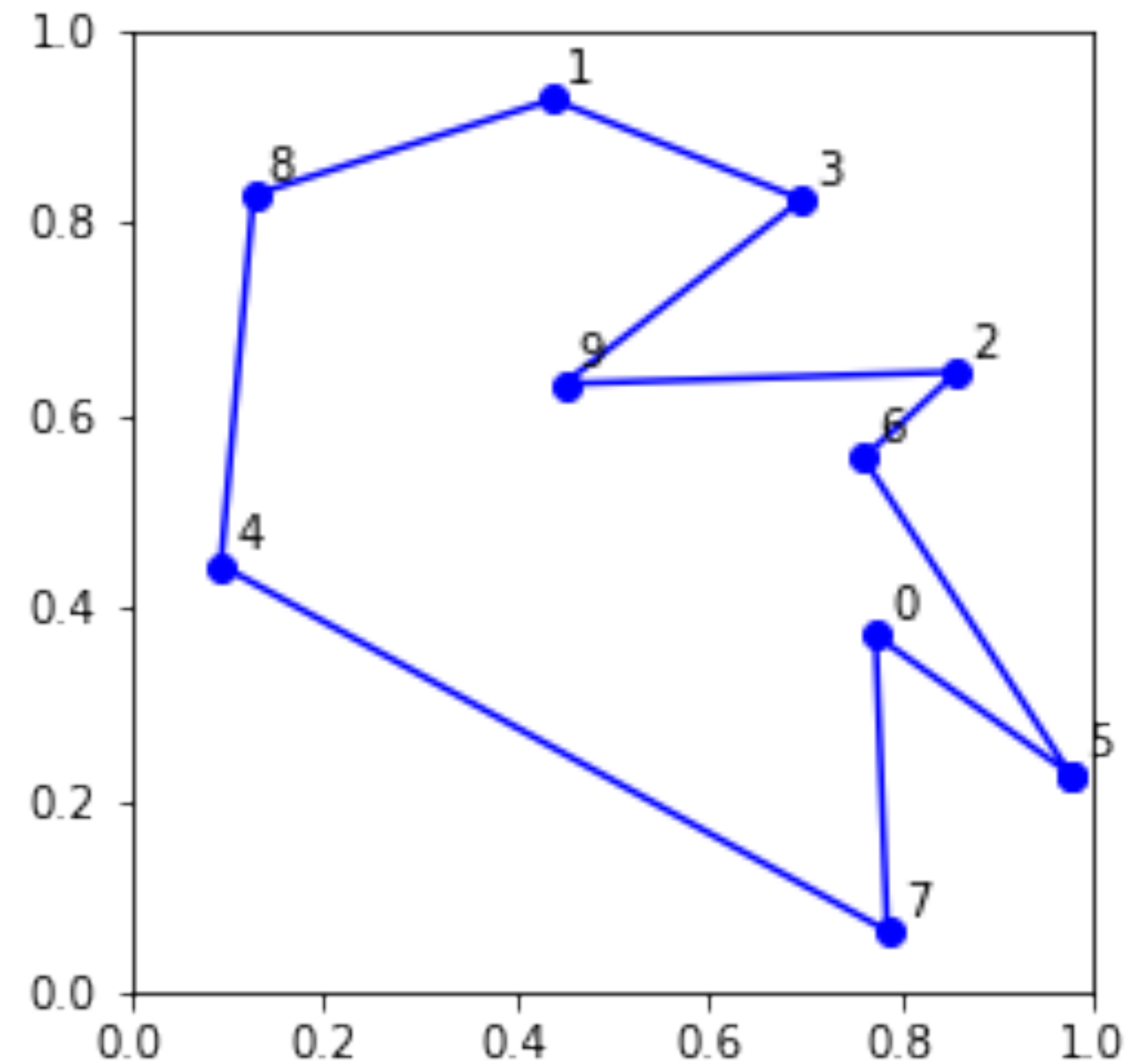




# O Problema do Caixeiro Viajante (TSP)

- Proposta de modificação do caminho

índice	caminho inicial	caminho final
0	5	5
1	6	6
2	8	2
3	1	9
4	3	3
5	9	1
6	2	8
7	4	4
8	7	7
9	0	0

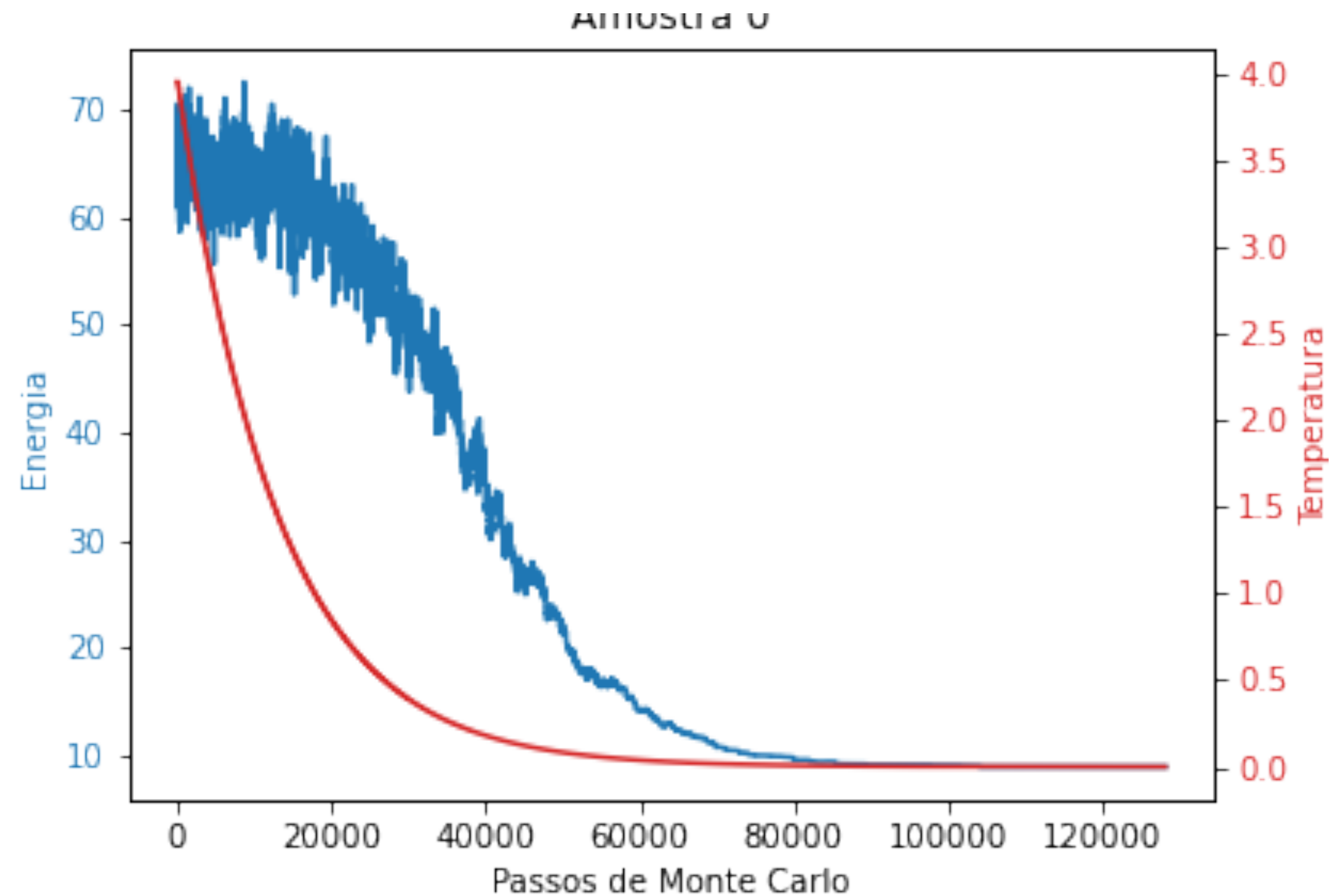


# O Problema do Caixeiro Viajante (TSP)

- O Algoritmo:
  1. Entre com as posições das cidades e determine as distâncias entre elas
  2. Proponha um caminho a ser percorrido e determine a distância total percorrida (energia)
  3. Proponha uma modificação no caminho e determine a diferença de energia ( $\Delta E$ )
  4. Escolha um número aleatório  $r \in [0,1)$  e calcule  $P = \exp(-\beta \Delta E)$ 
    - A. Se  $r \leq P$  aceite o novo caminho e volte ao passo 3
    - B. Se  $r > P$  mantenha o caminho atual e volte ao passo 3
  5. Após um determinado número de passos reduza a temperatura e continue até não haver mais alterações no caminho

# O Problema do Caixeiro Viajante (TSP)

- Evolução da energia numa simulação





# O Problema do Caixeiro Viajante (TSP)

- Evolução da energia numa simulação

