

# *SIMULATED ANNEALING*

Prof. Ademir A. Constantino ·  
Departamento de Informática  
Universidade Estadual de Maringá  
[www.din.uem.br/~ademir](http://www.din.uem.br/~ademir)

*É vedada a cópia, distribuição, transmissão, exibição, do material sem prévia autorização do autor*

# Simulated Annealing

- O termo *annealing* refere-se a um processo térmico que começa pela liquidação de um cristal a uma alta temperatura, seguido pela lenta e gradativa diminuição de sua temperatura, até que o ponto de solidificação seja atingido, quando o sistema atinge um estado de energia mínima.
- Em um cristal muito grande, por exemplo, se a temperatura for reduzida muito rápida, o cristal conterá inúmeras imperfeições

# Simulated Annealing

- A heurística *simulated annealing* surgiu de um algoritmo denominado Metrópolis ( Metropolis *et al.* 1953), bem conhecido pelos pesquisadores da área de Física-Química.
- Kirkpatrick *et al.* (1983) sugeriram que a simulação desse processo poderia ser usada para buscar soluções viáveis, com o objetivo de encontrar a solução ótima de um problema de otimização.

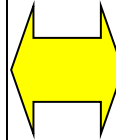
# Simulated Annealing

- Traduções encontradas na literatura:
  - \* Recozimento Simulado
  - \* Anelamento Simulado
  - \* Têmpera Simulada
- Tradução mais aceita pela comunidade de Pesquisa Operacional:
  - \* **Resfriamento Simulado**

# Processo físico x problema de otimização combinatória

## Otimização Combinatória

- uma solução viável
- função objetivo  $f(s)$ 
  - solução vizinha
- parâmetro de controle
  - melhor solução
  - solução ótima



## Processo Físico

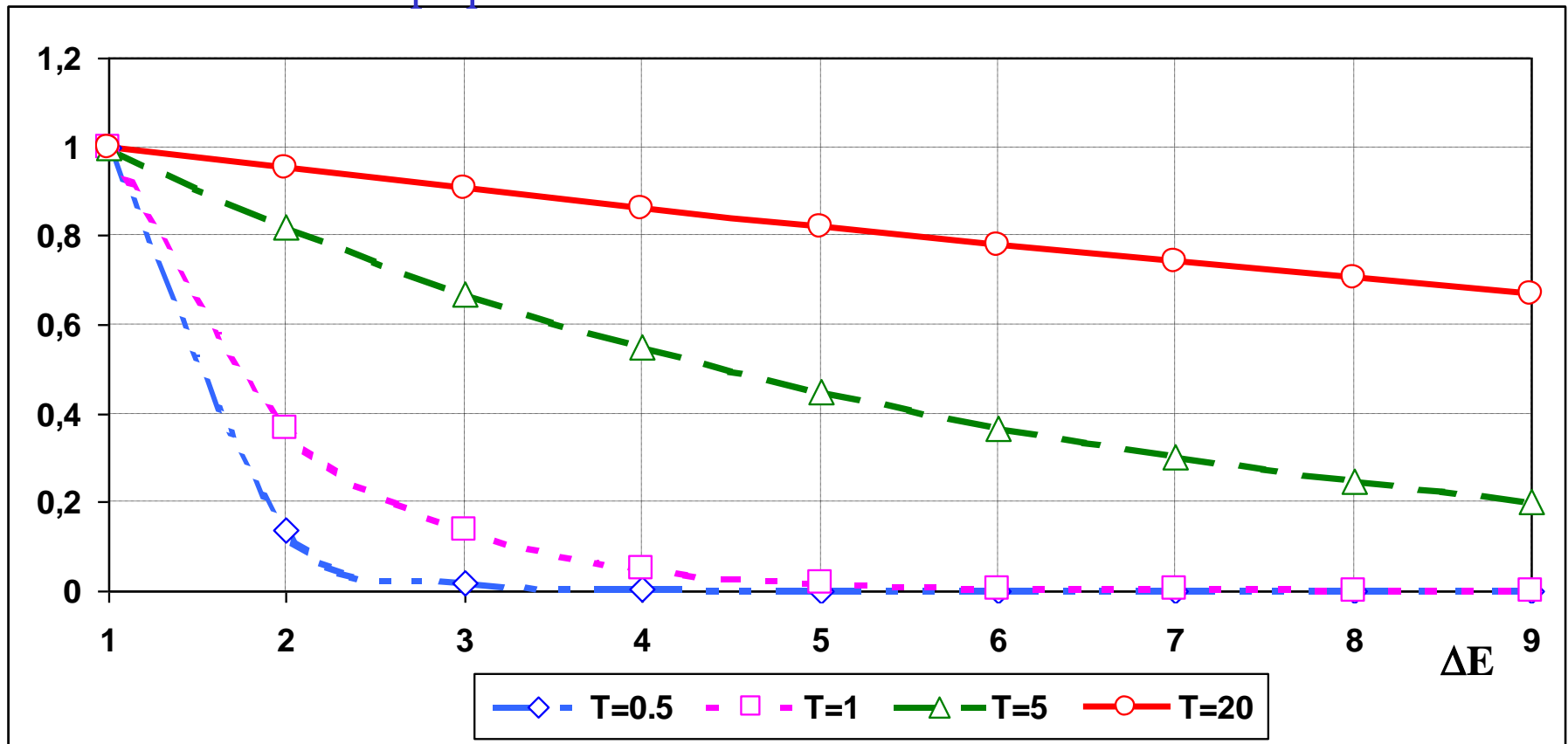
- uma configuração
- nível de energia
- mudança de estado
- temperatura
- estado de solidificação
- configuração de energia mínima

# Simulated Annealing

- Num algoritmo *simulated annealing*, são permitidos movimentos que aumentem o valor da função objetivo, segundo uma distribuição de probabilidade Boltzmann que se altera no decorrer das iterações do algoritmo.
- Essa função de distribuição foi inspirada no processo físico, onde a probabilidade de uma certa configuração ter sua energia aumentada de um  $\Delta E$  é de  $P(\Delta E) = e^{-\Delta E/T}$

# Probabilidade X Temperatura

- Temperatura  $T$  : parâmetro de controle
  - Usado para determinar a probabilidade
  - Alto  $T$  : grande chance
  - Baixo  $T$  : pequena chance



# Simulated Annealing

- A estratégia que é utilizada no *simulated annealing* é, a partir de uma alta temperatura, ser permitido alterações ruins, pois estamos longe do ótimo local.
- posteriormente, a temperatura irá diminuindo e a possibilidade de alterações ruins vai se reduzindo, pois estamos próximos do ótimo global.



# Simulated Annealing - Esquema Geral

Entrada:  $T_0$ ,  $T_f$ ,  $N_{it}$ ,  $S$

$T \leftarrow T_0$ ;  $S_0 \leftarrow$  gera solução inicial;  $S \leftarrow S_0$ ;  $S^* \leftarrow S_0$

enquanto  $T > T_f$  faça (temperatura alta)

  para  $cont \leftarrow 1$  até  $N_{it}$  faça (iterações para equilíbrio)

$S' \leftarrow$  seleciona uma solução vizinha de  $S$

$\Delta custo \leftarrow custo(S') - custo(S)$

    se  $\Delta custo < 0$  ou  $U[0,1] < \exp(-\Delta custo/T)$

      então  $S \leftarrow S'$

    se  $(custo(S') < custo(S^*))$  então  $S^* \leftarrow S'$

  fim do para

$T \leftarrow R(T)$

fim-enquanto

# Parâmetros do Simulated Annealing

- Parâmetros do *simulated annealing*:
  - \*  $T_0$  = temperatura inicial.
  - \*  $T_f$  = temperatura final.
  - \*  $N_{it}$  = número de iterações para atingir o equilíbrio em uma dada temperatura.
  - \*  $R(.)$  = função redução (*resfriamento*) da temperatura.

# Parâmetro Temperatura Inicial

## Simulated Annealing

- Temperatura Inicial
  - \* chute total, mas um valor suficientemente alto para que soluções ruins sejam aceitas com bastante frequência no início da heurística.
  - \* chute, sendo que o seu valor faça com que por volta de 50% de soluções ruins sejam aceitas.
  - \* relacionado ao valor da função objetivo.
    - (Diaz *et al.*, 1996), página 44.
    - baseado na variação do valor da função objetivo na primeira fase da heurística.

# Parâmetro de Redução de Temperatura Simulated Annealing

- Processo de redução (*scheduling*) da temperatura
  - \* Kirkpatrick *et al.* (1983) - Redução Geométrica:
    - $T \leftarrow \alpha T$
    - $\forall \alpha \in [0.8, 0.99]$ .
  - \* Lundy and Mees (1986)
    - $T \leftarrow (T/(1+\beta T))$ ,
    - $\forall \beta$  é uma constante próximo de zero

# Parâmetro Número de Iterações

## Simulated Annealing

- Número  $N_{it}$  de iterações para atingir o equilíbrio em uma dada temperatura.
  - \* número fixo de iterações;
  - \* depois de um certo tempo/iterações sem alterar o valor da função objetivo;
  - \* o número de iterações/tempo pode estar relacionado com o tamanho do problema;
  - \* pode também estar relacionado com a vizinhança escolhida;
  - \*  $N_{it} = \lceil (\log T_f - \log T_0) / \log \alpha \rceil$ ;
  - \*  $N_{it} = \lceil (T_0 - T_f) / \beta T_0 T_f \rceil$ .

# Parâmetro Temperatura Final Simulated Annealing

- Temperatura final ( $T_f$ )
  - \* próxima de zero;
  - \* limitação por tempo ou iterações;
  - \* finalização depois de um certo tempo/iterações sem que haja atualização da solução corrente;
  - \* esse tempo/iterações fixo pode estar relacionado com o tamanho do problema;
  - \* pode também estar relacionado com a vizinhança escolhida.

# Exemplo

- Função Real

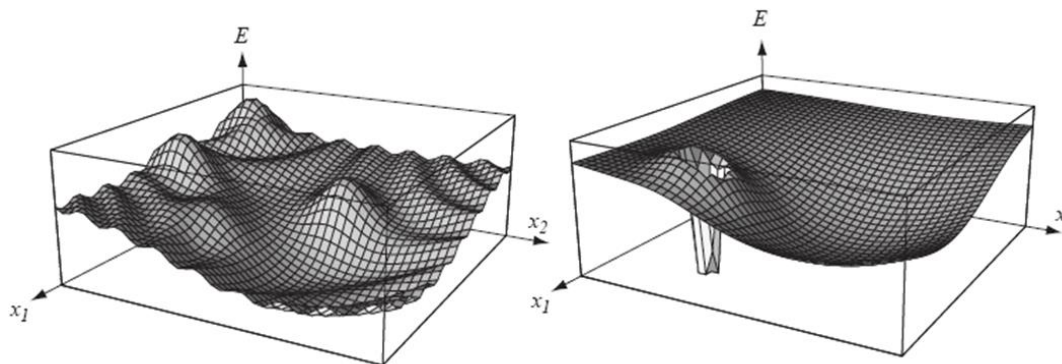
- \* Maximizar  $f(x) = x^3 - 60x^2 + 900x + 100$

- \* Codificação

- Representação por números binários
    - Ex:  $x=10 \Leftrightarrow (0,1,0,1,0)$  com 5 bits

- \* Vizinhança

- Modificar um ou mais bits;



# Vantagens

- Existe prova de convergência para a solução ótima (Lundy and Mees, 1986)
- Implementação simples
  - \* só visita uma solução a cada iteração
  - \* bastando calcular o valor da função objetivo da solução vizinha gerada



# Desvantagens

- Apesar de convergir para a solução ótima, a velocidade de redução de temperatura exigida implica em visitar um número grande de soluções vizinhas.
- Em princípio é necessário um processo lento de redução da temperatura e isso resulta em tempos de processamento elevados.
- Não possui memória, pois utiliza como informação do problema somente a variação do valor da função objetivo.
- Muitos parâmetros para calibrar.

# Comentários

- Pela simplicidade de implementação, pode ser utilizado em conjunto com alguma outra heurística ou outra meta-heurística.
- Existem implementações, onde apenas a idéia de *simulated annealing* é utilizado para melhorar o desempenho de outra heurística/metaheurística, como por exemplo, embutir a estratégia de aceitar soluções ruins com certa probabilidade.

# Dificuldades

- Determinação dos parâmetros
  - Escala de redução de  $T$
  - # iterações para cada temperatura
- Se o resfriamento for muito lento
  - Muito tempo para obter uma solução
- Se o resfriamento for muito rápido
  - A solução pode ser um ótimo local

# Simulated Annealing com Busca Local

Entrada:  $T_0$ ,  $T_f$ ,  $N_{it}$ ,  $S$

$T \leftarrow T_0$ ;  $S_0 \leftarrow$  gera solução inicial;  $S \leftarrow S_0$ ;  $S^* \leftarrow S_0$

enquanto  $T > T_f$  faça (temperatura alta)

para  $cont \leftarrow 1$  até  $N_{it}$  faça (iterações para equilíbrio)

$S' \leftarrow$  seleciona uma solução vizinha de  $S$  (1)

$S'' \leftarrow$  Busca Local ( $S'$ ) (2)

$\Delta custo \leftarrow custo(S'') - custo(S)$

se  $\Delta custo < 0$  ou  $U[0,1] < \exp(-\Delta custo/T)$

então  $S \leftarrow S''$

se  $(custo(S'') < custo(S^*))$  então  $S^* \leftarrow S''$

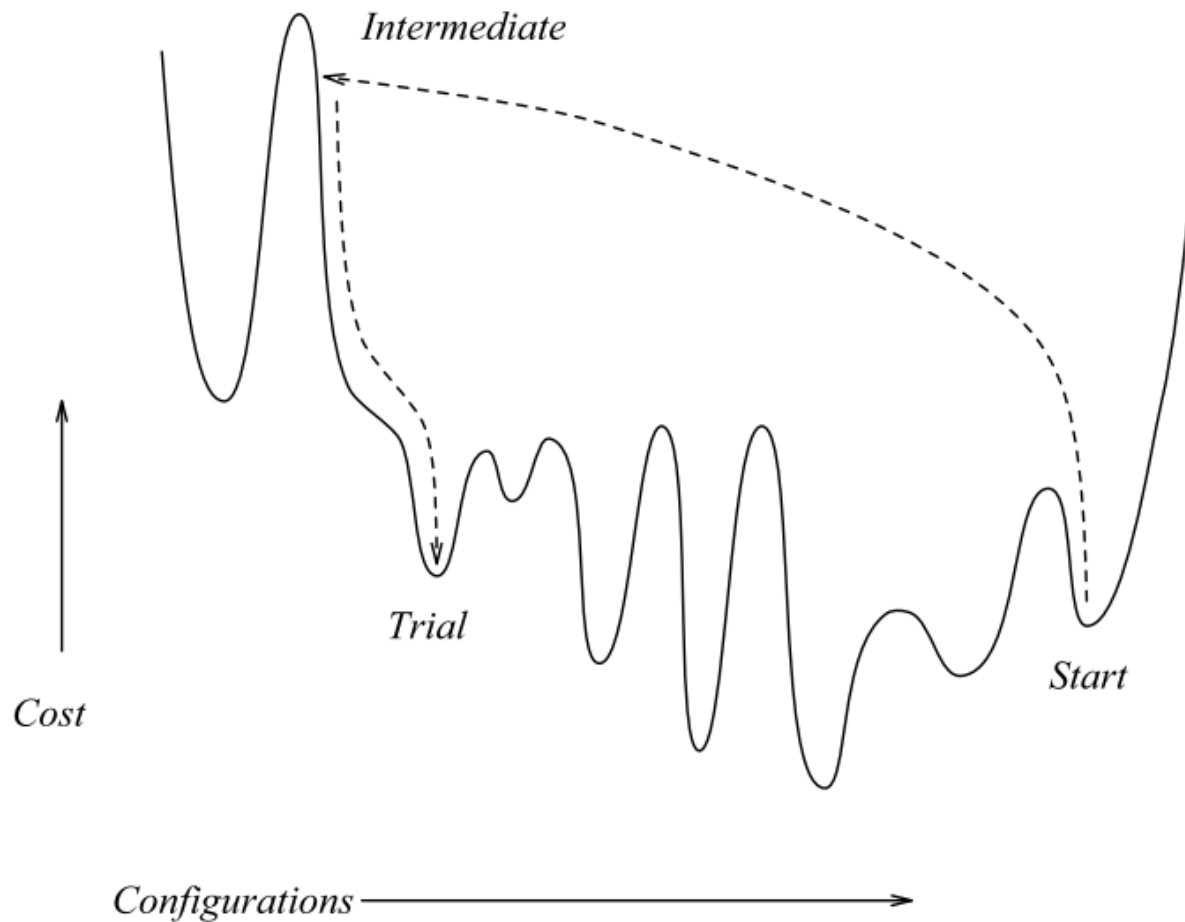
fim do para

$T \leftarrow R(T)$

fim-enquanto

Obs: vizinhança usada em (1) deve ser diferente da usada em (2).

# Simulated Annealing com Busca Local



- Referência: Martin , Olivier e Otto, 1996. •

# Bibliografia

- Diaz, A., Glover, F., Ghaziri, H. M., González, J. L., Laguna, M., Moscato, P. e Tseng, F. T. *Optimización Heurística Y Redes Neurolales*, Editorial Paraninfo, Espanha, 1996.
- Kirkpatrick, S., Gellat, C., and Vecchi, M. P. Optimization by Simulated Annealing. *Science*, 220, pp. 671-680, 1983.
- Lundy, M. and Mees, A. Convergence of an Annealing Algorithm. *Math. Prog.*, 24, pp. 111-124, 1986.
- Martin, A., Olivier C. e Otto, Steve W. Combining simulated annealing with local search heuristics. *Annals of Operations Research* (63), pp. 57-75, 1996.
- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Teller, A. H., and Teller E. Equation of State Calculation by Fast Computing Machines. *J. of Chem. Phys*, 21, pp. 1087-1091, 1953.
- Reeves, C. R. *Modern Heuristic Techniques for Combinatorial Problems*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, UK, 1993.