

Investigación de Operaciones

Simulated Annealing

Leslie Pérez Cáceres
leslie.perez@pucv.cl

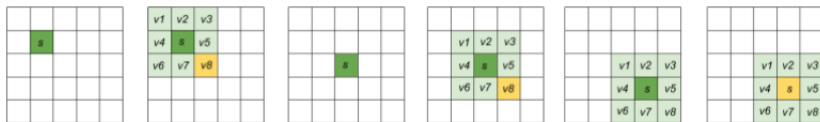
Escuela de Informática
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso

2021

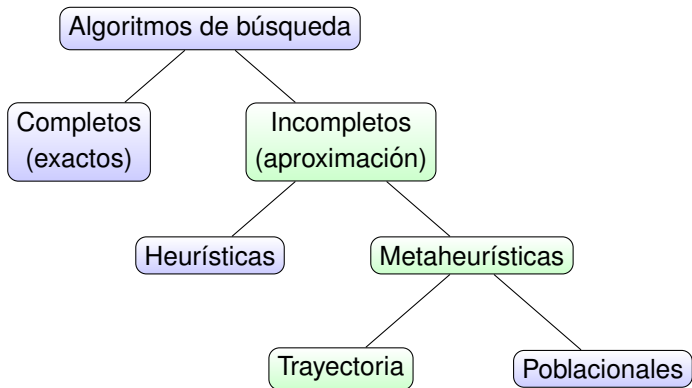


PONTIFICIA
UNIVERSIDAD
CATÓLICA DE
VALPARAÍSO

Aprendimos como utilizar heurísticas constructivas y perturbativas para realizar una simple búsqueda local



Este tipo de búsqueda nos lleva a un óptimo local
→ pero no explora el espacio de búsqueda



Metaheurísticas

Son métodos **generales** que guían la búsqueda de soluciones aplicando heurísticas y balanceando la **exploración** y **explotación** de la búsqueda para **evitar el estancamiento** en óptimos locales.

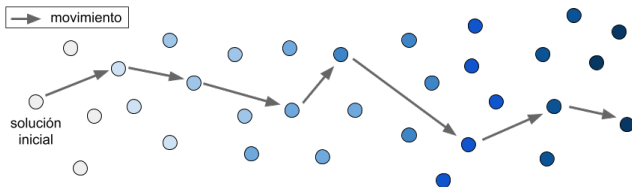


- No son definidas para un problema específico
- Mantienen una o varias solución a en cada iteración
- Son estocásticas (resultado depende de los números aleatorios)

¿Cuándo usarlas?

- Optimalidad no es requerida
- Gran espacios de búsqueda
- Existen restricciones de tiempo

Metaheurísticas de trayectoria



- son métodos de búsqueda global
- definen una **trayectoria** en el espacio de búsqueda
- manejan **una solución** a la vez
- aplican iterativamente una heurística perturbativa (**movimiento**)

Metaheurística de trayectoria basada en el templado de los metales



- Controla la explotación y exploración través del **criterio de aceptación**
- Criterio de aceptación **probabilístico**
- Utiliza una **temperatura** para decidir que solución aceptar

```
 $s \leftarrow s^+ \leftarrow \text{solucion\_inicial} ();$   
while !criterio_de_termino () do  
    /*  $V(s)$  es el vecindario de la solución  $s$  */  
     $s^* \leftarrow \text{siguiente\_vecino} (V(s));$   
    if criterio_de_aceptacion ( $s^*, s$ ) then  
        |  $s \leftarrow s^*;$   
    end  
     $s^+ \leftarrow \text{mejor\_solucion} (s, s^+)$   
end  
return  $s^+;$ 
```



```
Function criterio_aceptacion( $s^*$ ,  $s$ ):  
  if <condicion> then  
    return true  
  end  
  return false
```

Por ejemplo, suponiendo un problema de minimización:

- $f(s^*) < f(s)$
 >> explotación
- $(f(s^*) - f(s)) < \delta$
 > explotación y exploración
- TRUE (siempre acepta la nueva solución s^*)
 >> exploración.

```
Function criterio_aceptacion( $s^*$ ,  $s$ ):  
  if <condicion> then  
    return true  
  end  
  return false
```

¿Cómo **ajustar** el criterio de aceptación durante la búsqueda?

Simulated Annealing: criterio de aceptación

Idea: aceptar soluciones peores que la solución actual

→ mas exploración

→ puede que nos lleve a soluciones mejores!

Criterio de aceptación:

- Si la solución es **mejor** que la solución actual:

$$\Delta s = f(s^*) - f(s) < 0$$

→ el criterio la acepta directamente

- Si la solución es **peor**, es aceptada con probabilidad:

$$p = e^{-\frac{\Delta s}{T_i}}$$

donde T_i es la temperatura en la iteración i

Criterio de Metropolis

Simulated Annealing: Criterio de Metropolis

Si la solución es **peor**, es aceptada con probabilidad:

$$p = e^{-\frac{\Delta s}{T_i}}$$

Function `criterio_aceptacion` (s^* , s , T_i):

```
 $\Delta s = f(s^*) - f(s);$ 
```

```
if  $\Delta s < 0$  then
```

```
    | return true
```

```
end
```

```
if  $T_i == 0$  then
```

```
    | return false
```

```
end
```

```
 $p = e^{-\Delta s / T_i};$ 
```

```
if random()  $< p$  then
```

```
    | return true
```

```
end
```

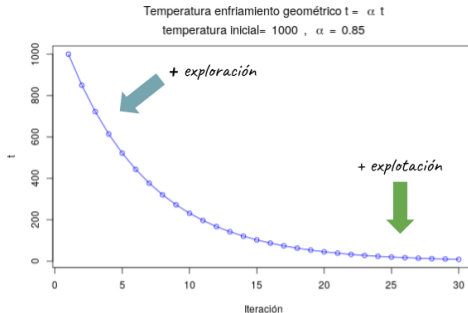
```
return false
```

Simulated Annealing: Esquema de enfriamiento

- La temperatura se reduce a medida que la búsqueda avanza
Por ejemplo:
→ Enfriamiento geométrico:

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

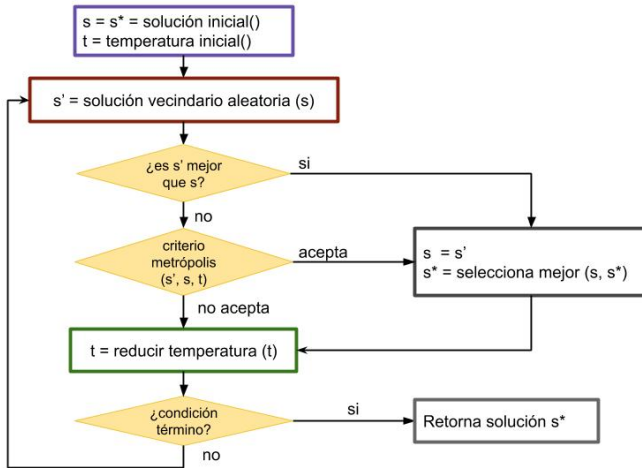
- Requiere definir una temperatura inicial T_0



Simulated Annealing: pseudocódigo

```
 $s \leftarrow s^+ \leftarrow \text{solucion\_inicial}();$   
 $T \leftarrow T_0;$   
while  $\text{!criterio\_de\_termino}()$  do  
     $s^* \leftarrow \text{siguiente\_vecino}(V(s));$   
     $\Delta s = f(s^*) - f(s);$   
    if  $\Delta s < 0$  then  
         $s \leftarrow s^*;$   
    else  
         $p \leftarrow e^{-\Delta s / T};$   
        if  $\text{random}() < p$  then  $s \leftarrow s^* ;$   
    end  
     $s^+ \leftarrow \text{mejor\_solucion}(s, s^+);$   
     $T \leftarrow \text{enfriamiento}(T, T_0);$   
end  
return  $s^+;$ 
```

Simulated Annealing: diagrama



Criterio de término de una metaheurística

Las metaheurísticas son estocásticas

→ pueden buscar infinitamente

El **criterio de término** en las metaheurísticas es la cantidad de recursos disponibles para búsqueda

¿Cómo se puede definir?

- 1 número de evaluaciones (soluciones evaluadas)

```
Function criterio_de_termino(evals):
```

```
    if evals  $\geq$  max_evals then
```

```
        return true
```

```
    end
```

```
    return false
```


Criterio de término de una metaheurística

Las metaheurísticas son estocásticas

→ pueden buscar infinitamente

El **criterio de término** en las metaheurísticas es la cantidad de recursos disponibles para búsqueda

¿Cómo se puede definir?

② número de iteraciones

Function `criterio_de_termino`(*iteracion*):

```
    if iteracion  $\geq$  max_iter then  
        return true  
    end  
    return false
```

Criterio de término de una metaheurística

Las metaheurísticas son estocásticas

→ pueden buscar infinitamente

El **criterio de término** en las metaheurísticas es la cantidad de recursos disponibles para búsqueda

¿Cómo se puede definir?

- 3 basado en temperatura

Function `criterio_de_termino`(T):

```
  if  $T \leq T_{min}$  then  
    | return true  
  end  
  return false
```

Criterio de término de una metaheurística

Las metaheurísticas son estocásticas

→ pueden buscar infinitamente

El **criterio de término** en las metaheurísticas es la cantidad de recursos disponibles para búsqueda

¿Cómo se puede definir?

- 3 mixtos: basado en temperatura + evaluaciones

```
Function criterio_de_termino(T):  
    if  $T \leq T_{min}$  or  $evals \geq max\_evals$  then  
        return true  
    end  
    return false
```

Parámetros de una metaheurística

Los **parámetros** de una metaheurística son todas las variables a las cuales se les debe asignar un valor

Los parámetros controlan el comportamiento de una metaheurística

Los parámetros de Simulated Annealing son:

- temperatura inicial (T_0)
- parámetros del esquema de enfriamiento (α)
- max. evaluaciones / max. iteraciones / temperatura mínima (T_{\min})

Los **componentes** de una metaheurística son todos procedimientos involucrados en la búsqueda

Son elegidos por quien diseña e implementa el algoritmo

Para Simulated Annealing los componentes son:

- procedimiento de generación de solución inicial
- operador de vecindario (movimiento)
- criterio de aceptación → Criterio de Metrópolis (siempre)
- esquema de enfriamiento
- criterio de término

Supongamos el siguiente Simulated Annealing:

Componentes:

- generación de solución inicial: Aleatoria uniforme
- operador de vecindario: Swap
- criterio de aceptación: Criterio de Metrópolis
- esquema de enfriamiento: Geométrico
- criterio de término: Temperatura mínima

Parámetros:

- $T_0 = 10$
- $\alpha = 0.4$
- $T_{\min} = 0.2$

Ejecute paso a paso el algoritmo Simulated Annealing definido sobre esta instancia del TSP:

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

Utilice los siguientes números aleatorios en la ejecución:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72, 0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36, 0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Ejecute paso a paso el algoritmo Simulated Annealing definido:

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

- Solución inicial: aleatoria uniforme
- Movimiento: swap
- Criterio de aceptación: Metropolis
- $T_0 = 10$
- Enfriamiento: geométrico
 $T_{i+1} = \alpha T_i, \alpha = 0.4$
- Criterio de término
 $T \leq 0.2$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72, 0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36, 0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Solución inicial: aleatoria uniforme

$$* rand() = 0.11$$

A B C D E

s = A

$$* rand() = 0.20$$

B C D E

s = A B

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Solución inicial: aleatoria uniforme

$$* rand() = 0.07$$

C D E

$s =$ A B C

$$* rand() = 0.36$$

D E

$s =$ A B C D

Solución generada:

$s =$ A B C D E $f(s) = 32$

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #1

Solución actual:

$$s = \boxed{A \quad B \quad C \quad D \quad E} \quad f(s) = 32$$

Vecino aleatorio: swap

$$* rand() = 0.25 \rightarrow B$$

$$* rand() = 0.72 \rightarrow D$$

$$s^* = \boxed{A \quad D \quad C \quad B \quad E} \quad f(s^*) = 39$$

La solución es peor que la actual:

→ Criterio de metrópolis

$$p = e^{-\frac{\Delta s}{T}}$$

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #1

$$s = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline A & B & C & D & E \\ \hline \end{array} \quad f(s) = 32$$

$$s^* = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline A & D & C & B & E \\ \hline \end{array} \quad f(s^*) = 39$$

→ Criterio de metrópolis

$$p = e^{-\frac{\Delta s}{T}}$$

$$\begin{aligned} \Delta s &= f(s^*) - f(s) \\ &= 39 - 32 \\ &= 7 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p &= e^{-\Delta s/T} \\ &= e^{-7/10} \\ &= 0.5 \end{aligned}$$

* $rand() = 0.43 < p \rightarrow$ acepta!

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #1

$$s = s^*$$

$$s = \boxed{A \quad D \quad C \quad B \quad E} \quad f(s) = 39$$

Enfriar temperatura

$$\begin{aligned} T &= \alpha T \\ &= 0.4 \cdot 10 \\ &= 4 \end{aligned}$$

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #2

Solución actual:

$$s = \boxed{\begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline A & D & C & B & E \\ \hline \end{array}} \quad f(s) = 39$$

Vecino aleatorio: swap

$$* rand() = 0.54 \rightarrow C$$

$$* rand() = 0.97 \rightarrow E$$

$$s^* = \boxed{\begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline A & D & E & B & C \\ \hline \end{array}} \quad f(s^*) = 33$$

La solución es mejor que la actual:

→ **acepta directamente!**

$$s = s^*$$

$$s = \boxed{\begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline A & D & E & B & C \\ \hline \end{array}} \quad f(s) = 33$$

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #2

$$s = \boxed{A} \boxed{D} \boxed{E} \boxed{B} \boxed{C} \quad f(s) = 33$$

Enfriar temperatura

$$\begin{aligned} T &= \alpha T \\ &= 0.4 \cdot 4 \\ &= 1.6 \end{aligned}$$

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #3

Solución actual:

$$s = \boxed{A \quad D \quad E \quad B \quad C} \quad f(s) = 33$$

Vecino aleatorio: swap

$$* rand() = 0.03 \rightarrow A$$

$$* rand() = 0.59 \rightarrow E$$

$$s^* = \boxed{E \quad D \quad A \quad B \quad C} \quad f(s^*) = 33$$

La solución es igual que la actual:

→ ¿Criterio de metrópolis?

$$p = e^{-\frac{\Delta s}{T}}$$

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #3

$$s = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline A & D & E & B & C \\ \hline \end{array} \quad f(s) = 33$$

$$s^* = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline E & D & A & B & C \\ \hline \end{array} \quad f(s^*) = 33$$

→ Criterio de metrópolis

$$p = e^{-\frac{\Delta s}{T}}$$

$$\begin{aligned} \Delta s &= f(s^*) - f(s) \\ &= 33 - 33 \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p &= e^{-\Delta s/T} \\ &= e^{-0/1.6} \\ &= 1 \end{aligned}$$

* $rand() = 0.36 < p \rightarrow$ acepta!

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #3

$$s = s^*$$

$$s = \boxed{E} \boxed{D} \boxed{A} \boxed{B} \boxed{C} \quad f(s) = 33$$

Enfriar temperatura

$$\begin{aligned} T &= \alpha T \\ &= 0.4 \cdot 1.6 \\ &= 0.64 \end{aligned}$$

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #4

Solución actual:

$$s = \boxed{E \mid D \mid A \mid B \mid C} \quad f(s) = 33$$

Vecino aleatorio: swap

$$* rand() = 0.41 \rightarrow A$$

$$* rand() = 0.62 \rightarrow B$$

$$s^* = \boxed{E \mid D \mid B \mid A \mid C} \quad f(s^*) = 29$$

La solución es mejor que la actual:

→ **acepta directamente!**

$$s = s^* \\ s = \boxed{E \mid D \mid B \mid A \mid C} \quad f(s) = 29$$

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #4

$$s = \boxed{E} \boxed{D} \boxed{B} \boxed{A} \boxed{C} \quad f(s) = 29$$

Enfriar temperatura

$$\begin{aligned} T &= \alpha T \\ &= 0.4 \cdot 0.64 \\ &= 0.256 \end{aligned}$$

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #5

$$s = \boxed{E} \boxed{D} \boxed{B} \boxed{A} \boxed{C} \quad f(s) = 29$$

Vecino aleatorio: swap

$$* rand() = 0.29 \rightarrow D$$

$$* rand() = 0.85 \rightarrow C$$

$$s^* = \boxed{E} \boxed{C} \boxed{B} \boxed{A} \boxed{D} \quad f(s^*) = 33$$

La solución es peor que la actual:

→ Criterio de metrópolis

$$p = e^{-\frac{\Delta s}{T}}$$

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #5

$$\begin{array}{l} s = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline E & D & B & A & C \\ \hline \end{array} \quad f(s) = 29 \\ s^* = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline E & C & B & A & D \\ \hline \end{array} \quad f(s^*) = 33 \end{array}$$

→ Criterio de metrópolis

$$p = e^{-\frac{\Delta s}{T}}$$

$$\begin{aligned} \Delta s &= f(s^*) - f(s) \\ &= 33 - 29 \\ &= 4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p &= e^{-\Delta s / T} \\ &= e^{-4 / 0.256} \\ &= 1.6 \cdot 10^{-7} \end{aligned}$$

* $rand() = 0.70 < p \rightarrow$ rechaza!

	A	B	C	D	E
A	-	8	4	9	9
B	8	-	6	7	10
C	4	6	-	5	6
D	9	7	5	-	4
E	9	10	6	4	-

$$T_0 = 10$$

$$\alpha = 0.4$$

$$T_{i+1} = \alpha T_i$$

$$T \leq 0.2$$

Numeros aleatorios:

0.11, 0.20, 0.07, 0.36, 0.25, 0.72,

0.43, 0.54, 0.97, 0.03, 0.59, 0.36,

0.41, 0.62, 0.29, 0.85, 0.70

Iteración #5

$$s = \boxed{E} \boxed{D} \boxed{B} \boxed{A} \boxed{C} \quad f(s) = 29$$

Enfriar temperatura

$$\begin{aligned} T &= \alpha T \\ &= 0.4 \cdot 0.256 \\ &= 0.1024 \end{aligned}$$

Criterio de término alcanzado

$$\rightarrow T \leq 0.2$$