

## Capítulo 5

# Recozimento Simulado (*Simulated Annealing*)

*Francisco José da Cunha Pires Soeiro*  
*José Carlos Becceneri*  
*Antônio José da Silva Neto*

### 5.1 Motivação e Histórico do Método

O Recozimento Simulado (*Simulated Annealing*, SA) tem sua origem na analogia entre o processo físico do resfriamento de um metal em estado de fusão e o problema de otimização. Baseado em ideias da mecânica estatística e no algoritmo de simulação proposto por Metropolis *et al.* [116] o SA foi apresentado inicialmente como uma técnica de otimização combinatória por Kirkpatrick *et al.* [83] que o utilizaram no projeto de sistemas eletrônicos. A mecânica estatística é a disciplina central da física da matéria condensada que estuda as propriedades agregadas de um conjunto elevado de átomos existentes em um líquido ou sólido. Como o número de átomos é da ordem de  $10^{23}$  por centímetro cúbico, somente as características mais prováveis do sistema em equilíbrio térmico serão observadas em experimentos. Isto é caracterizado pelas propriedades médias e pequenas flutuações em torno das mesmas. Cada configuração é definida por um conjunto de posições atômicas  $\{r_i\}$  e afetadas pela probabilidade de Boltzmann  $\exp[-E\{r_i\}/k_B T]$ , onde  $E\{r_i\}$  é a energia da configuração,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura.

Uma questão fundamental na mecânica estatística é saber o que acontece ao sistema em temperaturas baixas, se o mesmo permanece em estado líquido ou se solidifica e, neste caso, se atinge uma configuração cristalina ou se transforma em vidro. Isto está relacionado diretamente com a energia interna do material. Baixas temperaturas não são condições suficientes para garantir que baixos níveis de energia interna foram atingidos. Experimentos que levam a baixos níveis de energia interna do material são baseados em um recozimento cuidadoso, ou seja, numa redução bem lenta da temperatura desde o estado de fusão do material, que vai resultar numa estrutura cristalina pura. Se não for feito assim os cristais resultantes terão muitos defeitos ou a substância pode se transformar em um vidro, que é uma estrutura apenas ótima localmente. Este processo de se achar um estado de baixa energia é simulado para a solução de um problema de otimização. A função objetivo, ou função custo, corresponderá ao nível de energia do sistema, que nas duas situações, física ou simulada, se deseja minimizar. A temperatura do sistema físico não tem equivalente no problema de otimização. Esta será apenas um parâmetro de controle. No processo iterativo se apenas configurações que levam a uma redução da energia forem aceitas haverá uma convergência rápida de uma temperatura elevada para  $T = 0$ , o que fisicamente significa uma têmpera ou uma solução metaestável do ponto de vista matemático. No procedimento de Metropolis [116] foi incorporado um aproveitamento cuidadoso de passos de subida, ou seja, passos que resultam em um aumento da função objetivo, visando facilitar a obtenção do ótimo global. E foi esta probabilidade de se aceitar passos que levam a um valor pior da função objetivo que levou a um algoritmo que foge dos mínimos locais possibilitando a convergência para o ótimo global. Metropolis introduziu um algoritmo simples para simular o sistema de átomos em equilíbrio numa determinada temperatura. Em cada passo do algoritmo são dados deslocamentos aleatórios em cada átomo e a variação de energia é calculada  $\Delta E$  ( $\Delta E = E_{i+1} - E_i$ ). Se  $\Delta E < 0$  o deslocamento é aceito e a nova configuração passa a ser o ponto de partida para o próximo passo. No caso de  $\Delta E > 0$ , a nova configuração pode ser aceita de acordo com a probabilidade

$$P(\Delta E) = \exp(-\Delta E/k_B T) \quad (5.1.1)$$

Um número aleatório uniformemente distribuído no intervalo  $[0, 1]$  é calculado e comparado com  $P(\Delta E)$ . O critério de Metropolis estabelece que a configuração será aceita se o número aleatório for menor que  $P(\Delta E)$ , caso contrário é rejeitado e a configuração anterior é utilizada como ponto de partida para o próximo passo. Repetindo-se este procedimento básico diversas vezes o movimento dos átomos de um material na temperatura  $T$  é

simulado. Utilizando-se a função objetivo no lugar da energia e definindo-se as configurações atômicas como conjuntos de variáveis de projeto  $\{x_i\}$ , o procedimento de Metropolis gera um conjunto de configurações de um problema de otimização a uma certa temperatura. Esta temperatura é apenas um parâmetro de controle. A constante de Boltzmann também passa a ser um simples fator de escala normalmente igualado à unidade. O SA consiste em primeiro “fundir” o sistema a ser otimizado a uma temperatura elevada e depois em reduzir a temperatura até que o sistema “congele” e não ocorra nenhuma melhora no valor da função objetivo. Em cada temperatura a simulação deve ser executada num número tal de vezes que o estado de equilíbrio seja atingido. A sequência de temperaturas e o número de rearranjos  $\{x_i\}$  tentados em cada temperatura para o equilíbrio representam o esquema de recozimento do SA.

Atualmente o SA continua sendo bastante utilizado, muitas vezes em conjunto com outras técnicas de otimização combinatória, tais como algoritmos genéticos [132].

## 5.2 Descrição do Algoritmo

Um algoritmo básico do SA é apresentado a seguir. A nomenclatura utilizada é a seguinte:

- $X$  é a solução gerada na iteração corrente;
- $X^*$  é a melhor solução encontrada;
- $f$  é a função objetivo;
- $T_0$  é a temperatura inicial;
- $T$  é a temperatura corrente;
- $p$  é um número real, entre 0 e 1, gerado aleatoriamente.

**Passo 1.** Atribuir a  $X$  uma solução inicial

**Passo 2.** Fazer  $X^* = X$

**Passo 3.** Definir uma temperatura inicial  $T_0$

**Passo 4.** Verificar se as condições de parada foram encontradas

**Passo 5.** Escolher um ponto  $X'$  vizinho de  $X$

**Passo 6.** Calcular  $\Delta E = f(X') - f(X)$

**Passo 7.** Verificar se  $\Delta E < 0$

**Passo 8.** Se Passo-7 for verdadeiro: fazer  $X = X'$ . Se  $(f(X') < f(X^*))$  fazer  $X^* = X'$

**Passo 9.** Se Passo-7 não for verdadeiro: gerar um número aleatório  $p'$ . Se  $p' < \exp(-\Delta E/T)$  fazer  $X = X'$

**Passo 10.** Retornar ao Passo 5

**Passo 11.** Atualizar  $T$

**Passo 12.** Retornar ao Passo 4

Alguns comentários sobre os passos do algoritmo do SA são feitos a seguir.

No Passo 1, obtém-se uma solução inicial, o que pode ser feito de forma aleatória, normalmente com base na experiência.

No Passo 2, atribui-se a  $X^*$  o valor da solução inicial  $X$ , por ser a melhor solução conhecida até este passo.

No Passo 3, atribui-se a  $T$  o valor da temperatura inicial ( $T_0$ ). O parâmetro  $T_0$  deve ser suficientemente grande para que todas as transições sejam inicialmente aceitas. Evidentemente, esse valor depende do tipo do problema e da instância analisada. Na literatura, existem muitas propostas para o cálculo da temperatura inicial [1]. Cita-se aqui dois exemplos:  $T_0 = \ln f(X_0)$ , onde  $f(X_0)$  é o valor da função objetivo da solução inicial ou  $T_0 = \Delta E_{max}$ , onde  $\Delta E_{max}$  é a diferença máxima de custo entre duas soluções vizinhas. No último caso, porém, o cálculo pode consumir muito tempo computacional. Por isso, frequentemente, usamos uma estimativa para  $T_0$ .

No Passo 4, é estabelecido um critério de parada. No código utilizado neste capítulo além do número máximo de avaliações da função objetivo, o algoritmo termina pela comparação dos últimos  $N_\epsilon$  pontos de mínimo encontrados ao fim de cada temperatura com o mais recente mínimo e o melhor de todos encontrados ao longo de todo o processo. Se a diferença entre todos esses valores for menor que  $\epsilon$  o algoritmo termina. Este critério ajuda a assegurar que o ótimo global foi encontrado.

No Passo 5, escolhe-se um vizinho da solução corrente  $X$ . Essa função de escolha é essencial ao bom desempenho do algoritmo, pois, se analisarmos muitos vizinhos, podemos comprometer o tempo de processamento. No presente trabalho um novo valor de  $X, X'$ , é determinado variando-se o elemento  $i$  do vetor  $X$ , da seguinte maneira:

$$x_i = x_i + rv_i \quad (5.2.2)$$

onde  $r$  é um número aleatório uniformemente distribuído no intervalo  $[-1, 1]$  e  $v_i$  o  $i$ -ésimo elemento de  $V$  (vetor com os comprimentos dos passos). Depois de  $N_s$  passos sobre todas as variáveis de projeto (elementos de  $X$ ), o vetor  $V$  com os comprimentos dos passos correspondentes a cada variável é ajustado de modo que cerca de 50% de todos os movimentos sejam aceitos. A finalidade é amostrar amplamente o espaço de projeto. Se um número elevado de pontos é aceito para  $X$ , então o passo correspondente é aumentado. Para uma dada temperatura isto aumenta o número de rejeições e

diminui a percentagem de aceitação.

No Passo 6, calcula-se a diferença entre os valores da solução corrente e do novo ponto encontrado na vizinhança ( $X'$ ).

No Passo 8, se o valor da função no ponto  $X'$  for menor do que em  $X$ , então  $X'$  passa a ser a solução corrente. Da mesma forma verifica-se se o valor corrente é menor que o valor armazenado em  $X^*$ . Em caso afirmativo,  $X^*$  recebe o valor de  $X'$ .

No Passo 9, caso o valor de  $f(X')$  seja maior que o valor de  $f(X)$ , gera-se um número aleatório  $p'$  entre 0 e 1, indicando que uma solução pior foi encontrada em  $X'$ . Se  $f'$  é maior ou igual a  $f$ , o critério de Metropolis já mencionado decide se o ponto será aceito ou não. O valor

$$p = e^{-|f'-f|/T} \quad (5.2.3)$$

é computado e comparado com  $p'$ . Se  $p > p'$ , o novo ponto é aceito,  $X$  é atualizado e o algoritmo se move numa direção de subida. Se  $p < p'$ , então  $X'$  é rejeitado. Dois fatores diminuem a probabilidade de um movimento ascendente: baixas temperaturas e grandes diferenças nos valores das funções calculadas. Essa é uma tentativa de se escapar de mínimos locais.

No Passo 11, determina-se que a temperatura seja atualizada. Após  $N_T$  vezes nos ciclos (*loops*) acima a temperatura é reduzida. A nova temperatura é dada por

$$T' = r_T \times T \quad (5.2.4)$$

onde  $r_T$  é um número entre 0 e 1. Uma temperatura baixa diminui a probabilidade de movimentos de subida, produzindo um número elevado de pontos rejeitados e portanto diminuindo os comprimentos dos passos. Além disso, o primeiro ponto a ser testado em uma nova temperatura é o ótimo atual. Passos pequenos e início no ótimo atual significam que a área do espaço de projeto mais promissora é mais explorada.

Todos os parâmetros mencionados são definidos pelo usuário. Note-se que no início o SA tem uma estimativa grosseira do espaço de projeto movendo-se com passos maiores. À medida que a temperatura cai o método vai lentamente focalizando a área onde o mínimo global deve estar localizado.

O código do SA utilizado neste trabalho é baseado no programa desenvolvido em Fortran por Goffe *et al.* [65] que usaram um algoritmo implementado por Corana *et al.* [41]. Os parâmetros utilizados para a solução do problema de transferência radiativa apresentado na Seção 5.3 a seguir foram:

- $T_0 = 5,0$  - temperatura inicial;

- $r_T = 0,75$  - coeficiente de redução de temperatura;
- $[V] = [1; 1; 1; 1]$  - vetor com o passo inicial (quatro variáveis de projeto);
- $N_s = 20$  - número de perturbações de cada variável em cada passo;
- $N_t = 5$  - número de mudanças de passo em cada temperatura;
- $N_\epsilon = 4$  - número de temperaturas consecutivas onde o critério de convergência deve ser satisfeito;
- $\epsilon < 10^{-6}$  - critério de convergência;
- $N_{max} = 100.000$  - número máximo de avaliações da função objetivo.

Esses parâmetros foram obtidos empiricamente e produziram a necessária robustez para a solução do problema.

### 5.3 Aplicação ao Problema Inverso de Transferência Radiativa

O método descrito foi aplicado ao problema inverso de transferência radiativa em um meio homogêneo unidimensional, descrito na Subseção 2.2.1 e no Capítulo 3 [150, 151]. Os parâmetros a se determinar correspondem ao vetor indicado na equação (3.2.1) as seguintes incógnitas:

- $\tau_0$  - espessura ótica;
- $\omega$  - albedo de espalhamento simples;
- $\rho_1$  - refletividade na superfície interna esquerda do meio participante homogêneo unidimensional;
- $\rho_2$  - refletividade na superfície interna direita do meio participante homogêneo unidimensional.

Não temos dados experimentais disponíveis para a solução do problema inverso. Foram utilizados dados experimentais sintéticos  $Y_i$  adicionando ruído pseudo-aleatório  $r$  aos valores da intensidade da radiação térmica  $I_i$  calculados com os valores exatos das incógnitas que se deseja determinar, conforme a expressão abaixo:

$$Y_i = I_i + r\sigma \quad (5.3.5)$$

onde  $\sigma$  representa o desvio padrão dos erros experimentais. Esta expressão é equivalente à equação (3.3.6). Inicialmente consideramos apenas o caso sem ruído para avaliar a potencialidade do método. Introduzimos o ruído na solução híbrida da qual será descrita mais adiante. Vamos analisar dois casos apresentados na Tabela 5.1.

Propriedade radiativa	Caso 1	Caso 2
Espessura ótica $\tau_0$	1,0	1,0
Albedo $\omega$	0,5	0,5
Refletividade difusa $\rho_1$	0,1	0,95
Refletividade difusa $\rho_2$	0,95	0,5

Tabela 5.1: Valores das propriedades radiativas a serem determinadas.

Como solução inicial foram escolhidos pontos afastados da solução exata para testar a capacidade do método de enfrentar as dificuldades no espaço de projeto (região de busca) e evitar os mínimos locais.

Propriedade radiativa	Caso 1	Caso 2
Espessura ótica $\tau_0$	5,0	5,0
Albedo $\omega$	0,95	0,95
Refletividade difusa $\rho_1$	0,95	0,5
Refletividade difusa $\rho_2$	0,1	0,1

Tabela 5.2: Valores iniciais das variáveis.

A solução para os dois casos é apresentada na Tabela 5.3. Verifica-se a precisão dos resultados embora com um elevado esforço computacional.

Caso	$\tau_0$	$\omega$	$\rho_1$	$\rho_2$	Valor final da função objetivo eq. (3.2.4)	Número de avaliações da função objetivo
1	0,9999	0,5002	0,0968	0,9499	$2,8E-13$	36000
2	0,9998	0,5001	0,9497	0,5000	$2,1E-10$	36400

Tabela 5.3: Solução obtida com o Recozimento Simulado (SA).

Uma alternativa ao SA puro para a redução do custo computacional é a utilização de um método híbrido onde inicialmente o SA é utilizado por alguns ciclos e depois um método local baseado no gradiente como o método de Levenberg-Marquardt (LM) [109] é utilizado para a obtenção de uma solução mais rápida e precisa. A ideia é aproveitar as qualidades dos dois tipos de métodos. Usa-se o método global para se chegar a um ponto localizado na região de convergência do método local que é então utilizado. Ilustramos esta alternativa com o Caso 1 acima. A Tabela 5.4 mostra a solução do LM sozinho partindo do mesmo ponto utilizado pelo SA (Tabela 5.2). Neste caso foi introduzido um erro de 5% nos dados experimentais sintéticos.

Verifica-se que o LM não conseguiu convergir partindo do ponto especificado. Utilizemos então o SA para iniciar o problema porém rodando apenas por dois ciclos (duas temperaturas) o que perfaz um total de 800 avaliações da função objetivo.

A partir do resultado obtido na Tabela 5.5 roda-se o LM chegando-se à resposta correta em um número pequeno de iterações (Tabela 5.6).

Iteração	$\tau_0$	$\omega$	$\rho_1$	$\rho_2$	Função objetivo eq. (3.2.4)
0	5,0	0,95	0,95	0,1	10,0369
1	5,7856	$9,63E-1$	$6,6E-2$	$1,0E-4$	1,7664
2	7,0822	$9,97E-1$	$1,0E-4$	$1,0E-4$	2,5778
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
20	9,2521	1,0064	$1,0E-4$	$1,0E-4$	2,4646
Solução exata	1,0	0,5	0,1	0,95	0,0

Tabela 5.4: Resultados para o Caso 1 e erro de 5% nos dados experimentais sintéticos usando o LM.

Caso	$\tau_0$	$\omega$	$\rho_1$	$\rho_2$	Valor final da função objetivo eq. (3.2.4)	Número de avaliações da função objetivo
1	0,9530	0,5310	0,0001	0,9444	$8,047E-3$	800

Tabela 5.5: Solução do SA para o Caso 1 com 2 ciclos.

Iteração	$\tau_0$	$\omega$	$\rho_1$	$\rho_2$	Função objetivo eq. (3.2.4)
0	0,953	0,531	0,0001	0,944	$8,047E-3$
1	0,998	0,506	0,035	0,949	$4,833E-3$
2	1,001	0,503	0,070	0,949	$5,07E-6$
3	1,001	0,503	0,099	0,950	$2,27E-6$

Tabela 5.6: Solução para o Caso 1 utilizando o LM após 2 ciclos de SA (800 avaliações da função objetivo).

## 5.4 Considerações Finais

Pelos resultados apresentados verifica-se o bom desempenho do SA. A desvantagem é o elevado esforço computacional, característica comum a todos os métodos de otimização global. O uso de soluções híbridas com a utilização de um método baseado em gradientes (método local) após alguns ciclos do SA mostrou ser uma boa alternativa para se diminuir o esforço computacional e refinar a solução.