

Tratamento de problemas \mathcal{NP} -difíceis: Simulated Annealing

Cid C. Souza
Eduardo C. Xavier

Instituto de Computação/Unicamp

5 de maio de 2011

Simulated Annealing

- Baseado na equivalência entre o processo físico de formação de cristais e a otimização de um problema combinatório Π .

$$\begin{array}{lll} \text{Solução de } \Pi & \equiv & \text{Estado da matéria} \\ \text{Custo da Solução} & \equiv & \text{Energia do Estado} \end{array}$$

Observação: *cristal* é um estado físico de energia mínima !

- Obtenção de cristais (Física): colocar matéria em alta temperatura e resfriá-la lentamente. No início, com temperatura alta, a matéria pode mudar para estados de mais alta *ou* mais baixa energia. O processo é caótico !
- No final, com temperatura baixa, praticamente só é possível passar de um estado para outro que tenha energia menor. Esse processo se encerra quando o sistema está “congelado”, ou seja, foi atingido um estado de mínimo local de energia.

Simulated Annealing

- Um modelo, conhecido como modelo de Metropolis, de simulação de um sistema físico é baseado na idéia de que a probabilidade do sistema estar em um estado de energia E , é proporcional a função de Gibbs-Boltzmann

$$\frac{1}{e^{E/(kT)}}, \text{ para } T > 0$$

onde T representa a temperatura e k é uma constante.

- Para um dado T a função decresce com o aumento de E , isto implica que é mais provável o sistema estar em um estado de pouca energia do que de muita energia.

Simulated Annealing

$$\frac{1}{e^{E/(kT)}}, \text{ para } T > 0$$

- Variando o T :
 - ▶ Se T é pequeno temos que prob. de estar no estado de pouca energia é maior do que o de muita energia.
 - ▶ Se T é muito grande a diferença de se estar em um estado de pouca ou muita energia é pequena.

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{e^{E/(kT)}} = \frac{1}{e^0} = 1$$

- Dado que a probabilidade é proporcional a este valor, quando T é muito grande o sistema pode estar em qualquer estado de energia.

Simulated Annealing

Algoritmo de Metropolis

- Modelo para simulação de sistemas físicos.
- Dado uma temperatura T e um estado corrente S , pequenas alterações de S corresponde a uma vizinhança de S .
 - 1 Gere uma perturbação aleatória em S obtendo S' . Se a energia de S' é menor do que a de S ($E(S') \leq E(S)$), então S' será o novo estado corrente.
 - 2 Se $E(S') > E(S)$, seja $\delta E = E(S') - E(S)$. Então S' será o novo estado corrente com probabilidade $\frac{1}{e^{\delta E/(kT)}}$
- Note que quanto maior δE mais difícil é mudar para um estado de energia mais alto.

Simulated Annealing

Metropolis et al. mostraram o seguinte resultado para este processo de simulação quando é repetido inúmeras vezes.

Teorema

Seja

$$Z = \sum_{S \in \mathcal{S}} e^{-E(S)/(kT)}$$

onde \mathcal{S} é o conjunto de estados possíveis. Seja $f_S(t)$ a fração que a simulação permanece em S nas primeiras t iterações. Então $\lim_{t \rightarrow \infty} f_S(t) = \frac{1}{Z} e^{-E(S)/(kT)}$.

A simulação passa por um estado S uma fração de vezes proporcional a função de Gibbs-Boltzmann, i.e, quanto menor energia no estado S maior é a fração de tempo que permanece nele.

Simulated Annealing

Algoritmo de Metropolis

Alg. Metropolis (Minimização)

Comece com solução inicial S_0 , constantes k e T

Repita

Seja S a solução corrente

Seja S' escolhido com proba. uniforme na vizinhança de S

Se $(c(S') < c(S))$ então

$S \leftarrow S'$

Senão

Com probabilidade $\frac{1}{e^{(c(S') - c(S))/(kT)}}$

faça $S \leftarrow S'$

Caso contrário

permaneça com S

Simulated Annealing

Função de Gibbs-Boltzmann: $e^{-E(S)/(kT)}$

- Quanto maior T , mais instável é o estado físico (pode ser visto pela simulação de Metropolis).
- Quanto menor T , mais rápido o sistema converge para um estado de energia mínimo local.
- Para formar um cristal perfeito (quando o estado está num mínimo global), é conhecido um processo chamado *annealing*..
- No processo de *annealing* o material em uma temperatura muito alta, é resfriado bem lentamente, e forma-se um cristal perfeito.

Simulated Annealing

Simulated Annealing

- As heurísticas baseadas em annealing baseiam-se neste processo físico.
- Será que ao simular um problema onde o custo é a energia, e diminuirmos lentamente o parâmetro T chegaremos em uma solução de mínimo global?
- Nos sistemas físicos isto acontece, mas em problemas de otimização nem sempre, mas chegamos próximos do mínimo global!
- Ou pelo menos esperamos isto!

Simulated Annealing

- Para simular esse processo, o algoritmo de busca local passa de uma solução para outra na sua vizinhança com uma probabilidade que é maior para as soluções de menor custo e que, após um número elevado de iterações, tende a zero para as soluções que provoquem aumento de custo.
- O comportamento do algoritmo assemelha-se àquele de uma busca aleatória no início e àquele de uma busca local determinística no final.
- Parâmetros a serem ajustados: A temperatura inicial do processo (T_0); a taxa de resfriamento ($\alpha \in (0, 1)$), o número máximo de iterações (L_1) e número máximo de iterações em cada temperatura (L_2).

Simulated Annealing

```
Simulated-Annealing    (* problema de minimização *)  
   $T \leftarrow T_0$ ;  
   $S \leftarrow \text{Gera-Solucao-Inicial}$ ;  
   $S^* \leftarrow S$ ;  
  Repita ( $L_1$ ) vezes  
    Repita ( $L_2$ ) vezes  
       $S' \leftarrow \text{Escolha-Vizinho-Aleatorio}(S)$ ;  
       $\delta \leftarrow \text{custo}(S') - \text{custo}(S)$ ;  
      Se  $\delta < 0$  então  
         $S \leftarrow S'$  ;  
        Se  $\text{custo}(S) < \text{custo}(S^*)$  então  
           $S^* \leftarrow S$ ;  
      Senão  
        Fazer  $S \leftarrow S'$  com probabilidade  $e^{-(\delta/(kT))}$ ;  
   $T \leftarrow \alpha T$ ;  
  Retornar  $S^*$ .
```

Simulated Annealing

- Temperatura inicial T_0 geralmente recebe um valor pequeno como 1.
- Decréscimo da temperatura depende de α que é tipicamente entre $0.8 \leq \alpha \leq 0.99$.
- O número de iterações para baixar a temperatura, L_2 , não deve ser muito grande (entre 100 e 1000).
- A constante k é uma normalização e geralmente é setada para que $e^{-\delta/(kT_0)} \approx 1$. No início qualquer estado é possível!
- Além de um número máximo de iterações L_1 é comum parar o processo se ficarmos muitas iterações sem melhoras significativas.