



Simulated Annealing

Profa Mariana

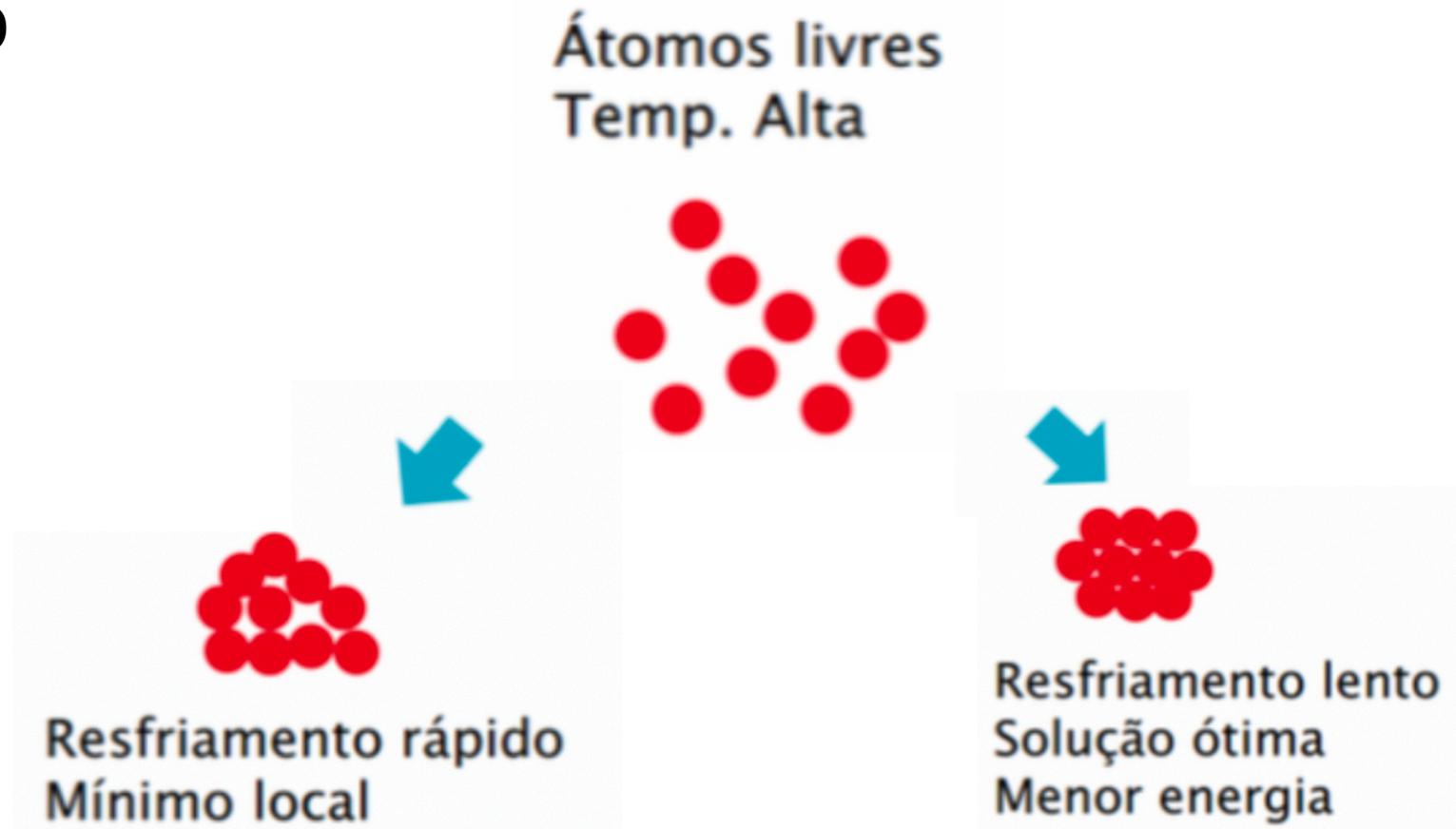
INTRODUÇÃO

A técnica *Simulated Annealing* – SA (recozimento simulado) foi usada para simular em um computador a têmpera de cristais.

O *annealing* (recozimento) de certos materiais consiste em submetê-los inicialmente a altas temperaturas e reduzi-las gradualmente até atingirem, com aumentos e reduções do estado de energia, o equilíbrio térmico, tornando-os assim, consistentes e rígidos.

O resfriamento gradativo de um material a partir de uma alta temperatura inicial leva o material a estados mínimos de energia. Informalmente esses estados são caracterizados por uma perfeição estrutural do material congelado que não se obteria caso o resfriamento não tivesse sido gradativo.

INTRODUÇÃO



Sob condições menos cuidadosas de resfriamento, o material se cristalizaria com uma energia “localmente mínima”, apresentando imperfeições estruturais.

IDEIA

Sob altas temperaturas os átomos estão totalmente “desorganizados” correspondendo a uma configuração aleatória de um problema de otimização (em geral, distante da configuração ótima desejada).

Uma pequena alteração (perturbação) nas posições de alguns destes átomos resulta numa variação de energia, que equivale a uma alteração no valor da função objetivo.

SIMULAÇÃO

A referida simulação a uma temperatura fixa T , consiste em dar um pequeno deslocamento a um dos átomos (conceito de vizinhança), computando a variação ΔE da energia do sistema, considerando os casos:

- Se $\Delta E \leq 0$, o deslocamento é incorporado ao estado do sistema, que é utilizado no passo seguinte;
- Se $\Delta E > 0$, a aceitação ou não do deslocamento passa a ser uma decisão probabilística.

Os estados possíveis de um material correspondem a soluções do espaço de busca. A energia em cada estado corresponde ao valor da função objetivo, considerando: energia mínima (se o problema for de minimização) ou máxima (se de maximização) correspondente ao valor de uma solução ótima local, possivelmente global.

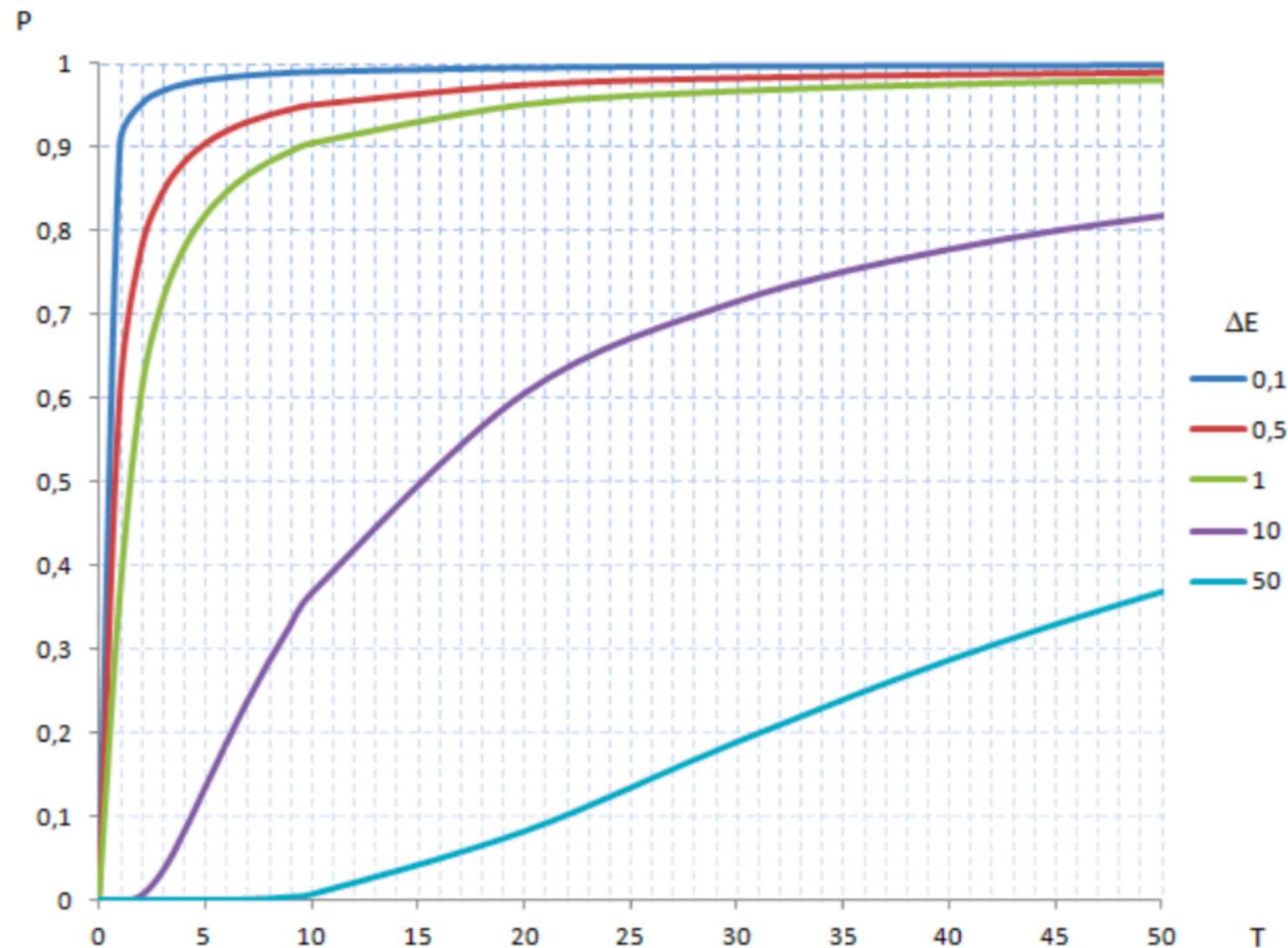
SIMULAÇÃO

Considerando os estados sucessivos de energia E_{i+1} e E_i , podem ocorrer os seguintes casos (problema de minimização):

- Se o novo estado é de energia menor que o estado atual ($\Delta E \leq 0$), esse novo estado passa a ser o estado atual;
- Se o novo estado tem uma energia maior que o estado atual ($\Delta E > 0$), a probabilidade de se mudar do estado atual para o novo estado é (critério de Metrópolis):

$$Prob = e^{-\Delta E/T}$$

onde T = temperatura atual.



- Se $\Delta E = 0$, ocorre uma situação de estabilidade ou equilíbrio. Neste caso tem-se duas configurações vizinhas com o mesmo custo (coincidência pouco provável de acontecer na prática).

PASSOS PARA UTILIZAÇÃO DO MÉTODO

- Identificar a função energia do sistema como a função objetivo que se quer otimizar, por exemplo, minimizar;
- Associar os átomos do sistema às variáveis do problema;
- Para cada temperatura de uma sequência de temperaturas decrescentes, realiza-se a simulação descrita;
- No final do processo, espera-se que o sistema estacione em um estado de energia globalmente mínima, por analogia com a física do problema.

OBS: o método aceita temporariamente soluções piores (pesquisa em todo o espaço de soluções) a fim de escapar de ótimos locais, porém é um método sem memória.

PARÂMETROS

- **Temperatura inicial:** $T_0 = \frac{-\Delta E^+}{\ln(\xi_0)}$

Em que:

ΔE^+ é a média aritmética, para um número randômico de perturbações dos incrementos da função objetivo;

ξ_0 é um valor empírico, aproximadamente igual a 0,8.

- **Decréscimo da temperatura:** $T_i = \alpha T_{i-1}$

Em que:

α : taxa de resfriamento (geralmente 0,9).

- **Número máximo de perturbações por solução.**
- **Número máximo de sucessos (aceitação).**

ALGORITMO (problema de minimização)

Inicialização: S_0 (solução inicial), M (máximo de iterações), V (máximo de vizinhos), L (máximo de sucessos), $S = S_0$, $T = T_0$, iteração = 1

Repita

$i = 1$ (número de soluções vizinhas encontradas), $nsucess = 0$

Repita

Crie uma solução S_{i+1} , vizinha de S_i

Calcule a função objetivo para S_{i+1}

Calcule a probabilidade P de aceitação de nova solução: $P = e^{-\Delta E/T}$

Se $\Delta E = f(S_{i+1}) - f(S_i) \leq 0$ ou $P > rnd$, então

$S = S_{i+1}$ (melhor solução)

$nsucess = nsucess + 1$

fim

$i = i + 1$ (tentativas)

Até $nsucess \geq L$ ou $i > V$

$T = \alpha T$

iteração = iteração + 1

Até $nsucess = 0$ ou iteração $\geq M$

REFERÊNCIAS:

SIQUEIRA, P. H. Metaheurísticas e Aplicações. Parte III – Outras Metaheurísticas. PPGMNE/UFPR. Notas de Aula.

PRATA, B. A. Metaheurísticas – Simulated Annealing. UFCE. Disponível em:
<https://www.youtube.com/watch?v=4VGt0jN73fc>