

Recocido simulado. Simulated annealing

Fernando Tricas, Elvira Mayordomo

Universidad de Zaragoza

8 de diciembre de 2016

También:

- Simulated annealing.
- Enfriamiento simulado.

Algoritmo de búsqueda probabilista meta-heurística para un problema de optimización global.

En algunos procesos metalúrgicos se calienta un material y después se enfría gradualmente de manera controlada, para aumentar el tamaño de los cristales que lo componen y reducir sus defectos.

Si la temperatura es suficientemente alta para asegurar un estado aleatorio y el enfriamiento es suficientemente lento para asegurar el equilibrio térmico los átomos alcanzarán un estado siguiendo un patrón que corresponde al mínimo de energía global para obtener un cristal perfecto.

- Objetivo: minimizar la energía global
- La probabilidad de pasar de un estado s a s' a temperatura $Temp$ es:

$$e^{-\frac{|E(s)-E(s')|}{K_B \cdot Temp}}$$

donde K_B es la constante de Boltzmann.

- **Nótese que es posible aumentar la energía** (aunque poco probable): pasar de s a s' aunque la energía de s' sea mayor que la de s .
- La constante K_B normaliza la probabilidad para que ha temperatura inicial aceptemos prácticamente cualquier transición.

- Se utiliza la analogía del recocido simulado para buscar soluciones de un problema de optimización cualquiera.
- Buscamos minimizar una cierta función de coste (la energía en el caso del recocido).
- Aun así (y en función de la temperatura) aceptaremos movernos a soluciones peores.
- De esa forma evitaremos enquistarnos en óptimos locales.

Recocido simulado

http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/d/d5/Hill_Climbing_with_Simulated_Annealing.gif

- Kirkpatrick, S.; Gelatt Jr, C. D.; Vecchi, M. P. (1983). 'Optimization by Simulated Annealing'. *Science* 220 (4598): 671-680.
doi:10.1126/science.220.4598.671. JSTOR 1690046. PMID 17813860.
- Cerný, V. (1985). 'Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: An efficient simulation algorithm'. *Journal of Optimization Theory and Applications* 45: 41-51.
doi:10.1007/BF00940812.

Adaptación del método del algoritmo Metropolis-Hastings (Montecarlo).

- Metropolis, Nicholas; Rosenbluth, Arianna W.; Rosenbluth, Marshall N.; Teller, Augusta H.; Teller, Edward (1953). 'Equation of State Calculations by Fast Computing Machines'. *The Journal of Chemical Physics* 21 (6): 1087. doi:10.1063/1.1699114.
- Hastings, W.K. (1970). 'Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications'. *Biometrika* 57 (1): 97-109. doi:10.1093/biomet/57.1.97. JSTOR 2334940. Zbl 0219.65008.

- 1 Inicialización. Solución aleatoria. 'Temperatura' muy alta.
- 2 Movimiento. Perturbar la solución con algún tipo de movimiento.
- 3 Evaluar. Calcular la variación de la puntuación (energía).
- 4 Elegir. Dependiendo del resultado de la evaluación aceptar o rechazar. La probabilidad de aceptación depende de la 'temperatura'.
 - ▶ Aceptar una solución mala con probabilidad variante.
- 5 Actualizar y repetir. Reducir el valor de la temperatura. Volver al paso 2 hasta que alcancemos el 'punto de enfriamiento'.

- Si el vecino es mejor, lo elegimos
- Si es peor, lo elegimos con probabilidad¹:

$$e^{\left(-\frac{|E(s)-E(s')|}{K_B \cdot Temp}\right)}$$

¹Distribución de Boltzmann

$$e^{\left(-\frac{|E(s)-E(s')|}{K_B \cdot Temp}\right)}$$

s es el estado actual, s' es el vecino

E es la función objetivo (o alguna medida relacionada).

$$\Delta E = |E(s) - E(s')|$$

$Temp$ disminuye conforme avanza el algoritmo

(Por ejemplo: $Temp \leftarrow Temp * 0,9$).

K_B Constante

- Temperatura alta \rightarrow aceptar casi cualquier vecino (random walk).
- Temperatura baja \rightarrow seguir la dirección de mejora (hill climbing aleatorio).

Cuando la ΔE es grande la probabilidad es baja.

- Temperatura inicial.
- Solución inicial.
- Movimiento (vecindario).
- Planificación (para el enfriamiento).
- Fin:
 - ▶ Número determinado de iteraciones
 - ▶ No ha habido cambios en un número determinado de iteraciones.

Esquema más concreto

SIMULATED-ANNEALING()

```
1  Crear solución inicial  $s$ 
2  Inicializar la temperatura  $Temp$ 
3  repeat
4      for  $i = 1$  to  $numIteraciones$ 
5
6          Generar un  $s'$  vecino aleatorio de  $s$ 
7          if ( $E(s) \geq E(s')$ )
8               $s = s'$ 
9          else
10             if ( $e^{(E(s)-E(s'))/(K_B \cdot Temp)} > random[0, 1)$ )
11                  $s = s'$ 
12             Reducir temperatura  $Temp$ 
13 until (no hay cambios en  $E(s)$ )
14 Resultado  $s$ 
```

Ejemplo

Problema de planificación, $1 \mid d_j \mid \sum w_j \cdot T_j$

jobs	1	2	3	4
p_j	9	9	12	3
d_j	10	8	5	28
w_j	14	12	1	12

Aplicar procedimiento de templado simulado.

T_j retraso.

- Secuencia inicial: 3, 1, 4, 2
- Vecinos: intercambios entre parejas.
 - ▶ Elegir uno aleatoriamente.
- Probabilidad: $t' = 0,9 \cdot t$
 - ▶ $t_0 = 0,9$

De Clifford Stein (Columbia University)

Ejemplo

- $s = 3, 1, 4, 2$
- $E(s) = 1 \cdot 7 + 14 \cdot 11 + 12 \cdot 0 + 12 \cdot 25 = 461$
- $t_0 = 0,9$
- $s_1 = \mathbf{1, 3, 4, 2}$
- $E(s_1) = 316 (< 461), s_{mejor} = s_1$
- $t = 0,9 \cdot 0,9 = 0,81$

Ejemplo

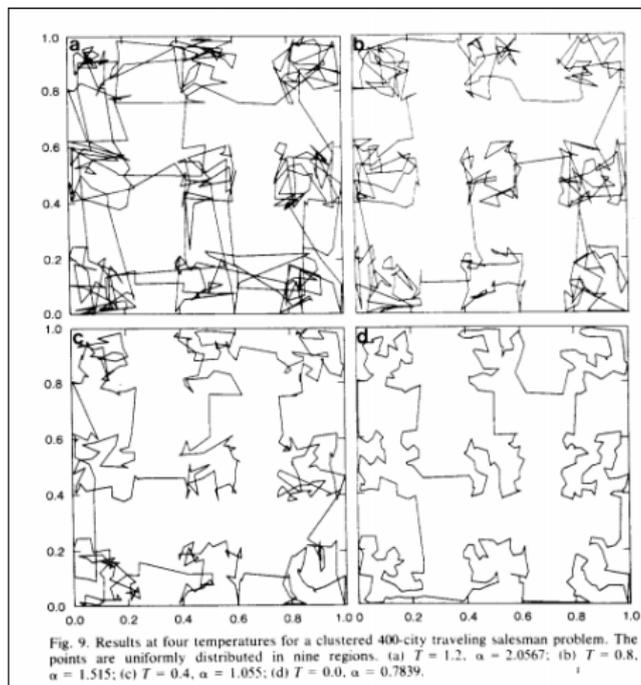
- $s_2 = 1, 3, \mathbf{2}, \mathbf{4}$
- $E(s_2) = 340 (> 316)$
- $U_1 = 0,17$ (entre 0..1, aleatorio) $0,17 > e^{-\frac{340-316}{0,81}} = 1,35 \cdot 10^{-13}$
 - ▶ Se rechaza

Ejemplo

- $s_3 = 1, \mathbf{4}, \mathbf{3}, 2$ (Vecino de $s_1 = 1, 3, 4, 2$)
- $t = 0,81 \cdot 0,9 = 0,729$
- $E(s_3) = 319 (> 316)$
- $U_2 = 0,91 > e^{-\frac{319-316}{0,729}} = 0,16$

Ejemplo

- $s_4 = 1, 4, 3, 2$
- $t = 0,729 \cdot 0,9 = 0,6561$
- ...



Kirkpatrick, S.; Gelatt Jr, C. D.; Vecchi, M. P. (1983). 'Optimization by Simulated Annealing'.

- Temperatura inicial típicamente 1
- Decremento de temperatura: típicamente $Temp = Temp * \alpha$ con $0,8 \leq \alpha \leq 0,99$
- *numIteraciones* (número de iteraciones para cada temperatura) típicamente entre 100 y 1000.
- Crear el esquema de enfriamiento apropiado es un proceso de **prueba y error** tomando diferentes valores de las constantes y comparando resultados.

- El esquema de enfriamiento es importante
- Cuidado con la elección de vecinos (parte realmente importante)
- No mucho soporte teórico
- Fácil de implementar
- Hill climbing primero? (con reinicios aleatorios)

- Evaluar vecinos vs. evaluar cambios
- Evaluación aproximada en lugar de exacta