

Recocido Simulado

2004-02-10

Adenso Díaz (Universidad de Oviedo)

El Recocido Simulado es una de las metaheurísticas más clásicas. Su simplicidad y buenos resultados en numerosos problemas, la han convertido en una herramienta muy popular, con cientos de aplicaciones en los más variados campos. Su fundamentación se basa en el trabajo de Metropolis et al. (1953) en el campo de la termodinámica estadística. Básicamente, Metropolis modeló el proceso de recocido simulando los cambios energéticos en un sistema de partículas conforme decrece la temperatura, hasta que converge a un estado estable (congelado). Las leyes de la termodinámica dicen que a una temperatura t la probabilidad de un incremento energético de magnitud dE se puede aproximar por

$$P[dE] = \exp(-dE/kt) \quad [1]$$

siendo k una constante física denominada de Boltzmann.

A principios de la década de los 80, publicaciones independientes de Kirkpatrick et al. (1983) sobre diseño de circuitos VLSI, y Cerny (1985) para el TSP, mostraron cómo este proceso podría ser aplicado a problemas de optimización, asociando conceptos clave del proceso original de simulación, con elementos de optimización combinatoria.

Por tanto, cualquier implementación de búsqueda local puede convertirse en una implementación RS al elegir elementos del entorno de modo aleatorio, aceptar automáticamente todos los movimientos hacia una mejor solución, y aceptar los movimientos a una solución peor de acuerdo con una probabilidad dada por [1]. La constante de Boltzmann k en general no se considera, debido a que no tiene significado en los problemas de optimización. Podríamos definir un algoritmo básico de Recocido Simulado para problemas de minimización como se indica en la Figura 1.

```
-----
Sea  $f(s)$  el coste de la solución  $s$  y sea  $N(s)$  su entorno.
Seleccionar una solución inicial  $s_0$ ;
Seleccionar una temperatura inicial  $t_0 > 0$ ;
Seleccionar una función de reducción de la temperatura  $\alpha$ ;
Seleccionar un número de iteraciones  $nrep$ ;
Seleccionar un criterio_de_parada;
REPETIR
REPETIR
  Seleccionar aleatoriamente una solución  $s \in N(s_0)$ ;
  Sea  $\Delta = f(s) - f(s_0)$ ;
  SI  $\Delta < 0$  ENTONCES  $s_0 = s$ 
  SINO
    Generar aleatoriamente  $u \in U(0,1)$ ;
    SI  $u < \exp(-\Delta/t)$  ENTONCES  $s_0 = s$ ;
  FINSINO
HASTAQUE cuenta_iteraciones =  $nrep$ 
 $t = \alpha(t)$ ;
HASTAQUE criterio_de_parada = CIERTO.
```

La mejor solución visitada será la solución heurística dada por el algoritmo

FIGURA 1. Algoritmo básico de Recocido Simulado para minimización

El parámetro t es un parámetro de control denominado generalmente temperatura, siguiendo la analogía con el proceso de enfriamiento físico. Una solución que suponga un incremento Δ en la función de coste se aceptará con probabilidad $\exp(-\Delta/t)$. Por tanto, si se permite que t alcance valores suficientemente pequeños, ya no habrá más movimientos a peores soluciones y la convergencia será a un óptimo local.

Varios estudios teóricos demuestran que si t decrece lo suficientemente lento, el proceso converge a la solución óptima. Sin embargo, una función de reducción de la temperatura a que garantizase esa convergencia al óptimo global, requeriría unos tiempos de cálculo prohibitivos. A pesar de todo, muchos trabajos empíricos que se han publicado usando programas de enfriamiento más rápidos demuestran que RS es una heurística eficiente para una gran variedad de problemas combinatorios.

Para poder implementar el algoritmo de la figura 1 para un problema concreto, es preciso tomar una serie de decisiones. Las decisiones genéricas están básicamente relacionadas con los parámetros que dirigen el programa de enfriamiento, incluyendo los valores máximo y mínimo que podrá tomar la temperatura, la velocidad a la que se reducirá y las condiciones de parada.

Dado que uno de los objetivos de cualquier procedimiento robusto de búsqueda es que la calidad de la solución final sea independiente de la solución inicial de la que se parta, la temperatura inicial debería ser independiente de la solución inicial y lo suficientemente alta como para aceptar casi libremente las soluciones del entorno. Por ejemplo, si el mayor incremento entre soluciones vecinas es conocido, sería posible calcular un valor t_0 que aceptase un movimiento con una determinada probabilidad. Cuando este no sea posible, la razón entre movimientos aceptados y rechazados que dé lugar a un estado inicial aceptablemente volátil puede ser fijado de antemano, y entonces el sistema podría ser calentado rápidamente hasta que esa razón alcance el valor deseado. Ese sería entonces el valor elegido t_0 para la temperatura inicial a partir de la cual comenzaría el proceso de recocido.

La velocidad a la que se produce el enfriamiento es otro factor clave en el éxito de la estrategia. Viene determinado por una parte por el número de iteraciones n_{rep} que se ejecutarán a cada temperatura, y por otro por la velocidad a la que se realizará el enfriamiento. La teoría sugiere que se debería permitir que el sistema esté cerca de su estado estacionario correspondiente a la temperatura actual, antes de reducir ésta, y que además la temperatura vaya gradualmente acercándose al valor 0.

En los primeros años del RS se utilizaron diversos programas de enfriamiento,

de los cuales dos son especialmente interesantes. La primera, establecía una velocidad de enfriamiento de la temperatura de tipo geométrico, $t \leftarrow a \times t$, con $a < 1$. Las evidencias empíricas daban a entender que valores elevados de a , con valores entre 0.8 y 0.99 (correspondientes a velocidades lentas de enfriamiento) eran los que mejores resultados proporcionaban. El número de iteraciones en cada temperatura se correspondía generalmente con el tamaño del problema, variando según descendía la temperatura. Por otro lado, es importante dedicar suficiente tiempo de búsqueda a temperaturas bajas para garantizar que se visita el óptimo local (es decir, aumentar el valor n_{rep} según se reduce t).

Según el segundo programa de enfriamiento, propuesto por Lundy y Mees (1986), se ejecuta una sola iteración para cada temperatura, pero por el contrario la temperatura se reduce $\leftarrow t/(1+bt)$, siendo b un valor muy a una velocidad muy lenta según la fórmula t pequeño. La evidencia empírica y los resultados teóricos dan a entender que los detalles concretos del programa de enfriamiento no son tan importantes como la velocidad a la que se reduce la temperatura, y que tanto el programa geométrico como el de Lundy y Mees darán resultados similares cuando el enfriamiento se produzca para el mismo rango de temperaturas y para un número total de iteraciones similares.

Teóricamente, t debería reducirse hasta 0, pero en la práctica la búsqueda converge por lo general a su óptimo local final bastante antes de ese valor nulo de la temperatura. Como se cumple que $\text{Prob}(f(s_0) - f(s_{opt}) \geq \frac{1}{2} S^{1/2} - 1) \times \exp(-e/t)$, siendo S el conjunto de soluciones, a una solución que esté a Lundy y Mees sugieren para llegar con probabilidad q menos de una distancia e del óptimo, parar en el momento en que .

Las decisiones específicas se refieren sobre todo a la definición del espacio de soluciones, la estructura de los entornos y la función de coste, así como a la elección de la solución inicial. Los resultados de Hajek (1988) apoyan la idea de que el modo en que estas decisiones interactúan al definir el ámbito de la búsqueda, tiene un efecto muy significativo en la calidad de la solución final alcanzada. Está generalmente aceptado que la solución inicial s_0 debe ser generada de modo aleatorio.

Algunas de las primeras teorías sobre RS se basaban en entornos uniformes y simétricos, es decir, todos los entornos eran $\hat{I}N(j) \rightarrow j \hat{I}N(i)$. Sin embargo, hoy se sabe que es del mismo tamaño y si i suficiente con exigir el cumplimiento de una condición más suave que exige que cualquier solución pueda alcanzarse desde cualquier otra a través de una cadena de movimientos válidos, usando los entornos.

Los resultados de Hajek (1998) indican que puede no ser una buena idea usar entornos que den lugar a espacios de búsqueda con muchos picos o con grandes y profundos valles. Es también evidente que la función de coste debería guiar la búsqueda hacia buenos mínimos locales, y que las grandes llanuras en las que todas las soluciones del entorno tienen el mismo valor,

deberían ser evitadas.

Al igual que con espacios de soluciones reducidos, hay ventajas al considerar entornos razonablemente reducidos, que aseguren que la búsqueda no converja hacia óptimos locales a temperaturas bajas. Sin embargo, esto debe ser compensado con la facilidad que permiten los grandes entornos de que se produzcan mejoras importantes en un movimiento simple, y de facilitar rápidos movimientos de un área a otra del espacio de búsqueda. La evidencia empírica en un gran número de problemas parece indicar que las preferencias entre entornos pequeños y grandes son dependientes de cada problema.

El lector puede encontrar en castellano distintas aplicaciones y más detalles en la implementación de Recocido Simulado, en Dowsland y Díaz (2003).

Bibliografía

Cerny, V.: A thermodynamical approach to the travelling salesman problem: an efficient simulation algorithm. *J. of Optimization Theory and Applic.*, 45: 41-55, 1985.

Dowsland, K. A., Díaz, A. (2003) "Diseño de Heurísticas y Fundamentos del Recocido Simulado", *Inteligencia Artificial*, vol. 2, no. 19. (<http://sensei.ieec.uned.es/cgi-bin/aeia/contenidoNum.pl?numero=19>)

Hajek, B.: Cooling schedules for optimal annealing. *Mathematics of Operations Research.*, 13: 311-329, 1988.

Kirkpatrick, S., Gelatt, C.D., Vecchi, M.P.: Optimization by simulated annealing. *Science*, 220: 671-680, 1983.

Lundy, M., Mees, A.: Convergence of an annealing algorithm. *Math. Prog.* 34: 111-124, 1986.

Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H., Teller, E.: Equation of state calculation by fast computing machines. *Journal of Chemistry Physics*, 21: 1087-1091, 1953.