

Cálculo del Mínimo Global de una Función empleando el Método de Optimización Global “Simulated Annealing”

Nota de Divulgación

M.C. Francisco Sánchez Mares
 Departamento de Ciencias Básicas
 Instituto Tecnológico de Aguascalientes
 fsanchez96@hotmail.com

Av. López Mateos 1801 Ote., Esq. Av. Tecnológico Aguascalientes, Ags.,
 Tel. 9105002 Ext. 103 fax (0149) 700423 C.P.20256

Resumen

El presente trabajo muestra la aplicación del método de optimización global Simulated Annealing (SA). Esta técnica ha sido aplicada en diversas áreas de la ingeniería como una estrategia robusta y versátil para calcular con éxito el mínimo global de una función o un sistema de funciones. Para probar la eficiencia del método se encontraron los mínimos globales de una función arbitraria y se evaluó el comportamiento numérico del Simulated Annealing durante la convergencia a las dos soluciones que presenta el caso de estudio.

Palabras Clave

Estrategia robusta, Simulated Annealing, mínimo global.

Introducción

El método de optimización global conocido como Simulated Annealing (recocido simulado) simula el enfriamiento lento de un sistema físico, el cual asocia una función de costo a una temperatura T . El método Simulated Annealing trabaja iterativamente proponiendo cambios de estado y los acepta o rechaza de acuerdo al criterio de Metropolis (Metropolis y col., 1953). En general el algoritmo trabaja de la siguiente forma: se propone un cambio de estado y se evalúa el costo; este cambio propuesto puede ser rechazado o aceptado; si la función de costo decrece, el cambio es aceptado sin ninguna condición; en caso contrario este cambio es aceptado pero con una cierta probabilidad.

Fundamentos teóricos

La función principal del Simulated Annealing es encontrar la configuración mínima de un problema de optimización global. Inicialmente se fija una temperatura inicial alta T (en la simulación T sólo es un parámetro que controla la aleatoriedad; no es una temperatura física). Luego se propone un valor

aleatorio, comprendido entre un límite superior y un límite inferior entre los cuales se supone que se encuentra el óptimo global de la función. Posteriormente se calcula la respuesta que tiene el sistema para este valor inicial, E_a (Energía del sistema); y se recalculará la respuesta E_b , para un nuevo valor candidato. Si este nuevo valor propuesto tiene una respuesta mínima entonces se acepta el cambio de estado. Por otra parte si la respuesta es alta, se acepta el cambio con una probabilidad igual a:

$$e^{\frac{-\Delta E_{ab}}{T}} \quad [1]$$

donde $\Delta E_{ab} = E_b - E_a$.

Esta aceptación ocasional de un estado, que es energéticamente menos favorable, es crucial, para el éxito de Simulated Annealing. El principal beneficio de esto es que permite al sistema saltar de un mínimo local no aceptable.

Después de la normalización de una función de partición, cada configuración será igualmente probable. El algoritmo continúa seleccionando y probando los valores aleatoriamente varias veces, y asignando sus estados en esta forma. Luego la temperatura comienza a decrecer y el proceso continúa repitiéndose.

De acuerdo a la expresión [1], existirá una probabilidad muy pequeña de que un estado candidato con una respuesta alta sea aceptado. El algoritmo selecciona y prueba todos los posibles mínimos globales, hasta que cada uno de ellos haya sido comparado varias veces.

En temperaturas muy bajas la probabilidad de que un estado energéticamente menos favorable sea aceptado, es pequeña. Simulated Annealing termina cuando la temperatura es muy baja, cercana a cero.

Si el proceso de enfriamiento fue lo suficientemente lento, el sistema tendrá una alta probabilidad de encontrarse en el mínimo global (estado de baja energía). La Figura 1 es la representación esquemática del principio del

Simulated Annealing. En la gráfica se puede apreciar la habilidad que tiene el Simulated Annealing de poder salir de mínimos locales para llegar al mínimo global.

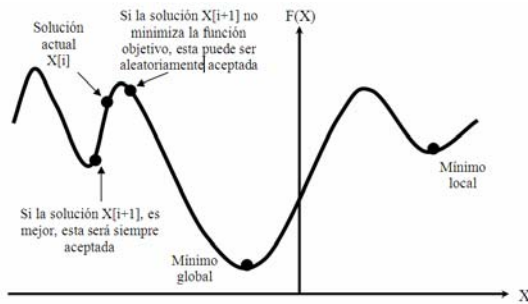


Figura 1. Principio del Simulated Annealing.

En la práctica el algoritmo es lento y requiere muchas iteraciones y pasar varias veces a través de todos los valores que pueden representar un óptimo global. Debido a que el algoritmo selecciona y prueba los valores uno por uno, el algoritmo también se conoce como *Sequential Simulated Annealing*.

El Simulated Annealing está compuesto por varios parámetros de optimización que pueden ser modificados según la complejidad de la función a evaluar. Por tanto, los parámetros del Simulated Annealing pueden ser acondicionados para cada función con el fin de favorecer la convergencia a la solución. La Tabla 1 presenta los parámetros de optimización que emplea el algoritmo del Simulated Annealing y que pueden ser modificados dependiendo de la función a optimizar.

Tabla 1. Cédula estándar de enfriamiento del algoritmo Simulated Annealing (Justo-García y García-Sánchez, 2005).

Parámetro	Descripción
T	Temperatura inicial del Simulated Annealing.
R_T	Factor de reducción de la temperatura.
NT	Máximo número de iteraciones antes de reducir la temperatura.
NS	Máximo número de ciclos externos.

Materiales y métodos

El programa se implementó en el lenguaje de programación FORTRAN empleando la subrutina proporcionada por W. L. Goffe (1994). El criterio de paro utilizado fue $1.0E-6$ y la cédula de enfriamiento utilizada fue $T = 1000$, $RT = 0.85$, $NT = 20$ y $NS = 20$. La función a evaluar seleccionada de manera arbitraria,

y conociendo con anterioridad que dicha función presentaba dos mínimos globales fue la siguiente:

$$F(x, y) = \sum_{i=1}^{20} [x + (yz_1) + (y^2 z_2) - z_3]^2 \quad [2]$$

donde x e y son las incógnitas a determinar. Los valores de z_1 , z_2 y z_3 se presentan en la Tabla 2.

Tabla 2. Valores de z_1 , z_2 y z_3 empleados en la Ecuación [2].

No.	z_1	z_2	z_3
1	0.286	0.645	4.284
2	0.973	0.585	4.149
3	0.384	0.31	3.877
4	0.276	0.058	0.533
5	0.973	0.455	2.211
6	0.543	0.779	2.389
7	0.957	0.259	2.145
8	0.948	0.202	3.231
9	0.543	0.028	1.998
10	0.797	0.099	1.379
11	0.936	0.142	2.106
12	0.889	0.296	1.428
13	0.006	0.175	1.011
14	0.828	0.18	2.179
15	0.399	0.842	2.858
16	0.617	0.039	1.388
17	0.939	0.103	1.651
18	0.784	0.62	1.593
19	0.072	0.158	1.046
20	0.889	0.704	2.152

La función evaluada presentó dos mínimos globales. Para encontrar los primeros valores óptimos (x, y) , los límites inferior y superior se establecieron de la siguiente forma: $x \in [0, 10]$ y $y \in [0, 10]$ y la estimación inicial de x e y fue: $x_0 = 5$ e $y_0 = 5$. Mientras que para encontrar el otro mínimo global se utilizaron los límites $x \in [0, 10]$ e $y \in [-10, 0]$ y la inicialización de las dos variables fue $x_0 = 1$ e $y_0 = -1$.

Resultados y discusión

La función evaluada presentó dos mínimos globales, para los cuales el Simulated Annealing no tuvo problemas de convergencia. Para el caso de esta función los parámetros empleados fueron adecuados. En la Tabla 3 se presentan los dos mínimos globales obtenidos para x e y , el número de funciones evaluadas por el método Simulated Annealing antes de converger ($NFEV$), el tiempo de cómputo t que tardó antes de llegar al resultado esperado y el valor mínimo de la función (VMF).

Tabla 3. Resultados obtenidos con el método Simulated Annealing

x	y	NFEV	t (seg.)	VMF
0.86479	1.2358	105,601	21	16.08173
2.4986	-0.98260	106,401	23	20.48233

Para esta función evaluada se registró el comportamiento numérico de las variables x e y durante la convergencia del método Simulated Annealing en el cálculo del mínimo global $x = 0.86479$ e $y = 1.2358$ (ver Figuras 2 y 3). En estas gráficas se pueden observar oscilaciones significativas al inicio debido a que el método propone valores que están muy lejanos de la solución (siempre dentro de los límites de búsqueda). Conforme avanza la optimización de la función, las oscilaciones comienzan a disminuir pero nunca dejarán de presentarse. Incluso ya estando el método muy cercano a la solución.

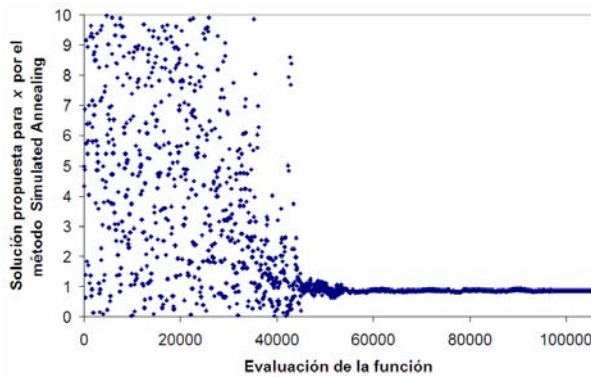


Figura 2. Comportamiento numérico de x durante la convergencia del método Simulated Annealing.

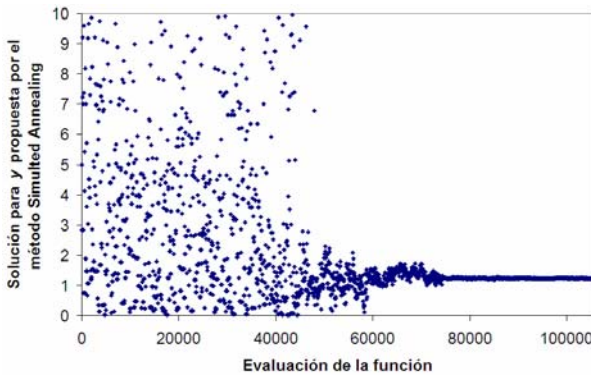


Figura 3. Comportamiento numérico de y durante la convergencia del método Simulated Annealing.

Para verificar los dos mínimos globales encontrados, se graficó el comportamiento de la función. Las Figuras 4 y 5 muestran la gráfica para el mínimo global $x = 0.86479$ e $y = 1.2358$, mientras que las Figuras 6 y 7 esquematizan para $x = 2.4986$ e $y = -0.98260$.

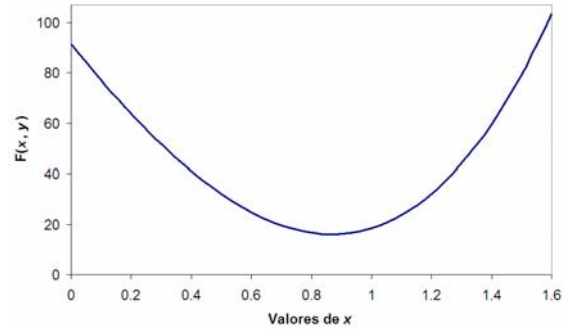


Figura 4. Comportamiento de la función para el mínimo global $x = 0.86479$ e $y = 1.2358$.

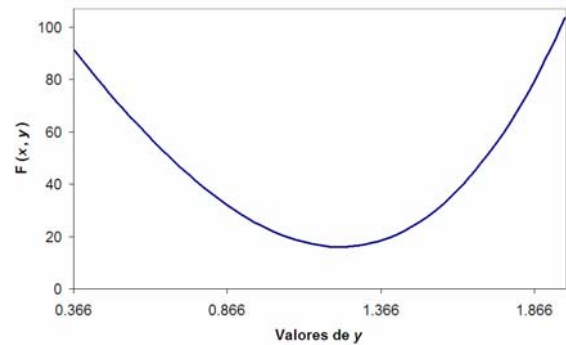


Figura 5. Comportamiento de la función para el mínimo global $x = 0.86479$ e $y = 1.2358$.

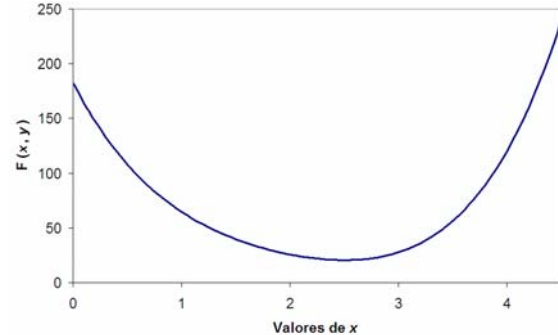


Figura 6. Comportamiento de la función para el mínimo global $x = 2.4986$ e $y = -0.98260$.

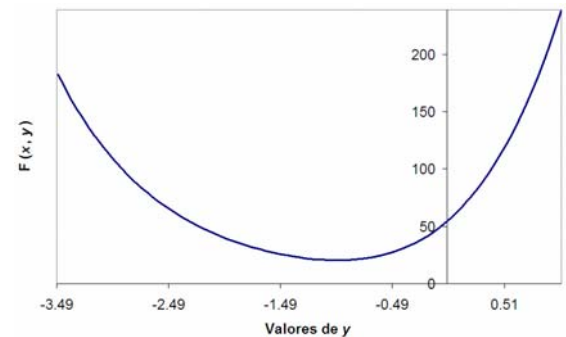


Figura 7. Comportamiento de la función para el mínimo global $x = 2.4986$ e $y = -0.98260$.

En las Figuras 4-7 se puede observar que la función evaluada tiene dos mínimos globales perfectamente delimitados. Por tanto, el método Simulated Annealing ha efectuado una predicción eficiente de los dos valores óptimos que minimizan a la función estudiada.

Conclusiones

El método de optimización global Simulated Annealing puede ser empleado para minimizar diversas funciones utilizadas en diversas áreas de la ingeniería.

La principal ventaja que presenta el método es su robustez, es decir no depende de las estimaciones iniciales como lo hacen los métodos de convergencia local, como es el caso del método de Newton-Raphson.

Según la complejidad de la función a minimizar, los parámetros de la cédula de enfriamiento se tienen que modificar para favorecer la convergencia del método. Por tanto, no es lo mismo minimizar una función utilizada en economía que una empleada en ingeniería química.

Referencias

- [1] Corana A., Marchesi M., Martini C. y Ridella, S. (1987); "Minimizing multimodal functions of continuous variables with the 'Simulated Annealing algorithm'". *ACM Trans. Math. Software* (vol. 13, pág. 262).
- [3] Goffe W.L., Ferrier G. D. y Rogers, J. Global (1994); "Optimization of statistical functions with Simulated Annealing". *J. Econometrics* (vol. 60, pág. 65).
- [4] Henderson N., Freitas L. y Platt M. G. (2004); "Prediction of critical points: a new methodology using global optimization". *AIChE J.* (vol. 50, pág. 1300).
- [5] Justo-García D. N y García-Sánchez F. (2005). "Cálculo de puntos críticos de sistemas multicomponentes utilizando optimización global". *XX Congreso Nacional de Termodinámica*; Apizaco, Tlaxcala.
- [6] Metropolis N., Rosenbluth A., Rosenbluth M., Teller A., Teller E. (1953). "Equation of state calculations by fast computing machines". *J. Chem. Phys.* , (vol. 21, pág. 1087).