

A TERMODINÂMICA COMO ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO THERMODYNAMICS AS AN OPTIMIZATION ALGORITHM

Ariane Cristina Fernandes Reis¹
IFPA Campus Ananindeua/arianecfr@gmail.com

Adriane Cristina Fernandes Reis²
IFPA Campus Ananindeua/adriane.fr22@gmail.com

Taís Tavares Chagas³
IFPA Campus Ananindeua/taiscardoso366@gmail.com

Thiago dos Santos Miranda⁴
IFPA Campus Ananindeua/thiago45thiago@yahoo.com

Lucas Oliveira Reis⁵
IFPA Campus Ananindeua/reis.lor22@gmail.com

Orientador - Denis Carlos Lima Costa⁶
IFPA Campus Ananindeua/denis.costa@ifpa.edu.br

Modalidade: Pesquisa

RESUMO: O *Simulated Annealing* é fundamentado nas Leis da Termodinâmica e determina a menor energia à transferência de Calor. As transições de Temperatura ocorrem para baixas energias, permitindo encontrar o valor ótimo no espaço de soluções. Esse artigo fundamenta-se nessas premissas para estipular a melhor distribuição de Temperatura em uma superfície, utilizando para isso um sistema meta heurístico.

Palavras-chave: Otimização – Arrefecimento Simulado – Energia – Matemática - Física

1 - INTRODUÇÃO

O *Simulated Annealing* (SA) é um método probabilístico apresentado por Kirkpatrick, Gelett e Vecchi, em 1983 e complementado por Cerny, em 1985. O mecanismo dedica-se a encontrar o valor mínimo global de uma função custo, que poderá apresentar mais de um mínimo local. O funcionamento ocorre emulando o processo térmico pelo qual um sólido é resfriado lentamente para que, quando eventualmente sua estrutura estiver congelada, isso aconteça em uma estrutura de energia mínima (Bertsimas, 1993).

Para Moriguchi et al (2015), durante as transições de energia, a variação da temperatura indica estados diferentes de Entropia e isto permite encontrar o valor ótimo global em um amplo espaço de soluções.

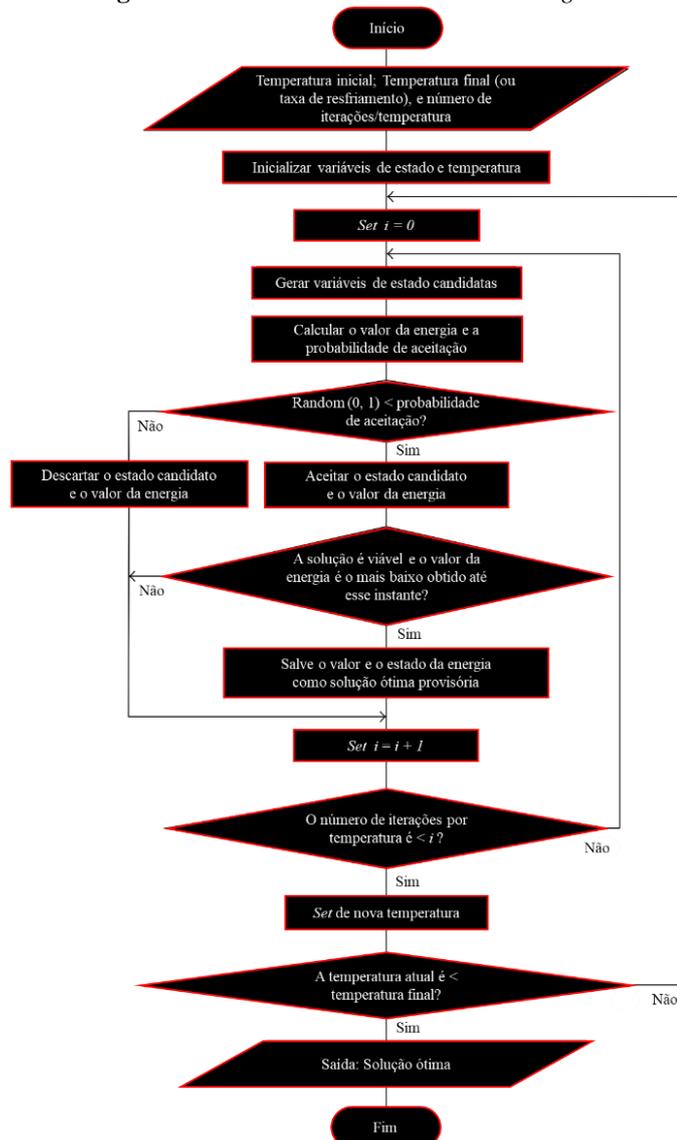
A técnica avalia que, a redução da temperatura diminui a frequência das transições entre estados mais altos de energia. Dessa forma, o sistema tende a fazer a transição para um estado

de energia mais baixa e com mais frequência. Interpretando, matematicamente, o procedimento, é possível encontrar heurísticamente, com satisfatória acurácia e precisão, os valores ótimos de um modelo matemático.

2 - METODOLOGIA

O SA é um método adaptável que requer quatro componentes: (1) uma função de resfriamento, que controla a taxa de diminuição da temperatura; (2) uma proposta função de densidade, que é uma função de distribuição de probabilidade que gera variáveis candidatas, ou seja, desbaste cotações; (3) uma função energética, que é o meta objetivo da função a ser minimizada; e (4) uma probabilidade de aceitação, ou seja, uma função de distribuição de probabilidade dependente da temperatura, que decide se o estado proposto é satisfatório. A Figura 1, representa o fluxograma do algoritmo.

Figura 1: Dinâmica do *Simulated Annealing*



Fonte: Adaptado de Moriguchi et al (2015).

A Figura 2 descreve o modelo Matemático-Computacional, que poderá ser executado em Linguagem MATLAB/OCTAVE. O comando *meshgrid* foi aplicado para gerar uma estrutura em 3 dimensões. O espaço de busca foi delimitado no intervalo operacional, representado por

$$x = [-3; 3] \text{ e } y = [-3; 3]$$

O Conjunto dos valores iniciais, V_0 , utilizado na busca da Temperatura ótima, está representado por

$$x_0 = [1; -1].$$

Figura 2: Código-fonte do *Simulated Annealing*

```

1  clc;
2  disp('=====')
3  disp('V SIEPEX - Semana Integrada de Ensino, Pesquisa e Extensão - 2023')
4  disp('Bacharelado em Ciência & Tecnologia ')
5  disp('Algoritmo de Arrefecimento Simulado')
6  disp('Autoras e Autores: ')
7  disp('Adriane Reis, Ariane Reis, Lucas Reis, Taís Chagas, Thiago Miranda')
8  disp('=====')
9  % Espaço de observações
10 x1=[-3:0.1:3]; y1=[-3:0.1:3];
11 [X,Y]=meshgrid(x1,y1);
12 % Modelo Matemático da Distribuição da Temperatura
13 Z = (2*X.^2+Y.^2)*exp(1-X.^2-Y.^2);
14 % Representação Gráfica do Modelo
15 meshc(X,Y,Z)
16 xlabel('x (m)')
17 ylabel('y (m)')
18 zlabel('T (°C)')
19 pause
20 % Processo de Otimização
21 options = optimoptions('simulannealbnd','PlotFcns',...
22     {@saplotbestx,@saplotbestf,@saplotx,@saplotf});
23 rng default % For reproducibility
24 fun = @(x) -1*((2*x(1)^2+x(2)^2)*exp(1-x(1)^2-x(2)^2));
25 x0 = [1,-1]; lb = [-3,-3]; ub = [3,3];
26 [x,fval,exitflag,output] = simulannealbnd(fun,x0,lb,ub,options)

```

Fonte: Autoras(es).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nessa seção foram aplicados os princípios do *Simulated Annealing* com o objetivo de encontrar as coordenadas (x,y) que definem o ponto em que a Temperatura (em °C) é ótima. A distribuição da Temperatura, sobre uma superfície S , está definida pela Equação (1), como apresentado no trabalho de Larwa e Kupiec (2019).

$$T(x, y) = (2x^2 + y^2). e^{1-[x^2+y^2]} \quad (1)$$

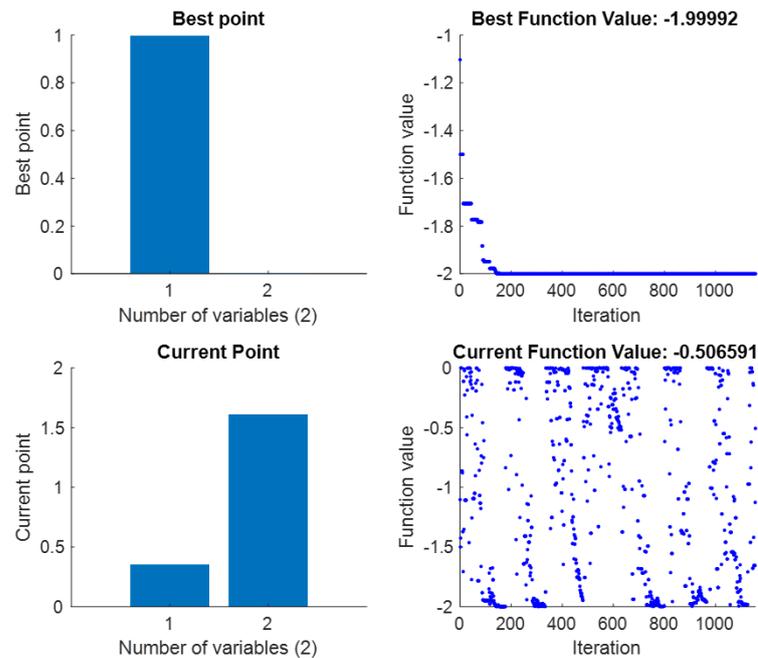
Os valores ótimos encontrados são:

$$x = 0.9956 \text{ m}; y = 0.0015 \text{ m}; T = -1.9999 \text{ }^\circ\text{C}$$

Foram realizadas 1156 iterações. Tempo médio para execução do algoritmo, 59.0618 segundos.

A Figura 3 destaca o comportamento do *Simulated Annealing* durante a execução computacional em linguagem MATLAB/OCTAVE.

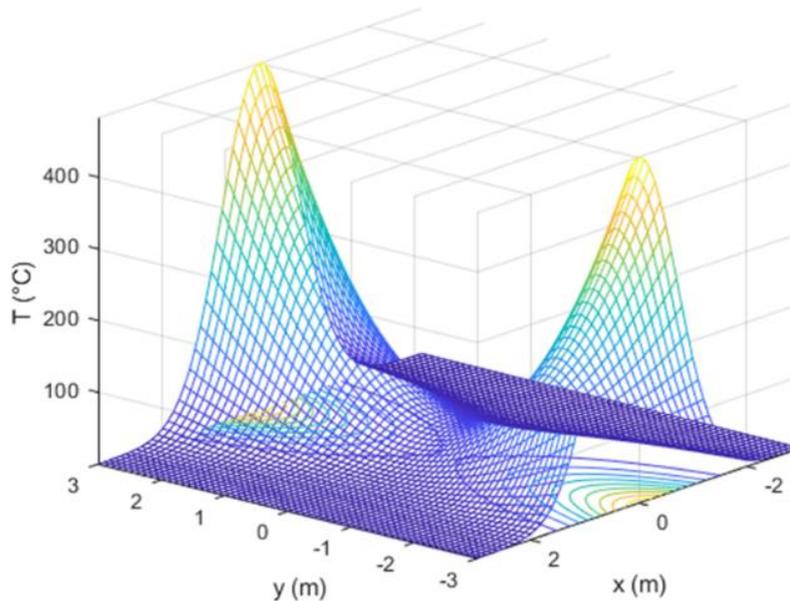
Figura 3: Execução Computacional



Fonte: Autoras(es).

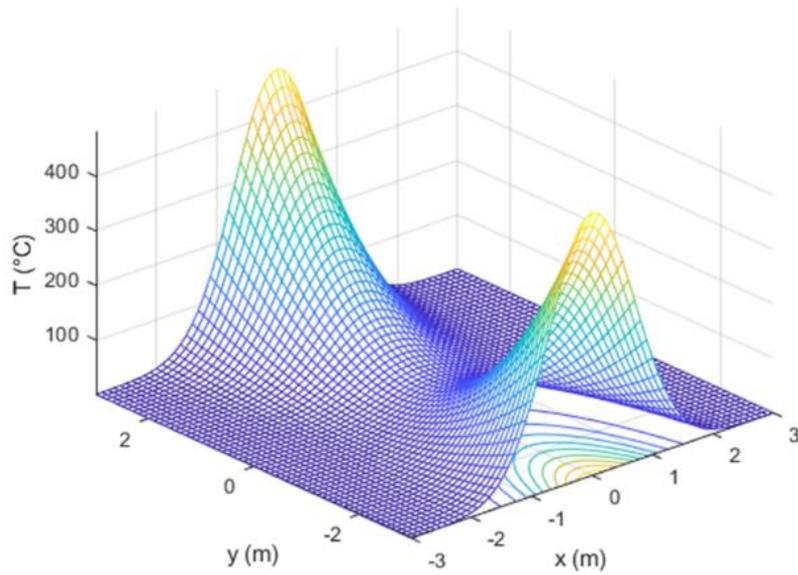
As Figuras 4, 5 e 6 mostram o comportamento da Distribuição da Temperatura, em diferentes perspectivas.

Figura 4: Distribuição da Temperatura - 01



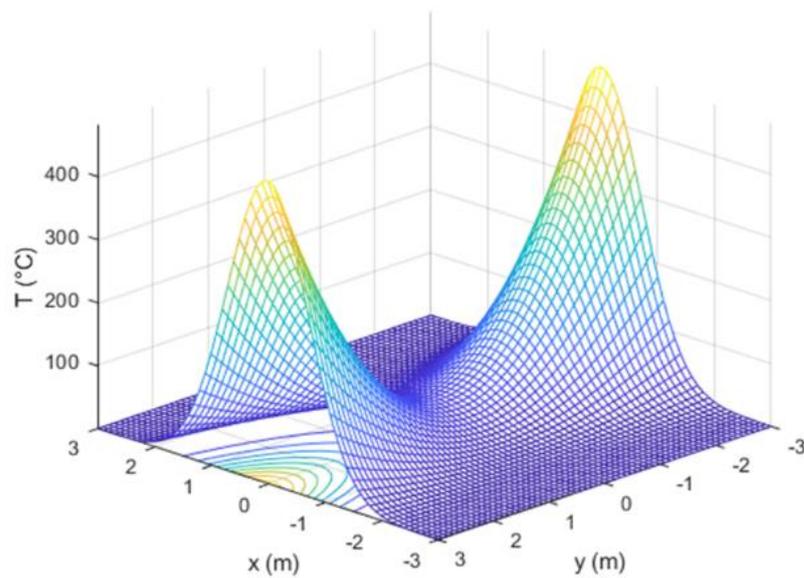
Fonte: Autoras(es).

Figura 5: Distribuição da Temperatura – 02



Fonte: Autoras(es).

Figura 6: Distribuição da Temperatura - 03



Fonte: Autoras(es).

CONCLUSÃO

A estratégia de otimização *Simulated Annealing* é, comprovadamente, estável e confiável. Para aplicações, em uma função Transcendente de múltiplas variáveis, o algoritmo demonstrou excelentes níveis de precisão e acurácia. Para futuros trabalhos serão inseridos, à modelagem, condições de contorno e restrições do sistema termodinâmico.

REFERENCIAL BIBLIOGRÁFICO

BERTSIMAS, Dimitris; TSITSIKLIS, John. Simulated Annealing. *Statist. Sci.* Institute of Mathematical Statistics. <https://doi.org/10.1214/ss/1177011077>. 1993.

BORGES, P.; EID, T.; BERGSENG, E. Applying simulated anneal using different methods for the neighborhood search in forest planning problems. *European Journal of Operational Research*. 2014.

LARWA, Barbara; KUPIEC, Krzysztof. Study of Temperature Distribution in the Ground. *Chemical and Process Engineering*. DOI: 10.24425/cpe.2019.126106. <http://journals.pan.pl/dlibra/journal/98834>. 2019.

MORIGUCHI, Kai; UEKI, Tatsuhito; SAITO, Masashi. An Evaluation of the use of Simulated Annealing to Optimize Thinning Rates for Single Even-Aged Stands. *International Journal of Forestry Research*. <http://dx.doi.org/10.1155/2015/173042>. 2015.

AGRADECIMENTOS

Aos Docentes e Discentes do Bacharelado em Ciência e Tecnologia, que executam com maestria o processo de ensino-aprendizagem.

Ao Grupo de Pesquisa Gradiente de Modelagem Matemática e Simulação Computacional - GM²SC, por possibilitar e incentivar a curiosidade e a investigação.