

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ciencias y Humanidades

Departamento de Física

**SOLUCIÓN DEL PROBLEMA DE LA
BRAQUISTÓCRONA, MEDIANTE UN
ALGORITMO DE SOBRECALENTAMIENTO
SIMULADO**

Antonio René Hernández Cordero

Guatemala

1999

**SOLUCIÓN DEL PROBLEMA DE LA
BRAQUISTÓCRONA, MEDIANTE UN
ALGORITMO DE SOBRECALENTAMIENTO
SIMULADO**

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ciencias y Humanidades

Departamento de Física

**SOLUCIÓN DEL PROBLEMA DE LA
BRAQUISTÓCRONA, MEDIANTE UN
ALGORITMO DE SOBRECALENTAMIENTO
SIMULADO**

Antonio René Hernández Cordero

Trabajo de graduación presentado para optar al grado académico de

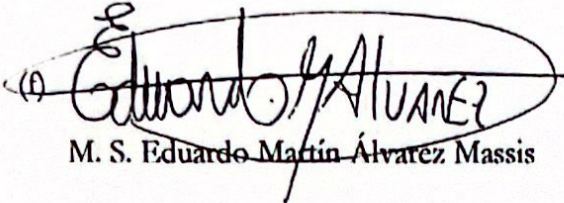
Licenciado en Física

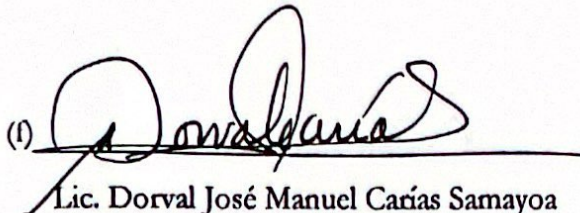
Guatemala

1999

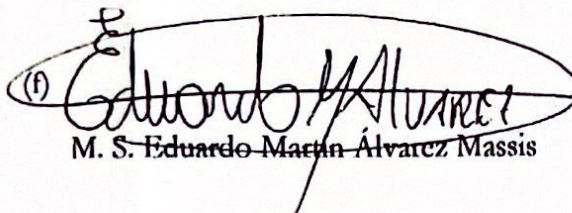


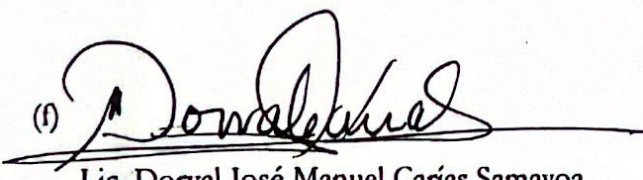
Vo. Bo. :

(f) 
M. S. Eduardo Martín Álvarez Massis

(f) 
Lic. Dorval José Manuel Carías Samayoa

Tribunal:

(f) 
M. S. Eduardo Martín Álvarez Massis

(f) 
Lic. Dorval José Manuel Carías Samayoa

(f) 
Lic. Víctor Marcelino Cortez Pineda

A mis padres, Felipe Antonio y Berta Alicia

RESUMEN

Se presenta una solución numérica del problema de la braquistócrona al utilizar un algoritmo de sobrecalentamiento simulado. Para ello, se desarrolló una aproximación discreta de las curvas que representan posibles trayectorias de una partícula entre los puntos inicial y final; se determinó una función discreta que depende de estas curvas y que aproxima el tiempo de recorrido de la trayectoria por parte de la partícula; y por último, se desarrolló un algoritmo de sobrecalentamiento simulado para minimizar dicha función.

El algoritmo de sobrecalentamiento simulado es un algoritmo para optimización combinatorial en el cual se simula el proceso de sobrecalentamiento, en el cual un material es llevado a altas temperaturas y luego enfriado lentamente, de tal forma que se considera que siempre está en equilibrio térmico. Debido a esto, se espera que la mayoría de las moléculas que conforman el material se encuentren en su estado de menor energía. En la simulación, el valor de la función representa la energía y se obtiene la solución al problema de minimización planteado.

El algoritmo se implementó en MATLAB[®]¹ y se realizaron varias corridas al utilizar distintos parámetros que afectaban la rapidez de enfriamiento, obteniéndose curvas discretas de once puntos, como soluciones numéricas para el problema planteado. Se compararon los resultados según su rapidez de convergencia, la probabilidad de aceptación de soluciones a lo largo de la ejecución del programa, y también se compararon los resultados con los obtenidos con un algoritmo que utilizaba el método de Montecarlo, del cual se deriva el método de sobrecalentamiento simulado.

¹ MATLAB[®] es una marca registrada por The Mathworks, Inc.

ÍNDICE

Resumen	xi
Índice.....	xiii
Índice de gráficas y tablas	xvii
I. Introducción.....	1
II. El Problema de la Braquistócrona.....	5
A. Planteamiento.....	5
B. Solución Analítica del Caso de un Potencial Constante	6
III. Física Estadística del Sobrecalentamiento	9
A. Naturaleza de la Física Estadística	9
B. Mecánica Estadística Clásica.....	10
1 Teorema H para Sistemas en Equilibrio.....	12
2 Ensamble Canónico.....	12
3 Otros Ensamblés.....	13
4 Distribución de probabilidades de la energía.....	14
5 Sistemas Discretos y Mecánica Estadística Clásica.....	15
C. Sobrecalentamiento (Annealing).....	17
IV. Optimización Combinacional y el Método de Sobrecalentamiento Simulado.....	19
A. Optimización Combinacional.....	19
B. Método de Sobrecalentamiento Simulado	20
1 Programas de Enfriamiento.....	22
a. Elección de la Temperatura Inicial.....	22
b. Criterios para el descenso de la temperatura.....	23
c. Criterios de Equilibrio Térmico.....	25
V. Implementación del Algoritmo de Sobrecalentamiento Simulado para el	

Problema de la Braquistócrona.....	27
A. Discretización de las Curvas	27
B. Definición del Problema de Optimización a Solucionar Numéricamente.....	30
C. Cambio en la Configuración del Sistema Termodinámico	31
D. Algoritmo Utilizado	31
E. Implementación en MATLAB®	35
VI. Resultados	37
A. Solución Numérica Para una Curva de Once Puntos.....	37
1 Solución a Comparar	37
2 Presentación de los Resultados.....	37
3 Primera corrida	38
4 Segunda corrida	40
5 Tercera Corrida.....	44
6 Cuarta Corrida	46
7 Quinta Corrida.....	48
8 Sexta Corrida.....	51
9 Una Corrida del Método de Montecarlo.....	53
10 Comparación de los Resultados de las Distintas Corridas del Método de Sobrecalentamiento Simulado	57
a. Aceptación de Soluciones.....	57
b. Enfriamiento	57
11 Comparación de las soluciones numéricas de la función objetivo	57
VII. Conclusiones	63
VIII. Bibliografía.....	65
Apéndice A: Código Utilizado.....	67

1. Método de Sobrecalentamiento Simulado	67
2. Método de Montecarlo.....	69

LISTA DE TABLAS Y GRÁFICAS

TABLAS

Tabla 6.1 Resultados para una curva de once puntos, primera corrida	39
Tabla 6.2 Resultados para una curva de once puntos, segunda corrida	43
Tabla 6.3 Resultados para una curva de once puntos, tercera corrida	44
Tabla 6.4 Resultados para una curva de once puntos, cuarta corrida	46
Tabla 6.5 Resultados para una curva de once puntos, quinta corrida	49
Tabla 6.6 Resultados para una curva de once puntos, sexta corrida	52
Tabla 6.7 Resultados para una curva de once puntos, método de Montecarlo	55

FIGURAS

Figura 1.1 Trayectoria posible entre dos puntos	6
Figura 4.1 Discretización de una trayectoria en siete puntos, donde $(x_0, y_0) = (0,0)$ y $(x_7, y_7) = (a, b)$	28
Figura 4.2 Trayectoria entre (x_{i-1}, y_{i-1}) y (x_i, y_i) en la curva discretizada	28
Figura 4.3 Diagrama de flujo del algoritmo utilizado	36

GRÁFICAS

Gráfica 6.1 Solución numérica para una curva de once puntos, primera corrida	42
Gráfica 6.2 Número de soluciones aceptadas contra número de iteraciones, primeras tres corridas	43
Gráfica 6.3 Solución numérica para una curva de once puntos., segunda corrida	44
Gráfica 6.4 Solución numérica para una curva de once puntos., tercera corrida	47
Gráfica 6.5 Solución numérica para una curva de once puntos., cuarta corrida	49
Gráfica 6.6 Número de soluciones aceptadas contra número de iteraciones, cuarta y quinta	

corridas	52
Gráfica 6.7 Solución numérica para una curva de once puntos., quinta corrida	53
Gráfica 6.8 Solución numérica para una curva de once puntos., sexta corrida	55
Gráfica 6.9 Número de soluciones aceptadas contra número de iteraciones, sexta corrida ..	56
Gráfica 6.10 Solución numérica para una curva de once puntos, método de Montecarlo	56
Gráfica 6.11 Número de soluciones aceptadas contra número de iteraciones, método de Montecarlo	58
Gráfica 6.12 Número de soluciones aceptadas contra número de iteraciones	60
Gráfica 6.13 Temperatura contra número de iteraciones	61
Gráfica 6.14 t mínimo contra número de iteraciones	63
Gráfica 6.15 t mínimo contra número de iteraciones	64

I. INTRODUCCIÓN

La braquistócrona es uno de los problemas que surgen en mecánica que resulta de la minimización de un funcional, el cual depende del estado del sistema. Algunos de estos problemas y su solución resultan en principios variacionales, tales como el principio de Hamilton y el principio de Fermat¹. El funcional que hay que minimizar para el problema de la braquistócrona es el tiempo que toma una partícula en recorrer una trayectoria entre dos puntos fijos bajo la acción de un potencial dado.

En el presente trabajo se tiene como objetivo solucionar numéricamente el problema de la braquistócrona al utilizar un algoritmo de sobrecalentamiento simulado.

El algoritmo de sobrecalentamiento simulado es una modificación del método de Montecarlo. El método de Montecarlo para optimización consiste en seleccionar aleatoriamente un estado (cerca del estado que se considera como la solución actual) y probar el valor de la función objetivo (en este caso el funcional a minimizar) en dicho estado; si la función objetivo tiene un valor menor en este estado de prueba que en el estado de la solución actual, se toma como nueva solución al estado que estaba a prueba.

El método de sobrecalentamiento simulado introduce en el algoritmo la condición de Metropolis, con la cual se permite aceptar estados en los que el valor de la función objetivo es mayor que en el estado de la solución actual, donde la aceptación del nuevo estado depende de una función de distribución de probabilidad de Boltzmann y Maxwell.

Esta función de distribución de probabilidades de Boltzmann y Maxwell es una función que rige el comportamiento de sistemas en equilibrio termodinámico a una temperatura T : el sistema está en un estado cuya energía es el valor esperado de una

¹ En YOURGRAU y MANDELSTAM, 1968, se exponen distintos principios variacionales y sus orígenes conceptuales, al examinar su relación con la mecánica, la electrodinámica y la teoría cuántica

distribución de probabilidades que depende de la energía E de un estado o configuración posible del sistema. Esta distribución es de la forma $\exp(-E/kT)$ donde k es la constante de Boltzmann. Esta función otorga una mayor probabilidad a los estados que tienen una menor valor de energía, según la temperatura del sistema. A una alta temperatura, la probabilidad de estar en un estado de energía alta no es despreciable, pero a una baja, sí.

Metropolis² utilizó la distribución de Boltzmann y Maxwell para hacer muestreos de estados y poder calcular ecuaciones de estado en mecánica estadística. Kirkpatrick, Gelatt y Vecchi³ aplicaron después la idea para la optimización, haciendo una simulación del sobrecalentamiento. En el sobrecalentamiento, un sistema es llevado a una alta temperatura y es enfriado muy lentamente hasta una temperatura baja, de manera que se considera que el sistema se encuentra siempre en equilibrio termodinámico y que por lo tanto, está regido por la distribución de Boltzmann y Maxwell. Cuando el sistema alcanza la temperatura final, se espera que el sistema se encuentre en el estado de menor energía. El sobrecalentamiento simulado consiste entonces en replantear el problema de optimización como la minimización de una función objetivo, que describe la energía del sistema, cuyos estados están dados por todos los puntos del dominio de la función objetivo.

Para encontrar numéricamente una solución al problema de la braquistócrona utilizando el método de sobrecalentamiento simulado, se define una función discreta que aproxime el valor del funcional correspondiente, ya que las curvas que representan las trayectorias posibles deben ser discretizadas para poder ser evaluadas por medio de la computadora. Así un estado posible del sistema es una curva discretizada en varios puntos ordenados, y el tiempo que tarde en recorrerse viene a ser entonces la "energía" del sistema.

² METROPOLIS, et al, 1953.

³ KIRKPATRICK et al, 1983.

La temperatura viene a ser entonces un parámetro que debe ir disminuyendo lentamente a medida que el proceso avanza.

El algoritmo de sobrecalentamiento simulado ha sido utilizado en distintas aplicaciones desde 1983, tales como diseño de microchips⁴, análisis de proximidades⁵, gráficas y reconstrucción de imágenes⁶, redes neuronales⁷. Por lo general se utiliza en problemas donde tenga que optimizarse funciones de muchas variables.

⁴ KIRKPATRICK et al, 1983.

⁵ TREJOS, J. y M. VILLALOBOS, 1997.

⁶ SUNDERMANN, E. 1995.

⁷ FREEMAN, J. A. y D. M. SKAPURA, 1993.

II. EL PROBLEMA DE LA BRACHISTOCRONA

A. Planteamiento.

Fue planteado por primera vez por Johann Bernoulli en 1696. El problema consiste en hallar la curva que conecta dos puntos en un campo gravitacional y es concava en la dirección descendente. Planteamos la curva que conecta dos puntos en un campo gravitacional en el espacio como un problema de cálculo de variaciones. El problema de la brachistocrona puede ser planteado en términos de un problema de cálculo de variaciones y de hecho se puede resolver bajo condiciones más generales de las que se dan en el problema original. La solución puede ser obtenida analíticamente.

La brachistocrona es una curva plana en un campo gravitacional

$$r(t) = (x(t), y(t), z(t)) \quad (1.1)$$

El problema de la brachistocrona de Torricelli y Varignon es que el punto de partida es el punto $A = (x_1, y_1, z_1)$ y el punto de llegada es el punto $B = (x_2, y_2, z_2)$ de la brachistocrona, es decir el tiempo de viaje T sobre la brachistocrona a lo largo de la brachistocrona desde el punto A hasta el punto B , es decir

$$T = \int_A^B \frac{ds}{v} \quad (1.2)$$

donde ds es el elemento de longitud y v es la velocidad.

$$v = \sqrt{2gz} \quad (1.3)$$

El tiempo de viaje T es un funcional de la curva. A partir de la ecuación (1.2) puede obtenerse la ecuación de la brachistocrona.

$$T = \int_A^B \frac{ds}{\sqrt{2gz}} \quad (1.4)$$

II. EL PROBLEMA DE LA BRAQUISTÓCRONA

A. Planteamiento.

Fue planteado por primera vez por Johann Bernoulli en 1696. El problema original se puede generalizar y enunciarse en la siguiente forma: Encontrar la curva que restringe el movimiento de una partícula en el espacio para moverse entre dos puntos dados, bajo la acción de un potencial y de fuerzas no conservativas, bajo condiciones iniciales fijas, y que, entre todas las curvas posibles, la partícula tome el menor tiempo posible en realizar el trayecto.

La braquistócrona se representa como una trayectoria parametrizada

$$\mathbf{r}(t) = (x(t), y(t), z(t)) \quad (1.1)$$

la cual debe cumplir con el Teorema de Trabajo y Energía, que dice que el cambio de energía cinética T entre dos puntos $r_1 = (x(t_1), y(t_1), z(t_1))$ y $r_2 = (x(t_2), y(t_2), z(t_2))$ de la trayectoria, es igual al trabajo realizado por la fuerza total \mathbf{F} sobre la partícula a lo largo de la curva entre dichos puntos¹, es decir

$$T_2 - T_1 = \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{F}(t) \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} dt \quad (1.2)$$

Por otra parte, la rapidez v de la partícula está dada por

$$v = \frac{ds}{dt} = \left| \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right| \quad (1.3)$$

de donde ds es diferencial de longitud de arco de la curva. A partir de la ecuación (1.3) puede obtenerse la relación

$$dt = \frac{ds}{v} \quad (1.4)$$

¹ SYMON, 1971, pp. 103-105.

Integrando ambos lados sobre toda la trayectoria r , tenemos que el tiempo total en que la partícula realiza el trayecto es igual a

$$t = \int_s \frac{ds}{v} \quad (1.5)$$

La solución del problema requiere minimizar el funcional t de (1.5) sujeto a la condición (1.2), para lo cual se pueden utilizar métodos variacionales.

B. Solución Analítica del Caso de un Potencial Constante

En un potencial constante g , el movimiento de la partícula m se realiza en dos dimensiones y las curvas posibles están descritas por una ecuación $y = y(x)$, donde y es positiva en la dirección del potencial g , como se muestra en la figura 1.1, donde los

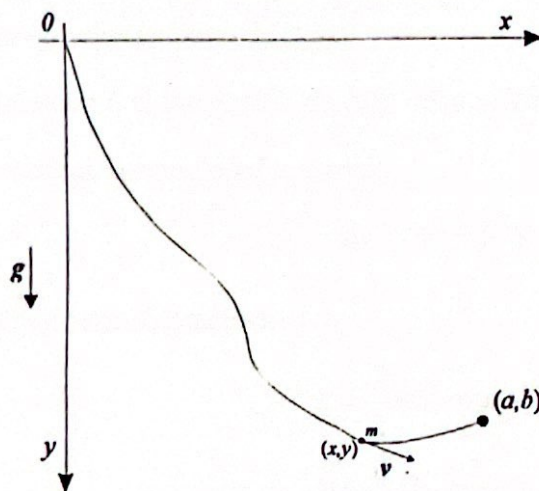


Figura 1.1 Trayectoria posible entre dos puntos

extremos de la curva están fijos en el origen y en el punto (a, b) . Integrando (1.2) del origen a un punto (x, y) , se obtiene que

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = mgy \quad (1.6)$$

por lo que

$$v = \sqrt{2gy} \quad (1.7)$$

Al sustituir (1.7) en (1.5) se obtiene

$$t\{y\} = \int_s \frac{ds}{v} = \int_0^a \frac{\sqrt{1+(y')^2}}{\sqrt{2gy}} dx \quad (1.8)$$

Este funcional tiene la forma de

$$J\{y\} = \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y') dx \quad (1.9)$$

mediante métodos variacionales², se puede demostrar que F debe cumplir con la ecuación diferencial de Euler-Lagrange³

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) = 0 \quad (1.10)$$

cuando $J\{y\}$ es un valor extremo de (1.9).

Para minimizar t , el integrando de (1.8) debe satisfacer (1.10), por lo cual después de simplificar, se obtiene la ecuación diferencial⁴,

$$2y''y + 1 + y'^2 = 0 \quad (1.11)$$

cuya solución, en forma paramétrica es

$$\begin{aligned} x &= \frac{A}{2}(\alpha - \operatorname{sen} \alpha) \\ y &= \frac{A}{2}(1 - \operatorname{cos} \alpha) \end{aligned} \quad (1.12)$$

donde A es una constante y α es un parámetro tal que $\alpha = 0$ en el origen. Las ecuaciones (12) son las ecuaciones de un cicloide, donde $A/2$ es el radio del círculo que lo genera. En el

² BUTKOV, 1968, pp. 554-557.

³ FIN BLANCHARD y BRÜNING, 1992, pp. 77-107 se desarrolla con profundidad la optimización de funcionales del tipo de la ecuación (1.9), incluyendo el principio de Hamilton con uno o varios grados de libertad.

⁴ BUTKOV, 1968, p. 558.

caso en que $a > \frac{1}{2}b$ la curva desciende por debajo del punto (a, b) , ya que la partícula debe tomar una velocidad de suficiente magnitud para llegar a este punto en el tiempo más corto posible, por lo que dichas ecuaciones definen a la braquistócrona⁵.

Evalutando la braquistócrona en (1.8) se obtiene el tiempo mínimo:

$$\begin{aligned}
 t &= \int_0^{\alpha_b} \sqrt{\frac{[x'(\alpha)]^2 + [y'(\alpha)]^2}{2gy}} d\alpha \\
 &= \int_0^{\alpha_b} \sqrt{\frac{\left(\frac{A}{2}\right)^2 (1 - \cos\alpha)^2 + \left(\frac{A}{2}\right)^2 \sin^2 \alpha}{2g\left(\frac{A}{2}\right)(1 - \cos\alpha)}} d\alpha \\
 &= \int_0^{\alpha_b} \sqrt{\frac{A(1 - 2\cos\alpha + \cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha)}{4g(1 - \cos\alpha)}} d\alpha \quad (1.13) \\
 &= \int_0^{\alpha_b} \sqrt{\frac{A(2 - 2\cos\alpha)}{4g(1 - \cos\alpha)}} d\alpha = \int_0^{\alpha_b} \sqrt{\frac{A}{2g}} d\alpha \\
 &= \alpha_b \sqrt{\frac{A}{2g}}
 \end{aligned}$$

donde α_b es el valor tal que $(x(\alpha_b), y(\alpha_b)) = (a, b)$.

⁵ Para la obtención de la braquistócrona existen otros métodos. Véase p. ej., SIMMONS, 1993, pp. 36-40.

III. FÍSICA ESTADÍSTICA DEL SOBRECALENTAMIENTO

A. Naturaleza de la Física Estadística

Es el estudio de sistemas que consisten en un número grande de subsistemas, los cuales interaccionan entre sí, de tal forma que producen que el sistema se comporte en una forma termodinámica¹, es decir, en la forma siguiente²:

- Existen estados de equilibrio³ del sistema.
- Un estado de equilibrio del sistema consiste de una o más regiones homogéneas⁴.
- Los estados de equilibrios pueden ser descritos por un número finito de parámetros, llamados parámetros termodinámicos, los cuales determinan todas las funciones de estado del sistema.
- Pueden definirse “coeficientes de transporte” a partir de respuestas de primer orden de los sistemas a pequeñas perturbaciones del estado de equilibrio.

Cada uno de estos subsistemas se describen mediante leyes físicas, las cuales determinan⁵ cómo se comportará dicho subsistema. Debido a que el número de subsistemas es muy grande⁶, describir el comportamiento del sistema al determinar el comportamiento de cada uno de los subsistemas es imposible en la práctica, debido a la gran cantidad de cálculos involucrados.

¹ RUELLE, 1974, p. 1

² RUELLE, 1974, pp. 1-2.

³ Si el sistema se encuentra aislado, este tiende al estado de equilibrio así como el tiempo tienda al infinito.

⁴ Homogéneos a escala macroscópica, es decir, para un número grande de subsistemas.

⁵ En el sentido de la física moderna, no se puede hablar de determinar exactamente el estado de un elemento del sistema, debido al principio de incertidumbre de Heisenberg, pero si se puede hablar de determinar los valores observables (o más probables) de dicho elemento.

⁶ Si consideramos el sistema formado por un litro de aire a una temperatura de 300 K y a una presión de 1 atm tiene aproximadamente $2.444985789687 \times 10^{22}$ moléculas, considerando al sistema como un gas ideal y utilizando la fórmula de los gases ideales.

Una forma de describir el comportamiento del sistema es utilizando una descripción estadística del mismo. El sistema se encuentra restringido por las leyes físicas y por condiciones que determinan el equilibrio termodinámico, lo cual conduce a una función de distribución de probabilidades que depende de los parámetros termodinámicos, que son el resultado de las restricciones de equilibrio termodinámico.

Mediante el uso de esta función distribución de probabilidades puede obtenerse la descripción del comportamiento de cantidades macroscópicamente observables que se relacionan con los parámetros termodinámicos⁷ por medio de funciones de estado. Los valores termodinámicos corresponden a los valores promedio de alguna propiedad de los subsistemas, lo cual constituye uno de los postulados de la mecánica estadística.⁸

Gibbs introdujo la idea de ensamble, que es una colección de un número muy grande de sistemas termodinámicos, siendo cada uno de ellos una réplica del sistema termodinámico de interés. Cada uno de dichos sistemas termodinámicos cumple con las restricciones del sistema original, por lo que si se obtiene el valor esperado⁹ de una propiedad específica sobre todos los sistemas que integran el ensamble, el valor obtenido corresponde a la cantidad termodinámica relacionada con la propiedad.

B. Mecánica Estadística Clásica.

Sea \mathcal{L} un sistema con N partículas. El movimiento de estas partículas está descrito por las ecuaciones de Hamilton:

⁷ Los parámetros termodinámicos deben ser observables macroscópicamente, debido a que una definición operativa o práctica de equilibrio termodinámico debe darse en base a cantidades que puedan ser medidas a nivel macroscópico.

⁸ MCQUARRIE, 1973. P. 36.

⁹ El valor esperado de la propiedad de interés se conoce también como el promedio de ensamble de la propiedad.

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p_i} &= \frac{dq_i}{dt} \\ \frac{\partial H}{\partial q_i} &= -\frac{dp_i}{dt} \end{aligned}, \quad i = 1, 2, \dots, 3N \quad (2.1)$$

donde q_1, q_2, \dots, q_{3N} definen las coordenadas generalizadas de las N partículas y los momentos generalizados están dados por p_1, p_2, \dots, p_{3N} , y H es el hamiltoniano del sistema.

El estado del sistema está descrito entonces por estas coordenadas y estos momentos generalizados y la evolución del sistema por las ecuaciones (2.1). Estas coordenadas y momentos forman un espacio $6N$ dimensional conocido como el espacio de fase Γ del sistema, conformado por puntos $(q, p) = (q_1, q_2, \dots, q_{3N}, p_1, p_2, \dots, p_{3N})$.

La probabilidad de que el sistema se encuentre en un estado (q, p) está determinada por una función de distribución de probabilidades $F(q, p, t)$ la cual determina el valor esperado de una función $G(q, p)$ de la forma

$$\langle G \rangle = \frac{1}{\Omega} \int G(q, p) F(q, p, t) dq dp \quad (2.2)$$

donde

$$\Omega = \int F(q, p, t) dq dp \quad (2.3)$$

es la constante de normalización de la distribución, siendo $dq = dq_1 dq_2 \dots dq_{3N}$ y $dp = dp_1 dp_2 \dots dp_{3N}$. Por otra parte, la distribución debe satisfacer la condición¹⁰

$$\frac{dF}{dt} = 0 \quad (2.4)$$

lo cual se conoce como teorema de Liouville.

1 Teorema H para Sistemas en Equilibrio

El sistema \mathcal{L} se considera en equilibrio cuando el valor de el Hamiltoniano H es

¹⁰ ISHARA, 1971, p. 22.

mínimo y se considera que una disminución del valor de H corresponde a aproximarse al equilibrio. En 1872, Boltzmann presentó el teorema H para discutir cómo el equilibrio es alcanzado por un sistema termodinámico. El teorema H dice así:

Si la función de distribución de probabilidades satisface la condición

$$\frac{1}{\Omega} \int H(q, p) F(q, p, t) dq dp = U \quad (2.5)$$

entonces H es un mínimo para cada punto (q, p) cuando

$$F(q, p) = e^{\beta(A-H)} \quad (2.6)$$

donde U , A y β son constantes independientes de las coordenadas del espacio de fase.

La función de distribución de probabilidades dada por (2.6) se conoce como distribución de Maxwell y Boltzmann para partículas libres.

2 Ensamble Canónico

Es una colección de \mathcal{A} sistemas, donde \mathcal{A} es grande y los sistemas son réplicas de un sistema que tiene N partículas libres¹¹, ocupa un volumen V y tiene temperatura constante T . Para que un sistema así exista, debe ponerse éste en un baño térmico a la temperatura T , y esperar por un tiempo lo suficientemente largo para considerar que el sistema ha llegado al equilibrio térmico y la temperatura sea uniforme e igual a T . Debido a que no existe restricción alguna sobre las condiciones iniciales, no debe haber restricción alguna para el momentum lineal y la posición de la partícula. De esta forma, el valor del Hamiltoniano del sistema puede variar de cero hasta el infinito, y es exactamente igual a la suma de la energía cinética de cada una de las partículas que conforman el sistema.

Si el sistema está en equilibrio termodinámico, el Hamiltoniano debe ser un mínimo. Entonces, por el teorema H, la función de distribución de probabilidades que rige al sistema

¹¹ La fuerza neta sobre cada una de ellas es cero.

es la dada en (2.6). La constante β es igual a $1/kT$,¹² donde k es la constante de Boltzmann¹³, por lo que

$$F(p, q) = e^{\frac{1}{kT}(F-H)} = e^{\alpha} e^{-\frac{H}{kT}} \quad (2.7)$$

Al utilizar esta distribución de probabilidades, el valor mínimo de U es entonces

$$U = \frac{3}{2} NkT \quad (2.8)$$

que representa la energía cinética de todas las partículas. Así, la energía cinética promedio de cada partícula es

$$u = \frac{3}{2} kT \quad (2.9)$$

Nótese que en las ecuaciones (2.8) y (2.9) la energía promedio es proporcional a la temperatura.

3 Otros Ensamblés

Similarmente, para otros sistemas con el volumen, el número de partículas y la temperatura fijos, el Hamiltoniano puede escribirse como la suma de varios términos, cada uno correspondiente a la clase de energía a la que pertenezca, tales como la energía cinética traslacional, la energía cinética rotacional, la energía potencial vibracional, la energía potencial electrónica, etc. Así

$$H = \sum_i H_i \quad (2.10)$$

y la energía promedio es entonces

$$U = \frac{1}{\Omega} \oint \sum_i H_i F(q, p, t) dq dp = \sum_i \frac{1}{\Omega} \oint H_i F(q, p, t) dq dp = \sum_i U_i \quad (2.11)$$

donde U_i es el valor promedio de H_i .

¹² Una demostración de que $\beta = 1/kT$ puede encontrarse en MOHLING, 1982, pp. 261-262.

¹³ $k = 1.380658(12) \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$

Si cada H_i tiene r_i grados de libertad, el teorema de la equipartición de la energía¹⁴ dice que

$$U_i = \frac{1}{2} r_i kT \quad (2.12)$$

Entonces

$$U \propto kT = \frac{1}{\beta} \quad (2.13)$$

4 Distribución de probabilidades de la energía

La función de distribución de Boltzmann y Maxwell dada en la ecuación (2.7) define también una función de distribución de probabilidades de los valores que toma el Hamiltoniano del sistema. Utilizando esta función de distribución de probabilidades puede calcularse la probabilidad de que el sistema tenga una energía igual o menor que un valor E :

$$P(H \leq E) = \frac{\int_0^E e^{-\alpha} e^{-\frac{H}{kT}} dH}{\int_0^{+\infty} e^{-\alpha} e^{-\frac{H}{kT}} dH} = \frac{-kT e^{-\frac{H}{kT}} \Big|_{H=0}^{H=E}}{-kT e^{-\frac{H}{kT}} \Big|_{H=0}^{H \rightarrow +\infty}} = \frac{-kT \left(e^{-\frac{E}{kT}} - 1 \right)}{-kT(0-1)} = 1 - e^{-\frac{E}{kT}} \quad (2.14)$$

Si los subsistemas del ensamble no interactúan entre sí, se tiene que el Hamiltoniano del sistema puede escribirse como

$$H = \sum_{i=1}^N h_i \quad (2.15)$$

donde h_i es el Hamiltoniano del i -ésimo subsistema. En esta forma, la función de distribución de probabilidades dada en la ecuación (2.7) está dada por

$$F(p, q) = \prod_{i=1}^N e^{-\alpha_i} e^{-\frac{h_i}{kT}} = \prod_{i=1}^N f_i(p, q) \quad (2.16)$$

¹⁴ LINDSAY, 1941, pp. 124-126.

donde $f_i(p, q)$ es una función de distribución de probabilidades correspondiente al Hamiltoniano del i -ésimo subsistema. Si los subsistemas son distinguibles, y el Hamiltoniano es el mismo para todos, entonces las distribuciones de probabilidades son iguales¹⁵ y

$$F(p, q) = (f(p, q))^N \quad (2.17)$$

donde

$$f(p, q) = e^{\frac{\alpha}{N}} e^{-\frac{h}{kT}} \quad (2.18)$$

Si los subsistemas son indistinguibles, entonces la función de distribución de probabilidades puede aproximarse¹⁶ por

$$F(p, q) \cong \frac{(f(p, q))^N}{N!} \quad (2.19)$$

En cualquiera de los dos casos, la probabilidad de que un subsistema tenga una energía menor o igual que ϵ , está dada por

$$P(h \leq \epsilon) = \frac{\int_0^{\epsilon} e^{\frac{\alpha}{N}} e^{-\frac{h}{kT}} dh}{\int_0^{+\infty} e^{\frac{\alpha}{N}} e^{-\frac{h}{kT}} dh} = 1 - e^{-\frac{\epsilon}{kT}} \quad (2.20)$$

5. Sistemas Discretos y Mecánica Estadística Clásica

Para sistemas termodinámicos en los cuales el Hamiltoniano toma valores discretos, los resultados son similares a los de un sistema continuo.

La función de distribución de probabilidades para el ensamble canónico de un sistema discreto es

¹⁵ McQUARRIE, 1973, pp. 69-70.

¹⁶ McQUARRIE, 1973, p. 71.

$$P_j = \frac{e^{-\frac{E_j}{kT}}}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{kT}}} \quad (2.21)$$

donde P_j es la probabilidad que el sistema se encuentre en el estado E_j , donde los E_i son todos los valores que puede tomar el Hamiltoniano del sistema. El mismo resultado se puede obtener para otros ensambles, y las ecuaciones (2.8) a la (2.12) mantienen su validez en sistemas discretos que satisfagan las condiciones necesarias descritas en la sección 2.2.

Si los subsistemas no interaccionan entre sí, entonces el Hamiltoniano del sistema satisface la condición dada por la ecuación (2.15), por lo que la probabilidad de que un subsistema se encuentre en un estado ϵ_j , está dada por

$$P_j = \frac{e^{-\frac{\epsilon_j}{kT}}}{\sum_i e^{-\frac{\epsilon_i}{kT}}} \quad (2.22)$$

donde los ϵ_i son los valores que puede tomar el Hamiltoniano del sistema. Si ϵ_0 es el mínimo valor que pueden tomar los ϵ_i , entonces si

$$\Delta\epsilon_i = \epsilon_i - \epsilon_0 \quad (2.23)$$

se tiene que

$$P_j = \frac{e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}} e^{-\frac{\epsilon_j}{kT}}}{e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}} \sum_i e^{-\frac{\epsilon_i}{kT}}} = \frac{e^{-\frac{\epsilon_j - \epsilon_0}{kT}}}{\sum_i e^{-\frac{\epsilon_i - \epsilon_0}{kT}}} = \frac{e^{-\frac{\Delta\epsilon_j}{kT}}}{\sum_i e^{-\frac{\Delta\epsilon_i}{kT}}}, \quad (2.24)$$

por lo que la distribución de probabilidades para los estados de energía ϵ_i es la misma que para las diferencias $\Delta\epsilon_i$.

Esta distribución es equivalente a la dada en la ecuación (2.18).

C. Sobrecalefacción (Annealing)

El sobrecalefacción es un proceso donde un sistema termodinámico se lleva a una temperatura muy alta y después se enfría hasta llegar a una temperatura baja, con una razón de cambio de la temperatura respecto del tiempo lo suficientemente pequeña para considerar que el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico en cada etapa del proceso.

En este proceso, cada uno de los subsistemas tiene una energía y la probabilidad de que éste se encuentre en un valor abajo de un valor ϵ está dada por la ecuación (2.20) en el caso continuo o bien por

$$P(\epsilon_j \leq \epsilon) = \sum_{\epsilon_j \leq \epsilon} p_j \quad (2.25)$$

en el caso discreto, donde p_j es la probabilidad dada en (2.24).

En el caso continuo,

$$h(p, q) = \epsilon \quad (2.26)$$

describe una superficie en el espacio de fase donde cada punto (p, q) define una configuración que posee una energía ϵ . En el caso, discreto, se tiene que para cada uno de los valores ϵ_j existe un cierto número de configuraciones del subsistema que poseen energía ϵ_j . A este número de configuraciones se le conoce como degenerancia del estado ϵ_j . La degenerancia de ϵ_j aumenta a medida que el valor de ϵ_j aumenta. Así, en el estado de mínima energía ϵ_0 , la degenerancia de este estado debe ser mínima.

De la misma forma se define la degenerancia de un sistema discreto para cada estado E_j , y esta se comporta como la degenerancia de los subsistemas.

Al inicio del proceso de sobrecalefacción, al tener la temperatura un valor alto, debido a las ecuaciones (2.20) y (2.25), la probabilidad de que un subsistema se encuentre a un estado de alta energía tiende a ser uno. A medida que la temperatura desciende, la probabilidad de estar en un estado de alta energía tiende a disminuir y al mismo tiempo

aumenta la probabilidad de estar en un estado de baja energía. Cuando la temperatura tiende a cero, la probabilidad de estar en un estado de baja energía tiende a uno. Lo anterior indica que la degenerancia del sistema debe haberse reducido. Además, como resultado de haber enfriado el sistema tan lentamente, puede considerarse que se encuentra en equilibrio termodinámico en cada etapa del enfriamiento. De no realizarse en esta forma, no puede garantizarse que el estado del sistema tenga la mínima degenerancia, ya que el sistema no se encontraba en equilibrio termodinámico en cada uno de las etapas.

Similarmente se puede observar que al inicio del proceso, cada subsistema tiene una energía dada, la cual por tener la temperatura un valor alto, está permitida en la distribución de Boltzmann. Al disminuir un poco la temperatura, el equilibrio termodinámico se pierde, por lo que si se deja el tiempo suficiente para que el sistema alcance el equilibrio termodinámico, existe una mayor probabilidad de que la energía de cada subsistema disminuya en vez que aumente. Así a medida de que la temperatura disminuye con una razón de cambio con respecto al tiempo lo suficientemente cercana a cero para que el sistema se encuentre en equilibrio termodinámico, la energía de los subsistemas tiende a disminuir. A una temperatura final cercana a cero, la probabilidad de que un subsistema se encuentre en un estado de energía bajo es muy alta.

La combinación de lo anterior conduce a que el sistema, al final del proceso de sobrecalentamiento, sea, probabilísticamente hablando, el sistema compuesto por una gran mayoría de subsistemas con mínima degenerancia y mínima energía.

IV. OPTIMIZACIÓN COMBINACIONAL Y EL MÉTODO DE SOBRECALENTAMIENTO SIMULADO

A. Optimización Combinacional

Es un conjunto de técnicas que buscan encontrar los valores óptimos de una función de muchas variables (llamada función objetivo o función de costo), al utilizar técnicas computacionales.

Si f es la función objetivo y $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ es el vector de variables, el problema de optimización combinatorial puede plantearse en la siguiente forma:

$$\text{Minimizar } f(\mathbf{X}) \quad (3.1)$$

sujeto a las condiciones

$$y_i^{(l)} \leq x_i \leq y_i^{(u)}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.2)$$

A partir de un vector inicial $\mathbf{X}^{(1)}$, debe generarse una sucesión de vectores $\mathbf{X}^{(2)}, \mathbf{X}^{(3)}, \dots$ tal que converge al vector solución \mathbf{X}^* . Si $\mathbf{X}^{(j)}$ denota el punto actual, cada valor $x_i^{(j)}$ se modifica en una forma aleatoria y uniforme, entre los valores de $y_i^{(l)}$ y $y_i^{(u)}$,¹ para obtener un valor z_i ; como resultado se obtiene un vector \mathbf{Z} ,

$$\text{si } f(\mathbf{X}^{(j)}) \geq f(\mathbf{Z}) \text{ entonces } \mathbf{X}^{(j+1)} = \mathbf{Z}; \quad (3.3)$$

en caso contrario, un nuevo vector \mathbf{Z} debe ser calculado.

El método anterior se conoce como método de Montecarlo para optimización, el cual es la base de todos los métodos de optimización combinatorial.

Ahora, bien la función objetivo puede tener mínimos locales, es decir que existen puntos \mathbf{Y}^* , para los cuales existe un valor r tal que

$$\|\mathbf{Z} - \mathbf{Y}^*\| < r \Rightarrow f(\mathbf{Y}^*) \leq f(\mathbf{Z}) \quad (3.4)$$

¹ Los cuales dependen del valor actual de $x_i^{(j)}$.

Dependiendo del vector inicial $\mathbf{X}^{(1)}$, existen sucesiones $\{\mathbf{X}^{(n)}\}$ que pueden converger a un mínimo local, en lugar del mínimo global que es la solución al problema planteado en (3.1) bajo las condiciones (3.2)².

B. Método de Sobrecalentamiento Simulado

Consiste en un método de optimización combinatorial, en el cual en lugar de la condición (3.3), se utiliza la condición de Metropolis³, la cual dice que si $\mathbf{X}^{(j)}$ es el punto actual, entonces la probabilidad de aceptar a \mathbf{Z} como el siguiente vector $\mathbf{X}^{(j+1)}$ de la sucesión está dada por

$$P = \begin{cases} 1, & \text{si } f(\mathbf{X}^{(j)}) \geq f(\mathbf{Z}) \\ \exp\left(\frac{f(\mathbf{X}^{(j)}) - f(\mathbf{Z})}{kT}\right), & \text{si } f(\mathbf{X}^{(j)}) < f(\mathbf{Z}) \end{cases} \quad (3.5)$$

donde k es la constante de Boltzmann y T es la "temperatura" del sistema.

La condición de Metropolis define una cadena de Markov tal que la sucesión de estados $\{\mathbf{X}^{(n)}\}$ define en el límite al infinito⁴ una distribución discreta⁵ de probabilidades exponencial⁶ para los valores de $\{f(\mathbf{X}^{(n)})\}$. Si el valor mínimo de esta función se denota

² Las condiciones (3.2) pueden definirse en términos de una norma, tal como la hipótesis de la implicación (3.3).

³ Metropolis y sus colegas (METROPOLIS et al, 1953) desarrollaron un método de muestreo en sistemas termodinámicos; utilizaron la condición (3.5) para generar una muestra cuya distribución tiende a ser la de un ensamble canónico, por lo que utilizando la distribución de la muestra pueda estimarse numéricamente la función de partición del sistema, promedios de ensamble y ecuaciones de estado del sistema. Kirkpatrick, Gellat y Vecchi (KIRKPATRICK et al, 1983) desarrollaron la idea del método de sobrecalentamiento simulado para mejorar el método de Montecarlo en optimización combinatorial.

⁴ Este es el equivalente termodinámico a hacer tender el valor de tiempo al infinito.

⁵ Se consideran únicamente casos discretos, ya que computacionalmente no existen casos continuos.

⁶ Valleau y Whittington (VALLEAU, y WHITTINGTON, 1977) muestran que la cadena de Markov obtenida en esta forma es una muestra de la población de un ensamble canónico, sobre la cual puede realizarse los

por f_0 , la distribución en el límite puede describirse como

$$P_k = \frac{e^{-\frac{(f_k - f_0)}{kT}}}{\sum_j e^{-\frac{(f_j - f_0)}{kT}}}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (3.6)$$

donde $f_k = f(\mathbf{X}^{(k)})$, para algún i , y donde $f_k \neq f_m$ si $k \neq m$, y $f_k < f_{k+1}$.⁷

Esta distribución de probabilidades es análoga a la (2.24). Con base en esto, puede definirse un sistema termodinámico canónico, donde la configuración \mathbf{X} , representa un estado del sistema, $f(\mathbf{X})$ representa el valor del Hamiltoniano en \mathbf{X} , y T es la temperatura del sistema termodinámico.

La distribución de probabilidades (3.6) asigna una mayor probabilidad para los valores de f_k cercanos al valor de f_0 , por lo que con la condición de Metropolis se obtiene una sucesión $\{\mathbf{X}^{(n)}\}$ donde el valor de $f(\mathbf{X}^{(n)})$ tenga una gran probabilidad de estar cerca de f_0 , a medida que n tiende a ∞ .

Este sistema termodinámico puede “sobrecalentarse”, en analogía a un sistema físico con el objetivo de obtener la configuración de mínima energía. Al igual que el proceso de sobrecalentamiento, el sistema termodinámico ahora creado puede iniciarse con una temperatura alta, para la cual, la probabilidad de estar en un estado donde el valor de la función sea alto no sea baja, en tal forma que el estado inicial⁸ tenga una probabilidad no despreciable. Al utilizar la condición (3.5) se generan otros estados, hasta llegar al equilibrio termodinámico; la temperatura debe disminuirse entonces de tal forma que pueda considerarse que la perturbación del equilibrio termodinámico es despreciable; se lleva el

promedios a los que se refiere la nota 3 de este capítulo.

⁷ Todos los valores posibles que puede tomar f , sin que se repitan.

⁸ Escogido por lo general en forma aleatoria.

sistema al equilibrio termodinámico al utilizar otra vez la condición (3.5); se enfría un poco más el sistema y se vuelve a llevar al equilibrio, repitiéndose esto hasta llegar a una temperatura baja.

En el proceso, se obtiene una sucesión de estados $\{\mathbf{X}^{(n)}\}$ para la cual, a medida que n tiende a infinito, el valor de $f(\mathbf{X}^{(n)})$ tiende estadísticamente al mínimo global de la función f .

1 Programas de Enfriamiento

En el método de sobrecalentamiento simulado debe establecerse un programa de enfriamiento, el cual consta de tres partes principales:

- *La elección de una temperatura inicial T_0* , la cual debe ser tal que en el estado inicial, la probabilidad de aceptar estados que incrementan el valor de la función objetivo sea alta.
- *El criterio del descenso de temperatura*, que indica cómo debe reducirse la temperatura del sistema.
- *El criterio del equilibrio térmico*, que indica cuando el sistema ha llegado al equilibrio térmico y es necesario reducir la temperatura del sistema de acuerdo con el criterio de enfriamiento.

a. Elección de la Temperatura Inicial

Existen diversas formas de establecer la temperatura inicial, de las cuales se describen tres a continuación:

- Se obtiene una configuración \mathbf{X} en forma aleatoria y se calcula el valor de $f(\mathbf{X})$. Se calcula

$$c_0 = kT_0 = \lambda f(\mathbf{X}) \quad (3.7)$$

donde λ es un valor entre 0 y 1. A continuación, se generan N_0 soluciones, donde N_0 es el número de soluciones que deben obtenerse, según el criterio de equilibrio térmico, antes de enfriar el sistema a una temperatura un poco menor. Se calcula

entonces qué porcentaje de estas soluciones produce un aumento en el valor de la función objetivo. Si este porcentaje sobrepasa un valor π_0 se acepta el valor de c_0 como temperatura inicial⁹; en caso contrario, se multiplica el valor de c_0 por un factor $\mu > 1$, obteniéndose entonces un valor nuevo c_0 de prueba¹⁰.

- Se generan N_0 soluciones con una temperatura de prueba, en la cual se calcula

$$c_0 = kT_0 = -\frac{\overline{\Delta f}}{\ln(\pi_0)}, \quad (3.8)$$

donde $\overline{\Delta f}$ es el promedio de los aumentos de la función objetivo ocurridos por cambios de estado, y π_0 es la razón de soluciones que aumentan el valor de f sobre N_0 .¹¹

- Se generan N_0 soluciones con una temperatura de prueba (que se presume alta). Se calcula $\overline{\Delta f}$ el promedio de los aumentos de la función objetivo ocurridos por cambios de estado, con lo cual puede calcularse

$$c_0 = kT_0 = \frac{\overline{\Delta f}}{1 - \pi_0} \quad (3.9)$$

donde π_0 es la razón de soluciones que conducen a aumentos en la función objetivo sobre el valor de N_0 .¹²

b. Criterios para el descenso de la temperatura

Existen varios criterios de enfriamiento, entre los cuales los más utilizados son:

- Geman y Geman¹³ demostraron que si la temperatura se reduce en la forma siguiente:

⁹ Por lo general, el valor de π_0 es aproximadamente 0.8

¹⁰ Un ejemplo de este procedimiento puede verse en GUTIÉRREZ ANDRADE et al, 1997, donde utilizan $\lambda = 0.2$, $\mu = 1.1$, y $\pi_0 = 0.8$

¹¹ Un ejemplo de este procedimiento puede verse en TREJOS y VILLALOBOS, 1998.

¹² Un ejemplo de este procedimiento puede verse en SUNDERMANN, 1995.

¹³ GEMAN y GEMAN, 1984, citado por FREEMAN y SKAPURA, 1993, pp. 197-198.

$$T(t_n) = \frac{T_0}{1 + \ln(t_n)}, \quad (3.10)$$

donde t_n es una función discreta creciente que representa la n -ésima etapa y $T_0 = T(t_0)$, entonces, estadísticamente hablando, la secuencia de estados $\{X^{(n)}\}$ converge asintóticamente al mínimo local. En la práctica, si se utiliza este criterio, el número de etapas que hay que llevar a cabo para enfriar un sistema puede ser muy alto, por lo que se utilizan por lo general otros criterios que requieran menos cálculos.

Szu¹⁴ describe otro criterio, donde se selecciona la temperatura en la siguiente forma

$$T(t_n) = \frac{T_0}{1 + t_n} \quad (3.11)$$

donde t_n es una función discreta creciente que representa la n -ésima etapa y $T_0 = T(t_0)$. Este criterio produce un enfriamiento más rápido que el presentado en el criterio (3.10). Desde la concepción del método de sobrecalentamiento simulado, se ha utilizado el siguiente criterio¹⁵ en la práctica: la temperatura de la n -ésima etapa se selecciona en la siguiente forma

$$T_n = \rho^n T_0, \quad (3.12)$$

donde $0 < \rho < 1$.

- Otros criterios pueden considerarse, a medida que la temperatura descienda lentamente.

Por ejemplo, la temperatura en la n -ésima etapa puede calcularse por

$$T_n = \frac{T_0}{e^{(1-c)n}} = e^{(c-1)n} T_0, \quad (3.13)$$

donde $0 < c < 1$. Nótese que este criterio es análogo al anterior.

¹⁴ SZU, 1986, pp. 420-425, citado por FREEMAN y SKAPURA, 1993, p. 198.

¹⁵ KIRKPATRICK et al, 1983.

c Criterios de Equilibrio Térmico

Un sistema se considera haber llegado al equilibrio termodinámico a una temperatura T , cuando ha pasado un tiempo lo suficientemente largo. En una forma análoga, se alcanza el equilibrio termodinámico a una temperatura T_n , en la n -ésima etapa de enfriamiento, cuando se ha alcanzado un número de soluciones N_n para esta etapa lo suficientemente grande.

Algunos de los criterios utilizados son los siguientes:

- Se establece un valor inicial N_0 y en cada etapa calcular

$$N_n = r^n N_0, \quad (3.14)$$

donde r es menor que uno.¹⁶

- Se establece un número constante de soluciones para cada etapa¹⁷, el cual depende de la naturaleza del problema.

¹⁶ Véase, por ejemplo, GUTIÉRREZ ANDRADE et al, 1997

¹⁷ Véase, por ejemplo, TREJOS y VILLALOBOS, 1998, y SUNDERMANN, 1995.

V. IMPLEMENTACIÓN DEL ALGORITMO DE CORRIENTE ALENTAMIENTO O SIMULADO PARA EL PROBLEMA DE LA DISTRIBUCIÓN DE LA CARGA EN UN SISTEMA DE ENERGIAS RENOVABLES

5.1. Descripción del Problema

El problema de la distribución de la carga en un sistema de energías renovables se plantea en el capítulo II de este trabajo. Se trata de un problema de optimización que requiere una técnica de optimización que permita encontrar la solución óptima de la distribución de la carga en un sistema de energías renovables. El problema de la distribución de la carga en un sistema de energías renovables se plantea en el capítulo II de este trabajo. Se trata de un problema de optimización que requiere una técnica de optimización que permita encontrar la solución óptima de la distribución de la carga en un sistema de energías renovables.

En este capítulo se describe el algoritmo de corriente alentamiento o simulado para el problema de la distribución de la carga en un sistema de energías renovables. El algoritmo de corriente alentamiento o simulado es un algoritmo de optimización que permite encontrar la solución óptima de la distribución de la carga en un sistema de energías renovables.

El algoritmo de corriente alentamiento o simulado se basa en la idea de que la solución óptima de la distribución de la carga en un sistema de energías renovables se encuentra en el punto de mínima energía. El algoritmo de corriente alentamiento o simulado se basa en la idea de que la solución óptima de la distribución de la carga en un sistema de energías renovables se encuentra en el punto de mínima energía.

$$\begin{aligned} (x_1, x_2) &= (0, 0) \\ x_1 &= x_2 + 1 \\ (x_1, x_2) &= (1, 0) \end{aligned}$$

Se define la función de costo en el punto (x_1, x_2) por

$$C(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$$

El algoritmo de corriente alentamiento o simulado se basa en la idea de que la solución óptima de la distribución de la carga en un sistema de energías renovables se encuentra en el punto de mínima energía. El algoritmo de corriente alentamiento o simulado se basa en la idea de que la solución óptima de la distribución de la carga en un sistema de energías renovables se encuentra en el punto de mínima energía.

V. IMPLEMENTACIÓN DEL ALGORITMO DE SOBRECALENTAMIENTO SIMULADO PARA EL PROBLEMA DE LA BRAQUISTÓCRONA

A. Discretización de las Curvas

En el planteo original del problema de la braquistócrona planteado en el capítulo II se hace referencia a cualquier curva que represente una trayectoria posible entre dos puntos dados. Entre estas trayectorias se encuentran algunas que se pueden descartar como soluciones al problema de la braquistócrona, ya que el tiempo que toma la partícula para recorrerlas es mayor que el de otras curvas.

En este sentido, se pueden dejar de tomar en cuenta algunas clases de curvas para facilitar la implementación del algoritmo. Así, se descartan las curvas tales que tenga $x'(t)$ menor que cero¹ para algún tiempo t en algún punto de la trayectoria, ya que a partir de una curva que cumpla esta condición se puede encontrar otra curva cuya pendiente es positiva.²

Tomando en cuenta lo anterior, las curvas $y = y(x)$ que satisfacen la condición de conservación de la energía (1.6) y que satisfacen la condición anterior pueden discretizarse, al escoger $n + 1$ puntos (x_j, y_j) , $j = 0, 1, 2, \dots, n$ de la misma, tales que

$$\begin{aligned}(x_0, y_0) &= (0, 0) \\ x_i &< x_j, \forall i < j \\ (x_n, y_n) &= (a, b)\end{aligned}\tag{4.1}$$

donde la velocidad en el j -ésimo punto está dada por

¹ La figura 1.1 describe el sentido de la variable x

² Puede pensarse en estas curvas como aquellas que en algún momento en el sentido del eje x , van hacia el punto objetivo, después se alejan de él, y después van de nuevo hacia el punto objetivo. En esta forma el tiempo que tarda esta curva en ser recorrida debe ser mayor que el de alguna curva en el que se tiene que la partícula va siempre hacia el punto objetivo en el sentido del eje x , debido a que el campo tiene componente en x igual a cero.

$$v_j = \sqrt{2gy_j} \quad (4.2)$$

La curva discreta $\{(x_j, y_j)\}$ es una aproximación a la curva $y(x)$. Si consideramos que la trayectoria entre el punto (x_{i-1}, y_{i-1}) y el punto (x_i, y_i) se puede aproximar por un segmento de recta, si la distancia

$$d(i-1, i) = \|(x_i, y_i) - (x_{i-1}, y_{i-1})\| \quad (4.3)$$

es pequeña, entonces podemos decir que la componente del potencial sobre la trayectoria es constante entre estos dos puntos.

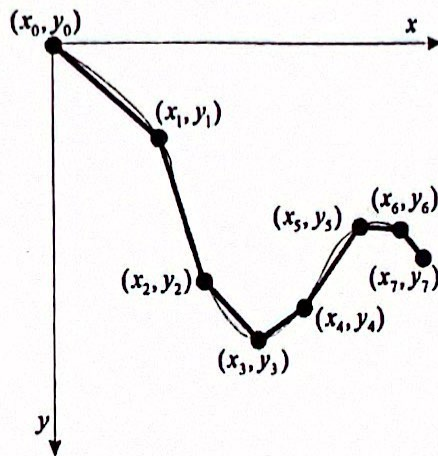


Figura 4.1 Discretización de una trayectoria en ocho puntos, donde $(x_0, y_0) = (0,0)$ y $(x_7, y_7) = (a,b)$

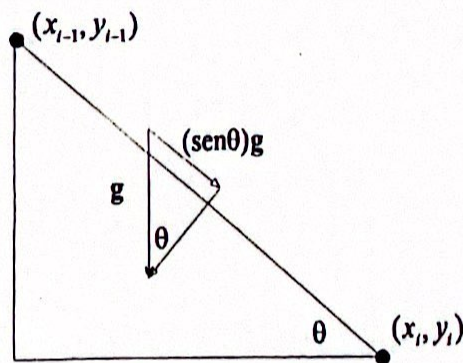


Figura 4.2 Trayectoria entre (x_{i-1}, y_{i-1}) y (x_i, y_i) en la curva discretizada

Asumiendo que la partícula se encuentra sujeta a un potencial constante en la dirección

de y y que no existen fuerzas disipativas que actúan sobre ella, de la geometría de la figura 4.2 se desprende que la aceleración entre los puntos (x_{i-1}, y_{i-1}) y (x_i, y_i) es constante e igual a $g \operatorname{sen} \theta$. El tiempo en el que la partícula recorre la curva discretizada entre los puntos dados es entonces

$$\begin{aligned} \Delta t_i &= \frac{v_i - v_{i-1}}{g \operatorname{sen} \theta} = \frac{\sqrt{2gy_i} - \sqrt{2gy_{i-1}}}{g \frac{y_i - y_{i-1}}{\sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2}}} \\ &= \left(\sqrt{\frac{2}{g}} \right) \left(\frac{(\sqrt{y_i} - \sqrt{y_{i-1}})}{[(\sqrt{y_i})^2 - (\sqrt{y_{i-1}})^2]} \sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2} \right) \\ &= \left(\sqrt{\frac{2}{g}} \right) \left(\frac{\sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2}}{\sqrt{y_i} + \sqrt{y_{i-1}}} \right) \end{aligned} \quad (4.4)$$

El tiempo total en recorrer la trayectoria, puede aproximarse entonces por

$$\sum_{i=1}^n \Delta t_i = \sum_{i=1}^n \left(\sqrt{\frac{2}{g}} \right) \left(\frac{\sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2}}{\sqrt{y_i} + \sqrt{y_{i-1}}} \right) \quad (4.5)$$

Cuando $n \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} y_{i-1} &\rightarrow y_i \\ \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} &\rightarrow y'(x_i) \end{aligned} \quad (4.6)$$

por lo que el límite cuando $n \rightarrow \infty$ de la suma (4.5) es

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \Delta t_i &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \left(\sqrt{\frac{2}{g}} \right) \left(\frac{\sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2}}{\sqrt{y_i} + \sqrt{y_{i-1}}} \right) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \frac{\sqrt{\frac{2}{g}} \sqrt{1 + \left(\frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right)^2}}{\sqrt{y_i} + \sqrt{y_{i-1}}} (x_i - x_{i-1}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \Delta t_i &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \frac{\sqrt{\frac{2}{g}} \sqrt{1 + (y'(x_i))^2}}{2\sqrt{y_i}} (x_i - x_{i-1}) \\
&= \int_0^a \frac{\sqrt{1 + (y')^2}}{\sqrt{2gy}} dx \\
&= t\{y\}
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Entonces, el valor de la suma (4.5) aproxima al valor del tiempo que toma la partícula en recorrer la curva $y(x)$, cuando el número de puntos es lo suficientemente grande.

B. Definición del Problema de Optimización a Solucionar Numéricamente

Para simplificar los cálculos se toma g igual a 2, a se fija siempre en 1, y b se da como un porcentaje del valor real de a .

Se define la malla C_F como el conjunto de pares ordenados (x, y) tales que x y y son múltiplos enteros no negativos de ϵ y $0 \leq x \leq a$, donde

$$\epsilon = \frac{a}{Fn} \tag{4.8}$$

siendo F es un número entero mayor que uno, que se llama factor de fineza.

El problema a solucionar es minimizar la función discreta

$$t(\mathbf{X}) = t((x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2}}{\sqrt{y_i} + \sqrt{y_{i-1}}} \right) \tag{4.9}$$

sujeta a las condiciones

$$\begin{aligned}
\epsilon &= \frac{1}{Fn} \\
(x_j, y_j) &\in C_F \\
(x_0, y_0) &= (0, 0) \\
x_i &< x_j, \forall i < j \\
(x_n, y_n) &= (1, b)
\end{aligned} \tag{4.10}$$

C. Cambio en la Configuración del Sistema Termodinámico

En el método de sobrecalentamiento utilizado debe cambiarse la configuración actual $\mathbf{X} = ((x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n))$ por otra configuración para que pueda aplicarse el criterio de Metropolis. En el algoritmo utilizado se cambian los puntos en el orden de 1 a n , uno a la vez, en la siguiente forma: para el punto (x_i, y_i) se encuentra un punto vecino (x_{pr}, y_{pr}) , el cual pertenece al conjunto

$$[\max\{x_i - D\varepsilon, x_i - x_{i-1} + \varepsilon\}, \min\{x_i + D\varepsilon, x_{i+1} - x_i - \varepsilon\}] \times [\max\{0, y_i - D\varepsilon\}, y_i + D\varepsilon] \subset C_{pr}, \quad (4.11)$$

donde D es un número entero positivo.

La probabilidad de escoger un punto en este conjunto depende de la cercanía del punto (x_i, y_i) con los puntos (x_{i+1}, y_{i+1}) y (x_{i-1}, y_{i-1}) de la curva y del valor de D , y se calcula como

$$\frac{1}{\left(\min\left\{ \frac{x_i + D}{\varepsilon}, \frac{x_{i+1} - x_i - 1}{\varepsilon} \right\} - \max\left\{ \frac{x_i - D}{\varepsilon}, \frac{x_i - x_{i-1} - 1}{\varepsilon} \right\} + 1 \right) \left(\frac{y_i + D}{\varepsilon} - \max\left\{ 0, \frac{y_i - D}{\varepsilon} \right\} + 1 \right)} \quad (4.12)$$

D. Algoritmo Utilizado

ENTRADA:

n , el número de puntos de la curva discreta

F , la fineza de la malla

D , el grado de vecindad

b , debe ser un múltiplo entero de ε

N , el número de soluciones para la temperatura inicial

λ , un número real tal que $0 < \lambda < 1$

π_0 , el porcentaje mínimo de aceptación de estados que incrementan t para aceptar la temperatura inicial, $0 < \pi_0 < 1$

μ , el factor de aumento de la temperatura inicial, $\mu > 1$

ρ , el factor de disminución de la temperatura entre dos etapas sucesivas, $0 < \rho < 1$

r , el factor de aumento, entre dos etapas sucesivas, del número de soluciones requeridas para llegar al equilibrio térmico, $r > 1$

M , el número de etapas de enfriamiento

a) $\varepsilon = \frac{1}{F \cdot n}$

b) $(x_0, y_0) = (0, 0), (x_n, y_n) = (1, b)$

c) Para $j = 1, 2, \dots, n - 1$

i) $x_j = jF\varepsilon$

ii) $y_j = \varepsilon \cdot \text{random_entero}$

d) $X = ((x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n))$

e) $Y = X$

f) $t(X) = t((x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2}}{\sqrt{y_i} + \sqrt{y_{i-1}}} \right)$

g) $X_{min} = X,$

$$t_{min} = t,$$

$$t_0 = t,$$

$$X_0 = X$$

$$xpr_0 = x_0$$

$$ypr_0 = y_0$$

$$xpr_n = x_n$$

$$ypr_n = y_n$$

h) $c = \lambda t$

i) $k = 0$

k) $\text{contador_inc} = 0$

$$\text{contador_pos} = 0$$

l) Para $k = 0, 1, \dots, N$

i) Para $i = 1, 2, \dots, n - 1$

$$(1) \quad x_{pr_i} = \varepsilon \cdot \text{random_entero} \left[\max \left\{ \frac{x_i}{\varepsilon} - D, \frac{x_i - x_{i-1}}{\varepsilon} + 1 \right\}, \min \left\{ \frac{x_i}{\varepsilon} + D, \frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} - 1 \right\} \right]$$

$$(2) \quad y_{pr_i} = \varepsilon \cdot \text{random_entero} \left[\max \left\{ 0, \frac{y_i}{\varepsilon} - D \right\}, \frac{y_i}{\varepsilon} + D \right]$$

ii) $\mathbf{X}_{pr} = ((x_{pr_0}, y_{pr_0}), (x_{pr_1}, y_{pr_1}), \dots, (x_{pr_n}, y_{pr_n}))$

iii) $t_{pr} = t(\mathbf{X}_{pr})$

iv) Si $t_{pr} \leq t$,

(1) $t = t_{pr}$

(2) $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{pr}$

(3) $k = k + 1$

v) Si $t_{pr} > t$,

(1) $\text{contador_pos} = \text{contador_pos} + 1$

(2) Si $\exp[(t - t_{pr})/c] > \text{random_real}[0,1)$,

(a) $t = t_{pr}$

(b) $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{pr}$

(c) $k = k + 1$

(d) $\text{contador_inc} = \text{contador_inc} + 1$

vi) Si $t < t_{min}$,

(1) $t_{min} = t$

(2) $\mathbf{X}_{min} = \mathbf{X}$

m) Si $\text{contador_inc} < \pi_0 \cdot \text{contador_pos}$,

i) $c_0 = \mu c_0$

ii) $\mathbf{X} = \mathbf{Y}$

iii) Irse al paso j)

n) $m = 1$

o) $c = \rho c$

p) $N = rN$

q) $k = 0$

r) Mientras $k < N + 1$

i) Para $i = 1, 2, \dots, n - 1$

$$(1) \ xpr_i = \varepsilon \cdot \text{random_entero} \left[\max \left\{ \frac{x_i - D}{\varepsilon}, \frac{x_i - x_{i-1}}{\varepsilon} + 1 \right\}, \min \left\{ \frac{x_i + D}{\varepsilon}, \frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon} - 1 \right\} \right]$$

$$(2) \ ypr_i = \varepsilon \cdot \text{random_entero} \left[\max \left\{ 0, \frac{y_i - D}{\varepsilon} \right\}, \frac{y_i + D}{\varepsilon} \right]$$

ii) $Xpr = ((xpr_0, ypr_0), (xpr_1, ypr_1), \dots, (xpr_n, ypr_n))$

iii) $t_{pr} = t(Xpr)$

iv) Si $t_{pr} \leq t$,

$$(1) \ t = t_{pr}$$

$$(2) \ X = Xpr$$

$$(3) \ k = k + 1$$

v) Si $t_{pr} > t$,

$$(1) \ \text{Si } \exp[(t - t_{pr})/c] > \text{random_real}[0,1),$$

$$(a) \ t = t_{pr}$$

$$(b) \ X = Xpr$$

$$(c) \ k = k + 1$$

vi) Si $t < t_{min}$,

$$(1) \ t_{min} = t$$

$$(2) \ X_{min} = X$$

- s) $m = m + 1$
- t) Si $m < M$, irse al paso o)
- u) PARAR

SALIDA:

\mathbf{X}_{min} , la configuración para la cual el valor de t fue mínimo

t_{min} , el valor de la función t en \mathbf{X}_{min}

La figura 4.3 muestra un diagrama de flujo de este algoritmo.

E. Implementación en MATLAB®

El programa fue implementado en MATLAB®. A partir de un código principal se desarrollaron otros para la obtención de datos cada cierto número de iteraciones. El apéndice A muestra el código principal utilizado.

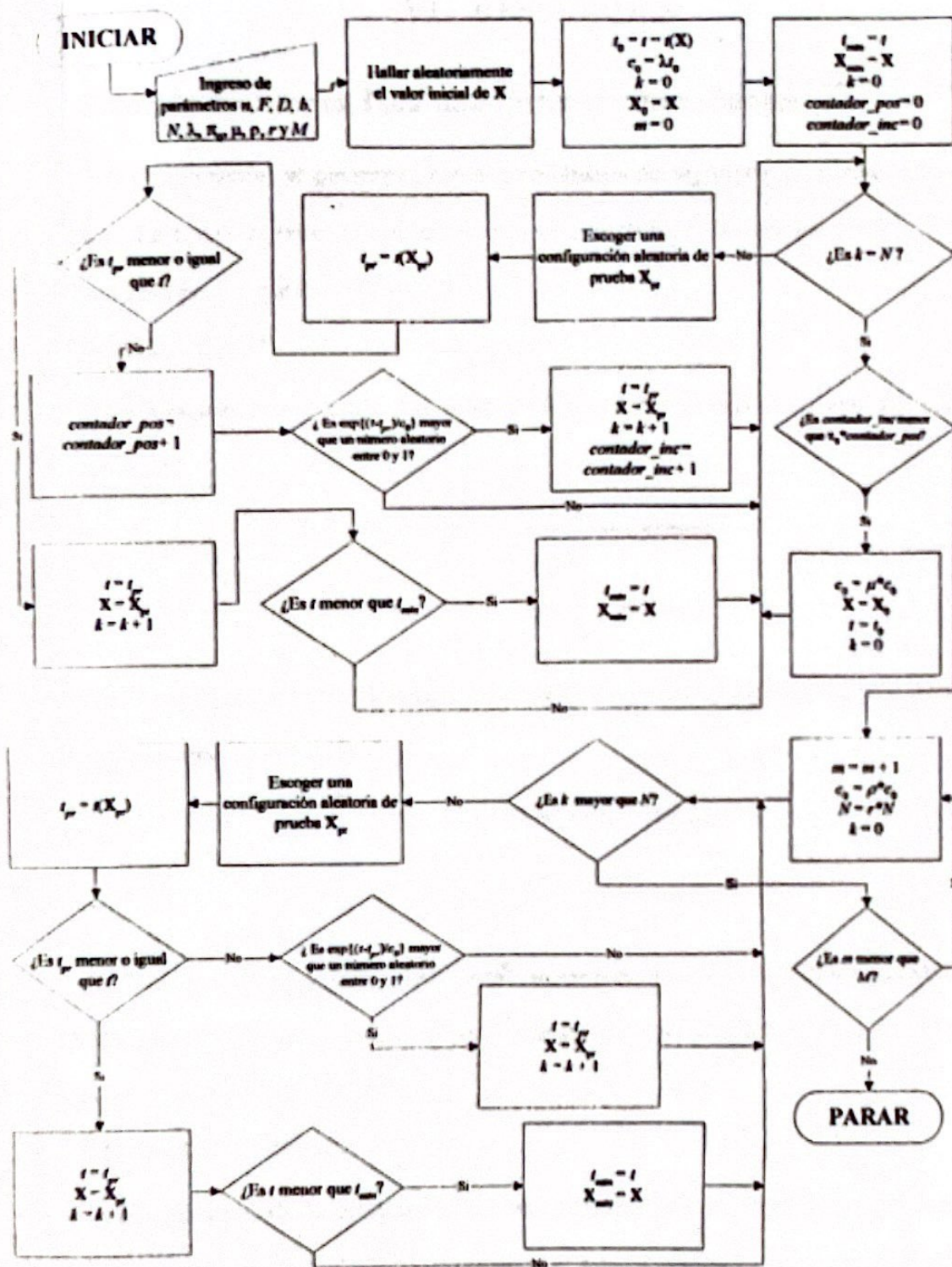


Figura 4.3 Diagrama de flujo del algoritmo utilizado

VI. RESULTADOS

A. Solución Numérica Para una Curva de Once Puntos

A continuación se presentan algunos resultados del algoritmo para una curva de once puntos. En todas las corridas realizadas, se utilizaron siempre los valores $b = 0.5$, $F = 10,000$ y $D = 1,000$, por lo que $\epsilon = 10^{-5}$.

1. Solución a Comparar

La braquistócrona entre los puntos $(0,0)$ y $(1,0.5)$ está dada por las ecuaciones paramétricas

$$\begin{aligned}x &= \frac{A}{2}(\alpha - \operatorname{sen} \alpha) \\y &= \frac{A}{2}(1 - \cos \alpha)\end{aligned}\tag{5.1}$$

donde A puede encontrarse al evaluar las ecuaciones (5.1) para el punto $(1,0.5)$ y resolver el sistema no lineal resultante

$$\begin{aligned}1 &= \frac{A}{2}(\alpha_b - \operatorname{sen} \alpha_b) \\0.5 &= \frac{A}{2}(1 - \cos \alpha_b)\end{aligned}\tag{5.2}$$

Al utilizar el programa MATLAB[®] se obtuvo que $A = 0.51719992168655$ y $\alpha_b = 3.50836876852448$, por lo que el tiempo que tarda en recorrerse, según la ecuación (1.13) para $g = 2$, es $t = 1.261549993896$.

2. Presentación de los Resultados

El algoritmo de la sección V.D genera una sucesión de soluciones, de las cuales, se registra la mejor encontrada hasta el momento. En la corrida del programa se registró cada 5,000 iteraciones lo siguiente:

- El número de soluciones encontradas hasta el momento.

- El menor valor de t hallado hasta el momento.
- La diferencia entre un valor de t calculado sobre once puntos de la braquistócrona y el menor valor de t determinado hasta ese momento. Este valor se encuentra evaluando (4.9) en una curva de once puntos donde los valores de x coinciden con los de la mejor aproximación calculada hasta el momento y los valores de y correspondientes son encontrados solucionando el sistema (5.1) para cada valor de x .¹
- La temperatura de esa iteración.
- La etapa de enfriamiento de esa iteración.

Además se presentan los puntos obtenidos para la mejor aproximación encontrada se presentan los puntos correspondientes de la braquistócrona para los valores de x de dicha mejor aproximación.

3 Primera corrida

En la primera corrida se obtuvo un valor de $t = 1.264189926$, que representa un error relativo de 0.00209609977229 ó del 0.21%, respecto del valor reportado en la sección 1.1, obtenido en un número de iteraciones comprendido entre la iteración 910,001 y la 915,000, no encontrándose una mejor aproximación hasta la iteración 1,140,683, que fue cuando el algoritmo completó 100 etapas de enfriamiento, desde una temperatura inicial de 0.30962627, que representa un 10% del valor de t , para la aproximación inicial.

Se observa que el porcentaje de aceptación de soluciones disminuye a medida que el número de iteraciones aumenta. Para las primeras 5,000 iteraciones, el porcentaje de aceptación fue de un 94.42%, mientras que para la iteración 1,140,683 fue del 24.12%.

¹ El valor de t evaluado en estos puntos de la braquistócrona no será igual al valor de tiempo que lleva recorrer la curva, debido a que (4.9) es una aproximación. Estos puntos, aunque son parte de la curva que minimiza el problema continuo, no necesariamente minimizan el problema discreto.

Tabla 6.1 Resultados para una curva de once puntos, primera corrida

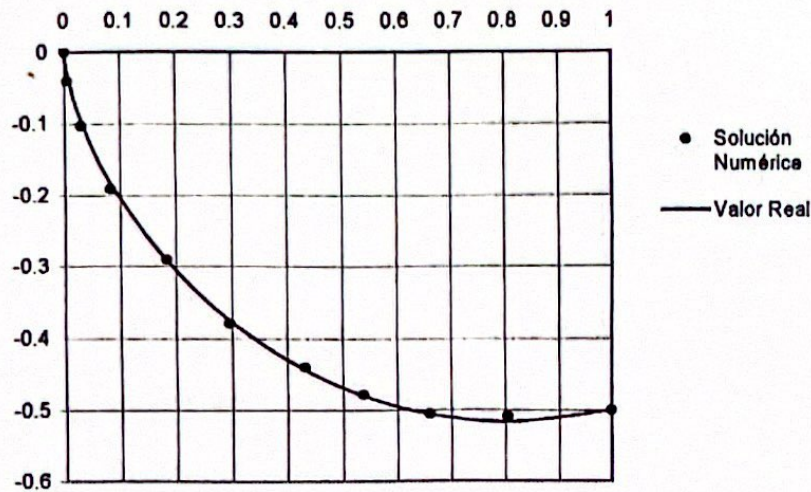
Iteraciones	Soluciones	t mínimo	diferencia de r	Temperatura	etapa	% Aceptación
1	1	3.096262703	-1.820768007	0.30962627	0	1.0000
5000	4721	1.415118238	-0.120651843	0.070130395	24	0.9442
10000	9241	1.350163438	-0.052309634	0.035506893	35	0.9241
20000	17600	1.279207533	-0.012065371	0.017977077	46	0.8800
25000	21411	1.277554199	-0.01189819	0.014035584	50	0.8564
30000	25096	1.273307108	-0.005038146	0.011657731	53	0.8365
40000	32116	1.272243798	-0.002910919	0.008555656	58	0.8029
45000	35478	1.269608206	-0.001486086	0.008042317	59	0.7884
75000	53684	1.268756665	-0.002612951	0.004608206	68	0.7158
100000	66696	1.268312458	-0.000869613	0.003597852	72	0.6670
115000	74070	1.267043552	-0.000391014	0.003179062	74	0.6441
120000	76316	1.266941128	-0.001999398	0.002988318	75	0.6360
155000	91407	1.266885441	-0.000886083	0.002482049	78	0.5897
160000	93078	1.266163631	-0.00127953	0.002333126	79	0.5817
175000	98802	1.265645269	-0.000707087	0.002193139	80	0.5646
195000	106364	1.265614676	-0.000449243	0.00206155	81	0.5455
225000	116291	1.265488749	-0.000738827	0.001821586	83	0.5168
260000	127365	1.265324635	-0.000548319	0.001609553	85	0.4899
300000	139033	1.265165033	-0.000606221	0.001422201	87	0.4634
330000	146712	1.264990334	-0.000389754	0.001336869	88	0.4446
400000	164766	1.264770341	-0.000513104	0.001181258	90	0.4119
515000	188377	1.264710561	-0.000558675	0.000981134	93	0.3658
545000	193730	1.264428574	-0.00053251	0.000981134	93	0.3555
850000	241638	1.264364631	-0.000315488	0.000720058	98	0.2843
915000	250035	1.264189926	-0.000619627	0.000676854	99	0.2733
1140683	275171	1.264189926	-0.000619627	0.000636243	100	0.2412

x numérica	y numérica	y real
0	0	0
0.00497	-0.04036	-0.030267929
0.02894	-0.10341	-0.095281075
0.08212	-0.19093	-0.182912438
0.18306	-0.29079	-0.2918177
0.29605	-0.37945	-0.375015379
0.43098	-0.43982	-0.443318918
0.53736	-0.4787	-0.479720233
0.66015	-0.50588	-0.505910752
0.80431	-0.50894	-0.517168162
1	-0.5	-0.5

Parámetros utilizados	
N	10
F	10000
D	1000
B	0.5
N	100
λ	0.1
π_0	0.8
μ	1.1
ρ	0.94
R	1.05
M	100

En la gráfica 6.2 se observa una tendencia a que el cambio en el número de soluciones por incrementos en el número de iteraciones va disminuyendo a medida que el número de

Gráfica 6.1 Solución Numérica para una Curva de Once puntos, primera corrida



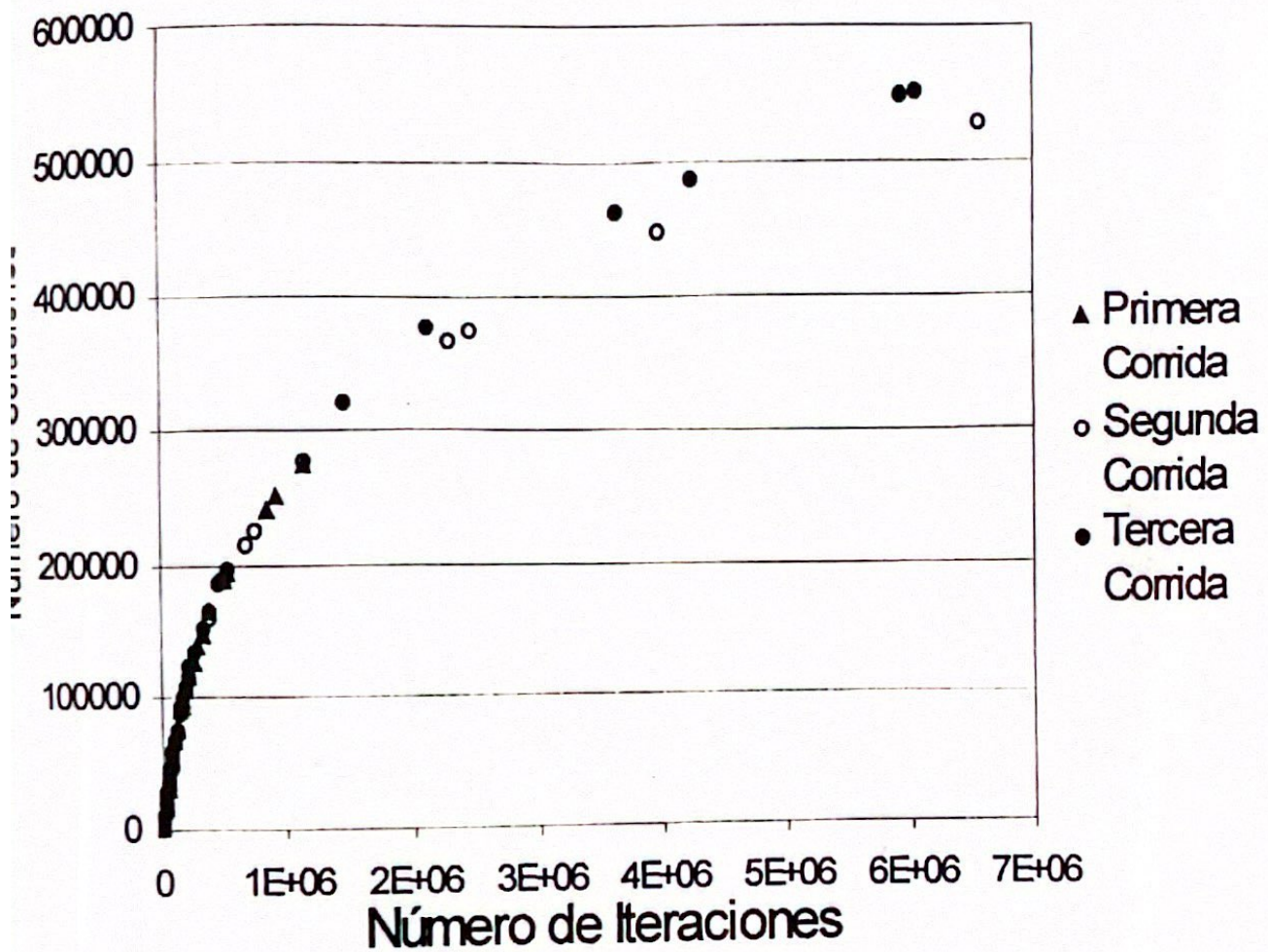
iteraciones aumenta.

En esta corrida, la temperatura iba descendiendo a una razón de 0.94 por etapa, teniendo la última etapa una temperatura de 0.000636243. La etapa inicial tiene un número de 100 aproximaciones, las cuales iban aumentando a una razón de 1.05, por lo que la última etapa consta de $13,150 = (1.05)^{100} * 100$ aproximaciones.

1 Segunda corrida

En la segunda corrida se obtuvo un valor de $t = 1.26365232$, que representa un error relativo de 0.001666462775294 ó del 0.17%, respecto del valor reportado en la sección 1.1, obtenido en un número de iteraciones comprendido entre la iteración 3,935,001 y la 3,940,000, no encontrándose una mejor aproximación hasta la iteración 6,551,306, que fue cuando el algoritmo completó 114 etapas de enfriamiento, desde una temperatura inicial de 0.309786797 (similar a la de la corrida anterior) que representa un 10% del valor de t , para

Gráfica 6.2 Número de Soluciones Aceptadas Contra Número de Iteraciones, Primeras Tres Corridas



la aproximación inicial.

Se observa en la tabla 6.3 que el porcentaje de aceptación de soluciones disminuye a medida que el número de iteraciones aumenta. Para las primeras 5,000 iteraciones, el porcentaje de aceptación fue del 94.24%, mientras que para la iteración 6,551,306 fue del 8.04%. En la gráfica 6.2 se observa una tendencia a que el cambio en el número de soluciones por incrementos en el número de iteraciones va disminuyendo a medida que el número de iteraciones aumenta.

En esta corrida, la temperatura iba descendiendo a una razón de 0.94 por etapa, teniendo la última etapa una temperatura de 0.000267694. La etapa inicial tiene un número de 100 aproximaciones, las cuales aumentan a una razón de 1.05, por lo que la última etapa consta de 26,036 aproximaciones.

Gráfica 6.3 Solución Numérica para una Curva de Once Puntos, Segunda Corrida

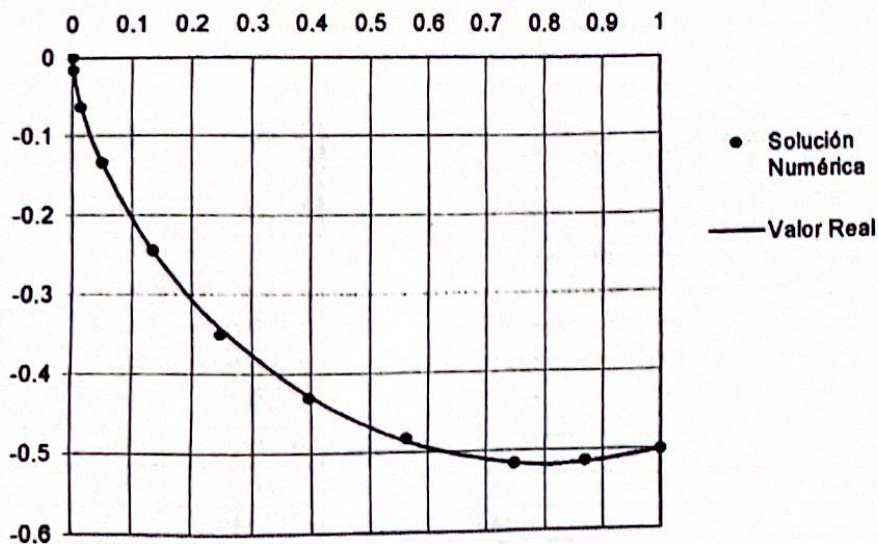


Tabla 6.2 Resultados para una curva de once puntos, segunda corrida

Iteraciones	Soluciones	t mínimo	diferencia de t	temperatura	etapa	% Aceptación
1	1	3.097867966	-1.82237327	0.309786797	0	1.0000
5000	4712	1.48673445	-0.215501095	0.070166755	24	0.9424
10000	9218	1.325835034	-0.047405224	0.035525302	35	0.9218
15000	13495	1.322672231	-0.037351114	0.024507832	41	0.8997
25000	21448	1.284294707	-0.005049493	0.014042861	50	0.8579
30000	25080	1.27947808	-0.006305313	0.011663775	53	0.8360
35000	28621	1.273708542	-0.005312913	0.010306112	55	0.8177
45000	35383	1.272588921	-0.006350738	0.008046486	59	0.7863
60000	44891	1.269441326	-0.004126828	0.005905349	64	0.7482
65000	47791	1.268577743	-0.002660738	0.005551028	65	0.7352
85000	58808	1.266901225	-0.002721091	0.004333959	69	0.6919
95000	63968	1.266726624	-0.001491258	0.003829486	71	0.6733
100000	66345	1.266008743	-0.001107164	0.003599717	72	0.6635
220000	114865	1.265701532	-0.001462191	0.00182253	83	0.5221
225000	116303	1.264549827	-0.000834817	0.00182253	83	0.5169
385000	159144	1.264418308	-0.000172329	0.001257309	89	0.4134
685000	214027	1.264386468	-0.000597688	0.000867379	95	0.3124
750000	224207	1.264324413	-0.000608888	0.000815336	96	0.2989
1155000	276983	1.264079763	-0.000326251	0.000598379	101	0.2398
2295000	366236	1.264047031	-0.000196944	0.000439153	106	0.1596
2470000	375910	1.263750129	-0.000240827	0.000412803	107	0.1522
3940000	446401	1.26365232	-0.000279655	0.000342868	110	0.1133
6551306	526903	1.26365232	-0.000279655	0.000267694	114	0.0804

x numérica	y numérica	y real
0	0	0
0.00138	-0.01563	-0.012971788
0.01449	-0.06347	-0.060988891
0.05009	-0.13495	-0.134831027
0.13435	-0.24476	-0.244989951
0.24637	-0.35039	-0.342018945
0.39558	-0.43092	-0.428024081
0.56223	-0.48256	-0.486327477
0.74846	-0.5161	-0.515220241
0.86976	-0.51406	-0.515608786
1	-0.5	-0.5

Parámetros utilizados	
N	10
F	10000
D	1000
B	0.5
N	100
λ	0.1
π_0	0.8
μ	1.1
ρ	0.94
R	1.05
M	120

5 Tercera Corrida

En la segunda corrida se obtuvo un valor de $t = 1.263537252$, que representa un error relativo de 0.001575251170081 ó del 0.16%, con respecto del valor reportado en la sección 1.1, obtenido en un número de iteraciones comprendido entre la iteración

Tabla 6.3 Resultados para una curva de once puntos, tercera corrida

Iteraciones	Soluciones	t mínimo	diferencia de t	temperatura	etapa	% Aceptación
1	1	3.480516576	-2.20502188	0.348051658	0	1.0000
5000	4736	1.497945304	-0.229673447	0.078833751	24	0.9472
10000	9329	1.45686123	-0.181928503	0.039913387	35	0.9329
15000	13697	1.430407488	-0.113287747	0.025882937	42	0.9131
20000	17823	1.298329281	-0.015495618	0.020208076	46	0.8912
25000	21679	1.2862617	-0.019082867	0.015777435	50	0.8672
30000	25306	1.274628666	-0.007906175	0.013104485	53	0.8435
40000	32390	1.27455254	-0.006278024	0.009617434	58	0.8098
50000	39250	1.273920601	-0.005758538	0.007988087	61	0.7850
55000	42545	1.27319451	-0.003875552	0.007058274	63	0.7735
60000	45750	1.273132427	-0.004431608	0.006634777	64	0.7625
65000	48900	1.269575492	-0.002122455	0.005862489	66	0.7523
75000	54769	1.268778895	-0.003398925	0.005180095	68	0.7303
80000	57706	1.26836311	-0.002445333	0.00486929	69	0.7213
110000	73826	1.267531556	-0.00164455	0.003573591	74	0.6711
140000	88153	1.267000041	-0.00041141	0.002968168	77	0.6297
150000	92206	1.266896805	-0.001050998	0.002790078	78	0.6147
170000	100623	1.266069836	-0.000409844	0.002465313	80	0.5919
185000	106773	1.266028037	-0.000741403	0.002317394	81	0.5772
190000	108832	1.266025538	-0.000969254	0.00217835	82	0.5728
230000	123315	1.26583321	-0.001371651	0.00192479	84	0.5362
260000	133500	1.264989958	-0.000623362	0.001700745	86	0.5135
330000	152401	1.264869705	-0.001252783	0.001412611	89	0.4618
390000	165860	1.264805357	-0.00074994	0.001327855	90	0.4253
475000	185921	1.264760537	-0.000416495	0.001102895	93	0.3914
490000	188919	1.264338377	-0.000350682	0.001102895	93	0.3855
525000	195958	1.264040613	-0.000351564	0.001036721	94	0.3733
1460000	320132	1.263910248	-0.000313617	0.000558394	104	0.2193
2130000	376636	1.263901417	-0.000238405	0.000463793	107	0.1768
3600000	461929	1.263819503	-0.000237292	0.000362106	111	0.1283
4210000	486645	1.26371315	-8.0812E-05	0.000340379	112	0.1156
5930000	547089	1.263601788	-0.000118224	0.000282714	115	0.0923
5935000	547157	1.263537252	-0.000146539	0.005451488	115	0.0922
6059073	550199	1.263537252	-0.000146539	0.000282714	115	0.0908

Tabla 6.3. Continuación

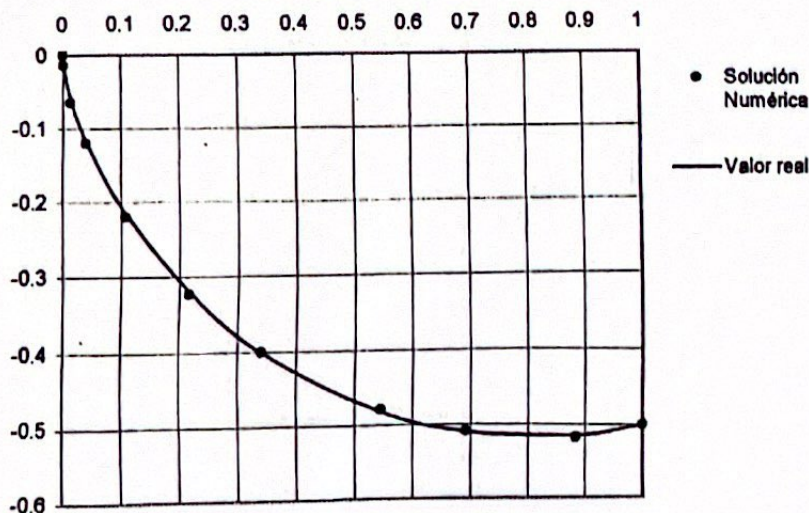
x numérica	y numérica	y real
0	0	0
0.00133	-0.01334	-0.0126581
0.01369	-0.06455	-0.05877809
0.03984	-0.12004	-0.11675013
0.10769	-0.22002	-0.21522436
0.21579	-0.32334	-0.31905229
0.34048	-0.40006	-0.40063926
0.54451	-0.47897	-0.48169012
0.69102	-0.50924	-0.51004347
0.88382	-0.51782	-0.51473149
1	-0.5	-0.5

Parámetros utilizados	
N	10
F	10000
D	1000
B	0.5
N	100
λ	0.1
π_0	0.8
μ	1.1
ρ	0.94
R	1.05
M	120

5,930,001 y la 5,935,000, no encontrándose una mejor aproximación hasta la iteración 6,059,073, que fue cuando el algoritmo completó 115 etapas de enfriamiento, desde una temperatura inicial de 0.348051658 (un 12% mayor que la de las corridas anteriores) que representa un 10% del valor de t , para la aproximación inicial.

Se observa que el porcentaje de aceptación de soluciones disminuye a medida que el número de iteraciones aumenta. Para las primeras 5,000 iteraciones, el porcentaje de a-

Gráfica 6.4 Solución Numérica para una Curva de Once Puntos, Tercera Corrida.



ceptación fue del 94.72%, mientras que para la iteración 6,059,073 fue del 9.08%. En la gráfica 6.2 puede observarse que el cambio en el número de soluciones por incrementos en el número de iteraciones va disminuyendo a medida que el número de iteraciones aumenta.

En esta corrida, la temperatura iba descendiendo a una razón de 0.94 por etapa, teniendo la última etapa una temperatura de 0.000282714. La etapa inicial tiene un número de 100 aproximaciones, las cuales aumentan a una razón de 1.05, por lo que la última etapa consta de 27,338 aproximaciones.

6. Cuarta Corrida

En la cuarta corrida se obtuvo un valor de $t = 1.280628363$, que representa un error relativo de 0.01512295921391 ó del 1.51%, con respecto del valor reportado en la sección 1.1, obtenido en un número de iteraciones comprendido entre la iteración 3,090,001 y la 3,095,000, no encontrándose una mejor aproximación hasta la iteración 3,366,254, que es cuando el algoritmo completó 150 etapas de enfriamiento, desde una temperatura inicial de 0.320979753 que representa un 10% del valor de t , para la aproximación inicial.

Tabla 6.4 Resultados para una curva de once puntos, cuarta corrida

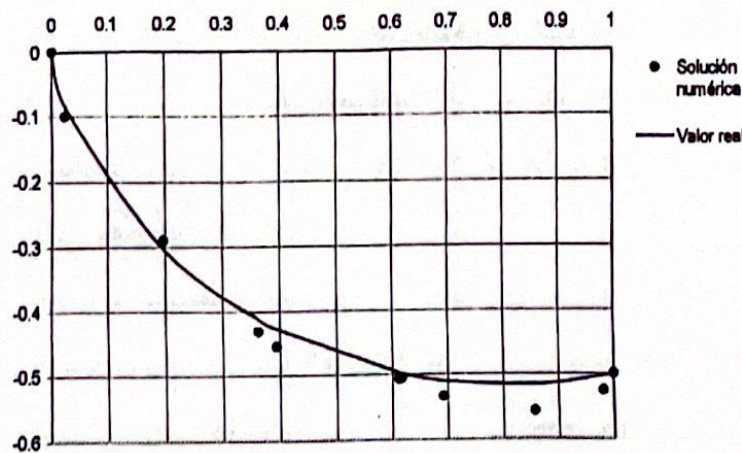
Iteraciones	Soluciones	t mínimo	diferencia de t	temperatura	etapa	% Aceptación
1	1	3.209797528	-1.934302832	0.320979753	0	1.0000
5000	4801	1.70267073	-0.424064212	0.249664908	25	0.9602
20000	19349	1.614416095	-0.334872957	0.198137637	48	0.9675
30000	29050	1.590904328	-0.299044696	0.182830453	56	0.9683
330000	319277	1.579891033	-0.304274956	0.112859436	104	0.9675
345000	333526	1.533736061	-0.262755244	0.112859436	104	0.9667
350000	338264	1.456123475	-0.183971151	0.111730842	105	0.9665
785000	753335	1.449559961	-0.180110344	0.095134094	121	0.9597
790000	757947	1.357426355	-0.089947396	0.095134094	121	0.9594
795000	762452	1.356734576	-0.089086116	0.095134094	121	0.9591
800000	767036	1.306519113	-0.038620129	0.095134094	121	0.9588
845000	809275	1.29610451	-0.026800451	0.093240925	123	0.9577
3095000	2922319	1.280628363	-0.012149954	0.071799535	149	0.9442
3366254	3175795	1.280628363	-0.012149954	0.07108154	150	0.9434

Tabla 6.4 Continuación

x numérica	y numérica	y real
0	0	0
0.02381	-0.10036	-0.084079513
0.19696	-0.29086	-0.303747898
0.36218	-0.43128	-0.411971722
0.39328	-0.45511	-0.426970516
0.61154	-0.5078	-0.497443127
0.61696	-0.50664	-0.498507953
0.69204	-0.53476	-0.51016377
0.85675	-0.55807	-0.516249258
0.98131	-0.5262	-0.503286614
1	-0.5	-0.5

Parámetros utilizados	
n	10
F	10000
D	1000
B	0.5
N	100
λ	0.1
π_0	0.8
μ	1.1
ρ	0.99
r	1.05
M	150

Gráfica 6.5 Solución Numérica Para una Curva de Once Puntos, Cuarta Corrida



Se observa en la tabla 6.4 que el porcentaje de aceptación de soluciones disminuye a medida que el número de iteraciones aumenta. Para las primeras 5,000 iteraciones, el porcentaje de aceptación fue del 96.02%, mientras que para la iteración 3,366,254 fue del 94.34%. En la gráfica 6.6 se observa una tendencia a que el cambio en el número de soluciones por incrementos en el número de iteraciones va disminuyendo a medida que el número de iteraciones aumenta.

En esta corrida, la temperatura iba descendiendo a una razón de 0.99 por etapa, teniendo la última etapa una temperatura de 0.07108154. La etapa inicial tiene un número de 100 aproximaciones, las cuales aumentan a una razón de 1.05, por lo que la última etapa consta de 150,798 aproximaciones.

7 Quinta Corrida

En la quinta corrida se obtuvo un valor de $t = 1.273961803$, que representa un error relativo de 0.00983853922877 ó del 0.98%, con respecto del valor reportado en la sección 1.1, obtenido en un número de iteraciones comprendido entre la iteración 12,680,001 y la 12,685,000, no encontrándose una mejor aproximación hasta la iteración 39,925,721, que es cuando el algoritmo completó 200 etapas de enfriamiento, desde una temperatura inicial de 0.348051658 que representa un 10% del valor de t , para la aproximación inicial.

En esta corrida, la temperatura iba descendiendo a una razón de 0.99 por etapa, teniendo la última etapa una temperatura de 0.046631848. La etapa inicial tiene un número de 100 aproximaciones, las cuales aumentan a una razón de 1.05, por lo que la última etapa consta de 1,729,259 aproximaciones.

Para las primeras 5,000 iteraciones, el porcentaje de aceptación fue del 96.58%, mientras que para la iteración 39,925,721 fue del 91.26%. En la gráfica 6.6 se observa una tendencia a que el cambio en el número de soluciones por incrementos en el número de iteraciones va disminuyendo a medida que el número de iteraciones aumenta.

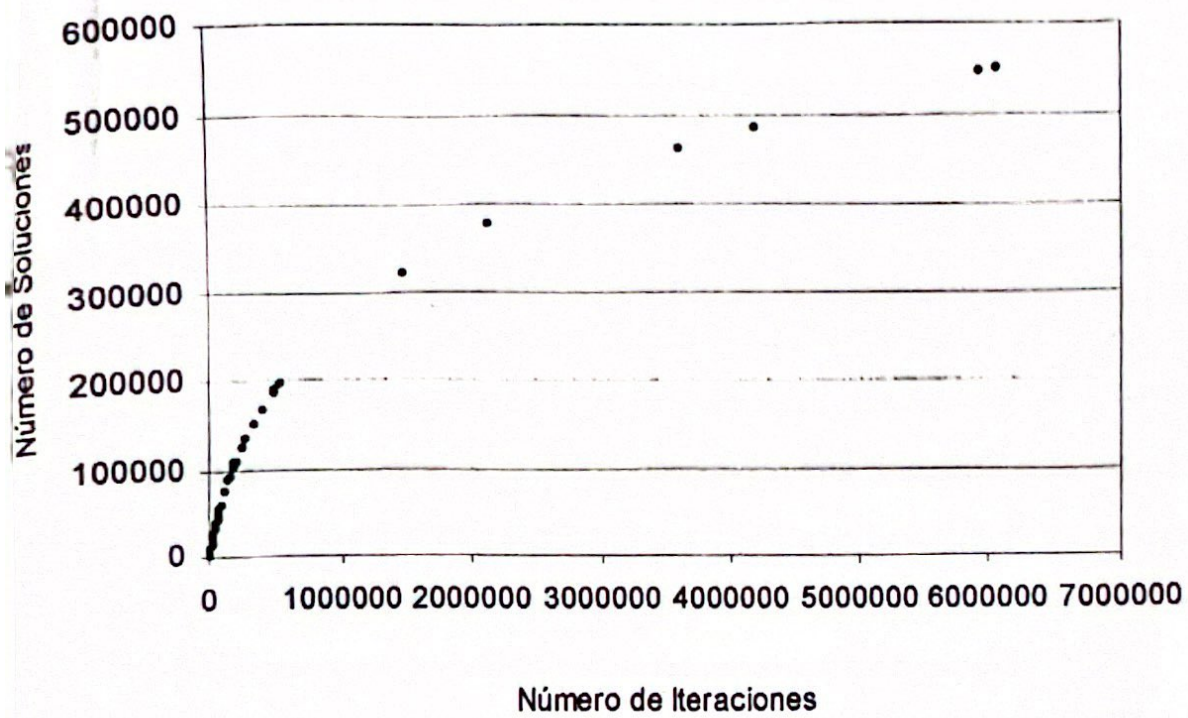
Tabla 6.5 Resultados para una curva de once puntos, quinta corrida

Iteraciones	Soluciones	t mínimo	diferencia de t	temperatura	etapa	% Aceptación
1	1	3.480516576	-2.20502188	0.348051658	0	1.0000
5000	4829	2.315504205	-1.020115368	0.270722013	25	0.9658
10000	9676	2.28857816	-1.005043803	0.242387775	36	0.9676
15000	14555	1.893568118	-0.609201052	0.225921246	43	0.9703
35000	33796	1.791452922	-0.522814813	0.1923624	59	0.9656
40000	38687	1.736814381	-0.462940034	0.188534389	61	0.9672
400000	388312	1.659092196	-0.392150393	0.117555979	108	0.9708
405000	393008	1.438550345	-0.167945745	0.117555979	108	0.9704
410000	397783	1.430353554	-0.161857938	0.117555979	108	0.9702
490000	474201	1.337011518	-0.042550553	0.112923804	112	0.9678
500000	483651	1.330219968	-0.064379991	0.112923804	112	0.9673
805000	775269	1.321645674	-0.040002494	0.102126265	122	0.9631
845000	812450	1.298011792	-0.031884152	0.101105002	123	0.9615
2860000	2718089	1.293507275	-0.01538741	0.07943599	147	0.9504
5445000	5125458	1.284355153	-0.010037369	0.069706751	160	0.9413
8455000	7914723	1.284344846	-0.01728876	0.063678319	169	0.9361
9540000	8915188	1.281689858	-0.013234731	0.06178701	172	0.9345
9545000	8919713	1.276531082	-0.008114762	0.06178701	172	0.9345
12685000	11799947	1.273961803	-0.007112759	0.058758831	177	0.9302
39925721	36438204	1.273961803	-0.007112759	0.046631848	200	0.9126

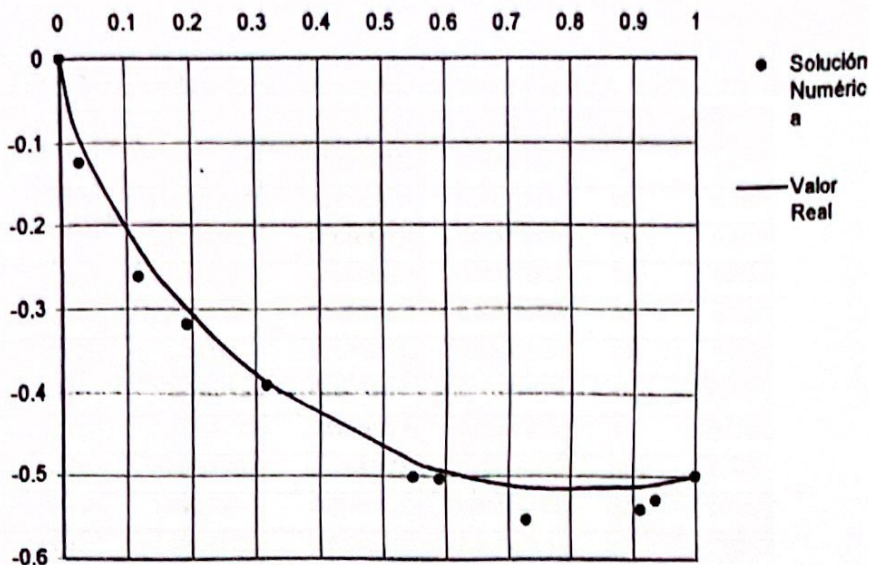
x numérica	y numérica	y real
0	0	0
0.02869	-0.12377	-0.0947541
0.11794	-0.26158	-0.22708283
0.19219	-0.31828	-0.29971709
0.31688	-0.39079	-0.38745119
0.54918	-0.502	-0.48294595
0.58989	-0.50385	-0.4928821
0.72879	-0.55291	-0.51381217
0.91107	-0.54047	-0.51248106
0.93608	-0.52942	-0.50977219
1	-0.5	-0.5

Parámetros utilizados	
n	10
F	10000
D	1000
B	0.5
N	100
λ	0.1
π_0	0.8
μ	1.1
ρ	0.99
r	1.05
M	200

**Gráfica 6.6 Número de Soluciones Aceptadas Contra
Número de Iteraciones, Tercera Corrida**



Gráfica 6.7 Solución Numérica Para una Curva de Once Puntos, Quinta Corrida



8 Sexta Corrida

En la sexta corrida se obtuvo un valor de $t = 1.263363052$, que representa un error relativo de 0.001437167066523 ó del 0.14%, con respecto del valor reportado en la sección 1.1, obtenido en un número de iteraciones comprendido entre la iteración 40,665,001 y la 40,670,000, no encontrándose una mejor aproximación hasta la iteración 43,078,104, que es cuando el algoritmo completa 81 etapas de enfriamiento, desde una temperatura inicial de 0.348051658 que representa un 10% del valor de t , para la aproximación inicial.

En esta corrida, la temperatura iba descendiendo a una razón de 0.9 por etapa, teniendo la última etapa una temperatura de 7.60404×10^{-5} . La etapa inicial tiene un número de 100 aproximaciones, las cuales aumentan a una razón de 1.06, por lo que la última etapa consta de 11215 soluciones.

Para las primeras 5,000 iteraciones, el porcentaje de aceptación fue del 96.58%, mientras que para la iteración 39,925,721 fue del 91.26%. En la gráfica 6.9 se observa una tendencia a que el cambio en el número de soluciones por incrementos en el número de

iteraciones va disminuyendo a medida que el número de iteraciones aumenta.

Tabla 6.6 Resultados para una curva de once puntos, sexta corrida

Iteraciones	Soluciones	t mínimo	diferencia de t	temperatura	etapa	% Aceptación
1	1	3.480516576	-2.20502188	0.348051658	0	1.0000
5000	4583	1.497037267	-0.226938214	0.034275114	22	0.9166
10000	8723	1.311685451	-0.006051723	0.013278882	31	0.8723
15000	12276	1.272805365	-0.006438631	0.007841047	36	0.8184
20000	15384	1.268817296	-0.000561577	0.005716123	39	0.7692
30000	20603	1.26824334	-0.002492795	0.003375314	44	0.6868
35000	22951	1.267965591	-0.002930107	0.002734004	46	0.6557
40000	25127	1.267277028	-0.001503979	0.002460604	47	0.6282
60000	32576	1.266591033	-0.000823773	0.001614402	51	0.5429
65000	34142	1.266273941	-0.000101572	0.001452962	52	0.5253
70000	35578	1.266071165	-0.000665206	0.001307666	53	0.5083
75000	36833	1.265087514	-0.000767052	0.001307666	53	0.4911
80000	38036	1.265066893	-0.000907953	0.001176899	54	0.4755
110000	44362	1.265039384	-0.000599891	0.000953288	56	0.4033
125000	46929	1.264799959	-0.00094775	0.000857959	57	0.3754
160000	52222	1.264530029	-0.000370527	0.000694947	59	0.3264
230000	60430	1.264447125	-0.000482577	0.000506616	62	0.2627
240000	61275	1.263838139	-3.10751E-05	0.000506616	62	0.2553
1170000	94999	1.26375587	-0.000234568	0.000242313	69	0.0812
1605000	102571	1.263753968	-0.000180748	0.000218082	70	0.0639
1715000	103961	1.263686711	-0.000199301	0.000196274	71	0.0606
3575000	123494	1.263683863	-0.000263391	0.000143083	74	0.0345
3725000	124147	1.263647714	-0.000294141	0.000143083	74	0.0333
4835000	130983	1.263572411	-0.000149907	0.000128775	75	0.0271
5820000	134482	1.263491386	-0.000186121	0.000128775	75	0.0231
7915000	142390	1.263454371	-9.69462E-05	0.000115898	76	0.0180
16145000	160164	1.263448856	3.01287E-05	9.38771E-05	78	0.0099
17940000	162229	1.263425459	-9.33992E-05	9.38771E-05	78	0.0090
20105000	165780	1.263399932	-1.27507E-06	8.44893E-05	79	0.0082
20115000	165781	1.26339508	-8.66053E-06	8.44893E-05	79	0.0082
29365000	176062	1.263384898	5.25443E-05	7.60404E-05	80	0.0060
40670000	183526	1.263363052	-1.89861E-05	7.60404E-05	80	0.0045
43078104	186068	1.263363052	-1.89861E-05	7.60404E-05	81	0.0043

Tabla 6.6 Continuación

x numérica	y numérica	y real
0	0	0
0.00244	-0.0228	-0.018922704
0.02079	-0.08209	-0.077048558
0.05191	-0.14066	-0.137872728
0.11667	-0.22653	-0.225643282
0.21023	-0.31603	-0.314631007
0.33513	-0.4005	-0.397730384
0.46271	-0.45789	-0.455622093
0.67038	-0.51344	-0.50738615
0.81573	-0.52142	-0.517194612
1	-0.5	-0.5

Parámetros utilizados	
n	10
F	10000
D	1000
h	0.5
N	100
λ	0.1
π_0	0.8
μ	1.1
ρ	0.9
r	1.05
M	200

Gráfica 6.8 Solución Numérica Para una Curva de Once Puntos, Sexta Corrida

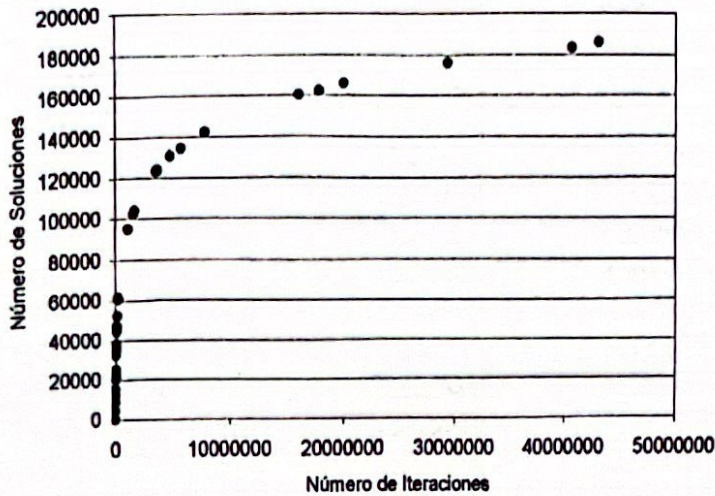


9 Una Corrida del Método de Montecarlo

Se realizó también una corrida utilizando el método de Montecarlo. Se obtuvo un tiempo mínimo de 1.263690303, el cual se obtuvo entre la iteración 38,325,001 y la 38,330,000; se realizaron 40,000,000 iteraciones. El error relativo para este resultado es de

0,00169657097567 ó 0.16%. En la tabla 6.7 se observa que el porcentaje de aceptación disminuye a medida que el número de iteraciones aumenta, y que el número de soluciones aceptadas fue de 248 en 40,000,000 pruebas.

Gráfica 6.9 Número de Soluciones Aceptadas Contra Número de Iteraciones, Sexta Corrida



Gráfica 6.10 Solución Numérica Para una Curva de Once Puntos, Método de Montecarlo

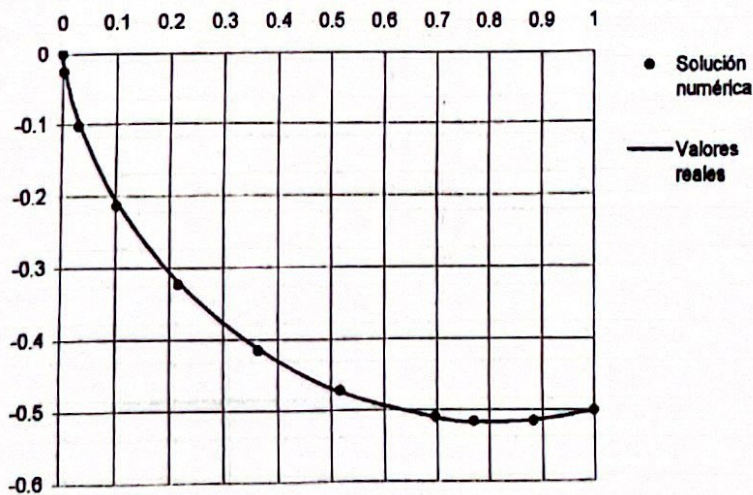


Tabla 6.7 Resultados para una curva de once puntos, método de Montecarlo

iteraciones	soluciones	t mínimo	diferencia t	% Aceptación
1	1	3.306984021	-2.031489325	1.0000
5000	194	1.265869812	0.000211112	0.0388
10000	195	1.265837497	9.82151E-05	0.0195
25000	196	1.265690784	9.47281E-05	0.0078
35000	201	1.265255697	-2.45654E-05	0.0057
40000	203	1.264999249	5.54512E-05	0.0051
45000	205	1.264899095	4.53422E-05	0.0046
50000	207	1.264863426	-0.000132528	0.0041
55000	210	1.264598839	-3.05673E-05	0.0038
65000	211	1.264595381	0.000130901	0.0032
70000	212	1.264557025	3.70511E-05	0.0030
90000	213	1.264512384	0.000196778	0.0024
320000	214	1.264466486	0.000162575	0.0007
350000	216	1.264437735	-1.77161E-06	0.0006
355000	217	1.264410065	0.000105962	0.0006
370000	218	1.264376827	5.58549E-05	0.0006
375000	219	1.264351883	0.000236337	0.0006
475000	220	1.264321927	9.25127E-05	0.0005
480000	221	1.264269098	0.000128125	0.0005
915000	222	1.264230449	0.00016165	0.0002
1520000	223	1.264211628	0.000129033	0.0001
2120000	224	1.264193834	0.000108403	0.0001
2405000	225	1.26417879	6.14161E-05	0.0001
2450000	226	1.264114378	6.42093E-05	0.0001
2465000	227	1.264080551	3.29149E-05	0.0001
2595000	228	1.264071395	3.42274E-06	0.0001
2610000	229	1.26406417	1.98601E-05	0.0001
2640000	230	1.264049209	2.41992E-05	0.0001
2675000	231	1.26403385	3.14676E-05	0.0001
2715000	232	1.264019654	5.44729E-05	0.0001
2785000	233	1.263995148	-2.21733E-05	0.0001
2795000	234	1.26397071	-5.81737E-05	0.0001
2820000	235	1.26395285	8.99528E-05	0.0001
2890000	236	1.263914244	5.45266E-05	0.0001
2925000	237	1.263862835	5.89199E-05	0.0001
3035000	238	1.263855541	5.02848E-05	0.0001
3070000	239	1.263854155	-4.56347E-06	0.0001
3125000	240	1.263844999	-4.19842E-06	0.0001
3310000	241	1.263812647	2.74055E-05	0.0001
3355000	242	1.263803601	3.81595E-05	0.0001
3910000	243	1.26376189	5.18654E-05	0.0001

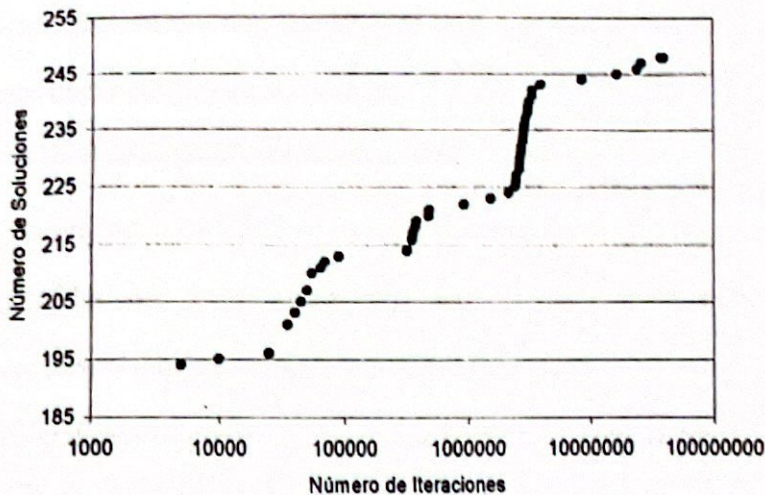
Tabla 6.7 Continuación

iteraciones	soluciones	t mínimo	diferencia t	% Aceptación
8570000	244	1.263750824	0.000119182	0.0000
16550000	245	1.263742644	5.45812E-05	0.0000
24340000	246	1.263729527	4.49205E-05	0.0000
26270000	247	1.26369833	4.86444E-05	0.0000
38330000	248	1.263690303	6.95076E-05	0.0000
40000000	248	1.263690303	6.95076E-05	0.0000

x numérica	y numérica	y real
0	0	0
0.00244	-0.0228	-0.018922704
0.02079	-0.08209	-0.077048558
0.05191	-0.14066	-0.137872728
0.11667	-0.22653	-0.225643282
0.21023	-0.31603	-0.314631007
0.33513	-0.4005	-0.397730384
0.46271	-0.45789	-0.455622093
0.67038	-0.51344	-0.50738615
0.81573	-0.52142	-0.517194612
1	-0.5	-0.5

Parámetros utilizados	
<i>n</i>	10
<i>F</i>	10000
<i>D</i>	1000
<i>h</i>	0.5

Gráfica 6.11 Número de Soluciones Aceptadas Contra Número de Iteraciones, Método de Montecarlo



Como puede apreciarse en la gráfica 6.11, el número de soluciones aceptadas se incrementa cada vez menos a medida que el número de iteraciones aumenta.

10 Comparación de los Resultados de las Distintas Corridas del Método de Sobrecalentamiento Simulado

a. Aceptación de Soluciones

La gráfica 6.2 muestra que la aceptación de soluciones para las tres primeras corridas fue muy similar, lo cual se debe a que los parámetros fueron los mismos ya que las temperaturas iniciales fueron muy parecidas. Similarmente, se puede apreciar en la gráfica 6.6 el mismo comportamiento de la aceptación de soluciones en la cuarta y en la quinta corridas. La sexta corrida difiere de las otras dos, ya que puede apreciarse en la gráfica 6.12 un comportamiento a aceptar menos soluciones que las otras corridas y en la tabla 6.6 puede verse que se aceptaron 118,068 soluciones en 43,078,104 iteraciones, lo cual es muy diferente de las otras corridas, en las cuales se aceptaron muchas más soluciones.

b. Enfriamiento

En la gráfica 6.13 se muestra la temperatura como función de las iteraciones. Se ha omitido en la misma la temperatura inicial. Como puede observarse la temperatura de las corridas disminuyó más rápidamente para la sexta corrida, por lo cual el porcentaje de aceptación disminuye a su vez más rápidamente que las primeras tres corridas, las cuales tienen un comportamiento muy similar, y en éstas a su vez, disminuye la temperatura a una razón mayor que la cuarta y quinta corridas.

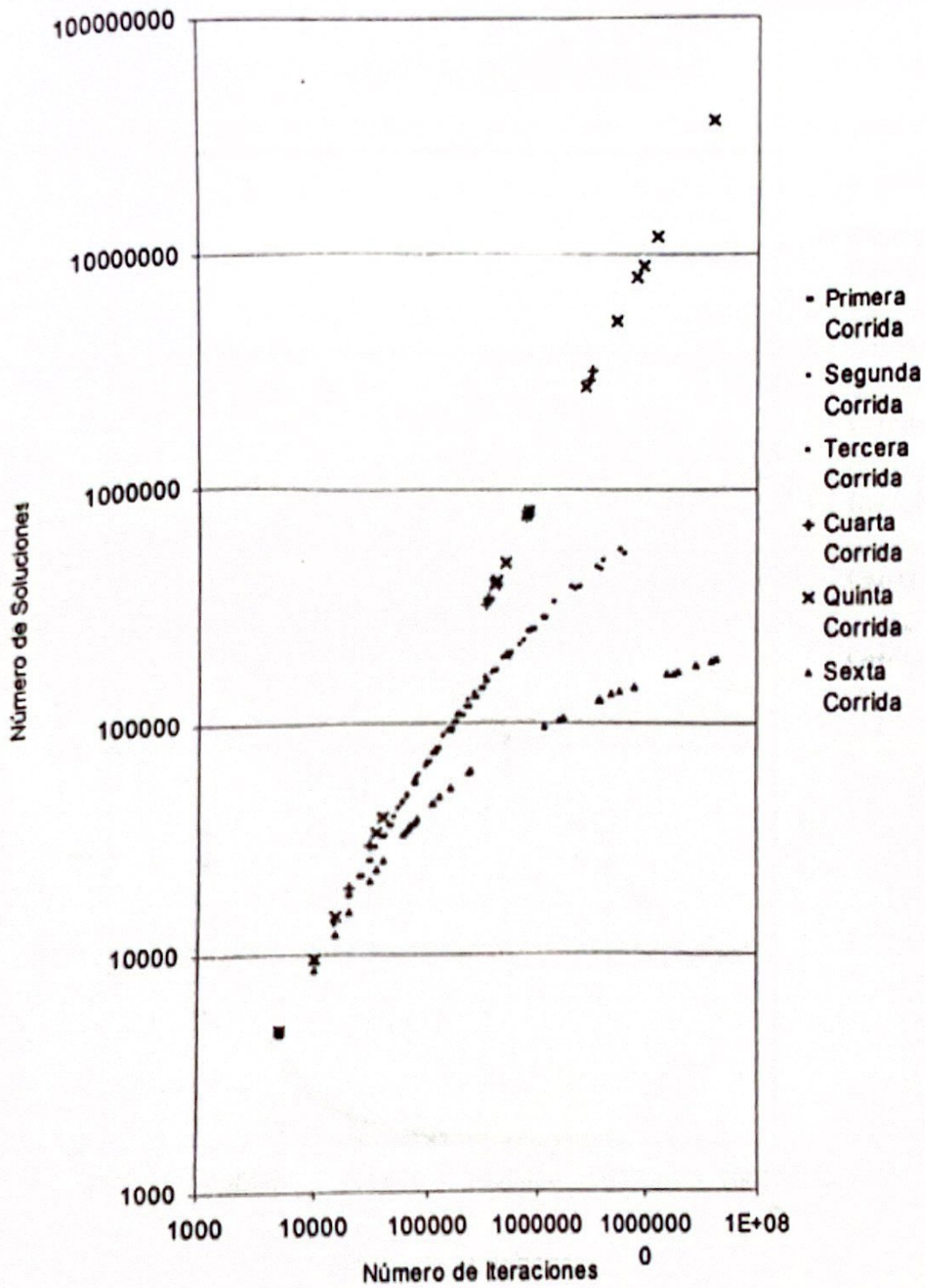
11 Comparación de las soluciones numéricas de la función objetivo

En las gráficas 6.14 y 6.15 se muestra el menor valor de f encontrado por iteración, según las tablas 6.1 a 6.7, para cada una de las seis corridas del método de sobrecalentamiento simulado y para la corrida del método de Montecarlo.

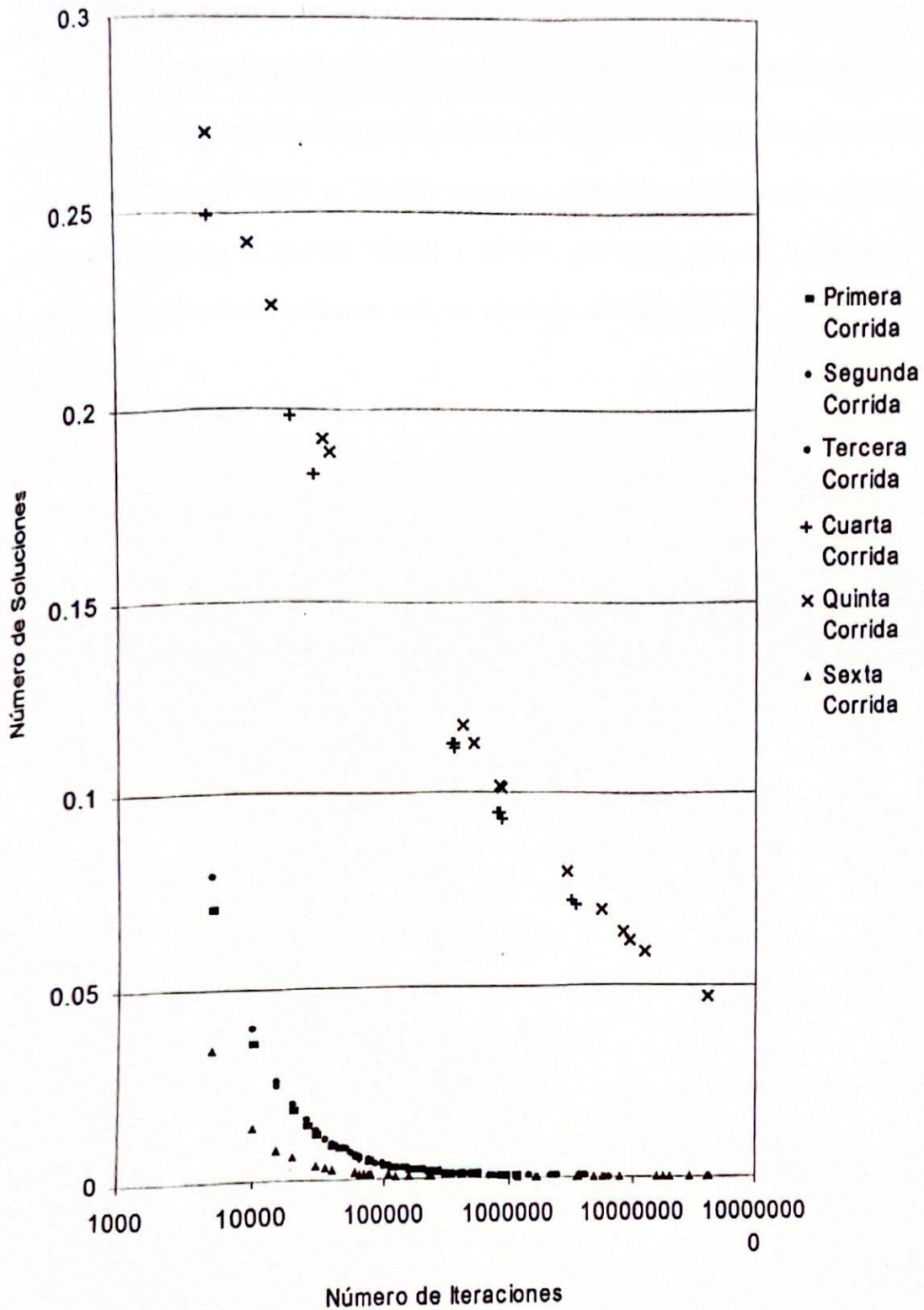
En la gráfica 6.14 puede apreciarse que la cuarta y la quinta corridas se comportan en una forma similar, aproximándose al mínimo más lentamente que las demás..

En la gráfica 6.15 se observa que al inicio, el método de Montecarlo se aproxima más

Gráfica 6.12 Número de Soluciones Aceptadas Contra Número de Iteraciones

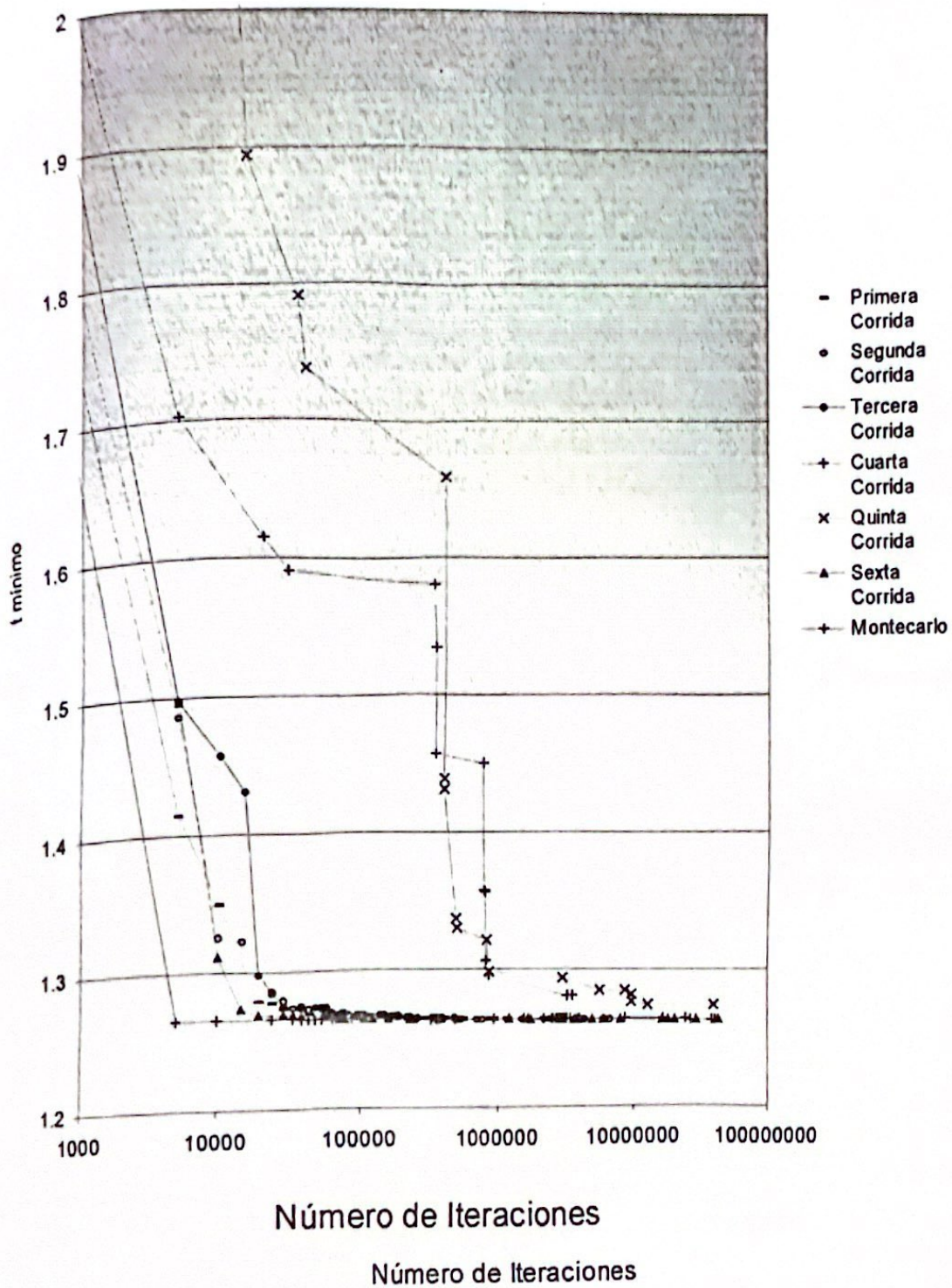


Gráfica 6.13 Temperatura Contra Número de Iteraciones

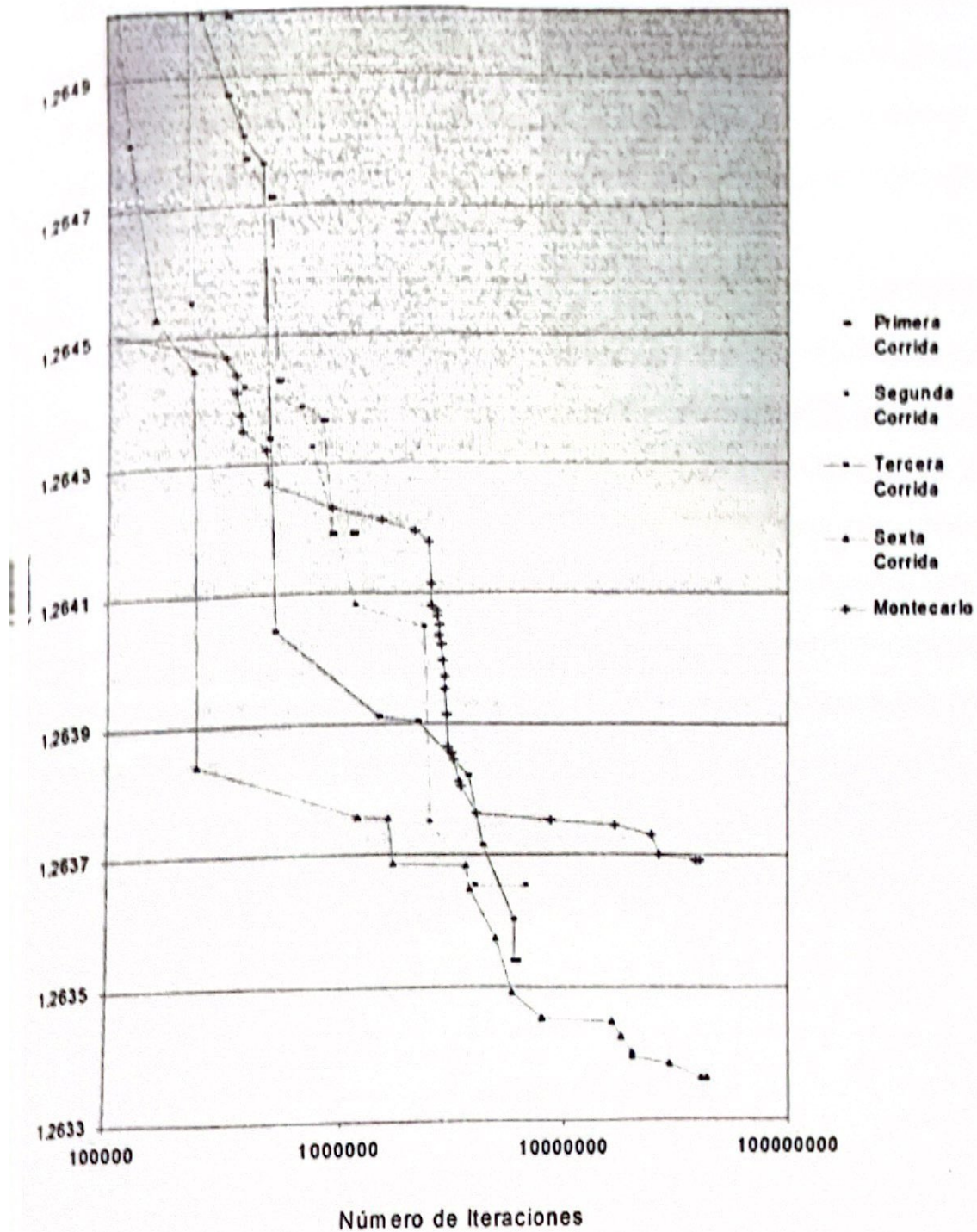


rápidamente al mínimo, pero eventualmente, cerca del mínimo, los resultados son mejores para la primera, segunda, tercera y sexta corridas del método de sobrecalentamiento simulado. La primera corrida da un resultado mejor que el de Montecarlo entre las iteraciones 910,001 y 915,000; la segunda corrida da un resultado mejor que el de Montecarlo entre las iteraciones 1,150,001 y 1,155,000; la tercera corrida da un resultado mejor que el de Montecarlo entre las iteraciones 520,001 y 525,000; por último, la sexta corrida da un resultado mejor que el de Montecarlo entre las iteraciones 225,001 y 230,000.

Gráfica 6.14 t Mínimo Contra Número de Iteraciones



Gráfica 6.15 t Mínimo Contra Número de Iteraciones



VII. CONCLUSIONES

Mediante el uso de un algoritmo de sobrecalentamiento simulado se obtuvieron soluciones numéricas al problema de la braquistócrona. El comportamiento estadísticos de estas soluciones dependían de los parámetros que regulaban la rapidez de enfriamiento, los cuales eran el factor de reducción de temperatura entre etapas sucesivas, el número de soluciones por etapa, y el factor de aumento en el número de soluciones entre etapas sucesivas.

A mayor rapidez de enfriamiento, hay una menor probabilidad de aceptación por etapa. La probabilidad de aceptación es un factor importante en la obtención del valor óptimo buscado: en el método de Montecarlo la probabilidad de aceptación disminuye con una mayor rapidez que en el método de sobrecalentamiento simulado, por lo que rápidamente puede llegar al inicio a un estado que esté cerca del mínimo de la función objetivo a partir del cual pasen la rapidez de convergencia disminuya drásticamente o bien a un mínimo local de la función objetivo; en el método de sobrecalentamiento simulado la probabilidad de aceptación disminuye a medida que aumenta el número de iteraciones, pero en una forma no tan drástica como en el método de Montecarlo, por lo que eventualmente, mejora los resultados del método de Montecarlo, debido a que pueden aceptarse estados que no mejoren la solución, a partir de los cuales puedan encontrarse mejores soluciones.

VIII. BIBLIOGRAFIA

1. ...
2. ...
3. ...
4. ...
5. ...
6. ...
7. ...
8. ...
9. ...
10. ...
11. ...
12. ...
13. ...
14. ...
15. ...
16. ...
17. ...
18. ...
19. ...
20. ...
21. ...
22. ...
23. ...
24. ...
25. ...
26. ...
27. ...
28. ...
29. ...
30. ...
31. ...
32. ...
33. ...
34. ...
35. ...
36. ...
37. ...
38. ...
39. ...
40. ...
41. ...
42. ...
43. ...
44. ...
45. ...
46. ...
47. ...
48. ...
49. ...
50. ...
51. ...
52. ...
53. ...
54. ...
55. ...
56. ...
57. ...
58. ...
59. ...
60. ...
61. ...
62. ...
63. ...
64. ...
65. ...
66. ...
67. ...
68. ...
69. ...
70. ...
71. ...
72. ...
73. ...
74. ...
75. ...
76. ...
77. ...
78. ...
79. ...
80. ...
81. ...
82. ...
83. ...
84. ...
85. ...
86. ...
87. ...
88. ...
89. ...
90. ...
91. ...
92. ...
93. ...
94. ...
95. ...
96. ...
97. ...
98. ...
99. ...
100. ...

VIII. BIBLIOGRAFIA

- BALESCU, R. 1975. Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics. John Wiley & Sons, Inc. New York, USA. 742 pp.
- BLANCHARD, P. y E. BRÜNING. 1992. Variational Methods in Mathematical Physics. Springer-Verlag. New York., USA. 410 pp.
- BUTKOV, E. 1968. Mathematical Physics. Addison-Wesley Publishing Company, Inc. USA. 735pp.
- EYRING, H., D. HENDERSON, B. J. STOVER y E. M. EYRING. 1964. Statistical Mechanics and Dynamics. John Wiley & Sons, Inc. New York, USA. 508 pp.
- FREEMAN, J. A. y D. M. SKAPURA. 1993. Redes neuronales: Algoritmos, aplicaciones y técnicas de programación. Addison-Wesley Iberoamericana, S. A. Wilmington, USA. 431 pp.
- FROST, R. y P. HEINEMAN. 1997. *Simulated Annealing: A Heuristic for Parallel Stochastic Optimization* en Proceedings of the 1997 International Conferences Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications.
- GEMAN, S. y D. GEMAN. 1984. *Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images* en Procedures of the Sixth IEEE Pattern Analysis and Machine Intelligence. p. 721-741.
- GUTIÉRREZ ANDRADE, M. A., S. DE LOS COBOS SILVA y B. R. PÉREZ SALVADOR. 1997. *Optimización con recocido simulado para el problema de asignación cuadrática y comparaciones con otras técnicas de solución*, en Memorias del X Simposio Internacional de Métodos Matemáticos Aplicados a las Ciencias – Liberia, Costa Rica. Instituto Tecnológico de Costa Rica. San José, Costa Rica, pp. 152-163.
- HEER, C. V. 1972. Statistical Mechanics, Kinetic Theory, and Stochastic Processes. Academic Press, Inc. New York, USA. 602 pp.
- ISHIARA, A. 1971. Statistical Physics. Academic Press, Inc. New York, USA. 438pp.
- KIRKPATRICK, S., C. D. GELATT, JR. y M. P. VECCHI. 1983. *Optimization by Simulated Annealing* en Science, 220, 4598, pp. 671-680.
- KITTEL, C. 1967. Elementary Statistical Mechanics. John Wiley & Sons, Inc. New York, USA. 228 pp.
- LINDSAY, R. B. 1941. Introduction to Statistical Physics. John Wiley & Sons, Inc. New York, USA. 306 pp.
- MCLACHLAN, JR., D. 1968. Statistical Mechanics Analogies. Prentice-Hall, Inc. New Jersey, USA. 153 pp.

- McQUARRIE, D. A. 1973. Statistical Mechanics. Harper & Row, Publishers, Inc. New York, USA. 641pp.
- METROPOLIS, N., A. W. ROSENBLUTH, A. H. TELLER and E. TELLER. 1953. *Equations of State Calculations by Fast Computing Machines*, en Journal of Chemistry Physics, **21**, 1087-1092. June, 1953.
- MOHLING, F. 1982. Statistical Mechanics: Methods and Applications. Publisher Creative Services, Inc. New York, USA. 608 pp.
- RAO, S. S. 1996. Engineering Optimization. 3ª edición. John Wiley & Sons, Inc. New York, USA. 903 pp.
- RUELLE, D. 1974. Statistical Mechanics. 2ª edición. W. A. Benjamin, Inc. Reading, Massachusetts, USA. 219pp.
- SIMMONS, G. F. 1993. Ecuaciones diferenciales. 2ª edición. McGraw-Hill/Interamericana de España, S. A. Madrid, España. 658 pp.
- SUNDERMANN, E. 1995. *PIE Image Reconstruction Using Simulated Annealing*, en Proceedings of the SPIE Medical Imaging 1995 Conference, Image Processing, pp. 378-386.
- SYMON, K R. 1971. Mechanics. 3ª edición. Addison-Wesley Publishing Company, Inc. USA. 639pp.
- TOLMAN, R. C. 1979. The Principles of Statistical Mechanics. Dover Publications, Inc. New York, USA. 661 pp.
- TREJOS, J. y M. VILLALOBOS. 1997. *Análisis de proximidades usando sobrecalentamiento simulado*, en Memorias del XI Simposio Internacional de Métodos Matemáticos Aplicados a las Ciencias – Santa Clara, Costa Rica (W. Castillo y J. Trejos, editores). Universidad de Costa Rica -Instituto Tecnológico de Costa Rica. San José, Costa Rica, pp. 41-52.
- VALLEAU, J. P. y S. G. WHITTINGTON. 1977. *A Guide to Monte Carlo for Statistical Mechanics: 1. Highways*, en Statistical Mechanics, Part A: Equilibrium Techniques. Plenum Press. New York, USA. 242 pp.
- WANNIER, G. H. 1966. Statistical Physics. John Wiley & Sons, Inc. New York, USA. 532 pp.
- YOURGRAU, W. y S. MANDELSTAM. 1968. Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory. Dover Publications, Inc. New York, USA. 201 pp.

APÉNDICE A: CÓDIGO UTILIZADO

1. Método de Sobrecalentamiento Simulado

Los valores de n , F , D , b , N , λ , π_0 , μ , ρ , r y M que aparecen en el código corresponden a los valores de n , F , D , b , N , λ , π_0 , μ , ρ , r y M que aparecen en la sección

4.4.

El código principal utilizado fue

```
n=
F=
D=
b=
N=
lamb=
pi0=
mu=
ro=
r=
M=
e=1/(F*n)
A=F*n
B=round(b/e)
x0=[0:F:A];
y0=round(A*rand(size(x0)));
y0(1)=0;
y0(n+1)=B;
x=x0;
y=y0;
t0=0;
xmin=x;
ymin=y;
for i=2:n+1,
    t0=t0+sqrt(e)*sqrt((x(i)-x(i-1))^2+(y(i)-y(i-1))^2)/(sqrt(y(i))+sqrt(y(i-1)));
end
t=t0
tmin=t0;
c=lamb*t0;
ypr=y0;
xpr=x0;
contador_inc=0;
while contador_inc<1,
    k=0;
    contador_pos=0;
    while k<=N,
        tpr=0;
```

```

for i=2:n,
    xprmax=min([x(i)+D,x(i+1)-1]);
    xprmin=max([x(i)-D,x(i-1)+1]);
    xpr(i)=xprmax+1;
    while xpr(i)>xprmax,
        xpr(i)=xprmin+fix((xprmax-xprmin+1)*rand);
    end
    ypr(i)=max([0,y(i)-D])+fix((y(i)+D-max([0,y(i)-D])+1)*rand);
    tpr=tpr+sqrt(e)*sqrt((xpr(i)-xpr(i-1))^2+
        (ypr(i)-ypr(i-1))^2)/(sqrt(ypr(i))+sqrt(ypr(i-1)));
end
tpr=tpr+sqrt(e)*sqrt((xpr(n+1)-xpr(n))^2+
    (ypr(n+1)-ypr(n))^2)/(sqrt(ypr(n+1))+sqrt(ypr(n)));
dt=tpr-t;
if dt<=0,
    t=tpr;
    x=xpr;
    y=ypr;
    k=k+1;
end
if dt>0,
    contador_pos=contador_pos+1;
    if exp(-dt/c)>rand,
        t=tpr;
        x=xpr;
        y=ypr;
        cont_inc=cont_inc+1;
        k=k+1;
    end
end
if tpr<=tmin,
    tmin=tpr;
    xmin=xpr;
    ymin=ypr;
end
end
i=contador_inc/contador_pos;
if pi<pi0,
    c=mu*c;
    x=x0;
    y=y0;
    t=t0;
    contador_inc=0;
end

%? N=N
%? To=c;
%? round(r*N);
%? 0;

```

```

while k<=N,
    tpr=0;
    for i=2:n,
        xprmax=min([x(i)+D,x(i+1)-1]);
        xprmin=max([x(i)-D,x(i-1)+1]);
        xpr(i)=xprmax+1;
        while xpr(i)>xprmax,
            xpr(i)=xprmin+fix((xprmax-xprmin+1)*rand);
        end
        ypr(i)=max([0,y(i)-D])+fix((y(i)+D-max([0,y(i)-D])+1)*rand);
        tpr=tpr+sqrt(e)*sqrt((xpr(i)-xpr(i-1))^2+
            (ypr(i)-ypr(i-1))^2)/(sqrt(ypr(i))+sqrt(ypr(i-1)));
    end
    tpr=tpr+sqrt(e)*sqrt((xpr(n+1)-xpr(n))^2+
        (ypr(n+1)-ypr(n))^2)/(sqrt(ypr(n+1))+sqrt(ypr(n)));
    dt=tpr-t;
    if dt<=0,
        t=tpr;
        x=xpr;
        y=ypr;
        k=k+1;
    end
    if dt>0,
        if exp(-dt/c)>rand,
            t=tpr;
            x=xpr;
            y=ypr;
            k=k+1;
        end
    end
    if tpr<=tmin,
        tmin=tpr;
        xmin=xpr;
        ymin=ypr;
    end
end
m=m+1;
end

```

2. Método de Montecarlo

Los valores de n , F , D , y b , que aparecen en el código corresponden a los valores de n , F , D , y b , que aparecen en la sección 4.4. M es en este caso el número máximo de iteraciones.

El código principal utilizado fue

h-

Imprenta "GORA"
25 Av. 25-71, Zona 5
Telefax: 335-5733 - 218-7292