

RECOCIDO SIMULADO

¿En qué consiste?

La idea consiste en realizar una exploración lo suficientemente amplia al principio, ya que la solución final es relativamente insensible con el estado inicial. Así, se disminuye la probabilidad de caer en un mínimo local, una meseta o una cresta.

Esto es una variante de la escalada en la que, al comienzo del proceso, pueden realizarse algunos movimientos descendentes.

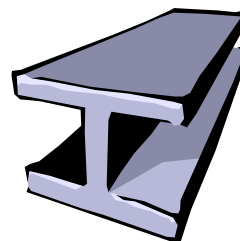


¿Qué es la escalada?



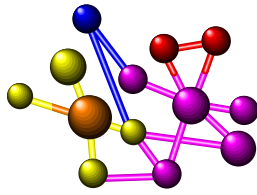
El término *escalada* proviene de un sencilla analogía. Supóngase que está en una posición desconocida de algún terreno montañoso, con el objetivo de ascender hasta el pico más alto. El problema es que hay niebla, y la vista no alcanza más que unos pocos metros a nuestro alrededor. Dejando de lado las soluciones evidentes, tales como esperar a que se levante la niebla, una forma lógica de proceder sería empezar a andar en la dirección de la cuesta más empinada posible.

Si sólo se avanza cuesta arriba, se alcanzará eventualmente un lugar en el cual el único camino posible nos lleve hacia abajo. En este momento, estaremos en la cima de una colina. Queda la duda consistente en si esta colina será realmente la más alta de la región.



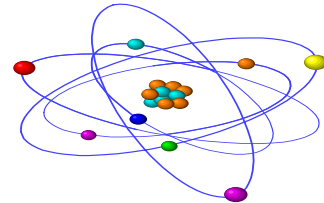
El enfriamiento o temple simulado (Simulated Annealing) recibe su nombre como consecuencia de la fuerte analogía existente con el proceso físico de temple que se aplica a los metales y otras sustancias.

El enfriamiento simulado visto como proceso computacional, se basa en el proceso físico de la aleación, en la que ciertas sustancias físicas como los metales se funden (es decir incrementan sus niveles de energía) para luego sufrir un proceso gradual de enfriamiento hacia un estado sólido.

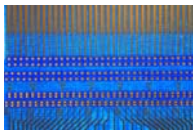


Nuestra intuición nos dice que un trozo de una sustancia a alta temperatura posee un estado de energía más alto que el de otro trozo idéntico a temperatura menor.

Supongamos que se desea reducir la energía de la sustancia al menor valor posible. Bajar simplemente la temperatura al cero absoluto no asegurará necesariamente que la sustancia se encuentre en su configuración energética más baja posible.



Considerese el ejemplo de un bloque de silicio que se está cultivando en un horno para utilizarlo como sustrato para dispositivos de circuitos integrados. Es sumamente deseable que la estructura cristalina sea una red cristalina perfecta, regular, a temperatura ambiente.



Una vez que el bloque de silicio se ha formado, debe enfriarse adecuadamente para asegurar que se forme correctamente la red cristalina. Un enfriamiento rápido puede dar lugar a muchas imperfecciones en la estructura cristalina, o a una sustancia vítrea, sin estructura cristalina regular en absoluto.

Estas dos configuraciones poseen una energía más alta que la del cristal con red cristalina perfecta: representa mínimos locales de energía.

Es preciso emplear un proceso de templeado para hallar el mínimo global de energía. La temperatura del bloque debe hacerse disminuir gradualmente, dando tiempo a los átomos de la estructura para que se organicen en la configuración correcta. Para cada temperatura, es preciso dar un tiempo suficiente para que el material alcance un equilibrio: En equilibrio, el material sigue la distribución canónica de probabilidades:

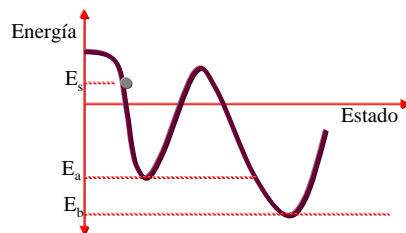
$$p = e^{-\Delta E/kT}$$

Donde ΔE es el cambio positivo en el nivel de energía, T es la temperatura, y k es la constante de Boltzmann. Así durante el descenso del valle que ocurre durante el enfriamiento, la probabilidad de que ocurran grandes saltos positivos es menor que la probabilidad de que ocurra uno más pequeño. También, la probabilidad de que se produzca un salto positivo decrece conforme la temperatura va bajando. De esta forma, estos saltos son más probables en los comienzos del proceso, cuando la temperatura permanece alta, y son más improbables, cuando la temperatura baja.

La velocidad con la que se enfría el sistema a lo largo del proceso se denomina *programa de enfriamiento*. Los procesos físicos de enfriamiento son muy sensibles al programa de enfriamiento. Si el enfriamiento se produce con demasiada rapidez, se formarán regiones estables de alta energía.

Para entender la forma en que el proceso de templado ayuda al cristal a evitar mínimos locales, emplearemos un argumento intuitivo.

Considerese el sencillo paisaje energético que se muestra en la figura . La bola de rodamiento que se describe en la figura, inicialmente no tiene energía suficiente para subir hasta el otro lado de la colina, y bajar hasta el mínimo global. Si *sacudimos* todo el sistema, es posible que la bola reciba un empujón suficiente para que suba la colina.



En otras palabras, se alcanza un mínimo local pero no global. Si, por el contrario, se utiliza un programa más lento, es más probable que se forme una estructura cristalina uniforme, que se corresponde con un mínimo global. Pero si el programa es demasiado lento el tiempo se desaprovecha. El plan de enfriamiento óptimo para cada problema de enfriamiento específico se suele hallar de forma empírica.

Todas estas propiedades del enfriamiento físico se pueden utilizar para definir análogo de enfriamiento simulado, que podría aplicarse (aunque no siempre con efectividad) en el momento en que sea posible utilizar una escalada simple.

Para este proceso análogo, ΔE sufre una generalización de forma que en vez de representar un cambio en la energía, representa un cambio en la función objetivo, cualquiera que ésta sea. La analogía con kT es un poco más complicada. En el proceso físico, la temperatura es una magnitud bien definida, medida con unidades estándar. La variable k describe la correspondencia que existe entre las unidades de temperatura y las unidades de energía.

Como en el proceso análogo, las unidades de E y T son artificiales, tiene sentido incorporar k a T , de forma que se seleccionen valores de T que hagan que el algoritmo se comporte adecuadamente. De esta forma, revisemos la fórmula probabilística:

$$p' = e^{-\Delta E/kT}$$

Sin embargo, es necesario elegir un plan para los valores de T (que todavía denominamos temperatura).

El algoritmo de enfriamiento simulado difiere sólo un poco del procedimiento de escalada simple. Aparecen tres diferencias:

- El programa de enfriamiento tiene que mantenerse
- Los movimientos hacia estados peores pueden aceptarse.
- Es una buena idea hacer un mantenimiento, además del estado actual, del mejor estado que se haya encontrado. Si el estado final es peor que el estado anterior (porque por mala suerte se han aceptado movimiento hacia estados peores), el estado anterior estará disponible aún.

ALGORITMO DE ENFRIAMIENTO SIMULADO

- 1.- Evaluar el estado inicial. Si también es el estado objetivo, devolverlo y terminar. En caso contrario, continuar con el estado inicial como el estado actual.
- 2.- Inicializar EL-MEJOR-HASTA-AHORA con el estado actual.
- 3.- Inicializar T de acuerdo con el programa de enfriamiento.

4.- Repetir hasta que se encuentre una solución o hasta que queden operadores que aplicar al estado actual.

a) Seleccionar un operador que aún no se haya aplicado al estado actual para producir un estado nuevo.

b) Evaluar el nuevo estado. Calcular:

$$\Delta E = (\text{valor del estado actual}) - (\text{valor del nuevo estado})$$

- Si el nuevo estado es un estado objetivo, devolverlo y terminar.
- Si no es un estado objetivo, pero es mejor que el estado actual, convertirlo en el estado actual. hacer también que EL-MEJOR-HASTA-AHORA sea el nuevo estado.
- Si no es mejor que el estado actual, convertirlo en el estado actual con la probabilidad p' definida anteriormente. Este paso normalmente se implementa invocando a un generador de números aleatorios para que se genere un número de rango $[1,0]$. Si este número es menor que p' , se acepta el movimiento. Si no, no se hace nada.

c) Revisar T cuando sea necesario, de acuerdo con el programa de enfriamiento.

5.- Devolver como respuesta EL-MEJOR-HASTA-AHORA.

Para la implementación de este algoritmo se necesita elegir un programa de enfriamiento que se compone de tres partes. La primera de ellas es el valor inicial de la temperatura. La segunda es el criterio que se sigue para decidir cuándo se va a reducir la temperatura del sistema. La tercera es la magnitud del decremento que sufre la temperatura en cada cambio. Existe también un cuarto componente en el programa de enfriamiento: cuándo terminar.

EN RESUMEN

Para encontrar un máximo global se adopta la siguiente estrategia: la mayor parte del tiempo se toma un paso pequeño en la dirección indicada por el gradiente, pero ocasionalmente se toma un paso largo en la dirección indicada por el gradiente o lo mismo pero en otra dirección. Simulated Annealing es una técnica de optimización que emplea una estrategia similar.

Simulated Annealing hace uso de un parámetro de *temperatura* que es ajustado durante la búsqueda.

... RESUMEN

Si la temperatura es alta, entonces son más probables los pasos largos. Si la temperatura es baja, entonces son más probables los pasos cortos. Inicialmente, la temperatura es alta, pero conforme transcurre el tiempo está se irá reduciendo.

Simulated Annealing fue inspirado por una técnica usada por la metalurgia para la obtención de materiales con propiedades particulares. En el templado de metales, los materiales son calentados y enfriados, repetidamente, para que adquieran una estructura cristalina particular.