



Institución Universitaria

Enfriamiento Simulado

Introducción

Las propiedades estructurales de un sólido dependen de la tasa de enfriamiento después de que el sólido ha sido calentado por encima del punto de fusión. Si el sólido se enfría lentamente, se pueden formar grandes estructuras cristalinas, las cuáles brindan propiedades benéficas para el sólido. Sin embargo, cuando el sólido se enfría de manera descontrolada, el resultado es una estructura frágil con propiedades no deseables.

- A mayor temperatura, mayor energía.
- A menor temperatura, menor energía.
- Las combinaciones más abruptas se generan a mayor energía.

Ejemplo conceptual: un objeto moviéndose por el agua puede hacerlo de forma más rápida y por ende alcanzar un mayor número posiciones cuando el agua es caliente. Sin embargo, a medida que el agua comienza a bajar de temperatura hasta solidificarse, el objeto tendrá menos posibilidad de moverse libremente.

Algoritmo

Algoritmo:

- Inicializar temperatura
- Crear solución inicial
- Evaluar la solución (energía)

Hasta que la temperatura sea mínima

- Perturbar la solución
- Crear nueva solución
- Evaluar nueva solución
- Comparar solución actual y nueva
- Reemplazar solución actual (criterio)
- Reducir temperatura

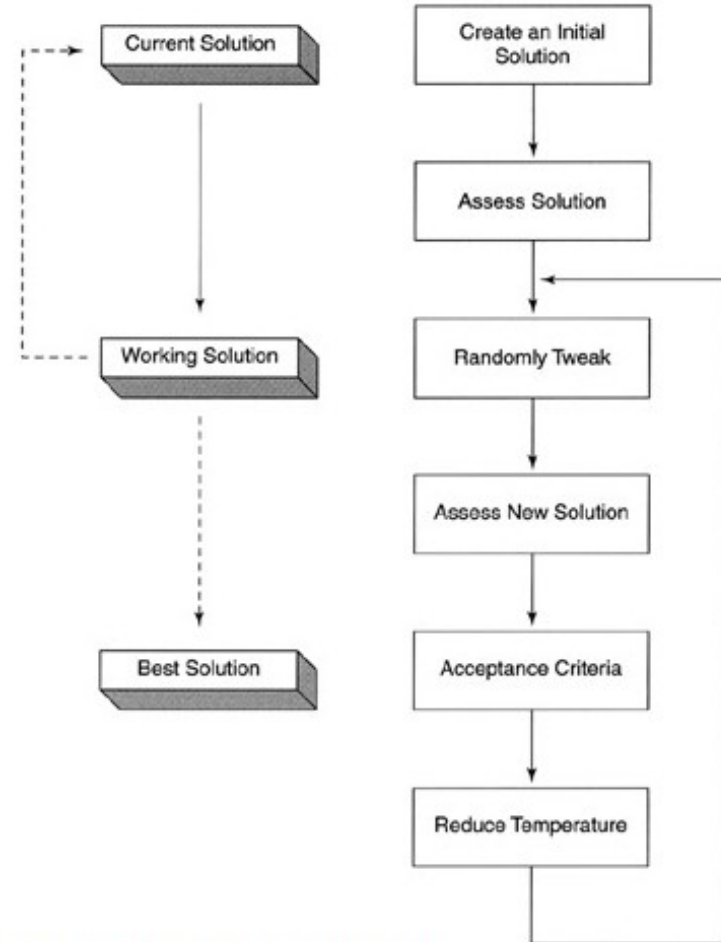


Figure 2.1: Simulated annealing algorithm.

Algoritmo: Reemplazar solución

En el enfriamiento simulado, se trata de minimizar la energía de la solución, haciendo la comparación entre un objeto caliente (inicial) y un objeto frío (final), el cuál tendrá menor energía.

Para reemplazar una solución entonces, se evalúa si la nueva solución tiene menor o igual energía (mejor) que la actual, y de ser así, se reemplaza la solución actual por la nueva.

Si por el contrario, la solución actual tiene mayor energía que la actual, se procede a decidir si se mantiene la solución o no de acuerdo a una probabilidad dada por:

$$P(\delta E) = \exp\left(\frac{-\delta E}{T}\right)$$

De acuerdo a la ecuación anterior, a medida que la temperatura disminuye, la probabilidad de aceptar una solución peor es menor. Lo anterior asegura que a mayor temperatura la posibilidad de explorar nuevas soluciones sea mayor.

Algoritmo: Reemplazar solución

Probability of Acceptance

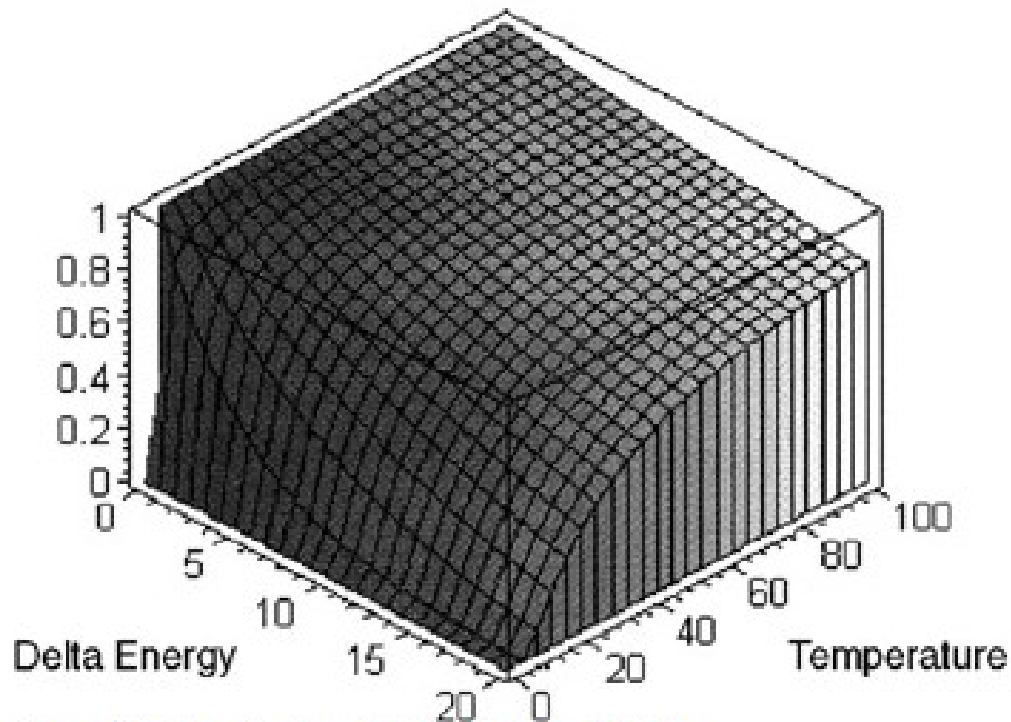


Figure 2.2: Visualization of Acceptance Probability.



Institución Universitaria

Algoritmo: Reducir temperatura

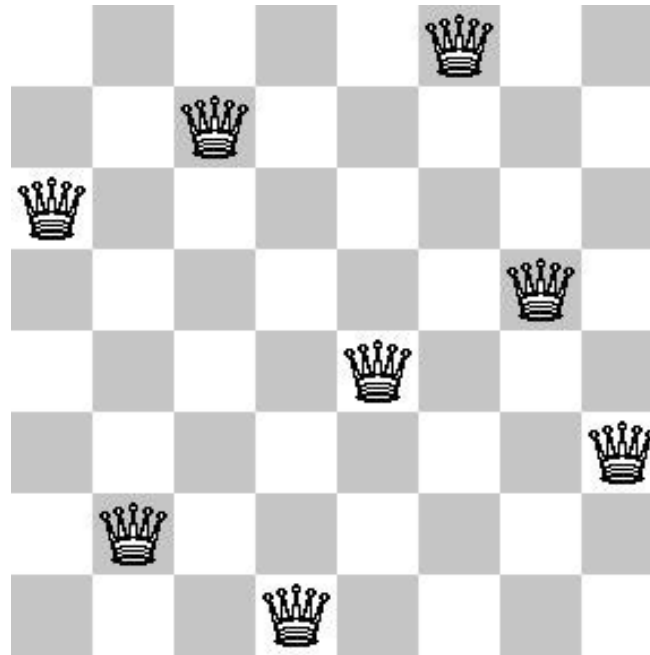
La temperatura del sistema se reduce a una tasa constante (α), después de haber iterado n veces para el mismo valor de temperatura (Monte Carlo).

$$T_{i+1} = \alpha * T_i$$

Problema: N-Queens

Ubicar N reinas en un tablero de ajedrez de tamaño $N \times N$ sin que estas se crucen en ningún momento.

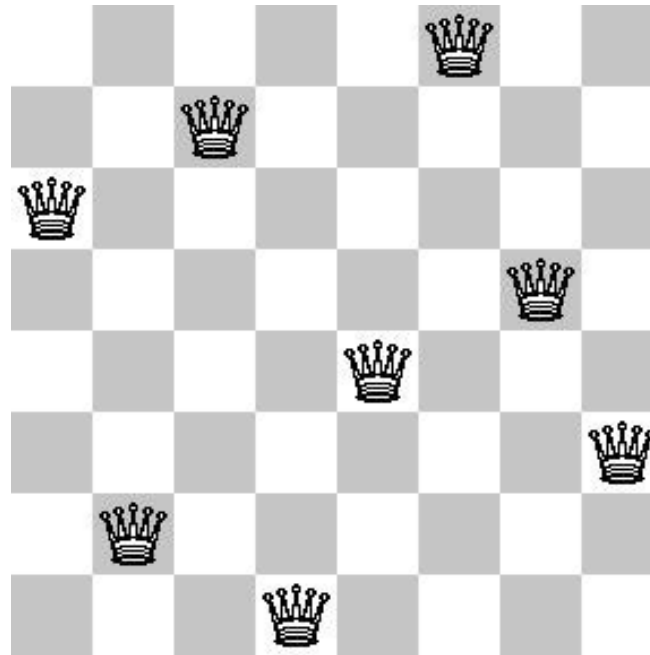
Al igual que en algoritmos genéticos, el problema inicial de la solución, es la forma en que esta se codifica, para este caso se puede utilizar un arreglo de enteros: [3, 7, 2, 8, 5, 1, 4, 6]



Problema: N-Queens

Solucionar:

- ¿Cómo podemos medir la energía de la solución?



Bibliografía de Interés

1. K. Konstantinos, Pattern Recognition, 4th ed. Elsevier, 2009.
2. S. Theodoridis, A. Pikrakis, K. Konstantinos, and D. Cavouras, Introduction to Pattern Recognition: A Matlab Approach. Elsevier, 2010.
3. P. Sankar and M. Pabitra, Pattern Recognition Algorithms for Data Mining. Chapman & Hall/CRC, 2004.
4. J. Orallo, J. Quintana, and C. Ramirez, Introducción a la minería de datos. Pearson Prentice Hall, 2004.
5. B. Araujo, Aprendizaje automático: conceptos básicos y avanzados. Pearson Prentice Hall, 2006.
6. Jain, a K., Duin, R. P. W., & Mao, J. (2000). Statistical pattern recognition: A review. Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on.
7. Pajares G., De la Cruz J., Visión por Computador: Imágenes digitales y aplicaciones, editorial Alphaomega. 2002.
8. Xindong Wu et.al. Top 10 algorithms in data mining, Springer, 2008.