

MÉTODO HÍBRIDO ENTRE MARQUARDT Y SIMULATED ANNEALING PARA LA RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA INVERSO. APLICACIÓN A HIDROLOGÍA SUBTERRÁNEA

AUTOR: ANDRÉS ALCOLEA RODRÍGUEZ

TUTORES: AGUSTÍN MEDINA / JESÚS CARRERA

- RESUMEN -

El problema inverso consiste en la estimación de los parámetros de un modelo a partir de las respuestas del sistema y de información previa sobre los parámetros. Se han desarrollado numerosas aproximaciones para abordar este problema, reduciéndose en muchos casos a la minimización de una determinada función, conocida como función objetivo. Dicha función puede considerarse como una medida de la diferencia entre los datos disponibles acerca de la variable en cuestión y la respuesta del modelo. Así, la resolución del problema inverso se convierte en un problema de optimización.

Una de las principales dificultades es hallar el mínimo global de la función objetivo, puesto que los métodos de optimización continua pueden quedar estancados en un mínimo local. En cambio, algunos de ellos presentan una atractiva velocidad de convergencia en un entorno del mínimo. Por otra parte, para algunos métodos de optimización combinatoria, la convergencia al mínimo global está asegurada en cualquier caso, al menos en teoría. No obstante, requieren un elevado esfuerzo computacional.

En el presente documento, se desarrolla un nuevo método de optimización, como génesis de dos bien conocidos, el método de Marquardt y Simulated Annealing. Así, se combinan las prestaciones del primero en cuanto a velocidad de convergencia, con las del segundo para eludir los mínimos locales de la función objetivo, en tanto que se intenta mantener un esfuerzo computacional moderado, si bien mayor que el necesario empleando el método de Marquardt.

En el desarrollo del trabajo, se actualiza un código de elementos finitos, en el que se implementa el nuevo algoritmo que, en resumen, opera como sigue:

- (1) Generación de una configuración (punto en el espacio de parámetros) de forma aleatoria
- (2) Simulación (resolución del problema directo)
- (3) Aplicación del método de Marquardt (una única iteración), obteniéndose una nueva configuración
- (4) Simulación con la configuración obtenida en el paso anterior
- (5) Selección de la mejor configuración (la que ofrece un menor valor de la función objetivo) de entre las obtenidas en (1) y (3)
- (6) Comparación del valor de función objetivo obtenido en (5) con el valor menor obtenido en todo el proceso
- (7) Aceptación/rechazo de la configuración obtenida en el paso (5), en función del criterio de Metropolis
- (8) Chequeo de convergencia/divergencia

El objetivo del trabajo, aparte de la generación del mencionado algoritmo, consiste en analizar la robustez del mismo, bajo distintas hipótesis de partida.

La incertidumbre asociada a los parámetros que el algoritmo híbrido incluye, dificulta el uso de éste. Así, se estudia, mediante la aplicación del código actualizado a una serie de ejemplos sintéticos, el efecto de dichos parámetros. Las conclusiones obtenidas reflejan que un error en la elección de dichos parámetros no es grave en cuanto a convergencia, obteniéndose valores finales de función objetivo similares, si bien el esfuerzo computacional necesario puede aumentar ostensiblemente. Asimismo, se muestra cómo una elección correcta de los mismos proporciona buenos resultados, tanto desde el punto de vista de convergencia, como de esfuerzo computacional.

Por otra parte, se estudia la sensibilidad del método de Marquardt y del método híbrido a los parámetros iniciales del modelo. Así, se presentan dos ejemplos para los cuales, dependiendo de dichos parámetros, el método de Marquardt presenta problemas de convergencia, mientras que el híbrido logra alcanzar valores de función objetivo próximos al del mínimo global.

Finalmente, el documento se cierra con algunas recomendaciones en cuanto a líneas futuras se refiere, tales como la posible paralelización del código, la inclusión de nuevos esquemas de perturbación y enfriamiento, así como la aplicación del algoritmo híbrido a casos reales.

“El honor se limita a testificar que el individuo no es una excepción, en tanto que la gloria afirma que lo es. La gloria se debe pues, adquirir, en tanto que el honor sólo se puede perder”

Arthur Schopenhauer

- AGRADECIMIENTOS -

Resultaría ingrato, e incluso injusto, abrir el documento sin dar las gracias a todas las personas que han hecho posible la consecución de los objetivos marcados.

Como siempre, a toda mi familia y, de forma muy especial a mis padres y mi hermana, quienes durante estos años me han animado y dado fuerzas para seguir. Resulta harto difícil expresar en unas pocas líneas todo lo que os debo, y todo lo que os deberé siempre. Gracias por haberme apoyado tanto en los momentos más difíciles.

Estos dos últimos años me han enseñando una serie de asignaturas que no se imparten en la carrera, como la amistad y el compañerismo. Por ello quisiera agradecer a mis compañeros de trabajo toda la ayuda prestada y, muy especialmente, a Xavier Sánchez, quien me inició en la Hidrogeología y fue mi tutor durante unos meses maravillosos. No podría haber conseguido nada sin vuestra ayuda.

A mis tutores, Agustín y Jesús, que a lo largo de estos dos años no se han limitado a aconsejarme en la vida profesional, sino que se han convertido en un firme punto de apoyo y en dos buenos amigos.

A la Escuela, de la cual guardaré gratos recuerdos, por el soporte y equipos prestados.

En general, a todos aquellos que me han hecho madurar como persona en estos años como universitario.

Gracias por todo

- ÍNDICE -

Índice

Índice de figuras

Índice de tablas

Resumen

Capítulo 1. Introducción	1
1.1 Introducción	1
1.2 Alcance	2
1.3 Antecedentes. Aplicación del problema inverso en Hidrología Subterránea	2
1.4 Motivación y objetivos	5
1.5 Organización del documento	6
Capítulo 2. Los problemas directo e inverso. Formulación	7
2.1 El problema directo. Formulación	7
2.2 El problema inverso. Formulación	10
Capítulo 3. Estado del arte de los algoritmos de optimización	13
3.1 Introducción	13
3.2 Breve repaso de los métodos de optimización	14
3.3 Cálculo de derivadas	15
3.3.1 Mediante cocientes incrementales	15
3.3.2 Mediante derivación directa	16
3.3.3 Mediante las ecuaciones de estado adjunto	16
3.4 Métodos de primer orden	17
3.5 Métodos de segundo orden	18
3.6 Métodos de orden cero	18
3.7 Comparación entre los distintos métodos	18
3.8 El método de Levenberg-Marquardt	19
3.9 Criterios de convergencia	20
3.10 Optimización combinatoria. Mejora iterativa	22
3.11 Simulated Annealing	24
Capítulo 4. El método híbrido. Descripción e implementación numérica	29
4.1 Introducción	29
4.2 Descripción del método híbrido	30
4.3 El código TRANSIN-III	32
4.4 Implementación del algoritmo	33

4.4.1 Esquemas de enfriamiento	33
4.4.2 Esquemas de perturbación	36
4.4.2.1 Según la matriz de covarianza a posteriori	36
4.4.2.2 Según un espacio de búsqueda predeterminado	37
Capítulo 5. Aplicaciones. Ejemplos sintéticos	38
5.1 Introducción	38
5.2 Metodología	39
5.3 Resultados	44
5.3.1 Esquema de perturbación	44
5.3.2 Valor inicial de la temperatura. Velocidad de enfriamiento	47
5.3.2.1 Valor inicial de la temperatura	47
5.3.2.2 Velocidad de enfriamiento	50
5.3.3 Tamaño de la perturbación	51
5.3.4 Sensibilidad a los parámetros iniciales	55
Capítulo 6. Conclusiones y líneas futuras	56
6.1 Conclusiones	56
6.2 Líneas futuras	58
Capítulo 7. Bibliografía	59
Apéndice. Propiedades de las matrices no negativas	

- ÍNDICE DE FIGURAS -

Figura 1. Distribución de probabilidad de Boltzmann	25
Figura 2. Probabilidad de aceptación de un nuevo estado según el criterio de Metropolis	26
Figura 3. Recorrido calculado a temperatura elevada	28
Figura 4. Recorrido obtenido al final del proceso	28
Figura 5. Diagrama de flujo del algoritmo híbrido.	31
Figura 6. Variación de la temperatura en función del número de iteraciones, según los distintos esquemas de enfriamiento.	35
Figura 7. Geometría y condiciones de contorno “reales”	39
Figura 8. Zonificación de transmisividades y puntos de observación	40
Figura 9. Zonificación de la recarga	40
Figura 10. Isopiezas de nivel piezométrico en régimen estacionario	40
Figura 11. Isopiezas de nivel piezométrico al cabo de cuatro días	41
Figura 12. Representación gráfica de los modelos perturbados. Se omiten aquellos con sufijo “bis”, pues la única variación son los parámetros iniciales. De arriba abajo y de izquierda a derecha, ejemplos del 1 al 8. En los dos últimos se marca con distinta trama las dos zonas de almacenamiento. En el resto de modelos hay una única zona de almacenamiento.	43
Figura 13. Comparación entre el método de Marquardt y el híbrido, en términos del esquema de perturbación (resultados del ejemplo 7), para un ejemplo donde Marquardt presenta dificultades de convergencia.	45
Figura 14. Comparación entre el método de Marquardt y el híbrido, en términos del esquema de perturbación. (resultados del ejemplo 4), para un ejemplo donde Marquardt no tiene dificultades de convergencia..	46
Figura 15. Comparación entre el método de Marquardt y el híbrido, perturbado según la matriz de covarianza bajo tres hipótesis de temperatura inicial.	48
Figura 16. Comparación entre el método de Marquardt y el híbrido, perturbado según el elipsoide de búsqueda bajo tres hipótesis de temperatura inicial.	48
Figura 17. Comportamiento del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda según distintos coeficientes de enfriamiento.	50
Figura 18. Comportamiento del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda según distintas velocidades de enfriamiento.	51
Figura 19. Sensibilidad del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda al radio estándar inicial (ejemplo 2).	52

Figura 20. Sensibilidad del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda al radio estándar inicial (ejemplo 3).	53
Figura 21. Sensibilidad del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda al radio estándar inicial (ejemplo 8)	53
Figura 22. Comportamiento del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda según el máximo cambio permitido en el espacio de parámetros. (O.M. denota orden de magnitud)	54

- ÍNDICE DE TABLAS -

Tabla 1. Tipo de condición de contorno en función del valor del coeficiente de goteo.	8
Tabla 2. Descripción de los métodos de optimización en función de la información que precisan acerca de la función objetivo.	15
Tabla 3. Formulación de los distintos criterios de enfriamiento.	34
Tabla 4. Valores “reales” de transmisividad (Figura 8, donde se muestra la distribución espacial)	40
Tabla 5. Descripción de las perturbaciones realizadas a partir del modelo de base	41
Tabla 6. Parámetros reales del modelo base vs. información previa (ejemplo 1).	42
Tabla 7. Valores obtenidos en función de la temperatura inicial, perturbando según el elipsoide de búsqueda.	49
Tabla 8. Comparación en términos de esfuerzo computacional	49
Tabla 9. Resumen de los resultados obtenidos con el modelo 4 partiendo de valores de los parámetros iniciales distintos.	55
Tabla 10. Resumen de los resultados obtenidos con el modelo 7 partiendo de valores de los parámetros iniciales distintos.	55

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

1.1 INTRODUCCIÓN

El problema general de optimización consiste en hallar el máximo o el mínimo de una función determinada. El abanico de problemas a los que se puede aplicar la optimización es impresionante. Por un lado, la tipología de los mismos es amplia (diseño, control, identificación). Por otro, tiene sentido en prácticamente todas las ramas de la ciencia y la tecnología. Probablemente por este motivo, durante muchos años se pensó que la optimización se convertiría en una técnica habitual. La realidad ha resultado ser diversa. En algunos campos, los métodos de optimización se han afianzado de forma efectiva como herramientas de trabajo. En otros, sin embargo, las dificultades prácticas han limitado muy significativamente su aplicación.

Esta tesina trata de la aplicación de la optimización al problema inverso en hidrología subterránea, que consiste en la estimación de los parámetros de un acuífero

(transmisividad, almacenamiento, etc.), a partir de medidas directas de los mismos y de variables dependientes de ellos, como niveles, concentraciones, etc [1]. Como se demostrará en capítulos posteriores, este problema se reduce a la minimización de una función, denominada función objetivo.

1.2 ALCANCE

El trabajo realizado para el desarrollo de esta tesina de especialidad puede dividirse en cuatro fases bien diferenciadas, en función de las cuales se organiza el presente documento.

En primer lugar se llevó a cabo una revisión de los métodos de optimización de uso más común en hidrología subterránea, realizándose una comparación de los mismos. Entre ellos conviene citar el método de Marquardt, el método del recocido simulado (Simulated Annealing) y el de la mejora iterativa, los cuales serán tratados en profundidad en secciones posteriores. Las ventajas y desventajas de cada uno de ellos, dieron pie a la formulación de un nuevo algoritmo de optimización, en el que se intentan conjugar las ventajas de cada uno de ellos, reduciendo, en la medida de lo posible, sus inconvenientes.

Para su aplicación, se actualizó un código de elementos finitos que sólo contaba con el método de Marquardt para la resolución del problema inverso y, en último lugar, se aplicó dicha actualización a varios ejemplos.

En el presente capítulo, a modo de introducción, se muestra una visión global del estado del arte del problema inverso en Hidrología Subterránea, así como se expone la motivación del trabajo desarrollado.

1.3 ANTECEDENTES. APLICACIÓN DEL PROBLEMA INVERSO EN HIDROLOGÍA SUBTERRÁNEA.

Como se ha esbozado en anteriormente, un problema de optimización consiste en maximizar o minimizar una determinada función, la cual puede ser de variable continua o discreta. Esta clasificación provoca una clara separación de esta rama de conocimiento en dos vertientes: la optimización continua y la optimización combinatoria, enfocada esta última a funciones de variable discreta o continua discretizada, si bien, comienzan a aparecer en la literatura especializada algunos resultados (bastante espúreos) de aplicaciones de esta modalidad a problemas de variable continua.

Por otra parte, los problemas de optimización suelen resolverse de forma aproximada por distintos motivos. En numerosas ocasiones, no se conoce una expresión analítica de la función a tratar. Además, el esfuerzo computacional requerido para la minimización o maximización de dicha función, suele ser no polinomial (en adelante, problema NP), es decir, el tiempo de cálculo no puede acotarse superiormente por una función polinómica dependiente de las dimensiones del problema.

Como alternativa para la resolución de problemas NP, se propuso la optimización combinatoria, mediante la cual se obtiene una aproximación del mínimo o del máximo buscado en un tiempo razonable, si bien no puede asegurarse que el resultado obtenido sea satisfactorio.

Los resultados más relevantes sobre optimización combinatoria se obtuvieron en la década de los setenta, siendo su exponente más claro el desarrollo de algoritmos de aproximación para la resolución del conocido Problema del Viajante, del que, por su peso histórico en el contexto científico, se hablará más adelante.

Un problema genérico de optimización puede expresarse de la siguiente forma:

Sea $C \subset \mathfrak{R}^n$ el conjunto (finito o infinito numerable) de configuraciones \mathbf{x} posibles o espacio de configuraciones y sea f una función de coste o función objetivo tal que:

$$\begin{aligned} f: C &\rightarrow \mathfrak{R} \\ \mathbf{x} &\rightarrow f(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2)$$

El problema se reduce ahora a:

$$\text{Minimizar/maximizar } f(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in C \quad (3)$$

Una vez definido el problema, resulta conveniente comentar la utilidad de estos métodos en el contexto de la hidrología subterránea. Una de las tareas más frecuentes en este campo es el empleo de modelos de predicción. Un modelo es cualquier herramienta diseñada para simular algún aspecto de un sistema real. Su objetivo es obtener una herramienta numérica que permita predecir con una precisión razonable la respuesta de un sistema natural frente a acciones impuestas.

El auge de la informática, a partir de la década de los setenta provocó, en el contexto de la hidrología subterránea (así como en muchas otras materias) la generalización del uso de modelos. En dicho contexto, la motivación más frecuente es la de cuantificar recargas, bombeos o impactos planificados, tales como implantaciones de depósitos de residuos, o accidentales, como roturas de presas, etc.

La generación de un modelo consta de distintas etapas [2], tales como la identificación de los procesos naturales. Esta primera etapa exige un ejercicio de conceptualización importante, pues se transforma una serie de procesos físico-químicos en una serie de ecuaciones matemáticas. El siguiente paso consiste en la identificación de la estructura del modelo, en cuanto a geometría, condiciones de contorno e iniciales,

etc. En este paso se pretende caracterizar la variabilidad espacial y temporal de los parámetros que gobiernan el sistema.

La tercera etapa trata de cuantificar dichos parámetros, y es en ella donde se ubica esta tesina de especialidad pues, como se comentó anteriormente, la resolución del problema inverso puede convertirse en un problema de optimización, según la formulación adoptada. El objetivo es el de estimar los parámetros del modelo, de forma que la respuesta del modelo sea lo más parecida posible a la respuesta del sistema real.

Referente a la evolución histórica del problema inverso [3], Nelson (1960) plantea el problema suponiendo conocida la variable de estado y los términos fuente/sumidero en todo el dominio, resolviendo el problema resultante a partir de la ecuación en régimen estacionario.

Este sería un buen método si el conocimiento sobre la variable de estado fuese exacto. Sin embargo, los errores en la toma de medidas necesarias para ello, se propagan considerablemente en el proceso de cálculo (resolución del problema inverso). Por otra parte se pueden producir oscilaciones espaciales elevadas en los parámetros obtenidos. Es decir, en su formulación original, el problema inverso en Hidrología Subterránea encaja en lo que Hadamard (1932) definió como problema “mal definidos”. Por ello, no se consideró ésta como una buena estrategia de solución. Por otra parte, el conocimiento requerido acerca de la variable de estado es mera ficción, pues no se suele disponer más que de medidas de la misma en unas localizaciones muy determinadas.

Posteriormente, se desarrollaron dos enfoques clásicos en la formulación del problema inverso, denominados “directos” e “indirectos” (Neuman, 1973). Los métodos “directos” se basan en la aproximación de Nelson, mientras que los “indirectos” minimizan una función que controla la diferencia entre calculado y medido. Los parámetros con los que se obtiene la variable de estado que proporciona el mínimo de dicha función son la solución del problema inverso.

No obstante, debido a la correlación espacial entre los parámetros y a la existencia de una componente aleatoria en las medidas, se hizo necesaria una estrategia que tuviera una cierta base estadística. Además, ninguno de los enfoques hasta ahora comentados hacía uso de la valiosa información acerca de los parámetros de la que se dispone. Por ejemplo, pueden conocerse, con un cierto grado de aproximación, los valores de la transmisividad y del coeficiente de almacenamiento mediante la interpretación de ensayos de bombeo. Para ello, Carrera y Neuman (1986) [4]-[6], formulan el problema inverso mediante un estimador de máxima verosimilitud, incorporando además información “a priori” acerca de los parámetros a cuantificar. Dicha formulación ha sido ampliamente validada y es de uso frecuente.

En secciones posteriores, se desarrollará de forma más extensa la formulación del problema inverso propuesta por Carrera y Neuman.

1.4 MOTIVACIÓN Y OBJETIVOS

Uno de los problemas más comunes que presentan los algoritmos de optimización es su velocidad de convergencia (que puede incluso no producirse) al mínimo de la función objetivo. Dependiendo del problema a resolver, dicha función puede presentar múltiples mínimos locales. En particular, la resolución del problema inverso aplicado al transporte de solutos suele presentar múltiples dificultades de convergencia.

Las técnicas de optimización continua convencionales suelen fallar en cuanto a robustez pues, si convergen, pueden hacerlo a un mínimo local, dependiendo del valor inicial asignado a los parámetros [7]. Además, en problemas mal condicionados es frecuente que los algoritmos se detengan sin haber llegado a un mínimo. El método de Marquardt, ampliamente utilizado en hidrología subterránea (y en muchos otros campos), puede llegar a converger a un valor de la función objetivo correspondiente a un mínimo local, lo cual proporciona un resultado engañoso, como se verá en un capítulo posterior, dedicado a los resultados.

Por otra parte, los métodos de búsqueda discreta o de optimización combinatoria requieren un elevado número de simulaciones, si bien, en teoría, algunos de ellos convergen al mínimo global de la función objetivo [7]. Por el contrario, la fuerte carga de aleatoriedad que introducen, en general, este tipo de métodos suele ir asociada a un esfuerzo computacional elevado. Dentro de este grupo, conviene destacar el método del recocido simulado (Simulated Annealing), por su robustez en la localización del mínimo global de la función objetivo. En teoría, dicha convergencia está asegurada para cualquier tipo de problema.

El objetivo de este trabajo es el de diseñar un algoritmo capaz de, primero, converger y, segundo, eludir los mínimos locales de la función a minimizar, manteniendo un tiempo de cálculo razonable. Para ello, se intenta combinar la velocidad de los métodos de optimización continua con la robustez en la localización del mínimo global de algunos métodos de optimización combinatoria.

Se presenta un método híbrido capaz de resolver cualquier problema de optimización continua, combinando la velocidad de convergencia del método de Marquardt en un entorno del mínimo global de la función objetivo, con la versatilidad del Simulated Annealing (SA en adelante) para eludir los mínimos locales, convergiendo de esta manera al mínimo global, en un tiempo de cálculo razonable.

1.5 ORGANIZACIÓN DEL DOCUMENTO

El documento se organiza en seis capítulos, además de éste. En el capítulo 2 se describen en detalle las formulaciones de los problemas directo e inverso en hidrología subterránea.

En el tercer capítulo se repasan los algoritmos de optimización más comunes en el campo de estudio. Dicho capítulo contiene dos secciones: la primera de ellas se refiere a los algoritmos de optimización continua, tales como los métodos de gradiente y los de cuasi-Newton, poniendo especial atención al método de Marquardt. La segunda contempla los algoritmos de mayor uso dentro de la optimización combinatoria, tales como el Simulated Annealing o la mejora iterativa. Asimismo, en dicho capítulo se comparan los distintos métodos, comentando algunas de sus ventajas e inconvenientes, lo cual permitirá el diseño del nuevo algoritmo, al que se dedica íntegramente el cuarto capítulo, donde se comentan los aspectos relativos a su implementación numérica en un código de elementos finitos ya existente.

En el capítulo 5 se detallan los resultados de la aplicación de dicho código a algunos ejemplos sintéticos, finalizándose el documento con las conclusiones extraídas sobre el algoritmo desarrollado.

CAPÍTULO 2. LOS PROBLEMAS DIRECTO E INVERSO. FORMULACIÓN

2.1 EL PROBLEMA DIRECTO. FORMULACIÓN

El problema directo consiste en la resolución de una ecuación (hallar los valores de la variable de estado) conocidos sus parámetros. El resultado es la variable de estado que describe la respuesta del sistema. En el caso de problema directo de flujo en medio poroso, la ecuación a resolver es [8], [9], [10]:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla(\mathbf{K}\nabla h) + \mathbf{q} \quad \text{en } \Omega \quad (4)$$

siendo h [L] el nivel piezométrico en el dominio, \mathbf{K} el tensor de conductividad hidráulica y \mathbf{q} un término fuente/sumidero, representando la recarga instantánea por

unidad de longitud, superficie o volumen, según la dimensión del problema. $S_s [L^{-1}]$ denota el coeficiente de almacenamiento específico.

Para resolver la ecuación (4), deben especificarse las condiciones iniciales y de contorno del problema:

$$\text{Condición inicial: } h(\mathbf{x},0)=h_0(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \Omega \tag{5}$$

$$\text{Condiciones de contorno: } (\mathbf{K}\nabla\mathbf{h})\mathbf{n} = \alpha(H - h) + Q \quad \text{en } \Gamma \tag{6}$$

donde Γ representa el contorno de Ω , \mathbf{n} es un vector unitario normal a Γ hacia el exterior de Ω , H y Q son el nivel y el caudal prescrito respectivamente, y α es un coeficiente que determina el tipo de condición de contorno, conocido en la literatura como coeficiente de goteo (Tabla 1).

Tabla 1: Tipo de condición de contorno en función del valor del coeficiente de goteo.

	Nombre	Significado físico
$\alpha=0$	Neuman	Caudal prescrito
$\alpha \neq 0, \alpha \neq \infty$	Cauchy	Condición mixta o de goteo
$\alpha \rightarrow \infty$	Dirichlet	Nivel prescrito

Una vez definido el sistema de ecuaciones a resolver, teniendo en cuenta los procesos físico-químicos que actúan sobre el medio a representar, puede obtenerse la respuesta del mismo. Para la resolución de dichos sistemas, es común en hidrología subterránea el uso del método de los elementos finitos o bien el de las diferencias finitas. Por su versatilidad para adaptarse fácilmente a contornos irregulares, en el programa donde se ha implementado el algoritmo híbrido, se ha adoptado el método de los elementos finitos para la discretización espacial del dominio.

En el programa desarrollado [8], [11], se utiliza dicho método en la discretización espacial y el método de diferencias finitas ponderadas en la temporal. Concretamente, se usa la variante de Galerkin de elementos finitos [8]-[11], mediante el cual y tras algunas manipulaciones se llega a la siguiente expresión:

$$\mathbf{A}(\mathbf{h})\mathbf{h} + \mathbf{D}(\mathbf{h}) \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} = \mathbf{b}(\mathbf{h}) \quad \text{en } \Omega \tag{7}$$

donde las matrices \mathbf{A} y \mathbf{D} dependen del tipo de elemento, de los parámetros de flujo y de la variable de estado (cuando el problema de flujo es no lineal) y \mathbf{h} es un vector que contiene los niveles piezométricos en los nodos del dominio discretizado. Aplicando ahora diferencias finitas en el tratamiento temporal, se obtiene la expresión más general para la ecuación de flujo, en régimen transitorio no lineal:

$$f(\mathbf{h}^{k+1}) = \mathbf{A}(\mathbf{h}^{k+\epsilon}) \mathbf{h}^{k+\theta} + \mathbf{D}(\mathbf{h}^{k+\epsilon}) \frac{\mathbf{h}^{k+1} - \mathbf{h}^k}{\Delta t} - \mathbf{b}^{k+\theta}(\mathbf{h}^{k+\epsilon}) = 0 \quad \text{en } \Omega \tag{8}$$

$$\text{donde } \mathbf{h}^{k+\beta} = \beta \mathbf{h}^{k+1} + (1-\beta) \mathbf{h}^k, \text{ siendo } \beta = \begin{cases} \theta \\ \varepsilon \end{cases} \quad (9)$$

La resolución del sistema (8) se basa en la actualización de forma iterativa del vector de incrementos, $\Delta \mathbf{h}^{k+1,l+1}$, basándose en la aproximación previa de $f(\mathbf{h}^{k+1,l})$, según:

$$\frac{\partial f(\mathbf{h}^{k+1,l})}{\partial \mathbf{h}} \Delta \mathbf{h}^{k+1,l+1} = f(\mathbf{h}^{k+1,l}) \quad (10)$$

En la expresión anterior, los superíndices (k+1) y (l+1) denotan el tiempo de resolución y el número de iteración de problema no lineal en dicho tiempo, respectivamente. Dicho sistema de ecuaciones se resuelve iterativamente hasta que se alcanza la convergencia, obteniéndose \mathbf{h}^{k+1} . La formulación representada en (10) se corresponde con el método de Newton Raphson completo, pues se evalúa el jacobiano del sistema no lineal de ecuaciones en cada iteración. Existen numerosas alternativas para su resolución en función de este criterio, tales como el método de la tensión inicial, método de la secante, de longitud de arco, etc. Si bien estos últimos son menos costosos en cuanto a tiempo computacional de evaluación de derivadas, el número de iteraciones a llevar a cabo es mayor, si se pretende obtener la misma precisión en los resultados.

En la expresión (8) los parámetros θ y ε se utilizan en la ponderación temporal y en el cálculo del nivel del cual dependen los parámetros, respectivamente. Este último es el nivel en el que se evalúan las matrices de flujo \mathbf{A} y \mathbf{D} , así como el vector término independiente \mathbf{b} , o de fuentes/sumideros. El sistema de ecuaciones suele evaluarse en un tiempo intermedio, esto es, para $\theta=0.5$, esquema conocido como de Cranck-Nicholson. En cambio, un valor de $\theta=0$ representa el esquema de diferencias finitas hacia delante en el tiempo (explícito), y un valor de $\theta=1$ hacia atrás en el tiempo (implícito).

Pinder y Gray [10], proponen la evaluación del nivel a resolver y del utilizado en la evaluación de las matrices de flujo y término independiente, en tiempos distintos, en función de los parámetros θ y ε . Según Galarza [11], el esquema de Cranck-Nicholson presenta un excelente comportamiento, desde el punto de vista de la precisión adquirida en la resolución del sistema, y el valor de ε debe ser próximo a 0.5, si bien este último valor depende de la formulación del problema.

2.2 EL PROBLEMA INVERSO. FORMULACIÓN

El problema inverso consiste en obtener un estimador de los parámetros de la ecuación que representa el problema físico a modelar, utilizando información previa sobre los mismos (obtenida, por ejemplo, mediante ensayos de campo o de laboratorio, o bien a partir de la experiencia del modelizador), su estructura de correlación, así como información acerca de la variable de estado.

El problema inverso en el contexto de la hidrología subterránea [1], consiste en la estimación de los parámetros de un acuífero (transmisividad, almacenamiento, etc.), a partir de medidas directas de los mismos y de variables dependientes de ellos, tales como niveles, concentraciones, etc.

Existen distintas formulaciones del problema inverso [3],[12]-[14]. En lo que sigue, se adopta la formulación propuesta por Carrera y Neuman (1986), basada en el método de la Máxima Verosimilitud, incorporando información previa.

La verosimilitud $L(\mathbf{p}|\mathbf{z}^*)$ de una hipótesis sobre los valores de los parámetros \mathbf{p} , dados los datos $\mathbf{z}^*=(\mathbf{h}^*,\mathbf{p}^*)$ y una estructura del modelo prefijada, se define como proporcional a $f(\mathbf{z}^*|\mathbf{p})$, función de densidad de probabilidad de haber observado \mathbf{z}^* , dados los parámetros \mathbf{p} , de acuerdo con algún modelo estadístico.

Así, la estimación por máxima verosimilitud consiste en hallar \mathbf{p} de forma que el valor de $L(\mathbf{p}|\mathbf{z}^*)$ sea máximo.

Para completar los datos, es necesario especificar el vector \mathbf{z}^* y la estructura de correlación o de error de las componentes de dicho vector. En adelante, se supondrá que $\mathbf{z}^* - \mathbf{z}(\mathbf{p})$ sigue una distribución multigaussiana con media nula, con lo que dicha estructura queda completamente definida mediante la matriz de covarianza. La hipótesis de multinormalidad viene avalada por el teorema central del límite, el cual demuestra que un gran número de pequeños errores en la medida de las componentes de \mathbf{z}^* se puede aproximar por una distribución multigaussiana de media nula. Por otra parte, la hipótesis de una distribución de probabilidad conocida permite el cálculo de intervalos de confianza de la estimación de parámetros y la realización de tests de hipótesis [13].

Es conveniente (sin pérdida de generalidad), suponer que la matriz de covarianza puede expresarse como:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_h &= \sigma_h^2 \mathbf{V}_h \\ \mathbf{C}_i &= \sigma_i^2 \mathbf{V}_i \end{aligned} \quad (11)$$

donde \mathbf{C}_h y \mathbf{C}_i son las matrices de covarianza de niveles y de la información previa asociada al i-ésimo tipo de parámetros, respectivamente. \mathbf{V}_h y \mathbf{V}_i son matrices conocidas y definidas positivas y σ_h y σ_i son escalares desconocidos. Las matrices \mathbf{V}_h y \mathbf{V}_i suelen obtenerse a partir de algún modelo geoestadístico, por ejemplo, mediante kriging.

Con las hipótesis anteriores y suponiendo multinormalidad, la verosimilitud de \mathbf{p} dado \mathbf{z}^* , se expresa como:

$$L(\mathbf{p}|\mathbf{z}^*) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} |\mathbf{C}|^{-\frac{N}{2}} \exp\left[-(\mathbf{z} - \mathbf{z}^*)^t \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{z} - \mathbf{z}^*) \right] \quad (12)$$

siendo N el número total de datos. En general, las medidas de niveles y parámetros no están correlacionados en el dominio. Así, sin pérdida de generalidad, puede suponerse que \mathbf{C} es de la forma:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_h & 0 \\ 0 & \mathbf{C}_p \end{pmatrix} \quad (13)$$

En la expresión anterior, \mathbf{C}_h representa la matriz de covarianza de las medidas de niveles y \mathbf{C}_p las referentes a los parámetros. Esta matriz puede considerarse diagonal por bloques, suponiendo que las estimaciones previas de los distintos parámetros no están correlacionadas.

Considérese la función S , definida como:

$$S = -2 \ln(L(\mathbf{p}|\mathbf{z}^*)) \quad (14)$$

Es evidente que maximizar la verosimilitud L , equivale a minimizar S . Sustituyendo (12) en (14), se obtiene:

$$S = N \ln(2\pi) + (\mathbf{h} - \mathbf{h}^*)^t \mathbf{C}_h^{-1} (\mathbf{h} - \mathbf{h}^*) + \sum_i (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_i^*)^t \mathbf{C}_i^{-1} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_i^*) + \ln(|\mathbf{C}_h| \prod_i |\mathbf{C}_i|) \quad (15)$$

Definiendo ahora las componentes de niveles y de parámetros como:

$$S_h = (\mathbf{h} - \mathbf{h}^*)^t \mathbf{V}_h^{-1} (\mathbf{h} - \mathbf{h}^*) \quad (16)$$

$$S_i = (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_i^*)^t \mathbf{V}_i^{-1} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_i^*) \quad (17)$$

Puede entenderse que las dos expresiones anteriores corresponden a las componentes de la función a minimizar referidas a niveles y a parámetros, respectivamente, obtenidas por mínimos cuadrados ponderados de la diferencia entre los valores calculados y los medidos. Sustituyendo las expresiones (16) y (17) en (15) y teniendo en cuenta (11), se obtiene:

$$S = \frac{S_h}{\sigma_h^2} + \sum_i \frac{S_i}{\sigma_i^2} + \ln(|\mathbf{V}_h|) + \sum_i \ln(|\mathbf{V}_i|) + n_h \ln(\sigma_h^2) + \sum_i n_i \ln(\sigma_i^2) + N \ln(2\pi) \quad (18)$$

En la expresión anterior, los escalares n_i y n_h representan el número de datos asociados al i -ésimo parámetro y a niveles, respectivamente, de forma que $N = n_h + \sum_i n_i$

Suponiendo conocida la estructura estadística (las matrices $\mathbf{V}_h, \mathbf{V}_i$ y los escalares σ_h y σ_i), la expresión anterior se reduce a:

$$S = S_h + \sum_i \lambda_i S_i + \beta \quad (19)$$

donde el funcional S es la función a minimizar o función objetivo, S_h es la componente de la función objetivo referente a niveles, S_i la correspondiente al parámetro i -ésimo, β un término constante y los escalares λ_i se definen como:

$$\lambda_i = \frac{\sigma_h^2}{\sigma_i^2} \quad (20)$$

Así pues, la resolución del problema inverso en su formulación según el método de Máxima Verosimilitud, se transforma en la minimización de un funcional dependiente de los valores de parámetros y niveles calculados y medidos y de la estructura de correlación entre los mismos. Es decir, se convierte en un problema de optimización continua, el cual puede ser abordado de numerosas formas, como se muestra en el capítulo siguiente.

CAPÍTULO 3. ESTADO DEL ARTE DE LOS ALGORITMOS DE OPTIMIZACIÓN

3.1 INTRODUCCIÓN

En el capítulo anterior se vió que la resolución del problema inverso se reducía a la minimización (optimización) de una función objetivo. Dicha función se expresaba como:

$$S = S_h + \sum_i \lambda_i S_i + \beta \quad (21)$$

Atendiendo a la dependencia respecto de los parámetros, esta función se compone de dos partes bien diferenciadas [2]:

- La primera, (término S_h) es una función cuadrática del residuo de niveles. Puesto que, en general, la dependencia de \mathbf{h} con respecto a los parámetros del modelo \mathbf{p} es no lineal, este primer sumando es una función no cuadrática y por tanto, no puede recurrirse a un método directo para el cálculo del mínimo de S .
- La segunda parte representa la contribución directa de los parámetros a la función objetivo, siendo una función cuadrática de los mismos.

En consecuencia, la función a minimizar es no cuadrática con respecto a los parámetros del modelo (a través de \mathbf{h}), por lo que no es posible minimizarla de forma directa, debiendo recurrir a métodos iterativos.

El presente capítulo se inicia con un breve repaso de los diversos métodos de optimización, estableciendo en primer lugar, una clasificación de los mismos, en función del grado de información que precisan sobre S , para describir en secciones posteriores los más comúnmente utilizados en la resolución de problemas de ingeniería.

3.2 BREVE REPASO DE LOS MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN

En primer lugar, resulta conveniente establecer una distinción entre los métodos de optimización continua y los de optimización combinatoria. Dentro del primer grupo, se encuentran los bien conocidos de gradientes, Newton, etc.

Los métodos de optimización continua encuentran la solución a partir de información sobre las derivadas de la función, como se verá más adelante. Los de optimización combinatoria que consideraremos aquí, generan posibles soluciones de forma aleatoria. Ambos generan una sucesión de vectores de parámetros \mathbf{p} , que debe converger a $\bar{\mathbf{p}}$, punto en el espacio de parámetros donde se alcanza el mínimo de la función objetivo. Los del primer grupo utilizan información sobre derivadas para generar la siguiente configuración, mientras que los del segundo lo realizan de forma aleatoria. Los métodos de optimización combinatoria se han venido aplicando típicamente a problemas de variable discreta, si bien, comienzan a utilizarse, con mayor o menor fortuna, en problemas de variable continua [15]-[19].

Como se muestra en la Tabla 2, los métodos de optimización sin restricciones se pueden dividir en cuatro grandes grupos, atendiendo a la información que precisan de la función (21) o de su componente de niveles [20], [21].

Tabla 2: Descripción de los métodos de optimización en función de la información que precisan acerca de la función objetivo.

	Información que precisan	Ejemplos
De orden 0	S	Búsqueda aleatoria, algoritmos genéticos, etc.
De orden 1	S y su gradiente	Métodos de gradientes conjugados y cuasi-Newton
De orden 2	S , su gradiente y la matriz hessiana (o una aproximación de la misma)	Newton, Gauss-Newton, etc.

Dado que, en algunos métodos resulta necesario el cálculo de derivadas de la función objetivo, en la siguiente sección se presentan los métodos más usuales para obtenerlas.

3.3 CÁLCULO DE DERIVADAS

El problema puede abordarse según dos perspectivas bien diferenciadas. La primera de ellas calcula la derivada de forma aproximada, mientras que la segunda realiza el cálculo de forma analítica, bien por derivación directa o bien a través de las ecuaciones de estado adjunto.

3.3.1 MEDIANTE COCIENTES INCREMENTALES

La derivada de una función $f(\mathbf{x})$ con respecto a la componente x_i , en un punto \mathbf{x}_0 , puede aproximarse por un cociente incremental como, por ejemplo:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{f(x_{0i} + \Delta x_i) - f(x_{0i} - \Delta x_i)}{2\Delta x_i} + \Theta(\Delta x_i^2) \tag{22}$$

Este método presenta dos grandes problemas. El primero de ellos es el gran esfuerzo computacional que requiere, pues para el cálculo de gradiente, debe evaluarse la función objetivo $2 \cdot n$ veces, siendo n el número de parámetros a estimar. Por otra parte, la magnitud Δx_i ideal es desconocida. Así, un valor grande produce un elevado error de truncamiento ($\Theta(\Delta x_i^2)$), mientras que un valor pequeño provoca errores de redondeo. El valor óptimo varía de una componente a otra y, para cada una, dentro del espacio de parámetros. Por ello, a veces es preciso probar más de un valor.

3.3.2 MEDIANTE DERIVACIÓN DIRECTA

En el caso más general, la ecuación de estado, mediante la que se obtiene la respuesta del sistema, presenta la siguiente forma (el desarrollo se muestra en régimen estacionario, por simplicidad):

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}) \mathbf{w}(\mathbf{x}) = \mathbf{b}(\mathbf{x}) \quad (23)$$

donde \mathbf{K} es la matriz de resolución del sistema, \mathbf{w} es la variable de estado, \mathbf{x} contiene los parámetros y \mathbf{b} representa los términos fuente/sumidero.

La función objetivo S , como se vio en el capítulo anterior, es de la forma:

$$S = S(\mathbf{x}, \mathbf{w}) \quad (24)$$

Así, es sencillo calcular las derivadas de la función objetivo con respecto a los parámetros:

$$\frac{dS}{d\mathbf{x}} = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial S}{\partial \mathbf{w}} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{x}} \quad (25)$$

Por derivación directa de la ecuación de estado, podemos obtener las derivadas de la variable \mathbf{w} con respecto a los parámetros \mathbf{x} :

$$\mathbf{K} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{w} \quad (26)$$

Obsérvese que la matriz de resolución para obtener dichas derivadas (solución del sistema (26)) es la misma que para la resolución del problema directo. Así, el esfuerzo necesario para el cálculo del gradiente, una vez resuelto el problema directo, equivale a resolver n sistemas de ecuaciones, siendo n la dimensión de \mathbf{x} .

3.3.3 MEDIANTE LAS ECUACIONES DE ESTADO ADJUNTO

Una buena estrategia para el cálculo del gradiente es mediante el método de estado adjunto. Su derivación, que aquí se muestra también en régimen estacionario, se basa en que la minimización de la función objetivo (21), viene restringida por las ecuaciones de estado (23), que pueden considerarse como restricciones de igualdad [22]. Así, el problema de minimización de la función objetivo, puede plantearse como:

$$L = S + \boldsymbol{\lambda}^t (\mathbf{K}(\mathbf{x}) \mathbf{w}(\mathbf{x}) - \mathbf{b}(\mathbf{x})) \quad (27)$$

Denotando por $\boldsymbol{\psi}(\mathbf{w}, \mathbf{x})$ las ecuaciones de estado:

$$\boldsymbol{\psi}(\mathbf{w}, \mathbf{x}) = \mathbf{K}(\mathbf{x})\mathbf{w}(\mathbf{x}) - \mathbf{b}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (28)$$

Las derivadas de L con respecto a los parámetros del modelo se pueden escribir, tras reordenar términos, como:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{x}} + \boldsymbol{\lambda}^t \frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \mathbf{x}} + \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{w}} + \boldsymbol{\lambda}^t \frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \mathbf{w}} \right) \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{x}} \quad (29)$$

Por otra parte, el gradiente puede expresarse como:

$$\mathbf{g} = \frac{dS}{d\mathbf{x}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{x}} + \boldsymbol{\lambda}^t \frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \mathbf{x}} \quad (30)$$

Dado que se pretende evitar el cálculo de $\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{x}}$, por ser la parte más costosa, se impone que:

$$\boldsymbol{\lambda}^t \frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \mathbf{w}} = - \frac{\partial S}{\partial \mathbf{w}} \quad (31)$$

La expresión anterior se conoce como las ecuaciones de estado adjunto, a partir de las cuales, una vez obtenido el vector $\boldsymbol{\lambda}$ puede sustituirse en la ecuación (30), obteniéndose el gradiente. Dado que $\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{K}$, resulta que el esfuerzo necesario para el cálculo del gradiente se limita al de resolver un sistema de ecuaciones (31), y multiplicar la solución del mismo por $\frac{\partial \boldsymbol{\psi}}{\partial \mathbf{x}}$, según la ecuación (30).

3.4 MÉTODOS DE PRIMER ORDEN

Entre ellos, se destacan, por su uso tradicional en la resolución de problemas de ingeniería, los métodos de gradientes conjugados y los de cuasi-Newton. Estos últimos se basan en conseguir información sobre la curvatura de la función objetivo utilizando los valores del gradiente y de la misma función en iteraciones anteriores, considerando una aproximación de Taylor de orden 1, obteniendo de este modo una aproximación de la curvatura de S en un punto. En este tipo de métodos, la matriz hessiana se aproxima de forma muy simple, actualizándola en cada iteración mediante una matriz simétrica definida positiva. Los métodos de gradientes conjugados realizan una búsqueda del mínimo según direcciones conjugadas (ortogonales entre si respecto de la métrica definida por una aproximación a la matriz hessiana de S). Dicha aproximación se

actualiza también de iteración a iteración, tal y como ocurre en el caso de los métodos tipo cuasi-Newton.

3.5 MÉTODOS DE SEGUNDO ORDEN

Mediante una aproximación de Taylor de segundo orden, se realiza una aproximación de la función objetivo en cada iteración. Por ello se necesita conocer el gradiente y la matriz hessiana de la función en cada iteración, siendo la evaluación de esta última especialmente costosa (en términos de esfuerzo computacional) de evaluar, generalmente.

Además, si la matriz hessiana no es definida positiva, el método presenta dificultades de convergencia a la solución. Esto último puede suceder si los valores iniciales de los parámetros están muy alejados de la solución real.

3.6 MÉTODOS DE ORDEN CERO

Pese a que más tarde se insistirá sobre ellos, valga decir aquí que requieren evaluar la función objetivo en muchas más ocasiones que con un método que utilice información de derivadas. En este caso, la evaluación de la función descrita en (21) es costosa, lo que hace que, además, sean bastante lentos. Los métodos de optimización combinatoria suelen englobarse en este grupo, si bien, alguno de ellos (en su concepción original), como el Simulated Annealing, puede utilizar información sobre las derivadas, como se verá en secciones posteriores.

3.7 COMPARACIÓN ENTRE LOS DISTINTOS MÉTODOS

En la presente sección, se pretende establecer una comparación cualitativa entre los distintos métodos, remarcando las ventajas e inconvenientes de cada uno de ellos, para justificar, de forma natural, la definición de un algoritmo híbrido. Dicha comparación se basa en la experiencia adquirida, así como la reflejada en la literatura, y se realiza en términos de robustez en la convergencia, así como en términos de coste computacional.

- Como ya se ha dicho y se verá más adelante, los métodos de orden cero presentan una velocidad de convergencia lenta, si bien algunos de ellos poseen propiedades atractivas de convergencia.

- Contrariamente a lo que pueda parecer, el método de gradientes conjugados es un mal método, poco robusto y lento en la convergencia, tal y como demuestra Cooley [23], pues direcciones de búsqueda consecutivas son ortogonales. Para huir de este tipo de restricciones de velocidad de convergencia, Fletcher (1981) [20], recoge numerosas aproximaciones que salvan este problema
- Los métodos de Gauss-Newton suelen utilizarse para la minimización de funciones que se pueden expresar en la forma $\mathbf{r}^t \mathbf{r}$, siendo \mathbf{r} un vector de residuos ponderados (diferencia ponderada entre valores calculados y medidos en nuestro caso, tal y como se deduce la expresión (19)). Para este tipo de funciones, la matriz hessiana se expresa como:

$$\mathbf{H} = 2\mathbf{J}^t \mathbf{J} + 2 \sum_i \mathbf{r} \nabla^2 \mathbf{r} \quad (32)$$

siendo \mathbf{J} la matriz jacobiana de \mathbf{r} . En la expresión anterior se observa que la matriz hessiana está formada por la suma de dos matrices. La primera de ellas contiene exclusivamente información de las derivadas de primer orden y la segunda se obtiene a partir de derivadas de segundo orden y de los valores de los residuos. Los métodos de Gauss-Newton consideran una aproximación a la matriz hessiana formada por la primera de las componentes ($2\mathbf{J}^t \mathbf{J}$). Dichos métodos son similares al de Newton diferenciándose en el cálculo de la matriz hessiana, que en el último es exacta y en los primeros una aproximación. La ventaja del método de Gauss-Newton respecto del de Newton es que no necesita el cálculo de derivadas de segundo orden, que son muy costosas de obtener. Respecto a los de cuasi-Newton, la ventaja reside en una mejor convergencia, en general, por emplear una aproximación mejor de la matriz hessiana. En cierto modo, este método conjuga la ideas de los métodos de Gauss-Newton y las de los métodos de gradientes, procurando corregir los fallos de convergencia o la lentitud de la misma que estos presentan. No obstante, presenta serios problemas cuando la aproximación a la matriz hessiana es singular o próxima a serlo. Por este motivo, se ha escogido como método el de Levenberg-Marquardt, el cual, como se verá en la siguiente sección, no presenta tantos problemas de singularidad de la matriz usada en la resolución del sistema cuya respuesta es el vector de actualización.

3.8 EL MÉTODO DE LEVENBERG-MARQUARDT

Este método es un caso particular de los de paso restringido, los cuales intentan reducir las dificultades de convergencia de algunos métodos basados en aproximaciones cuadráticas de la función objetivo, intentando restringir el paso a entornos en los que es válida esta aproximación.

El método de Levenberg-Marquardt resuelve el sistema de ecuaciones siguiente [24]:

$$\left(\mathbf{H}^{(k)} + \mu^{(k)} \mathbf{I}\right) \Delta \mathbf{p}^{(k)} = -\mathbf{g}^{(k)} \quad (33)$$

siendo $\mathbf{H}^{(k)}$ la matriz hessiana en el punto (en el espacio de parámetros) $\mathbf{p}^{(k)}$ o una aproximación de la misma, $\mathbf{g}^{(k)}$ el gradiente en la k -ésima iteración, $\Delta \mathbf{p}^{(k)}$ el incremento de parámetros ($\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{p}^{(k)} + \Delta \mathbf{p}^{(k)}$) y $\mu^{(k)}$ un escalar positivo que se actualiza de iteración a iteración mediante criterios empíricos, de los que se hablará más adelante. Éste controla la dirección del vector de actualización. Si $\mu^{(k)} = 0$, el método de Levenberg-Marquardt se convierte en el de Gauss-Newton. En cambio, si $\mu^{(k)}$ aumenta, disminuye el módulo del vector de actualización y su dirección se aproxima a la del gradiente de la función objetivo (Marquardt, 1963).

Buscando una mayor robustez, el sistema que se resuelve no es el de la ecuación (33), sino que se escalan las derivadas de la función, respecto de los coeficientes de la diagonal de la matriz hessiana, resultando el sistema:

$$\left(\mathbf{E}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{E}^{-1} + \mu \mathbf{I}\right) \mathbf{E}^{-1} \Delta \mathbf{p} = -\mathbf{E}^{-1} \mathbf{g} \quad (34)$$

donde

$$\mathbf{H} = \mathbf{J}^t \mathbf{J}, \quad \mathbf{g} = \mathbf{J}^t \mathbf{r} \quad \text{y} \quad \mathbf{E} = \sqrt{\mathbf{H}_{ij}} \delta_{ij} \quad (35)$$

siendo H_{ij} el elemento de la fila i , columna j , de la matriz hessiana y la expresión δ_{ij} representa la delta de Kronecker, esto es, tiene valor unidad si $i=j$ y valor nulo en caso contrario.

3.9 CRITERIOS DE CONVERGENCIA

El objetivo consiste en obtener una sucesión de puntos del espacio de parámetros, convergente a un valor tal que la sucesión de valores imagen (de función objetivo) sea decreciente y convergente al valor mínimo de la función. Desde el punto de vista numérico, la convergencia no está aún completamente definida, dado que, en primer lugar, no es posible generar la sucesión de puntos en el espacio de parámetros de una forma completa, siendo únicamente posible evaluar el valor imagen de un número finito de ellos. Lo que representa un criterio de convergencia cualquiera es, en realidad, un criterio de parada en el algoritmo, el cual será lógicamente coherente con la información adquirida hasta la iteración en curso. Obviamente los criterios idóneos serían del tipo:

$$\left|f(\mathbf{p}_n) - f(\bar{\mathbf{p}})\right| \leq \varepsilon \quad (36)$$

$$\|\mathbf{p}_n - \bar{\mathbf{p}}\| \leq \varepsilon \quad (37)$$

siendo $\bar{\mathbf{p}}$ el punto en el espacio de parámetros cuya imagen se corresponde con el mínimo de f . No obstante, este tipo de criterios no son factibles, pues no se conoce ni dicho punto $\bar{\mathbf{p}}$ ni el mínimo de la función objetivo, dado que éstos son precisamente los que se buscan.

Los criterios más comúnmente utilizados son [8]:

- a) $\|\mathbf{g}_k\| \leq \varepsilon_1$ (Norma del gradiente)
- b) $\left| \frac{f(\mathbf{p}_k) - f(\mathbf{p}_{k+1})}{f(\mathbf{p}_k)} \right| \leq \varepsilon_2$ (Reducción relativa del valor de la función objetivo)
- c) $\frac{\|\mathbf{p}_{k+1} - \mathbf{p}_k\|}{\|\mathbf{p}_k\|} \leq \varepsilon_3$ (Variación relativa de parámetros en iteraciones sucesivas)
- d) $\left\| \frac{\mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_1} \right\| \leq \varepsilon_4$ (Variación relativa de la norma del gradiente)

En muchas ocasiones, el proceso no se detiene por la simple verificación de uno de los criterios en una iteración, sino cuando se verifica uno de ellos en más de una iteración. Un problema adicional, y de difícil solución, estriba en la elección de los parámetros de convergencia ε_i adecuados.

En cuanto al parámetro de Marquardt, este se actualiza (si cabe) de iteración a iteración como se explica a continuación. Uno de ellas verifica, en primer lugar, si la función objetivo se aproxima a una función cuadrática pues, en tal caso, un valor nulo del parámetro de Marquardt resulta idóneo. Esta comprobación se realiza comparando el valor de la función objetivo en dos iteraciones sucesivas con su desarrollo de Taylor de segundo orden.

Del desarrollo de Taylor de la función objetivo en un punto \mathbf{p} , se tiene:

$$S(\mathbf{p}^{(k+1)}) = S(\mathbf{p}^{(k)}) + \mathbf{g}^{(k)} \Delta \mathbf{p}^{(k)} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{p}^{(k)t} \mathbf{H} \Delta \mathbf{p}^{(k)} + \mathcal{O}(\|\Delta \mathbf{p}^{(k)}\|^3) \quad (38)$$

Si la función objetivo fuera cuadrática, el último término, correspondiente al infinitésimo de tercer orden del desarrollo, sería nulo, por lo que:

$$\phi \stackrel{\text{def}}{=} \frac{S(\mathbf{p}^{(k+1)}) - S(\mathbf{p}^{(k)})}{\mathbf{g}^{(k)} \Delta \mathbf{p}^{(k)} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{p}^{(k)t} \mathbf{H} \Delta \mathbf{p}^{(k)}} = 1 \quad (39)$$

En la expresión anterior no es necesario calcular el término $\Delta \mathbf{p}^{(k)t} \mathbf{H} \Delta \mathbf{p}^{(k)}$ si se considera la aproximación del hessiano antes comentada. Por otra parte, no se permite una variación libre en los parámetros, sino que se controla su variación relativa de iteración a iteración mediante un porcentaje fijado a priori [2], [8]. Así, se calcula un

factor $\alpha \in (0,1]$ por el que se multiplica el vector incremento de parámetros. De esta forma, el incremento real de los parámetros es:

$$\Delta \mathbf{q}_k = \alpha \Delta \mathbf{p}_k \quad (40)$$

Tras algunas manipulaciones de la expresión (39), utilizando (34), (35) y (40), se obtiene la siguiente expresión:

$$\phi = \frac{S(\mathbf{p}^{(k+1)}) - S(\mathbf{p}^{(k)})}{\mathbf{g}^{(k)t} \Delta \mathbf{q}^{(k)} \left(1 - \frac{1}{2} \alpha\right) - \mu \Delta \mathbf{q}^{(k)t} \mathbf{E}^2 \Delta \mathbf{q}^{(k)}} \quad (41)$$

En general, el coeficiente calculado será distinto de la unidad. En función de su diferencia en valor absoluto con respecto a dicho valor, se aumenta o se disminuye el valor del parámetro de Marquardt, multiplicándolo o dividiéndolo por factores predefinidos. Se disminuye en el caso de que el valor calculado en (41) esté próximo a la unidad (buena aproximación cuadrática), y multiplicándolo en caso contrario.

Otro criterio utilizado para la modificación del parámetro de Marquardt consiste en analizar el ángulo formado por el gradiente y el vector de actualización. Localmente, la dirección del gradiente cambiado de signo es la de máximo descenso de la función objetivo pero, en muchas ocasiones, el vector de actualización queda fuera del entorno donde esta afirmación es cierta. A pesar de ello, tampoco es conveniente que ambos vectores formen un ángulo superior a noventa grados. Así, se aumenta el parámetro de Marquardt si dicho ángulo es aproximadamente de noventa grados.

3.10 OPTIMIZACIÓN COMBINATORIA. MEJORA ITERATIVA

Hasta el momento, se han enunciado algunos de los pormenores de los métodos de optimización continua más comúnmente utilizados. Se produce ahora un salto cualitativo, pues los métodos de optimización combinatoria no suelen utilizar información acerca de las derivadas. Un nexo común a todos ellos es la evaluación de la función objetivo en puntos pertenecientes al espacio de parámetros generados (en la mayoría de los casos) de forma aleatoria. En la presente sección se describe en detalle el proceso seguido por dos de estos métodos, la mejora iterativa y el Simulated Annealing.

La aplicación de la mejora iterativa presupone el conocimiento de las posibles configuraciones (puntos del espacio de parámetros), de la función de coste o función objetivo y de un mecanismo de transición que permita obtener una configuración nueva (valores de los parámetros) a partir de la anterior, perturbada de algún modo.

La mejora iterativa puede describirse como sigue: partiendo de la configuración actual, el mecanismo de transición genera un entorno de la misma. Dicho entorno engloba todas las posibles configuraciones alcanzables a partir de la actual, tras una

transición o perturbación. Se elige aleatoriamente una nueva configuración perteneciente a dicho entorno y se evalúa la función objetivo en la configuración creada. Si este valor es menor que el anterior, se acepta como buena la nueva configuración; en caso contrario, se genera una nueva configuración a partir de la última buena y se repite el proceso, el cual termina cuando el valor de la función objetivo asociado a una configuración es menor que el de todas sus vecinas.

Los inconvenientes de este método son evidentes:

- 1.- Por definición, el algoritmo converge a un mínimo, aunque no se conoce si el valor al que se ha llegado corresponde a un mínimo local o global. Además, aunque se conociera, no existe ninguna información acerca de la desviación entre los mínimos local y global.
- 2.- El valor final de la función objetivo suele depender de la configuración inicial (valores iniciales de los parámetros). Además, no suele disponerse de información para la elección de ésta.
- 3.- En general, el consumo computacional es elevado, sin garantía alguna de convergencia.

Sin embargo, la ventaja más clara que presenta el algoritmo de la mejora iterativa es su aplicabilidad a cualquier problema formulable en términos de optimización combinatoria. Para ello, únicamente se precisa de un espacio configuración, de una función a minimizar o función objetivo y de un mecanismo de transición.

Para eludir las desventajas antes comentadas, existen diferentes alternativas [25], [26]:

- 1.- Ejecutar el algoritmo para un elevado número de configuraciones iniciales, por ejemplo, uniformemente distribuidas en el espacio de parámetros. Esto provoca un incremento considerable en el tiempo de computación necesario. De todas formas, como en el caso anterior, el éxito en el proceso dependerá de la topología de la función objetivo.
- 2.- (Refinamiento del punto anterior). Utilizar información adquirida en pasos previos del algoritmo en la elección de la configuración inicial del paso siguiente.
- 3.- Introducir mecanismos de transición más complejos o, equivalentemente, generar las vecindades de mayor extensión, de forma que dotemos al algoritmo de capacidad de eludir los mínimos locales correspondientes a un mecanismo de generación más simple. Sin embargo, esta alternativa no erradica la posibilidad de que el algoritmo quede estancado en un mínimo local no deseado. Por otra parte, la elección de los parámetros del mecanismo de generación requieren el conocimiento de la topología de la función objetivo.
- 4.- Aceptar transiciones en las que haya un incremento positivo de la función objetivo, si bien, por definición, deja de ser mejora iterativa.

La segunda y tercera alternativas son fuertemente dependientes del problema a resolver, con lo que restringe la aplicabilidad del algoritmo.

3.11 SIMULATED ANNEALING

Un algoritmo que utiliza la cuarta alternativa propuesta en el apartado anterior (si bien cuenta con la posibilidad de utilizar las cuatro) ha sido descrito por van Laarhoven & Aarts [26] (1987), que en su manuscrito “*Simulated Annealing. Theory and Applications*” sintetizan los resultados obtenidos hasta aquel momento. No obstante, resulta complicado atribuir una paternidad al algoritmo pues, uno de los primeros resultados fue obtenido por Metropolis en (1953). Entre ese momento y la actualidad, las apariciones en la literatura son esporádicas y de distinta índole. Uno de los campos donde mayor utilidad está prestando este algoritmo es en biomedicina, con numerosas publicaciones en los últimos años.

Dicho algoritmo recibe otros nombres como MonteCarlo annealing, enfriado estadístico, escalada probabilística o hill-climbing, de relajación estocástica, etc. Como se verá más adelante, las soluciones obtenidas mediante SA no dependen de la configuración inicial escogida y, usualmente, se obtiene un mínimo próximo al analítico, siendo además posible acotar el tiempo computacional exigido por el algoritmo mediante una función polinomial dependiente de las dimensiones del problema a resolver. Este método puede entenderse como una generalización de la mejora iterativa, si bien, pese a tener una mejor capacidad de convergencia, es algo más lento que aquél.

El Simulated Annealing (SA) o recocido simulado se basa en la analogía entre la simulación del recocido de sólidos y la resolución de problemas de optimización combinatoria a gran escala. En Física, el recocido denota el proceso por el cual un sólido en un baño de calor se calienta por incremento de temperatura del mismo, hasta una temperatura máxima para la cual las partículas del sólido pierden su coherencia o estructura, pasando a un estado de entropía o desorden máximo. Acto seguido, se aplica al cuerpo un enfriamiento, disminuyendo la temperatura del baño de calor lenta y paulatinamente. Así, se produce un reordenamiento de las partículas del sólido hacia un nuevo estado de mínima entropía (al final del proceso), suponiendo que la temperatura inicial del baño haya sido lo suficientemente alta y el proceso de enfriamiento lo suficientemente lento.

Partiendo de un estado de máxima temperatura, el proceso de recocido puede describirse como sigue. Para cualquier valor de la temperatura T , se permite al sólido alcanzar el equilibrio térmico caracterizado por la probabilidad de estar en un estado con un nivel de energía E . Debido al elevado número de átomos del sólido, sólo es “observable” el comportamiento más probable del mismo. Es conocido que esta densidad de probabilidad se ajusta a la distribución de Boltzmann, la cual se expresa como:

$$f(E) = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (44)$$

En la expresión anterior $Z(T)$ es el llamado factor de normalización, también llamado función de partición (de valor kT) y k es la constante de Boltzmann. El factor exponencial es asimismo conocido como el factor de Boltzmann.

A medida que la temperatura decrece, la distribución de Boltzmann se concentra en los estados de mínima energía o entropía para, finalmente, cuando la temperatura se aproxima a la mínima necesaria, únicamente los estados de mínima energía tienen probabilidad no nula de ser alcanzados. No obstante, aún cuando la temperatura es mínima, siempre existe una probabilidad de cambio de energía, que permite al sólido escapar de un mínimo local de energía.

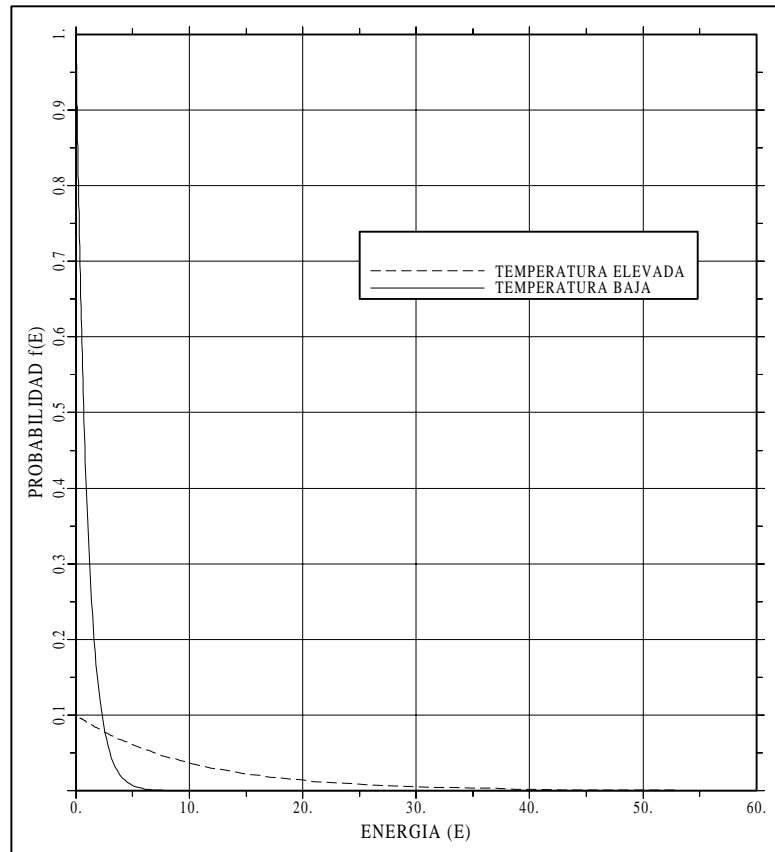


Figura 1. Distribución de probabilidad de Boltzmann

En la Figura 1 se describe la evolución del proceso anterior. Para una temperatura elevada, la probabilidad de que la energía también lo sea es prácticamente igual a la unidad. En cambio, a medida que la temperatura decrece, la probabilidad de que la energía sea elevada, disminuye considerablemente, según un factor exponencial.

Si el proceso de enfriamiento es demasiado rápido, es decir, si no se permite al sólido alcanzar el equilibrio térmico para cada temperatura, los defectos pueden quedar embebidos en la estructura del sólido, creándose así situaciones amorfas metaestables dentro del propio cuerpo.

Para simular la evolución hacia el equilibrio térmico de un sólido para una temperatura fija, Metropolis et al. (1953) proponen el método de MonteCarlo, el cual genera secuencias de estados del sólido de la siguiente forma: conocido el estado actual del sólido, caracterizado por la posición de sus partículas, se aplica una pequeña perturbación generada aleatoriamente. Si la diferencia de energía entre el estado actual y

el perturbado a partir de éste es negativa, la perturbación conduce a un estado de menor energía y el proceso continúa a partir del estado generado. En cambio, si esta diferencia de energías es positiva, entonces la probabilidad de aceptar el nuevo estado viene dada por (44). Es decir:

$$\Pr\{\text{aceptación}\} = \min\left\{1, \frac{1}{kT} \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)\right\} \quad (45)$$

Este criterio de aceptación es el conocido como de Metropolis y puede resumirse en la figura siguiente.

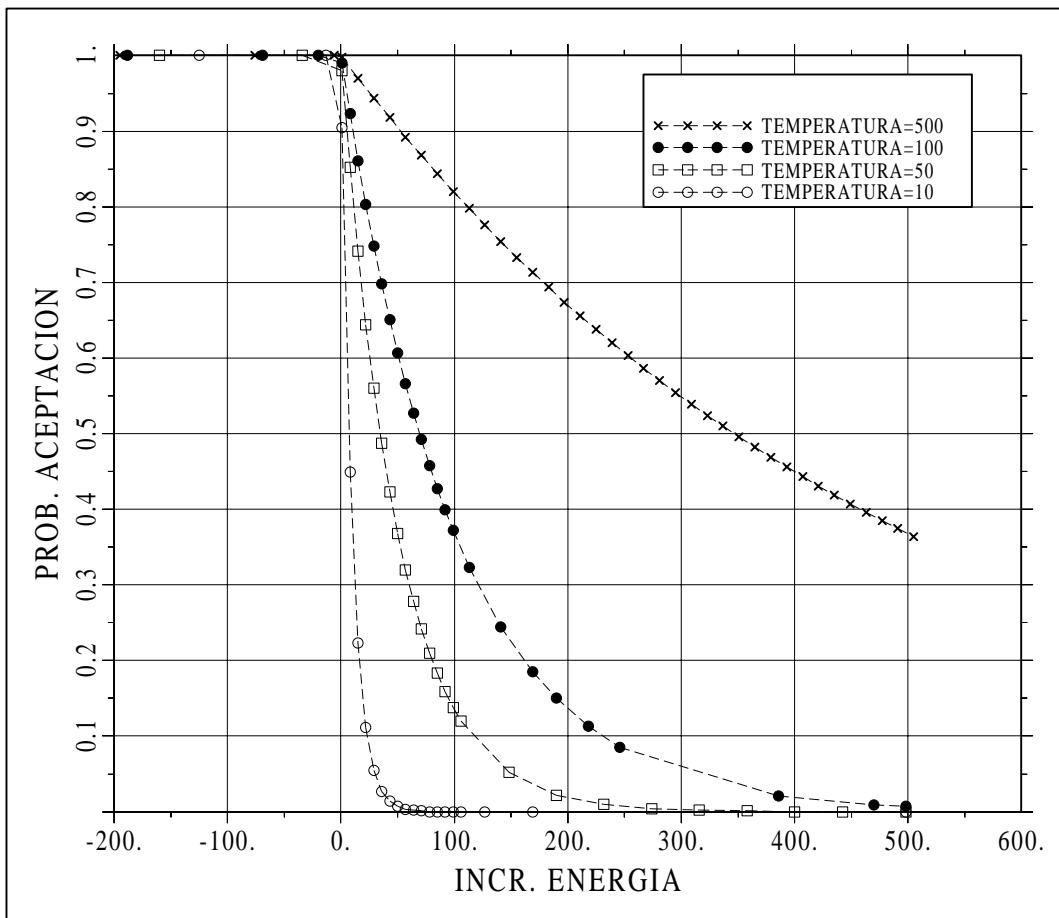


Figura 2. Probabilidad de aceptación de un nuevo estado según el criterio de Metropolis

En la figura anterior se observa cómo incrementos negativos conducen a una aceptación segura de la nueva configuración. La rama de incrementos positivos depende de la temperatura en la que se encuentra el proceso. Así, si la temperatura es elevada (comienzo del proceso) la probabilidad de aceptación es mayor que si la temperatura fuese pequeña (final del proceso).

Generalizando a un problema de optimización cualquiera, las configuraciones asumen el papel de estados del sólido, mientras que la función objetivo asume el de función de energía y la temperatura representa un parámetro de control sobre la evolución del proceso. Así, SA puede considerarse como una secuencia de aplicaciones

del criterio de Metropolis, evaluados para valores decrecientes del parámetro de control (temperatura) [26].

El algoritmo puede resumirse como sigue: inicialmente, se asigna al parámetro de control, temperatura, un valor. Al igual que en la mejora iterativa, se define un mecanismo tal que, dada una configuración determinada \mathbf{p}_i , pueda determinarse otra (\mathbf{p}_j) perteneciente a un entorno de la primera. Esto último corresponde a la aplicación de una perturbación de la configuración \mathbf{p}_i . Sea $\Delta f = f(\mathbf{p}_j) - f(\mathbf{p}_i)$; entonces, la probabilidad de aceptar la configuración \mathbf{p}_j , generada a partir de \mathbf{p}_i , viene dada por la expresión:

$$\text{pr}\{\text{aceptar } \mathbf{p}_j\} = \min\left\{1, \frac{1}{kT} \exp\left(-\frac{\Delta f}{kT}\right)\right\} \quad (46)$$

Como se observa en la Figura 2, la tendencia asintótica de la exponencial negativa hace que siempre exista una probabilidad no nula, por pequeña que sea, de alcanzar un estado con incremento positivo en la función objetivo, lo cual proporciona al método una cierta capacidad de eludir los mínimos locales.

Para cada valor del parámetro de control, el sistema debe alcanzar el equilibrio térmico. Una vez alcanzado dicho estado, se disminuye el parámetro de control T . Este proceso se repite, aplicándose a valores decrecientes de temperatura, finalizando con un valor de la misma para el cual, prácticamente no se aceptan deterioros o incrementos positivos en la función objetivo. La configuración correspondiente a este estado final se supone óptima, es decir, aquella que ofrece un valor mínimo de la función objetivo.

Al igual que ocurría con la mejora iterativa, se trata de un algoritmo completamente general, capaz de resolver cualquier problema formulable en términos de optimización combinatoria.

La comparación entre SA y la mejora iterativa es clara. Basta, por ejemplo, fijar como nula la temperatura inicial y se anula la rama exponencial del criterio de Metropolis, convirtiéndose así la mejora iterativa en un caso particular de este algoritmo. Puede entenderse entonces, SA como una generalización del anterior, donde se acepta con probabilidad no nula, pero gradualmente decreciente, configuraciones que provocan un incremento positivo de valor de la función objetivo.

En cuanto al modelo matemático del algoritmo, puede aproximarse por una cadena de Markov [26]-[28], pues ésta no es más que una secuencia de intentos en el que el resultado de una transición depende únicamente del resultado de la transición anterior. Es decir, SA es un algoritmo "sin memoria". Ello implica que el resultado final no dependerá de los parámetros iniciales dados. Sus propiedades de convergencia vienen asociadas sobremanera a las propiedades de las matrices no negativas [29]-[31] y se recogen en el anejo del presente documento.

Los mecanismos de perturbación serán tratados en profundidad en secciones posteriores, donde se describirá un nuevo algoritmo, híbrido entre SA y el método de Marquardt, dado que utiliza los mismos patrones de perturbación que SA .

Para finalizar la presente sección y a modo de ejemplo, se describe uno de los ejemplos más conocidos en la rama de optimización combinatoria: el Problema del viajante [26], [32].

El problema consiste en minimizar la distancia que debe recorrer un representante de ventas, que debe pasar por un número determinado de ciudades una vez y sólo una. En este caso la función objetivo es la suma de distancias a recorrer por el viajante. Así, si (x_i, y_i) , con $i=1, N$, son las coordenadas de los puntos de paso obligado (ciudades), la función objetivo a minimizar se escribe como:

$$f = \sqrt{\sum_{i=1}^{N-1} (x_{i+1} - x_i)^2 + (y_{i+1} - y_i)^2} \tag{47}$$

Lógicamente, esa distancia total dependerá del orden de recorrido de los puntos de paso. Es precisamente esto último lo que se pretende establecer de forma que f sea mínima. Para hacerse una idea del número de configuraciones posibles a evaluar, para $N=10$ ciudades, esta cantidad es superior a tres millones y medio de caminos diferentes posibles.

En las figuras 3 y 4 se presenta un ejemplo con diez ciudades, cuyas coordenadas se han escogido aleatoriamente en una cuadrícula de 1×1 (unidades arbitrarias).

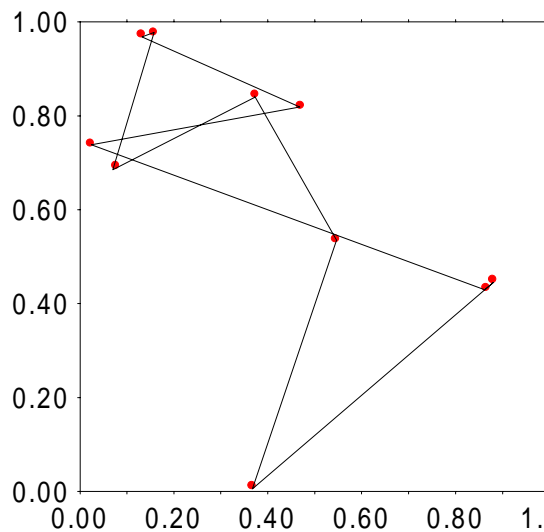


Figura 3. Recorrido calculado a temperatura elevada

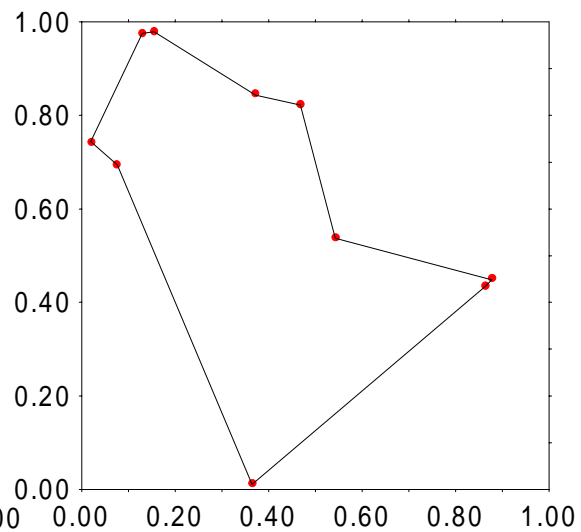


Figura 4. Recorrido obtenido al final del proceso

En estas figuras puede observarse la evolución del proceso. Para un valor medio entre la temperatura inicial y la final (temperatura aún elevada), el camino calculado es bastante caótico, obteniéndose una distancia recorrida de 3.64 (Figura 3). En ese instante, el número de perturbaciones que provocaron un incremento negativo en la función objetivo fue de 100, aproximadamente. En cambio, el camino final calculado ofrece una distancia mínima de 2.76, para un valor de la temperatura prácticamente nulo, en el que el número de movimientos satisfactorios era nulo, si bien seguían aceptándose transiciones en las que la función objetivo aumentaba. Esta simulación se realizó mediante el algoritmo presentado en Numerical Recipes [32].

CAPÍTULO 4. EL MÉTODO HÍBRIDO. DESCRIPCIÓN E IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

4.1.- INTRODUCCIÓN

En el capítulo anterior se ha descrito con un cierto nivel de detalle el proceso que siguen los algoritmos más comúnmente utilizados en la minimización de funciones; asimismo, se han comparado entre ellos, llegándose a la conclusión de que los métodos de optimización continua no suelen converger al mínimo global de la función, además de utilizar un considerable coste computacional en el cálculo de derivadas. Por otra parte, los algoritmos de optimización combinatoria requieren un coste computacional excesivo, si bien algunos de ellos aseguran (al menos en teoría) la convergencia al mínimo global. Finalmente, comparando las prestaciones de los distintos métodos, se optó por el uso conjunto del método de Marquardt y del Simulated Annealing.

En esta sección, se presenta un algoritmo híbrido entre dichos métodos, que combina las prestaciones de SA, a la hora de eludir los mínimos locales, con la velocidad de convergencia del método de Marquardt en un entorno del mínimo, intentando mantener un coste computacional razonable. Como se verá en secciones posteriores, el hecho de añadir al método de Marquardt una carga de aleatoriedad mediante SA, no afecta sobremanera al coste computacional del primero, pues éste es especialmente sensible al tiempo utilizado en el cálculo de derivadas, no a la simulación, en general.

4.2.- DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO HÍBRIDO

Inicialmente, debe proveerse al algoritmo de una configuración inicial (juego de parámetros). Este calculará el valor imagen de dicho punto en el espacio de parámetros. Posteriormente se aplica el método de Marquardt y se obtiene un nuevo juego de parámetros, que también será evaluado. Llegados a este punto, se comparan ambos valores de función objetivo y se opta por el juego de parámetros que ofreció el menor valor de función objetivo. Esto se lleva a cabo durante la primera iteración que realiza el método, y que resulta sensiblemente diferente del resto, pues no se aplica ningún mecanismo de perturbación, para no perder la información inicial de los parámetros.

A partir de la segunda iteración, y durante el resto del proceso, el procedimiento es el siguiente: se aplica una perturbación a los parámetros almacenados, creándose así una nueva configuración, \mathbf{p}^1 . Se evalúa la función objetivo en dicho punto y se aplica el método de Marquardt, obteniéndose \mathbf{p}^2 . Sea f^* el valor menor de la función objetivo entre los obtenidos para \mathbf{p}^1 y \mathbf{p}^2 .

Existen dos posibilidades:

- La primera de ellas se da cuando el valor antes mencionado es inferior al de la iteración anterior (caso de aplicar SA) o al mejor obtenido en todo el proceso (caso de aplicar mejora iterativa). En este caso la iteración se considera como “buena”, pues lleva a un valor menor de la función objetivo. En este caso, se almacenan los parámetros y se chequea la convergencia del algoritmo. Por otra parte, se comprueba el estado de equilibrio térmico, como se verá más adelante, y si es necesario se disminuye el valor del parámetro de control (temperatura).
- En caso contrario (la función objetivo aumenta), se abren dos nuevas posibilidades, en función de la probabilidad de aceptación de Boltzmann:
 - a) Se acepta la nueva configuración de parámetros (la que proporcionó f^*) a instancias de la probabilidad de Boltzmann (criterio de Metropolis). En este caso se toman estos parámetros como los iniciales para la siguiente iteración, pero no se actualiza el vector de los parámetros “mejores”. Además, se comprueba si el algoritmo debe detenerse por problemas de convergencia.
 - b) Se rechaza la nueva configuración, a instancias de la probabilidad de Boltzmann. También en este caso se verifica si el algoritmo debe parar por problemas de convergencia. Si no se detiene el proceso, los parámetros

obtenidos en esta iteración se pierden, iniciándose la siguiente con los parámetros “mejores” obtenidos hasta el momento, es decir, aquéllos que dieron lugar a la función objetivo menor.

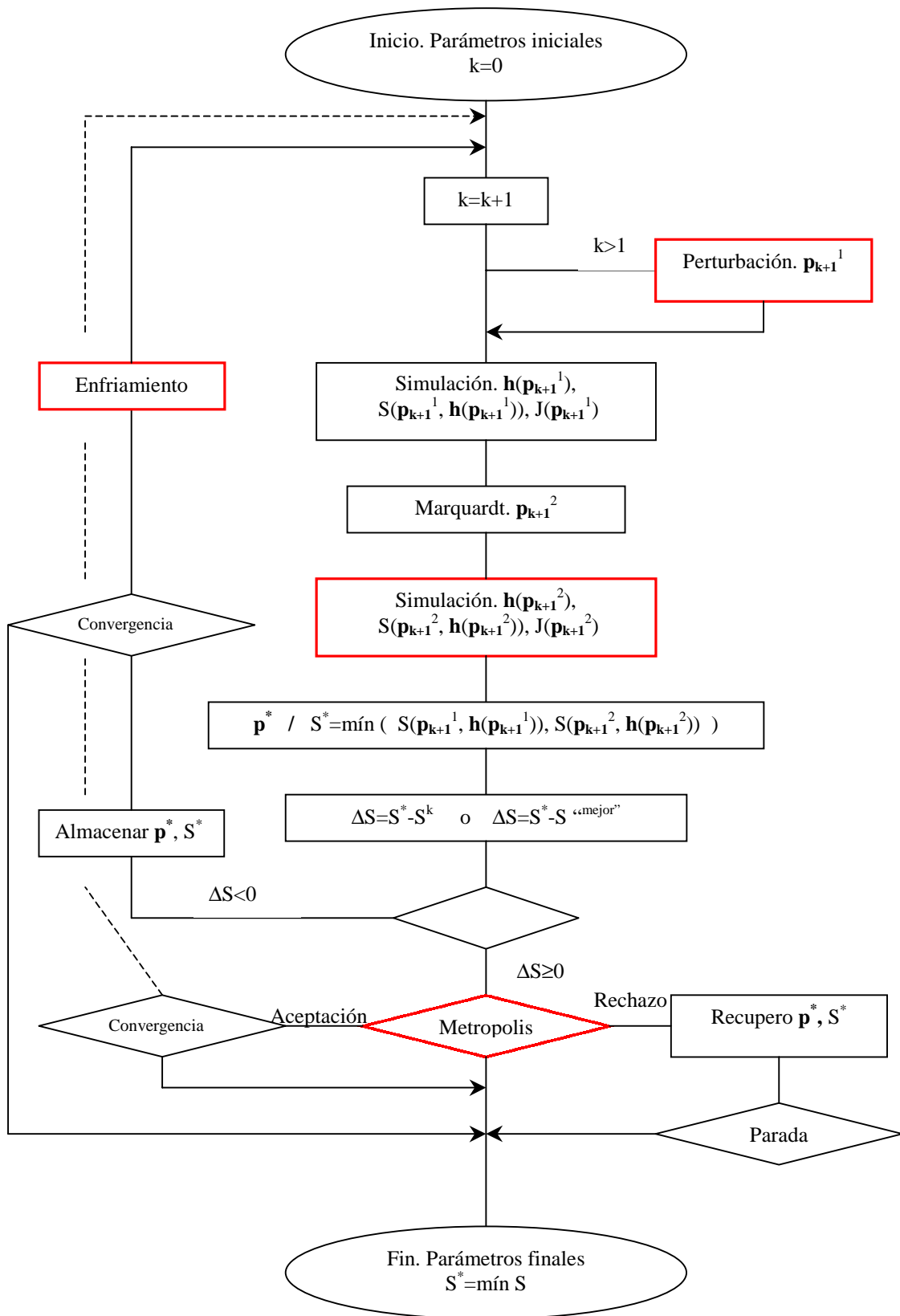


Figura 5. Diagrama de flujo del algoritmo híbrido.

En la Figura 5, se muestra el diagrama de flujo del método híbrido, donde se observan las distintas partes del algoritmo, tal y como se ha descrito. S^* denota el valor menor de la función obtenido en la iteración $k+1$, de entre los calculados $S(\mathbf{p}_{k+1}^1)$ y $S(\mathbf{p}_{k+1}^2)$, \mathbf{p}^* es el valor de los parámetros que dieron lugar a S^* y \mathbf{J} la matriz jacobiana.

El proceso continua hasta que en alguno de los chequeos, se verifica la convergencia o se detiene por máximo número de iteraciones o de iteraciones fallidas, entendiéndose éstas como aquéllas en las que se rechazó la configuración obtenida.

A continuación se presenta una breve descripción del código de elementos finitos, a partir del cual se desarrolló el nuevo algoritmo. Dicho código, de nombre TRANSIN-III [8] fue desarrollado en la E.T.S.I.C.C.P.B.

4.3.- EL CÓDIGO TRANSIN III

El código TRANSIN-III [8], en el desarrollo del cual el tesinando participa activamente, resuelve las ecuaciones de flujo y transporte, tanto en el caso lineal como no lineal y en régimen estacionario o transitorio. Asimismo, a partir de medidas de niveles y/o concentraciones, se puede obtener una estimación sobre los parámetros de las ecuaciones.

Como se esbozó anteriormente, el problema directo (simulación) se resuelve mediante el empleo del método de los elementos finitos (Galerkin), dada la versatilidad que estos tienen para adaptarse a contornos irregulares. Para un mayor nivel de detalle acerca de la resolución del problema directo, nos remitimos al segundo capítulo del presente documento.

La formulación adoptada para la resolución del problema inverso es la del Método de Máxima Verosimilitud, con la incorporación de información a priori acerca de los parámetros, como se documenta en el capítulo 2, utilizando el método de Marquardt para el problema de optimización resultante.

La particularidad más relevante del código utilizado es que la calibración o ajuste de los parámetros (de forma que la variable calculada o respuesta del modelo se ajuste a la real o medida) se realiza de forma automática.

Dada la complejidad del proceso de modelación, especialmente en su fase de identificación de procesos o de conceptualización, este código es especialmente útil, pues libera al usuario de la pesada carga (y de los errores inherentes a un proceso repetitivo) de modificar manualmente los parámetros en cada ejecución del código.

Una vez comentadas las particularidades del código, a continuación se describen (de forma muy sucinta) los distintos cuerpos que componen el programa.

El primero de ellos corresponde a la entrada de datos, la cual tuvo que ser ligeramente modificada, para introducir las nuevas variables utilizadas por el método

híbrido. El segundo de ellos, corresponde a la simulación, en la que se calculan los niveles y/o concentraciones (en función del problema a resolver) en cada nudo del dominio discretizado. También se calcula en este cuerpo las derivadas (caso de aplicar el método de Marquardt) y el valor de la función objetivo correspondiente a la configuración actual.

El cuerpo de mayor relevancia para el tema que nos ocupa es el de gestión de problema inverso, donde se aplica el método de Marquardt. Una de las particularidades del mismo es que no sólo permite la estimación de los parámetros físicos del modelo, sino también la estimación de parámetros específicos asociados a funciones no lineales [12] (caso de flujo y/o transporte no lineal).

Finalmente, cuenta con un cuerpo de cálculo de balance de masas y otro de escritura de resultados.

4.4.- IMPLEMENTACIÓN DEL ALGORITMO

Las múltiples opciones que permite el algoritmo radican en la posibilidad de usar cualquier tipo de esquema de enfriamiento y de perturbación. En esta sección, se indican los esquemas más frecuentemente utilizados y reflejados en la literatura.

4.4.1- ESQUEMAS DE ENFRIAMIENTO

Recordamos que los objetivos de cualquier esquema de enfriamiento son los siguientes:

- 1) Cuando la entropía del sistema es máxima, se debe aceptar el mayor número de configuraciones posibles, aunque éstas produzcan incrementos positivos en la función objetivo (aunque sean muy grandes). Esto se consigue mediante una temperatura inicial suficientemente alta.
- 2) Controlar la evolución del proceso, es decir, rebajar la temperatura de forma que en cualquier paso la misma se alcance el equilibrio térmico. Así, al final del enfriamiento, no deben permitirse perturbaciones que provoquen incrementos positivos en la función objetivo.
- 3) Controlar el tamaño del entorno en el que se generarán las nuevas configuraciones. Así, a temperatura alta, el radio de búsqueda (radio del entorno) debe ser grande, para dotar de una buena movilidad al sistema, mientras que, a bajas temperaturas, esto es, al final del proceso, dicho radio debe ser prácticamente nulo pues, presumiblemente, la configuración se hallará próxima a la del mínimo global.

La literatura refleja numerosos esquemas de enfriamiento y variantes sobre los mismos [15]-[17], [19], [25], [26], [28], presentando todos ellos un comportamiento general bastante similar, por lo que resulta difícil la elección a priori de uno de ellos. En la Tabla 3 se citan los esquemas más utilizados, y que han sido incluidos en el código.

Tabla 3. Formulación de los distintos criterios de enfriamiento.

Nombre	Formulación
Temperatura constante	$T = \alpha = T_0$ $\alpha > 0$
Variación aritmética de T	$T_{k+1} = T_k - \alpha$ $\alpha > 0$
Variación geométrica de T	$T_{k+1} = \alpha T_k$ $\alpha \in (0,1]$
Variación inversamente proporcional al número de iteraciones	$T_{k+1} = \frac{T_k}{1 + \alpha k}$ $\alpha \in (0,1]$
Variación inversamente proporcional al número de iteraciones (logarítmico)	$T_{k+1} = \frac{T_k}{\log(1 + \alpha k)}$ $\alpha \in (0,1]$
Variación controlando la velocidad de enfriamiento	$T_{k+1} = \begin{cases} \frac{T_k}{1 + \alpha k}, & \text{si } k < k_{\text{límite}} \\ \alpha T_k, & \text{si } k \geq k_{\text{límite}} \end{cases}$ $\alpha \in (0,1]$
Variación controlando probabilidades de aceptación de configuraciones “malas”	$T_{k+1} = \left(\frac{\log(\text{pr}_{\text{ini}})}{\log(\text{pr}_{\text{fin}})} \right)^{1/N} T_k$

k representa el número de iteración, α es una constante cuyo rango de variación se indica, N es el máximo número de iteraciones y pr_{ini} , pr_{fin} representan las probabilidades de aceptación inicial y final, respectivamente. $k_{\text{límite}}$ representa un valor umbral de control de la velocidad de enfriamiento.

En la Figura 6, pueden observarse algunas de las opciones del algoritmo de evolución de la temperatura.

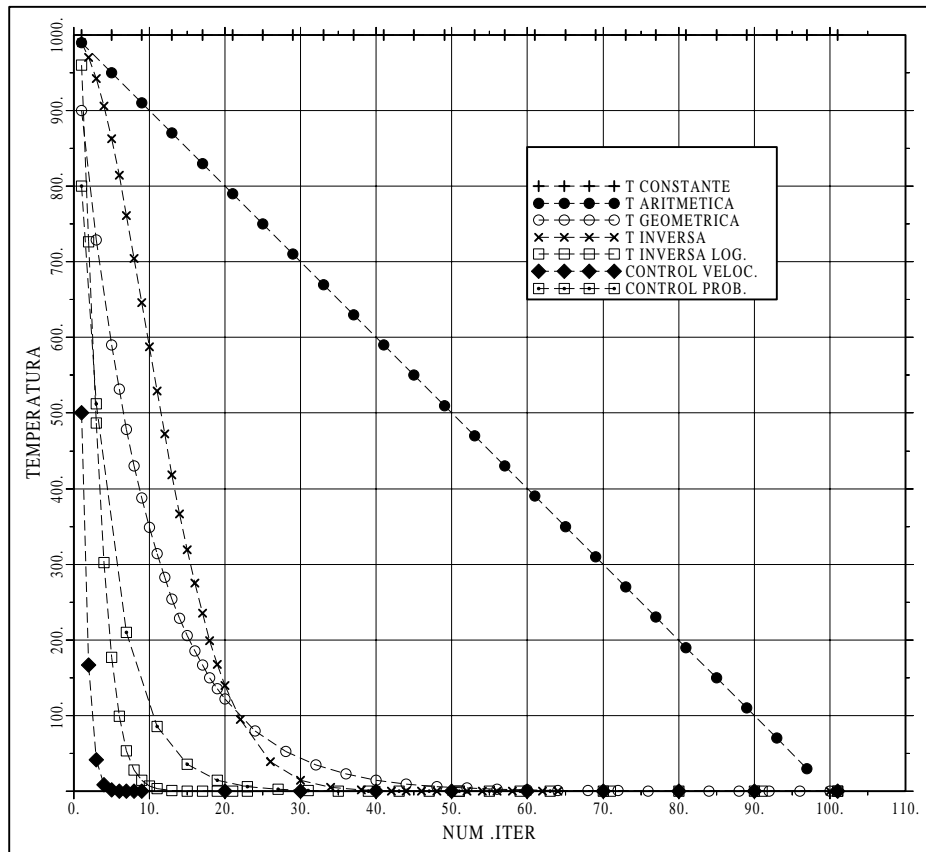


Figura 6. Variación de la temperatura en función del número de iteraciones, según los distintos esquemas de enfriamiento.

Si bien en este trabajo se presentan resultados utilizando únicamente el esquema de enfriamiento por variación geométrica, la experiencia adquirida permite asegurar que el comportamiento de los distintos esquemas es bastante equivalente si se escogen los parámetros del mismo de forma adecuada.

Obsérvese que resulta difícil asignar valores a los parámetros involucrados en dichos esquemas, dado que éstos pueden ser muy dependientes del tipo de problema. Así, por ejemplo, la temperatura inicial depende sobremanera del máximo incremento positivo de función objetivo. Por otra parte, una buena elección de los mismos resulta necesaria para conseguir una convergencia rápida y efectiva del algoritmo.

Numerosas publicaciones tratan de acotar dichos parámetros, limitando de esta forma su incertidumbre [25], [26]. Para el esquema de enfriamiento según una variación geométrica de la temperatura, generalmente se usa un valor de el coeficiente α igual a 0.95, si bien, otros autores utilizan otros valores, en cualquier caso, superiores a 0.90. En cuanto a la temperatura inicial del proceso, no existe un valor, ni siquiera estimado, pues éste depende sobremanera de la función objetivo a tratar y de los incrementos que puedan darse entre una iteración y la siguiente.

Una incertidumbre adicional es el número de iteraciones que se realizan para cada valor de temperatura. Dicho de otra forma, cuál debe ser la velocidad de enfriamiento del sistema (ligada también al valor del parámetro de enfriamiento α). Así, la literatura refleja valores muy dispares para dicho número.

Alcolea et al. [7] presentan algunos criterios acerca del enfriamiento del sistema. Uno de ellos radica en si la función objetivo se aproxima de forma adecuada mediante una función cuadrática. Si el valor del coeficiente ϕ (39) es próximo a la unidad, se disminuye el valor de la temperatura. El segundo de ellos verifica si el incremento de la función objetivo ha sido negativo y de cierta entidad, mientras que el tercero lo hace con la norma del gradiente de dicha función. Si las magnitudes antes comentadas han disminuido considerablemente, se disminuye el valor de la temperatura. Dichos criterios se consideran de forma independiente, pues todos ellos son indicadores el proceso evoluciona, en general, de forma correcta.

4.4.2- ESQUEMAS DE PERTURBACIÓN

El objetivo es el de generar una nueva configuración a partir de una existente, mediante la modificación de los parámetros de forma aleatoria. Se han implementado un total de tres esquemas. El primero de ellos utiliza una aproximación de la matriz de covarianza a posteriori, mediante la inversión de la aproximación de la matriz hessiana. Los otros dos realizan una perturbación aleatoria de la configuración dentro de un espacio de búsqueda prefijado (esferas o elipsoides). En secciones posteriores se presentarán resultados acerca de los esquemas según la matriz de covarianza y según espacios de búsqueda elípticos. A continuación se comentan brevemente las particularidades de dichos esquemas de perturbación.

4.4.2.1.- SEGÚN LA MATRIZ DE COVARIANZA A POSTERIORI

Este esquema no es tan aleatorio como el que se presentará en la siguiente sección, dado que, en cierta forma, representa la estructura de correlación entre los distintos parámetros del modelo. Para ello, mediante la inversa de la matriz hessiana se consigue una aproximación de primer orden de la matriz de covarianza a posteriori. Por otro lado, se genera un vector de números aleatorios \mathbf{u} , siguiendo una distribución gaussiana de media nula y matriz de covarianza igual a la identidad. Por último, el vector de actualización se genera según la expresión siguiente:

$$\Delta \mathbf{p} = \beta \mathbf{Q} \mathbf{u} \quad (48)$$

$$\mathbf{H}^{-1} = \mathbf{Q} \mathbf{Q}^t \quad (49)$$

$$\mathbf{u} \in \mathbf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{1}) \quad (50)$$

Como se verá más adelante, el comportamiento de este esquema de perturbación está muy ligado al del método de Marquardt, pues, en los casos donde este último fallaba, también lo hace el primero.

4.4.2.2.- SEGÚN UN ESPACIO DE BÚSQUEDA PREDETERMINADO

Se trata de fijar un espacio de búsqueda de dimensiones predefinidas, R_{k+1} , ponderado por la desviación de cada uno de los parámetros. Se crea de esta forma un elipsoide n-dimensional, con centro en la configuración actual. Así, el vector de actualización se genera, componente a componente según la siguiente expresión:

$$\Delta p_i = R_{k+1} \sigma_i u_i \quad (51)$$

siendo u_i un escalar generado de forma aleatoria mediante una distribución uniforme (0,1].

Además, el radio del espacio de búsqueda (R_{k+1}) debe disminuir paulatinamente, de forma que, al principio del proceso, se cubra todo el espacio de parámetros (o gran parte de éste) para, al final, cubrir únicamente el entorno del mínimo deseado. Para ello, se pueden emplear los mismos criterios de enfriamiento de la temperatura, definidos en la sección anterior.

CAPÍTULO 5. APLICACIONES. EJEMPLOS SINTÉTICOS

5.1 INTRODUCCIÓN

Una vez expuestos los fundamentos matemáticos y la implementación numérica del algoritmo, se presenta en este capítulo un extracto de los resultados de un total de diez ejemplos, en base a los cuales se obtienen algunas conclusiones sobre el algoritmo propuesto.

Se han escogido ejemplos sintéticos, de forma que el tiempo necesario para su estudio fuese pequeño, dado el elevado número de ejecuciones del código que se han llevado a cabo (un total de quinientas, aproximadamente), las cuales han permitido extraer algunas conclusiones sobre el comportamiento del algoritmo, por comparación con el método de Marquardt.

5.2 METODOLOGÍA

Un ejemplo sintético presupone conocida la estructura del modelo, en cuanto a su geometría, condiciones de contorno, condiciones iniciales, etc, además del valor de los parámetros reales. En base a este modelo, se realizó una simulación, con lo que se obtuvo el valor de los niveles “reales” en los puntos de observación. No obstante, y con objeto de simular también el error de medida de los mismos, se aplicó a los mismos un ruido gaussiano de media nula y desviación conocida, obteniéndose así los valores de los niveles “medidos”.

El modelo que se tomó como base consiste en un dominio de $25 \times 16 \text{ m}^2$, cuyos contornos superior e inferior son impermeables, mientras que el izquierdo y el derecho son de caudal ($1.0 \text{ m}^3/\text{día}$) y de nivel prescrito (3.0 m), respectivamente. Además, en el interior del dominio existen un pozo que bombea $5.5 \text{ m}^3/\text{día}$ y una serie de nudos con condición de contorno mixta o de goteo ($\alpha=0.7$, $H=0.5 \text{ m}$), como se observa en la Figura 7. Todo el dominio se ve afectado por una recarga, dividida en tres zonas (de izquierda a derecha), cuyos valores son de 1 , 3 y 6 mm , respectivamente (Figura 9).

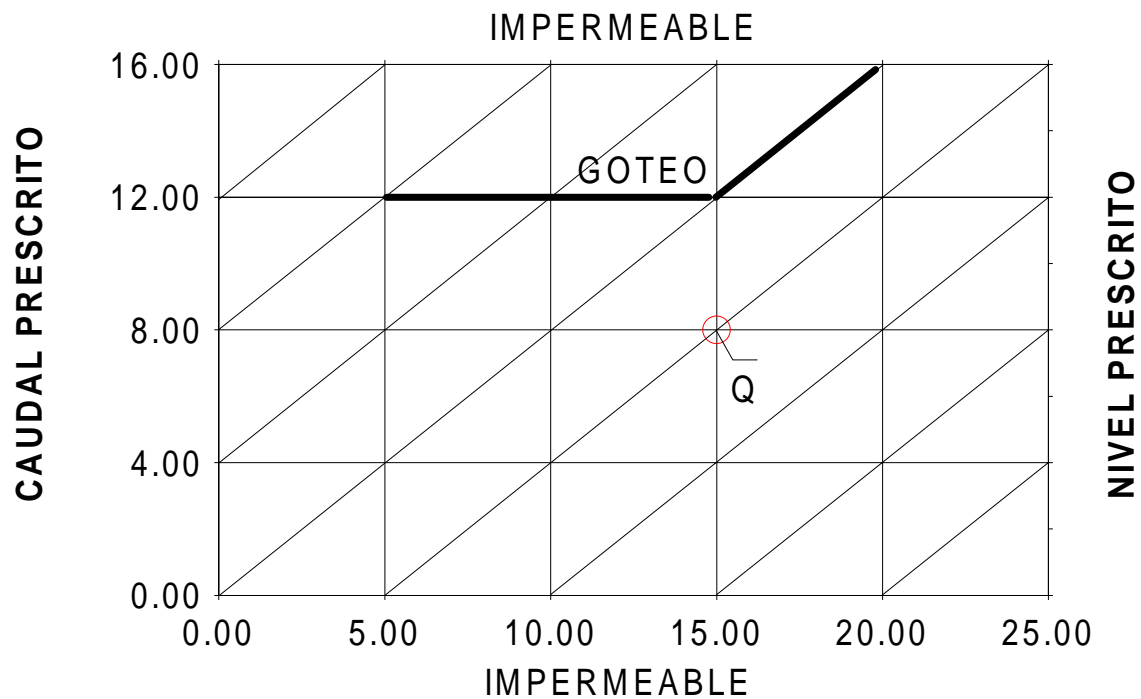


Figura 7. Geometría y condiciones de contorno “reales”

En la Figura 7, la línea de mayor grosor representa la condición mixta o de goteo.

La zonificación de transmisividades se supone conocida, con los valores que se muestran en la Tabla 4:

Tabla 4. Valores “reales” de transmisividad (en la Figura 8 se muestra la distribución espacial)

Número de zona	Valor real (m ² /d)
1	0.1
2	2.0
3	3.0
4	T _{xx} = 40.0
4	T _{yy} =10.0
5	5.0

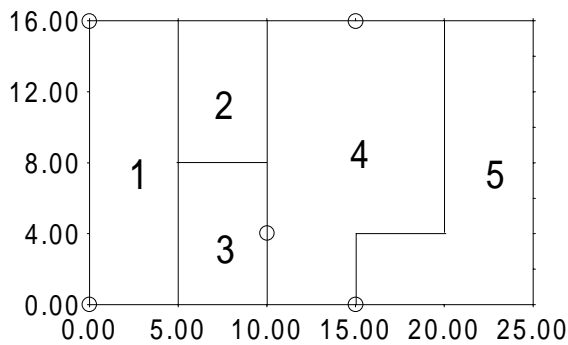


Figura 8. Zonificación de transmisividades y puntos de observación

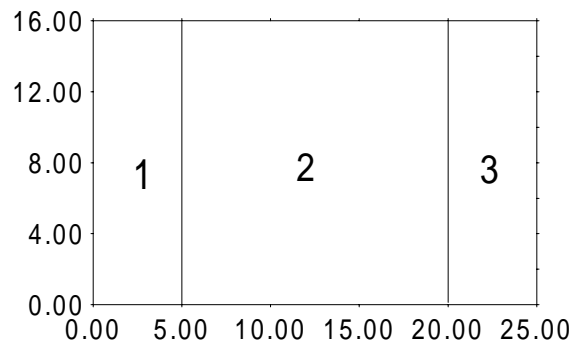


Figura 9. Zonificación de la recarga

Los niveles “reales” obtenidos tras la simulación se representan en las figuras 10 y 11, donde se puede observar la variación de los mismos, entre el tiempo inicial (estado estacionario) y cuatro días más tarde:



Figura 10. Isopiezas de nivel piezométrico en régimen estacionario

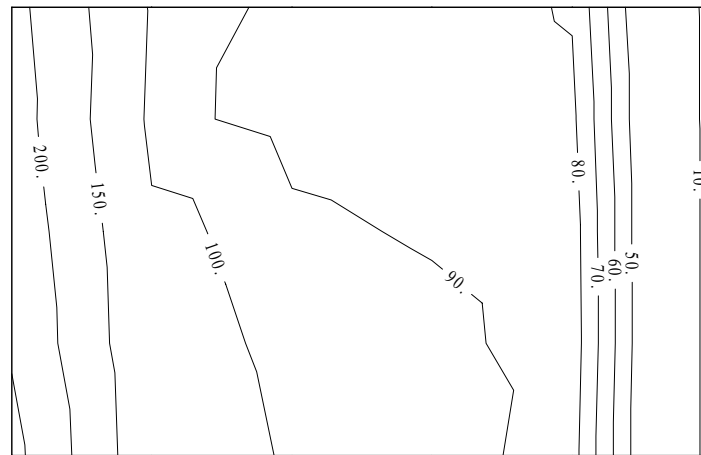


Figura 11. Isopiezas de nivel piezométrico al cabo de cuatro días

Una vez definida la “realidad”, se consideran diez modelos conceptuales distintos, a partir del modelo base. Entre otras modificaciones, se perturban los parámetros iniciales (del modelo base), el número de zonas de transmisividad, almacenamiento o bien se cambia la geometría de los mismos. En la Tabla 5 se presenta un resumen con las perturbaciones realizadas.

Tabla 5. Descripción de las perturbaciones realizadas a partir del modelo base

Código de ejemplo	Descripción
1	Modelo base con los parámetros iniciales perturbados según modelo estadístico.
2	Modelo base con la zona 4 de trans. isótropa y parámetros iniciales perturbados según modelo estadístico.
3	4 bandas de T horizontales y parámetros iniciales perturbados según modelo estadístico a partir de los modelo base.
4	Idem. Cinco bandas de T verticales y parámetros iniciales perturbados según modelo estadístico a partir de los modelo base
4bis	Idem 4 pero con otros parámetros iniciales no cumpliéndose ninguna relación estadística entre estos y los del modelo base
5	10 zonas de T dividiendo 4 en dos bandas horizontales y parámetros iniciales perturbados según modelo estadístico a partir de los modelo base
6	4 zonas de T rectangulares y parámetros iniciales perturbados según modelo estadístico a partir de los modelo base
7	Idem 2 pero con dos zonas de almacenamiento, en dos bandas verticales.
7bis	Idem 7 pero con otros parámetros iniciales no cumpliéndose ninguna relación estadística entre estos y los del modelo base
8	Idem 3 pero con dos zonas de almacenamiento, en dos bandas verticales.

En la Figura 12 se muestran los modelos conceptuales generados a partir del modelo base o “real”, en los que se cambió la zonificación del mismo. Para simular la

incertidumbre en los valores de los parámetros, se toma como información previa la resultante de añadir al valor real de los parámetros un ruido gaussiano $N(0,1)$ a los parámetros del modelo base (Tabla 6). Así, estos estarán dentro de un rango de dos órdenes de magnitud, con probabilidad del 95% aproximadamente (dado que este ruido es en escala logarítmica). En el resto de casos (salvo los especificados anteriormente), se aplica la media geométrica de las zonas de transmisividad del modelo base que son ocupadas por las zonas de los modelos perturbados. Por otra parte, los parámetros iniciales se toman iguales a la información previa de los mismos.

Tabla 6. Parámetros reales del modelo base vs. información previa (ejemplo 1).

Número de zona	Valor real (m^2/d)	Valor perturbado (m^2/d)
1	0.1	0.002
2	2.0	0.057
3	3.0	0.61
4	$T_{xx}=40.0$	$T_{xx}=490.0$
4	$T_{yy}=10.0$	$T_{yy}=0.367$
5	5.0	48.1

Una vez presentada la metodología de trabajo, en la siguiente sección se mostrarán los resultados obtenidos.

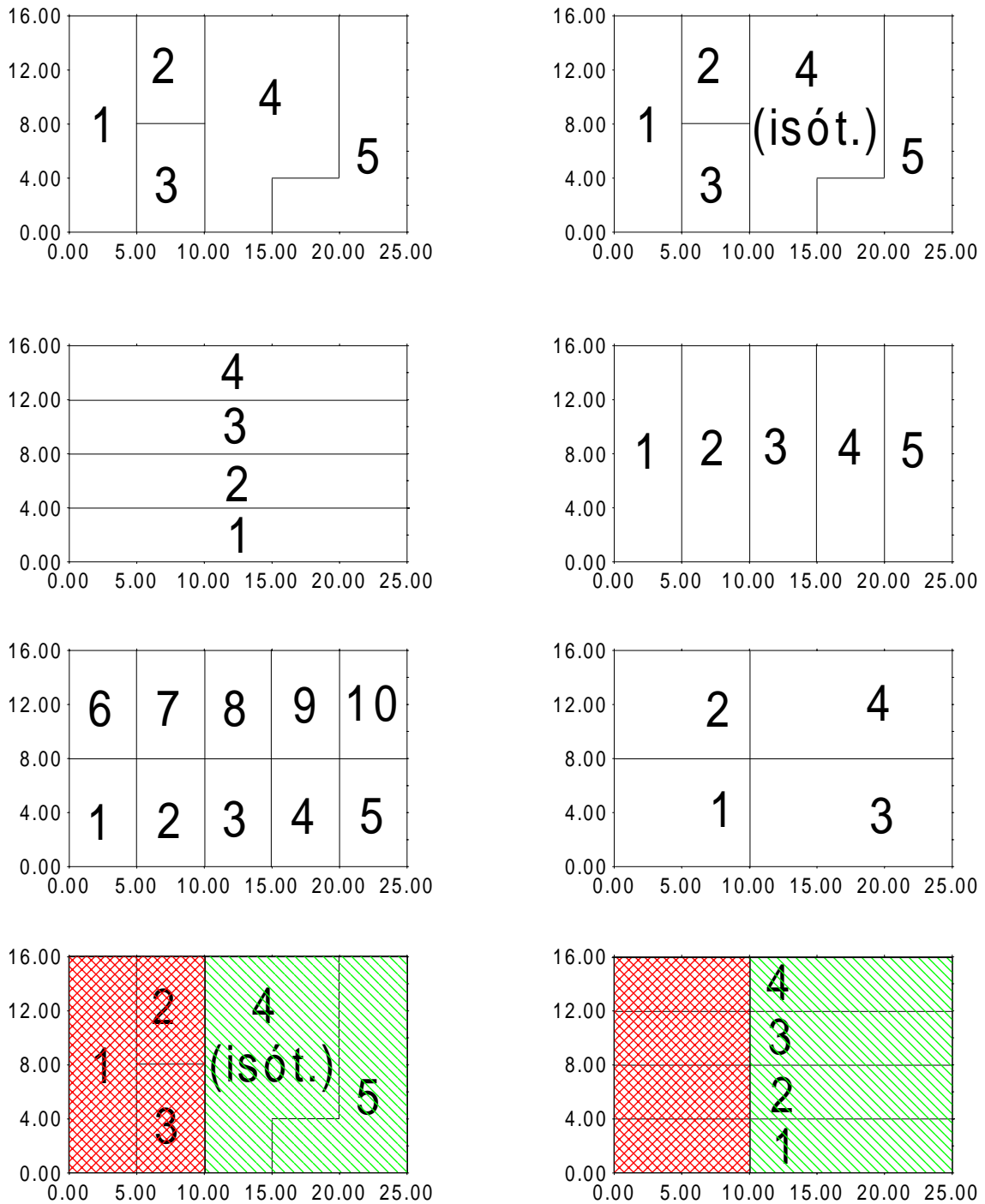


Figura 12. Representación gráfica de los modelos perturbados. Se omiten aquéllos con sufijo “bis”, pues la única variación son los parámetros iniciales. De arriba abajo y de izquierda a derecha, ejemplos del 1 al 8. En los dos últimos se marca con distinta trama las dos zonas de almacenamiento. En el resto de modelos hay una única zona de almacenamiento.

5.3 RESULTADOS

En los capítulos anteriores se ha descrito el funcionamiento del algoritmo, en cuanto a convergencia, criterios de perturbación y esquemas de enfriamiento. Recordamos que el propósito es el de desarrollar un nuevo método, que conjugue la velocidad de convergencia del método de Marquardt con la versatilidad del Simulated Annealing para eludir los mínimos locales. Uno de los principales problemas del nuevo algoritmo es la incertidumbre acerca de los parámetros de los distintos esquemas de enfriamiento y perturbación, tales como la temperatura inicial, el coeficiente de enfriamiento o el radio de búsqueda inicial, sobre los cuales, no hay valores tipificados en la literatura.

Con estas premisas, los ejemplos se buscan con los objetivos siguientes:

- Para poder analizar la robustez del método, es decir, la habilidad de eludir los mínimos locales, al menos en alguno de los ejemplos el método de Marquardt debe presentar dificultades de convergencia.
- Los ejemplos deben tener un número variable de parámetros a estimar, para poder analizar el efecto de dicho número en las capacidades de estimación de uno y otro algoritmo.
- Asimismo, dichos ejemplos se utilizan para comparar el comportamiento del algoritmo híbrido frente a distintos valores de los parámetros inciertos, propios de los esquemas de enfriamiento y perturbación. Los parámetros a estudiar son:
 - Esquema de perturbación
 - Valor inicial de la temperatura
 - Velocidad de enfriamiento
 - Tamaño de la perturbación
- Se desea estudiar también el efecto de los valores iniciales de los parámetros a estimar. Concretamente, se pretende estudiar si alguno de los algoritmos es capaz de superar los problemas de convergencia bajo distintos valores de partida, así como si alcanzan siempre el mismo valor como mínimo de la función.

La metodología que se utilizará para estudiar estos efectos consiste en dejar uno de los parámetros como grado de libertad, fijándose el resto, dedicándose las secciones siguientes a cada uno de los casos.

5.3.1 ESQUEMA DE PERTURBACIÓN

Como se esbozó en el capítulo anterior, se presenta la comparación entre dos criterios de perturbación; el primero de ellos emplea la matriz de covarianza a posteriori, reflejando, en cierto modo, la correlación entre los diferentes parámetros (estimados). En el segundo se genera un espacio de búsqueda aleatorio, que tiene en cuenta la variabilidad de un parámetro, en función de la desviación típica del mismo.

A continuación se presentan los resultados obtenidos en dos ejemplos, donde se comparan los valores de función objetivo obtenidos por uno y otro esquema, así como

por el método de Marquardt. En lo que sigue, y en todas las gráficas presentadas, se denomina FBEST a la mejor función objetivo obtenida durante el proceso.

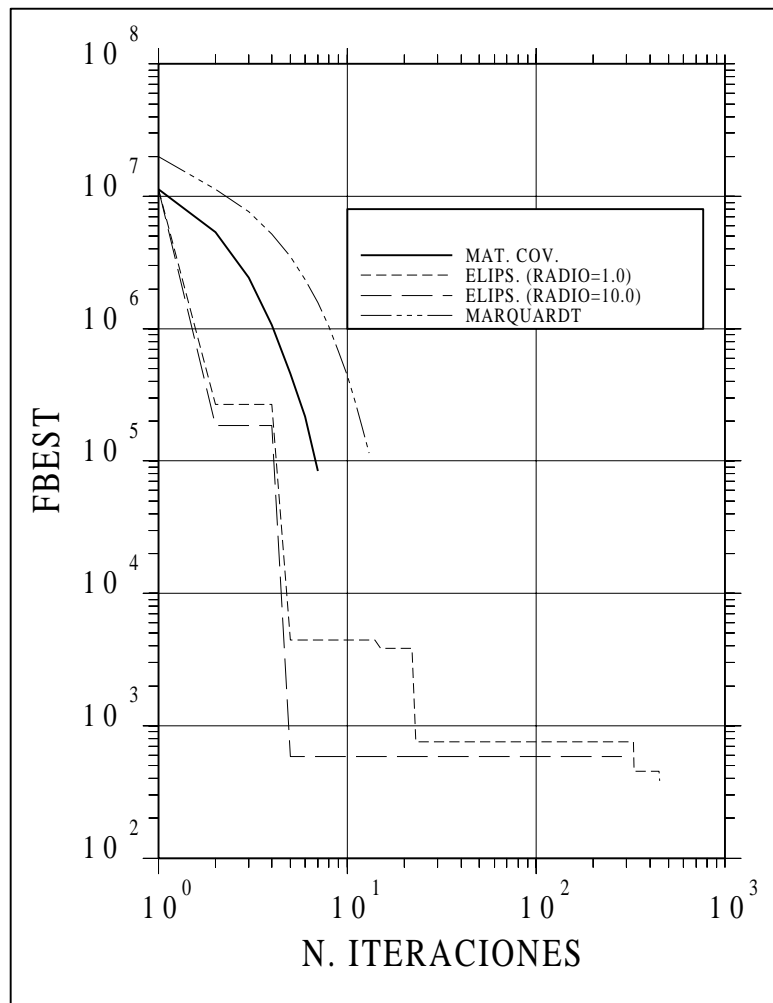


Figura 13. Comparación entre el método de Marquardt y el híbrido, en términos del esquema de perturbación (resultados del ejemplo 7), para un ejemplo donde Marquardt presenta dificultades de convergencia.

En la Figura 13 (resultados del ejemplo 7) se observa que el esquema de perturbación según la matriz de covarianza a posteriori presenta un comportamiento similar al de Marquardt, si bien ofrece un resultado mejor, tanto en términos de valor final de la función objetivo como en velocidad de decrecimiento de la misma. No obstante, ambos tuvieron problemas de convergencia para el juego inicial de parámetros dado. Además, pese a que no se presentan en la gráfica, distintas hipótesis sobre temperatura inicial, parámetro β de ponderación, etc., no afectan en absoluto al comportamiento del algoritmo, obteniéndose, en cualquiera de los casos, el mismo resultado. En cambio, la perturbación según espacio de búsqueda aleatorio (en adelante elipsoide de búsqueda) presenta un valor final de la función objetivo próximo al del mínimo que se obtiene en el modelo real. Este último se calculó simulando el modelo real con los niveles “medidos”, obteniéndose un valor de 70, aproximadamente.

El esquema de perturbación según un elipsoide de búsqueda es moderadamente sensible a dichos parámetros, sobre todo en cuanto a la velocidad de convergencia, si bien, el valor final obtenido es prácticamente el mismo. En la Figura 13 se muestran dos ejecuciones del algoritmo, variando la hipótesis de radio inicial.

A continuación, y como contraste, se presentan los resultados del modelo 4, en el que el método de Marquardt convergió satisfactoriamente.

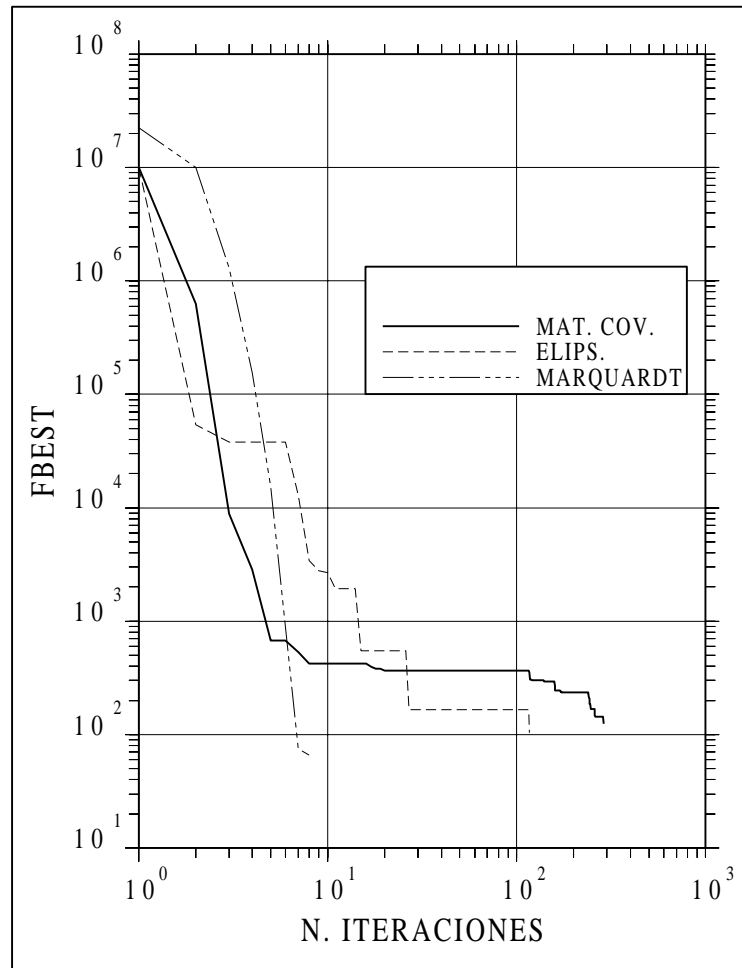


Figura 14. Comparación entre el método de Marquardt y el híbrido, en términos del esquema de perturbación. (resultados del ejemplo 4), para un ejemplo donde Marquardt no tiene dificultades de convergencia.

En la Figura 14 se aprecia de nuevo que el comportamiento del esquema de perturbación según la matriz de covarianza presenta un comportamiento similar al método de Marquardt, no en cuanto a la evolución (es mucho más rápido el método de Marquardt) sino en cuanto al valor final obtenido. Asimismo, se observa que el elipsoide de búsqueda vuelve a alcanzar un valor razonable de la función objetivo. Dicha gráfica muestra además como, cuando el método de Marquardt converge, también lo hace el híbrido utilizando el esquema de perturbación según la matriz de covarianza. Estas afirmaciones pueden corroborarse en el resto de problemas, de los que aquí se han presentado dos casos representativos.

5.3.2 VALOR INICIAL DE LA TEMPERATURA. VELOCIDAD DE ENFRIAMIENTO

Se aplicó, para todos los ejemplos, el esquema de variación geométrica de temperatura (Capítulo 4), probándose tres valores iniciales para la misma, de 10^4 , 10^6 y 10^8 , así como dos coeficientes de enfriamiento α , de valores 0.9 (tradicional en la literatura) y 0.7 (valor pequeño, según la misma). Además, se repitió el proceso rebajando el valor de T a dos velocidades, una de ellas muy rápida (en cada iteración buena), y la otra muy lenta (cada diez iteraciones buenas). Se entiende por iteración “buena”, aquélla en la que se produjo un descenso en el valor de la función objetivo, con respecto al mejor valor obtenido en todo el proceso.

Así, se divide esta sección en tres subapartados, siguiendo el esquema definido en el párrafo anterior.

5.3.2.1 VALOR INICIAL DE LA TEMPERATURA

Este valor es sumamente importante en la evolución del proceso, así como en la consecución o no del valor mínimo de la función objetivo. Recordemos que, un valor demasiado alto de la temperatura inicial puede hacer que las perturbaciones (según el elipsoide de búsqueda) se muevan en un espacio demasiado amplio. De esta forma, será complicado acercarse paulatinamente al mínimo, pues se pueden aceptar muchas configuraciones con incremento positivo demasiado grande. Como contrapunto, un valor inicial excesivamente pequeño puede provocar que el algoritmo se estanque en un mínimo local de la función objetivo.

Así, esta decisión resulta crítica, además de complicada pues, a priori, no se tiene conocimiento acerca de la función objetivo. A continuación se presenta, para el ejemplo 1, el resultado obtenido. La Figura 15 contiene la evolución de la función objetivo según el método de Marquardt más la evolución del híbrido (empleando el esquema de perturbación según la matriz de covarianza) bajo las tres hipótesis de temperatura inicial antes comentadas. En la Figura 16 se aprecia la evolución cuando se emplea el esquema de perturbación según elipsoides. En todas ellas, el tamaño inicial de la perturbación se fijaba, así como el número de iteraciones “buenas” necesarias para reducir la temperatura.

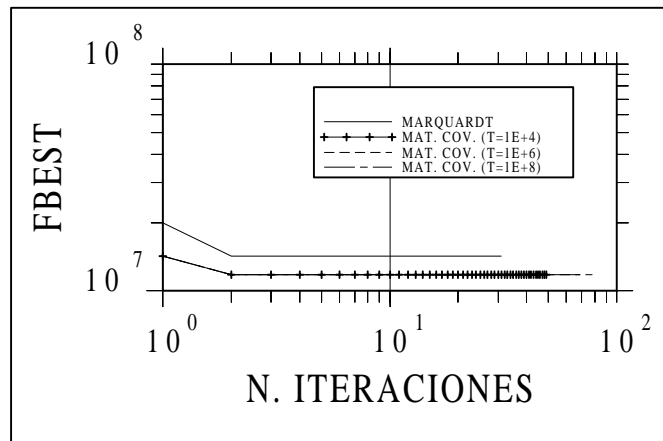


Figura 15. Comparación entre el método de Marquardt y el híbrido, perturbado según la matriz de covarianza bajo tres hipótesis de temperatura inicial.

En la Figura 15 se observa como, en este caso, el esquema de perturbación según la matriz de covarianza es completamente insensible a la temperatura inicial del proceso, lo cual se refleja en la superposición de las tres curvas. De nuevo, ambos algoritmos presentan dificultades de convergencia, como se comentó en el apartado anterior.

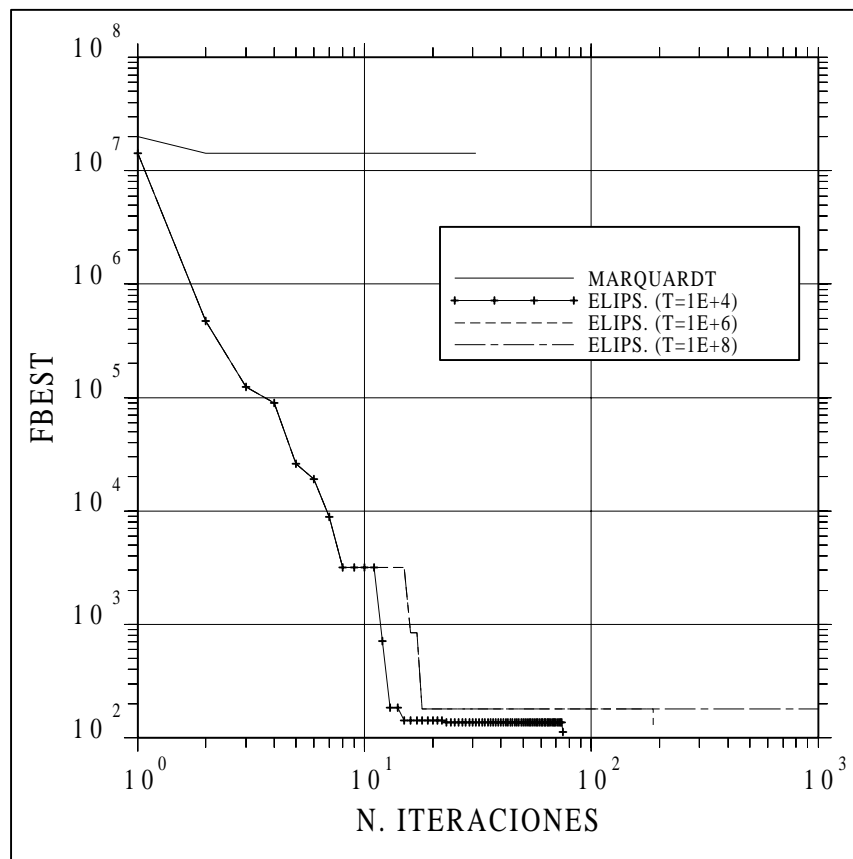


Figura 16. Comparación entre el método de Marquardt y el híbrido, perturbado según el elipsoide de búsqueda bajo tres hipótesis de temperatura inicial.

En la Figura 16 se observa como, en este caso, el algoritmo es algo sensible al valor inicial de temperatura, si bien, el valor final obtenido no varía en exceso. Así, se obtienen los resultados de la siguiente tabla:

Tabla 7. Valores obtenidos en función de la temperatura inicial, perturbando según el elipsoide de búsqueda.

Temperatura	Función objetivo final	Número de iteraciones
10^4	113	75
10^6	129	188
10^8	180	1000 (máx. permitido)

De los resultados se desprende que, para los casos estudiados, el valor mínimo impuesto ($T=10^4$) fue suficiente para alcanzar un valor próximo al del mínimo. Esta conclusión resulta importante en aras de mantener un esfuerzo computacional moderado, puesto que, el aumentar el valor de la temperatura inicial, aumenta el número de iteraciones a llevar a cabo (dado que hay una mayor probabilidad de aceptar configuraciones que no reducen el valor de la función objetivo), sin producir una mejora apreciable en el valor final obtenido.

En la tabla anterior se incluye el número de iteraciones realizadas por el método de Marquardt, si bien, recuérdese que no es comparable a las que realiza el híbrido, dado que este último realiza una simulación más que el método de Marquardt, en la misma iteración. Para establecer una comparación en términos de esfuerzo computacional, se presenta en la Tabla 8 el tiempo aproximado de cálculo (en segundos) empleado en las ejecuciones antes comentadas.

Tabla 8. Comparación en términos de esfuerzo computacional

Temperatura	Matriz de covarianza	Elipsoide de búsqueda
10^4	6	5
10^6	8	12
10^8	9	72
M. de Marquardt	4	

Nótese que, pese a tardar menos el esquema de perturbación de la matriz de covarianza, el resultado (en términos de función objetivo) obtenido es pésimo, en comparación con el esquema de perturbación del elipsoide de búsqueda.

5.3.2.2 VELOCIDAD DE ENFRIAMIENTO

La elección de la velocidad de enfriamiento consiste en valorar dos parámetros: el coeficiente de enfriamiento (α) y el número de iteraciones buenas necesarias para rebajar la temperatura. Puede darse un efecto similar al comentado en el apartado anterior, es decir, si se enfría demasiado rápido, el método puede quedarse estancado en un mínimo local de la función objetivo, mientras que, si se hace de forma demasiado lenta, el proceso puede resultar interminable.

Los resultados que se muestran son los del ejemplo 5, en el que Marquardt vuelve a tener dificultades para alcanzar la convergencia. Nuevamente, el esquema de perturbación según la matriz de covarianza presenta un comportamiento similar, siendo completamente insensible a los parámetros de los esquemas de perturbación y enfriamiento. En las figuras 17 y 18 se muestra la gran sensibilidad que presenta el elipsoide de búsqueda (en estadios intermedios) a los valores del coeficiente de enfriamiento, así como al número de iteraciones “buenas” necesarias para rebajar el valor de la temperatura.

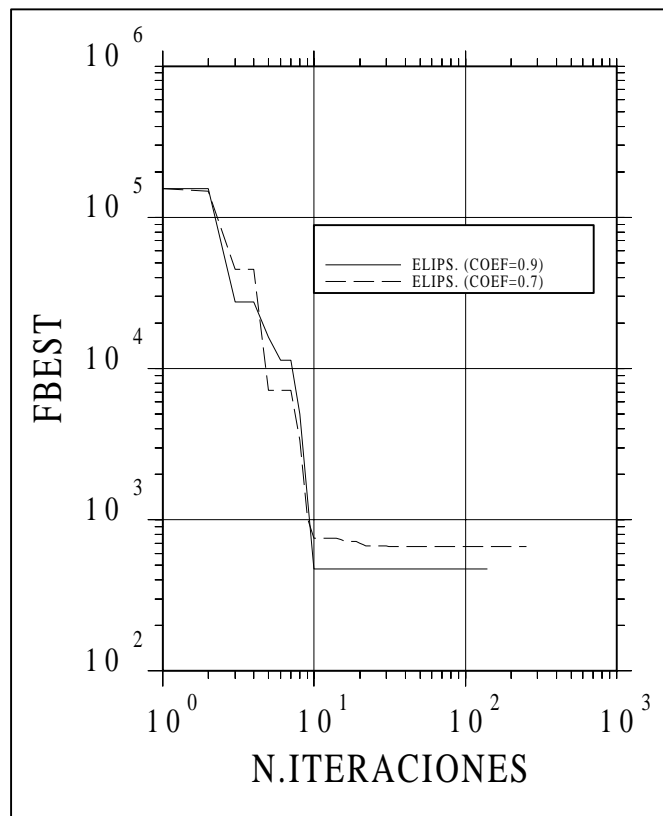


Figura 17. Comportamiento del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda según distintos coeficientes de enfriamiento.

En la Figura 17 puede observarse que el comportamiento de ambas curvas es parejo hasta la décima iteración, a partir de la cual, el esquema cuyo parámetro de enfriamiento es 0.9 decrece con mayor velocidad que el caso de $\alpha=0.7$. Ello es debido a que la

temperatura es demasiado baja en el segundo como para poder seguir buscando una mejor configuración, dado que el radio estándar del elipsoide (el de la esfera inscrita, si se estimaran tres parámetros) es demasiado pequeño. El valor final de éste fue de 0.478 en el esquema más lento ($\alpha=0.9$) y del orden de 10^{-6} en el más rápido ($\alpha=0.7$).

En cuanto al número de iteraciones “buenas” necesarias para el enfriamiento, se realiza una comparación similar, que se presenta en la Figura 18:

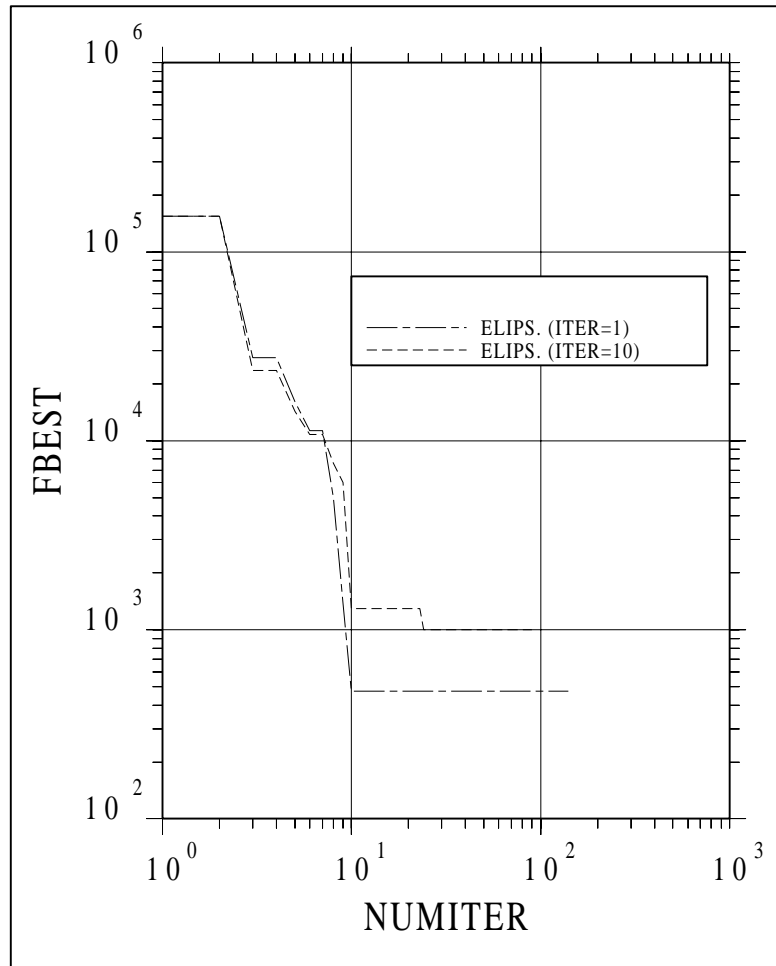


Figura 18. Comportamiento del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda según distintas velocidades de enfriamiento.

Fijado el coeficiente de enfriamiento $\alpha=0.9$ (que ha sido el que ha dado lugar a un mejor resultado), se compara el comportamiento del esquema puramente aleatorio frente a dos ritmos de enfriamiento. En el primero de ellos (muy rápido), se enfría cada vez que se consigue disminuir el valor de la función objetivo con respecto al menor valor obtenido en todo el proceso. Para el segundo caso, en cambio, dicha reducción debe cumplirse diez veces (no necesariamente consecutivas).

Se extrae una conclusión similar a la obtenida en cuanto a la temperatura inicial. Un esquema “rápido” ofrece mejores resultados que uno lento. Obsérvese que el comportamiento de ambas curvas es muy similar, salvo al final del proceso, cuando el espacio de búsqueda es muy pequeño en el caso de enfriar en cada iteración buena

(radio estándar 0.478) y no ha sido disminuido en el otro caso, pues éste último no consigue rebajar el valor de la función objetivo más que en ocho ocasiones.

Así, para el caso estudiado, si bien es una tendencia bastante general en todos los modelos propuestos, un valor del coeficiente de enfriamiento igual a 0.9, enfriando cada vez que la función objetivo disminuía, ofreció los mejores resultados. Se estudió además un caso intermedio, en el que se disminuía la temperatura cada tres reducciones de función objetivo (con respecto al menor valor obtenido en el proceso). El resultado (no se muestra en forma gráfica) fue prácticamente el mismo que se obtuvo rebajando en cada reducción.

5.3.3 TAMAÑO DE LA PERTURBACIÓN

Esta magnitud se ve afectada por determinados factores, tales como la velocidad de enfriamiento, de la que se ha hablado en el apartado anterior. En cuanto al radio de búsqueda inicial, sólo el esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda depende de dicha magnitud (51). En cambio, la configuración generada por el esquema según la matriz de covarianza depende (además de la matriz de covarianza) de un parámetro de ponderación β , que se mantiene constante durante todo el proceso.

En el primer caso (elipsoides de búsqueda), el tamaño de la perturbación depende a su vez del radio estándar inicial. Para estudiar su efecto, se presentan las gráficas correspondientes a los ejemplos 2, 3 y 8, a partir de las que se realizará una comparación similar a la del efecto de la temperatura inicial.

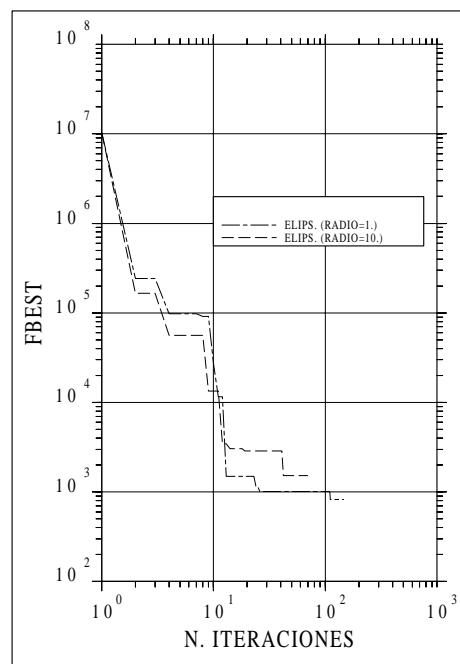


Figura 19. Sensibilidad del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda al radio estándar inicial (ejemplo 2).

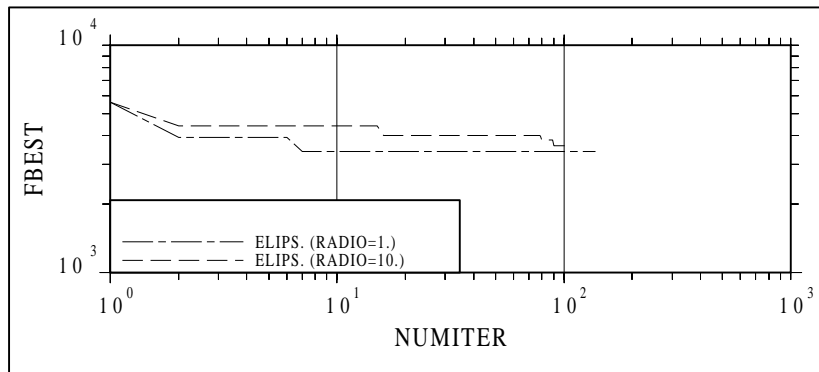


Figura 20. Sensibilidad del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda a radio estándar inicial (ejemplo 3).

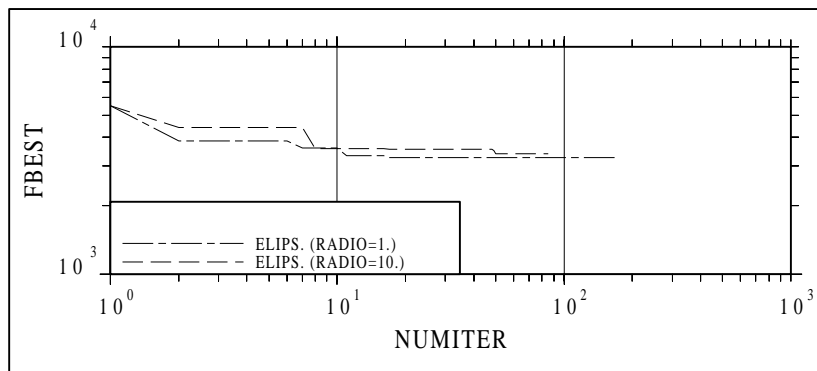


Figura 21. Sensibilidad del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda a radio estándar inicial (ejemplo 8).

En las figuras 19, 20 y 21 se observa como, al igual que pasaba con la temperatura inicial, un valor pequeño del radio de búsqueda inicial (1.0 en transformación logarítmica, luego en realidad es un orden de magnitud de variación del parámetro, mientras que el segundo radio de búsqueda inicial supone una variación de diez órdenes de magnitud) es suficiente para alcanzar una buena aproximación al valor mínimo de la función. Ésta también es una tendencia general en el resto de casos.

En el esquema de perturbación usando la matriz de covarianza (en los casos en los que éste ofrece un resultado aceptable) la sensibilidad al parámetro β no es demasiado ostensible.

Adicionalmente, el tamaño de la perturbación viene condicionado por la restricción del vector de actualización Δp (40), de la cual se habló en el capítulo 3. Pese a que es posible estar dentro de un espacio de búsqueda de gran extensión (las perturbaciones calculadas sean muy grandes), la restricción de tamaño del vector de actualización puede hacer que, en realidad, la perturbación con la que se creará la nueva configuración sea muy pequeña.

A continuación, se pretende estudiar el efecto del máximo tamaño permitido, para lo cual se comparan dos ejecuciones del método híbrido, efectuadas con tamaños máximos de uno y dos órdenes de magnitud.

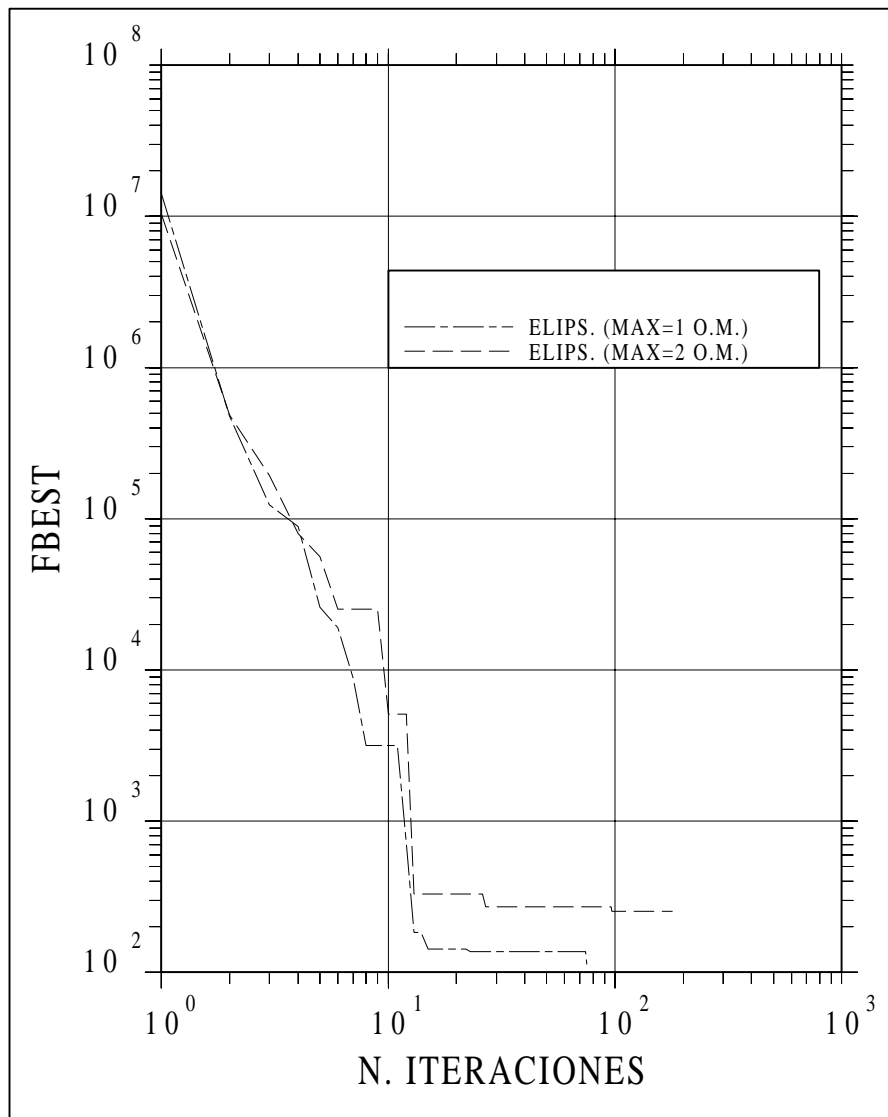


Figura 22. Comportamiento del esquema de perturbación por elipsoides de búsqueda según el máximo cambio permitido en el espacio de parámetros. (O.M. denota orden de magnitud)

El resultado que ofrece la Figura 22 no hace sino corroborar los anteriores, es decir, una perturbación demasiado grande hace que el espacio de búsqueda sea excesivamente grande y, por tanto, las posibilidades del algoritmo para encontrar el mínimo se reducen. Así, si el tamaño del espacio de búsqueda es muy grande, el algoritmo dedicará un esfuerzo innecesario, obteniendo, en general, incrementos positivos de función objetivo muy grandes, llegando incluso a “perdersé”, no hallándose así el mínimo.

5.3.4 SENSIBILIDAD A LOS PARÁMETROS INICIALES

Para el estudio de este efecto se utilizan los ejemplos **4** y **7**, cuyos parámetros presentan una determinada estructura estadística, como se describe en la sección 5.2.

Para verificar el efecto de los parámetros iniciales, se cambian los antes comentados por otros, sin ninguna estructura estadística (ejemplos **4bis** y **7bis**). Los resultados de la comparación se presentan en las tablas siguientes:

Tabla 9. Resumen de los resultados obtenidos con el modelo **4** partiendo de valores de los parámetros iniciales distintos.

Método	Variable	4	4bis
Marquardt	F. obj.	66	2880
	Núm. iter.	8	40
Híbrido	F. obj.	104	98.5
	Núm. iter.	117	321

En la Tabla 9 se puede observar cómo el método híbrido alcanza valores similares de función objetivo a los adquiridos por el método de Marquardt en el primero de los casos, mientras, que en el segundo (parámetros generados aleatoriamente), el método de Marquardt se queda estancado en un mínimo local de la función objetivo, mientras que el híbrido alcanza un valor similar al del primer caso.

Este efecto es aún más notable en la siguiente comparación, que se muestra en la Tabla 10, en la que Marquardt (para parámetros con estructura estadística bien definida) termina en un valor ciertamente elevado de la función objetivo, mientras que el híbrido alcanza un valor próximo al del mínimo global. En ambos casos, el método híbrido rebajó el valor obtenido por el de Marquardt, si bien el número de iteraciones empleado fue mayor (en ambas tablas se presenta el resultado obtenido en la mejor de las ejecuciones del híbrido, las cuales se obtuvieron mediante perturbaciones según la matriz de covarianza, en los ejemplos **4bis** y **7bis**, y mediante perturbaciones según elipsoides de búsqueda, en los ejemplos **4** y **7**).

Tabla 10. Resumen de los resultados obtenidos con el modelo **7** partiendo de valores de los parámetros iniciales distintos.

Método	Variable	7	7bis
Marquardt	F. obj.	115000	69
	Núm. iter.	13	51
Híbrido	F. obj.	382	68.2
	Núm. iter.	449	483

CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS

6.1 CONCLUSIONES

Se ha presentado una metodología para la minimización/maximización de funciones, como alternativa al uso del método de Marquardt en los casos en que éste presenta dificultades de convergencia.

Asimismo, se ha implementado la formulación de dicha metodología en un código de elementos finitos preexistente, aplicándose finalmente dicho código a un total de diez ejemplos sintéticos, en base a los cuales se extraen las presentes conclusiones.

- Se ha mostrado que el algoritmo es moderadamente sensible a los parámetros de los distintos esquemas de perturbación y enfriamiento implementados. No obstante, una mala elección de los mismos puede traducirse en un esfuerzo computacional desmesurado.
- En cuanto a los parámetros del esquema de variación geométrica del parámetro de control (temperatura) se ha visto que un buen valor para el coeficiente de enfriamiento era 0.9, así como que una temperatura inicial elevada no conducía a un resultado cualitativamente mejor.

- En cuanto a los esquemas de perturbación, se ha mostrado que el método que utiliza la matriz de covarianza a posteriori presenta un comportamiento análogo al de Marquardt, quedando el algoritmo estancado en mínimos locales en ciertas ocasiones. Por tanto, éste no resulta un buen esquema de perturbación. En cambio, el que utiliza un elipsoide de búsqueda, presenta un comportamiento bastante robusto, alcanzando un valor próximo al mínimo en la mayoría de las ocasiones.
- Por otra parte, se han presentado resultados que muestran, en cuanto al radio de búsqueda inicial, una conclusión similar a la de la temperatura inicial. Así, un rango inicial pequeño de variación presentaba mejores y más rápidos resultados que uno mayor. Análogas conclusiones han sido obtenidas en cuanto a la máxima variación permitida para una componente del vector de actualización.
- Finalmente, como conclusión general, diremos que el algoritmo presentado, en su vertiente más aleatoria (elipsoides de búsqueda), con pequeñas perturbaciones y rápido enfriamiento ha mostrado una gran robustez en la mayoría de los casos, incluso cuando Marquardt ofrecía resultados engañosos.

No obstante, únicamente se recomienda su uso como alternativa a Marquardt cuando se tenga la sospecha de que este último está teniendo problemas en la convergencia, dado que, el esfuerzo computacional que el método híbrido requiere, pese a ser razonable, hace que no sea competitivo con aquél.

6.2 LÍNEAS FUTURAS

En base a los resultados de la presente tesina de especialidad, quedan abiertas una serie de cuestiones que son susceptibles de ser analizadas con un mayor nivel de detalle y que no han sido incluidas en el documento, tales como:

- Paralelización del código. En ocasiones, la mayor parte del esfuerzo computacional viene dado por un conjunto de iteraciones en las que el algoritmo se haya muy lejos del mínimo buscado, evaluando la función objetivo muchas veces, llevando la mayoría de estos intentos a incrementos positivos de la función objetivo. Una posibilidad estriba en la paralelización del código en cuanto a la generación y evaluación de configuraciones.
- Análisis en detalle del resto de esquemas de enfriamiento implementados que afectan tanto al radio de búsqueda como a la temperatura.
- Imposición de cotas en los parámetros inciertos de los distintos esquemas, utilizando información acerca de la aproximación cuadrática de la función objetivo, en base a la información disponible, como el gradiente, la aproximación de la matriz hessiana, etc.
- Implementación de nuevos esquemas de perturbación más sofisticados.
- Aplicación del algoritmo ejemplos sintéticos incluyendo transporte, así como a modelos reales.

CAPÍTULO 7. BIBLIOGRAFÍA

- [1] Carrera J., Medina A. y Galarza G. Groundwater inverse problem. Discussion on geostatistical formulations and validation *Hydrogéologie*, Vol. 4, (1993) 313-324.
- [2] Medina A. *Estimación conjunta de los parámetros de las ecuaciones de flujo y transporte*. Tesis Doctoral, ETSECCPB-UPC, 1993.
- [3] Carrera, J., Neuman, S.P. El problema inverso de la hidrología subterránea. Estado del arte y método de solución. *Revista internacional de métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería*, Vol. 2, (1986) 3-25.
- [4] Carrera, J., Neuman, S.P. Estimation of aquifer parameters under Transient and Steady State Conditions, I. Maximum Likelihood Method Incorporating Prior Information. *Water resources Research*, Vol. 22, No. 2, (1986) 199-210.
- [5] Carrera, J., Neuman, S.P. Estimation of aquifer parameters under Transient and Steady State Conditions, II. Uniqueness, Stability and Solution Algorithms. *Water resources Research*, Vol. 22, No. 2, (1986) 211-227.
- [6] Carrera, J., Neuman, S.P. Estimation of aquifer parameters under Transient and Steady State Conditions, III. Application to Synthetic and Field Data. *Water resources Research*, Vol. 22, No. 2, (1986) 228-242.

- [7] Alcolea, A. Medina A., Carrera, J. A hybrid Marquardt - Simulated Annealing method for solving the groundwater inverse problem. *Proceedings of ModelCare'99*. (En prensa).
- [8] Galarza, G., Medina, A., Carrera, J. *El Berrocal Project*, Topical Report 17, ENRESA (1996).
- [9] Huyakorn, P.S. Thomas, S.D., Thompson, B.M. Techniques for making finite elements competitive in modelling flow in variably saturated porous media. *Water Resources Research*, Vol. 20, No. 8, (1984) 1099-1115.
- [10] Pinder, G.F., Gray, W.G. *Finite element simulation in surface and subsurface hydrology*. Academic press N.Y., 1977.
- [11] Galarza, G. *Calibración automática de parámetros en problemas no lineales de flujo y transporte*. Tesis Doctoral, ETSECCPB-UPC, 1993.
- [12] Alcolea, A., Medina, A. Estimación de parámetros específicos asociados a funciones no lineales. *Proceedings del Congreso Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería, Sevilla'99*. (en prensa).
- [13] Fisnterle, S. y Najita, J. Robust estimation of hydrogeologic model parameters. *Water Resources Research*, Vol. 34, No. 11, (1998) 2939-2947.
- [14] Hoeksema, R.J. y Kitanidis, P.K., Comparison of Gaussian Conditional Mean and Kriging Estimation in the Geostatistical Solution of the Inverse Problem. *Water Resources Research*, Vol. 21, 6, (1985) 825-836.
- [15] Bennage, W.A., Dhingra, A.K., Single and multiobjective structural optimization in discrete-continuous variables using simulated annealing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 38, (1995) 2753-2773.
- [16] Van Groeningen, J.W., Spatial Simulated Annealing for optimizing sampling. *GeoENV I – Geostatistics for Environmental Applications*, Kluwer Academic Publishers, Vol 1, (1996) 351-361.
- [17] Deutsch, C.V., Conditioning reservoir models to well test information, *GeoENV I – Geostatistics for Environmental Applications*, Kluwer Academic Publishers, Vol 2, (1996) 505-518.
- [18] Marryott, R.A. Dougherty, D.E., Stollar, R.L., Optimal Groundwater management. 2. Application of Simulated Annealing to a Field-Scale Contamination Site. *Water Resources Research*, Vol. 29, No. 4, (1993) 847-860.
- [19] Mauldon A.D., Karasaki K., Martel S.J., Long J.C.S., Landsfeld M. , Mensch A. , Vomvoris S. An Inverse Technique for Developing Models for Fluid Flow in Fracture Systems Using Simulated Annealing. *Water Resources Research*, 29, 11, (1993) 3775-3789.

- [20] Fletcher, R. *Practical methods of optimization. Vol. 1. Unconstrained optimization.* John Wiley & Sons, 1981.
- [21] Carrera, J. La aplicación de algoritmos de calibración automática a modelos de flujo en medios porosos y fracturados. *Seminario de análisis numérico*, Ed. Michavila (1988) 63-86.
- [22] Carrera, J. y Medina, A. An improved form of adjoint-state equations for transient simulations. *Computational method in Water Resources*, Vol 10, (1994) 199-206.
- [23] Cooley, R.L. Regression modeling of groundwater flow. *U.S.G.S. Open File Report*, (1985) 85-180.
- [24] Marquardt, D.W. An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters. *Journal of SIAM*, Vol. 11, 2, (1963).
- [25] Marryott, R.A. Dougherty, D.E. y Stollar, R.L., Optimal Groundwater management. 1. Application of Simulated Annealing to a Field-Scale Contamination Site. *Water Resources Research*, Vol. 27, 10, (1991) 2493-2508.
- [26] van Laarhoven, P.J.M., Aarts, E.H.L, *Simulated Annealing: Theaory and Applications*, Kluwer Academic Publishers, 1987.
- [27] Ross, S.M., *Introduction to probability models*, Academic Press, 1980.
- [28] Shalloway, D. Packed Annealing: A Deterministic Method for Global Minimization. Application to Mollecular Confirmation. *Recent Advances in Global Optimization*, Princeton Series in Computer Science, (1992) 433-477.
- [29] Desai, M.P. , Rao V.B. On the convergence of reversible Markov Chains. *SIAM Journal of Matrix Analysis Applications*, Vol. 14, No. 4, (1993) 950-966.
- [30] Minc H., *Nonnegative Matrices*, Wiley-Interscience, 1988.
- [31] Feller W. *An Introduction to Probability theory and its Applications*. John Wiley & Sons, 1968.
- [32] Numerical Recipes Software, Cambridge University Press, 1995.

APÉNDICE. PROPIEDADES DE LAS MATRICES NO NEGATIVAS

1. INTRODUCCIÓN

El objetivo de este apéndice es el de presentar las propiedades de convergencia del método del Simulated Annealing (SA en adelante). Dichas propiedades, como se verá más adelante, depende sobremanera de las propiedades de las matrices no negativas. Dichas propiedades se presentan bajo la hipótesis de que el dominio ha sido previamente discretizado en una serie de configuraciones (puntos en el espacio de parámetros) posibles, si bien, éste no es el caso más general.

2. MODELO MATEMÁTICO DEL ALGORITMO

Dada una estructura de entornos de una configuración, SA puede verse como un algoritmo que trata de transformar una configuración actual en otra de su entorno. Dado que la transformación es completamente aleatoria, una configuración determinada sólo depende de la configuración anterior. Por ello, la mejor forma de modelar matemáticamente este algoritmo es en términos de cadenas de Markov. Una cadena de Markov no es más que una secuencia de intentos, donde el resultado de cada intento depende sólo del resultado del intento anterior.

En el caso del SA, dichos intentos serían transiciones de una configuración a otra, luego resulta evidente que el resultado de una transición depende únicamente del de la transición anterior (configuración actual) y del parámetro de control en el caso de entrar en la rama exponencial del criterio de Metropolis, dado que la transformación es aleatoria.

Una cadena de Markov se describe a partir de una serie de probabilidades condicionadas:

$$(P)_{ij} = \Pr\{X_{k+1} = j | X_k = i, \dots, X_0 = o\} = \Pr\{X_{k+1} = j | X_k = i\} \quad (1)$$

donde X_k representa el resultado de la k -ésima transición; por tanto $(P)_{ij}$ representa la probabilidad de que el resultado de la $k+1$ -ésima transición sea j , sabiendo que el resultado de la k -ésima transición había sido i .

Sea $a_i(k)$ la probabilidad de que el resultado de la k -ésima transición sea i . Entonces, por simple teoría de probabilidad tenemos que:

$$a_i(k) = \Pr\{X(k) = i\} = \sum_1^{\text{not}} a_i(k-1) \cdot \Pr\{X(k) = i | X(k-1) = 1\} \quad k = 1, 2, \dots \quad (2)$$

donde la suma se realiza sobre todas las posibles configuraciones.

Dentro del modelo matemático, se distinguen dos casos:

- Las probabilidades condicionadas no dependen del número de transiciones llevadas a cabo; tenemos entonces la llamada cadena de Markov homogénea.
- Las probabilidades condicionadas dependen del número de transiciones llevadas a cabo; tenemos entonces la llamada cadena de Markov no homogénea.

Sea \mathbf{P} la matriz de transición. Ésta es de dimensiones $N \times N$, donde N es el número de configuraciones posibles dentro del dominio a simular. Por otra parte, por la definición del criterio de Metropolis, las probabilidades de transición dependen del parámetro de control, el análogo de la temperatura en la analogía física.

No obstante, si la temperatura T se considera constante, el algoritmo es homogéneo y se puede definir la matriz de transición de la siguiente forma:

$$(\mathbf{P}(T))_{ij} = \begin{cases} G(i, j) \cdot A(C(i), C(j), T) & j \neq i \\ 1 - \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^{|\mathbf{R}|} G(i, l) \cdot A(C(i), C(l), T) & j = i \end{cases} \quad (3)$$

donde $|\mathbf{R}|$ denota el número de configuraciones posibles y $C(i)$ la configuración i -ésima, T es la temperatura, \mathbf{G} es una matriz con las probabilidades de generación (G_{ij} representa la probabilidad de generar la j -ésima configuración a partir de la i -ésima) y \mathbf{A} es también una matriz cuyas componentes son las probabilidades de aceptación.

Como resultado de la definición, la matriz \mathbf{P} resulta ser una matriz estocástica, esto es, la suma de los elementos de una fila es igual a 1:

$$\sum_j P_{ij}(T) = 1 \quad \forall i = 1, \dots, |\mathbf{R}| \quad (4)$$

Como se verá más tarde, este tipo de matrices tiene una serie de propiedades interesantes, por otra parte necesarias para la determinación de la prueba de convergencia global del algoritmo.

Definiendo μ como el entorno de la configuración actual i , se puede escribir:

$$\begin{aligned} G : \mathbf{R} \times \mathbf{R} &\rightarrow [0,1] \\ (i, j) &\rightarrow G_{ij} \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} G(i, j) &= 0 \quad \forall i, j \notin \mu \\ G(i, j) &\neq 0 \quad \forall i, j \in \mu \\ \sum_{j \in \mu} G_{ij} &= 1 \quad \forall i = 1, \dots, |\mathbf{R}| \end{aligned}$$

$$A: \mathfrak{R}^3 \rightarrow (0,1]$$

$$(C(i), C(j), T) \rightarrow A_{ij}$$

La matriz de generación se adopta según una distribución uniforme; esto es equivalente a decir que todos los estados de un entorno están conectados con aquél a partir del que se generó el mismo (con idéntica probabilidad). Por otra parte, por definición de probabilidad, todas las entradas de la matriz de transición son positivas o nulas.

Por la propia definición de la matriz de aceptación, todas sus entradas son también positivas o nulas. Ello (junto con lo anteriormente comentado respecto a la matriz de generación) nos permite decir que la matriz de generación es estocástica (visto anteriormente) y no negativa (todas sus entradas son positivas o nulas), esto es:

$$P_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j$$

Como se había comentado anteriormente, el parámetro de control se hace disminuir paulatinamente por pasos. Con respecto a este decremento, se distinguen dos casos:

- El algoritmo homogéneo: se describe el algoritmo como una sucesión de cadenas de Markov homogéneas, donde cada una de ellas se genera para un valor fijo del parámetro de control, y este se hace disminuir entre dos cadenas consecutivas.
- El algoritmo no homogéneo: se describe el algoritmo como una única cadena de Markov no homogénea, y el valor del parámetro de control se disminuye entre transiciones sucesivas.

En este trabajo se considera únicamente el algoritmo homogéneo. Veamos ahora el aspecto de la matriz de transición tras un número determinado de pasos. Es el resultado conocido como ecuación de Chapman-Kolmogorov, donde el superíndice entre paréntesis indica el cardinal del paso (esta ecuación sólo se verifica para el caso de proceso homogéneo).

$$P_{ij}^{n+m} = \Pr \text{ob} \{X_{n+m} = j \mid X_0 = i\} = \sum_{k \in R} \Pr \text{ob} \{X_{n+m} = j, X_n = k \mid X_0 = i\} =$$

$$= \Pr \text{ob} \{X_{n+m} = j \mid X_n = k\} \cdot \Pr \text{ob} \{X_n = k \mid X_0 = i\} = \sum_{k \in R} P_{kj}^m P_{ik}^n$$

Por tanto: $P^{(n+m)} = P^{(n)} P^{(m)}$

donde el superíndice entre paréntesis indica el cardinal del paso y, notamos que esta ecuación sólo se verifica para el caso de proceso homogéneo.

3. RESULTADOS SOBRE CONVERGENCIA

La prueba de convergencia del algoritmo no resulta en absoluto sencilla, y para ello se necesitan previamente algunos resultados sobre teoría matricial. Vimos que la matriz de transición era estrictamente no negativa (todas sus entradas son mayores que cero) y estocástica (la suma de los elementos de una fila es uno), y aprovechamos este hecho, pues las propiedades de este tipo de matrices son excelentes.

3.1 PROPIEDADES DE LAS MATRICES ESTOCÁSTICAS

Definición:

Una matriz es estocástica si la suma de los elementos de cualquier fila (o de cualquier columna) es 1.

Teorema 1.

(a) Una matriz \mathbf{P} no negativa de dimensiones $n \times n$ es estocástica si y sólo si :

$$\mathbf{P}\mathbf{J}=\mathbf{J}$$

donde $J_{kl}=1 \quad k=1,\dots,n \quad l=1,\dots,n$

(b) Una matriz cuadrada $n \times n$ es estocástica si y sólo si $\mathbf{j}=(1,1,1,\dots,1)$ es un autovector correspondiente al autovalor maximal 1.

(c) El módulo de los autovalores de una matriz estocástica es siempre menor o igual que 1.

(d) El producto de dos matrices estocásticas es una matriz estocástica.

Prueba:

$$(pa) \Rightarrow \text{Sea } \mathbf{B}=\mathbf{A}\mathbf{J}; \text{ entonces } B_{ik} = \sum_1 A_{il}J_{lk} = \sum_1 A_{il} = 1 \quad \forall i, k \Rightarrow \mathbf{A}\mathbf{J} = \mathbf{J}$$

$$\Leftarrow 1 = J_{ik} = \sum_1 A_{il}J_{lk} = \sum_1 A_{il} = 1 \Rightarrow \mathbf{A} \text{ es estocástica}$$

$$(pb) \Rightarrow \mathbf{A} \text{ estocástica} \Rightarrow \mathbf{A}\mathbf{J} = \mathbf{J} \Rightarrow (\mathbf{A}\mathbf{j})_i = \sum_k A_{ik}j_k = 1 = j_i \quad \forall i$$

$$\Leftarrow \mathbf{A}\mathbf{j} = \mathbf{j} \Rightarrow (\mathbf{A}\mathbf{j})_i = 1 = \sum_k A_{ik}j_k = \sum_k A_{ik} = 1 \Rightarrow \mathbf{A} \text{ es estocástica}$$

(pc) En lo que sigue σ denota el espectro de autovalores de la matriz.

$$\lambda \in \sigma(\mathbf{A}) \Leftrightarrow \exists \mathbf{x} \neq \mathbf{0} / \mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

$$\begin{aligned} |\lambda x_i| &= \left| \sum_k A_{ik} x_k \right| \leq \sum_k (|A_{ik}| \cdot |x_k|) = \sum_k (A_{ik} \cdot |x_k|) \leq \sum_k (A_{ik} \cdot |x_{\max}|) = \\ &= |x_{\max}| \cdot \sum_k A_{ik} = |x_{\max}| \quad \forall i = 1, \dots, |\mathbf{R}| \text{ en particular, si } x_i = x_{\max} \\ |\lambda x_{\max}| &\leq |x_{\max}| \Rightarrow |\lambda| \leq 1 \end{aligned}$$

(pd) Si \mathbf{A}, \mathbf{B} estocásticas, entonces $\mathbf{A}\mathbf{J}=\mathbf{J}$ y $\mathbf{B}\mathbf{J}=\mathbf{J}$. Por tanto :

$$(\mathbf{A}\mathbf{B})\mathbf{J}=\mathbf{A}(\mathbf{B}\mathbf{J})=\mathbf{A}\mathbf{J}=\mathbf{J}$$

Definición:

Una cadena de Markov cuya matriz de transición asociada tiene todos sus términos diagonales no nulos es una cadena de Markov reflexiva.

Nota: éste es el tipo de matrices con el que trabajamos, pues por la propia definición de la matriz de transición, los términos de la diagonal son no nulos. Por otra parte, esta definición implica la peor de las situaciones con la que el algoritmo se puede encontrar. Se da en el caso de quedarse estancado en una configuración determinada, pues:

$$P(i,i,T) > 0, \text{ para toda } i.$$

Teorema 2. Localización de los valores propios de una matriz estocástica.

Si \mathbf{A} es una matriz estocástica y $w = \min(A_{ii})$ entonces se verifica que:

$$|\lambda - w| \leq 1 - w \quad \forall \lambda \in \sigma(\mathbf{A})$$

Prueba:

$$\lambda \in \sigma(\mathbf{A}) \Rightarrow \exists \mathbf{x} \neq \mathbf{0} / \mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

Sea $0 < |x_m| = \max_i |x_i|$. Entonces :

$$\lambda x_m = \sum_k A_{mk} x_k; \text{ luego } \lambda x_m - A_{mm} x_m = \sum_{\substack{k \\ k \neq m}} A_{mk} x_k$$

Por la desigualdad triangular :

$$|\lambda - A_{mm}| \leq \sum_{k \neq m} A_{mk} \frac{|x_k|}{|x_m|} \leq \sum_{k \neq m} A_{mk} = 1 - A_{mm} \text{ por ser } \mathbf{A} \text{ estocástica}$$

Luego tenemos que:

$$|\lambda - w| \leq |\lambda - A_{mm} + A_{mm} - w| \leq |\lambda - A_{mm}| + |A_{mm} - w| \leq (1 - A_{mm}) + (A_{mm} - w)$$

Lema 1

Si \mathbf{P} es la matriz de transición asociada a una cadena de Markov reflexiva, se verifica lo siguiente:

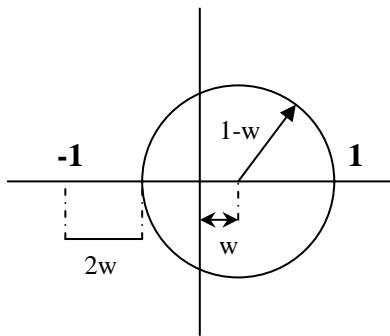
$$\forall \lambda \in \bar{\sigma}(\mathbf{P}) \quad \{|\lambda| = 1 \Rightarrow \lambda = 1\}$$

donde $\bar{\sigma}(\mathbf{P})$ denota el espectro de \mathbf{P} .

Prueba:

Ya se ha demostrado que cualquier autovalor de una matriz estocástica tiene por módulo un escalar inferior a 1; también se ha visto que 1 es autovalor asociado al autovector $j=(1,1,\dots,1)$. La prueba de este lema es inmediata si se demuestra que -1 no pertenece al espectro de la matriz estocástica.

En virtud del teorema 2, es trivial de demostrar dado que $w > 0$. En forma gráfica se observa perfectamente que -1 no puede pertenecer al espectro de la matriz de transición:



Si $w > 0$ el único punto con módulo unidad contenido en el disco cerrado es el 1, por tanto, -1 no pertenece al espectro de la matriz.

Figura 4. Localización de los valores propios de una matriz estocástica.

Lema 2

Si \mathbf{P} es la matriz de transición de una cadena de Markov reflexiva y $\mathbf{B} = \mathbf{P}^r$, siendo r un número natural positivo tal que $r \geq \Phi(R, \mu)$, siendo este último término el diámetro de la cadena, entonces $B_{ij} \neq 0 \quad \forall i, j$.

Nota: Este lema, fácilmente demostrable por teoría matricial, implica que todos los estados son alcanzables en un número finito de pasos.

Lema 3

El bloque correspondiente al autovalor maximal 1 de una matriz de transición asociada a una cadena de Markov reflexiva, puesto en forma triangular por bloques, no tiene elementos no nulos fuera de la diagonal.

Prueba:

Sea \mathbf{P} la matriz de transición, entonces existe una matriz \mathbf{S} no singular, tal que \mathbf{P} adquiere su forma diagonal por bloques, en la forma $\mathbf{A} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{S}$.

Considerando el bloque de dicha matriz en su forma diagonal por bloques asociado al autovalor unidad, sea (i,j) el primer elemento no nulo de dicho bloque.

Sea $\mathbf{B} = \mathbf{A}^k$; entonces el bloque asociado al autovalor unidad (en la matriz \mathbf{B}) verifica: $B^{\lambda=1} = (A^k)^{\lambda=1} = (A^{\lambda=1})^k$; considerando el coeficiente (i,j) nuevamente, es trivial de demostrar que: $B_{ij} = kA_{ij}$

Considerando la norma infinito de Minkowski:

$$|B_{ij}| \leq |kA_{ij}| \leq \|\mathbf{B}\|_{\infty} = \|\mathbf{A}^k\|_{\infty} = \|\mathbf{S}^{-1} \mathbf{P}^k \mathbf{S}\|_{\infty} \leq \|\mathbf{S}^{-1}\|_{\infty} \|\mathbf{P}^k\|_{\infty} \|\mathbf{S}\|_{\infty} \leq \|\mathbf{S}^{-1}\|_{\infty} \|\mathbf{S}\|_{\infty} = q = \text{constante}$$

El último producto es inherente a k ; por tanto, cuando k sea lo suficientemente elevada, el término $|kA_{ij}| > q$; llegamos así a una contradicción, y por tanto el término A_{ij} debe ser forzosamente nulo.

Corolario 1

El bloque asociado al autovalor unidad de la matriz de transición de una cadena de Markov reflexiva es semejante a la matriz identidad.

Lema 4

El autovector asociado al autovalor unidad de una matriz de transición asociada a una cadena de Markov reflexiva de múltiplo del vector unidad.

Prueba:

Sea \underline{v} el autovector asociado al autovalor unidad; así $\mathbf{P}\underline{v} = \underline{v}$. Sea $\mathbf{B} = \mathbf{P}^k$, siendo k un escalar mayor o igual que el diámetro de la cadena. Por tanto $\mathbf{P}\underline{v} = \underline{v} = \mathbf{B}\underline{v}$.

Por otra parte, existe una componente del vector \underline{v} , que denotamos por v_i , tal que (de nuevo utilizando la norma infinito de Minkowski) :

$$|v_i| = \|\underline{v}\|_{\infty} = \max_j |v_j| = \left| \sum_j B_{ij} v_j \right| \leq \sum_j B_{ij} |v_j| \leq \|\underline{v}\|_{\infty} \sum_j B_{ij} = \|\underline{v}\|_{\infty}$$

Se ha aprovechado aquí uno de los resultados del teorema 1, que asegura que el producto de matrices estocásticas es una matriz estocástica. Por tanto, la matriz \mathbf{B} es estocástica. Los símbolos de desigualdad de la ecuación anterior, pueden transformarse en símbolos de igualdad, y por tanto las componentes del vector v son todas ellas iguales (en módulo). Por otra parte, tal y como se pretendía demostrar:

$$|v_i| = \|v\|_\infty \Rightarrow v = \|v\|_\infty \underline{j}$$

Teorema 3

La matriz de transición asociada a una cadena de Markov reflexiva tiene un autovalor simple igual a la unidad con autovector asociado $\underline{j}=(1,1,\dots,1)$, mientras que el resto de autovalores tienen módulo inferior a la unidad.

Prueba:

La única parte de este teorema que resta por demostrar es la de la simplicidad del autovalor unidad, esto es $m(1)=1$, donde m es la multiplicidad del autovalor.

Supongamos que la multiplicidad es m , un número superior a 1. Entonces, considerando la matriz de transición en su forma diagonal por bloques, (\mathbf{A}), tendremos que el bloque asociado al autovalor unidad de la matriz diagonal por bloques será (según el corolario anterior) la matriz identidad de dimensiones $m \times m$.

Por tanto, las m primeras columnas de la matriz \mathbf{S} (autovectores asociados al autovalor unidad) serán múltiplos del vector \underline{j} y, por tanto linealmente dependientes, con lo que la matriz \mathbf{S} será singular, llegando a una contradicción, lo que implica que la multiplicidad del autovalor unidad es simple.

Corolario 2

El bloque asociado al autovalor unidad de una matriz de transición asociada a una cadena de Markov reflexiva (en su forma diagonal por bloques) es la matriz identidad con dimensiones 1×1 .

5.2 DEMOSTRACIÓN DE CONVERGENCIA DEL ALGORITMO

Teorema 3 o teorema del límite de la cadena

Si \underline{d} es el único autovector estandarizado asociado al autovalor maximal 1 de una matriz de transición asociada a una cadena de Markov reflexiva, entonces:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{P}^k = \underline{j} \cdot \underline{d}^t$$

donde \mathbf{P} denota la matriz de transición y $\underline{j}=(1,1,\dots,1)$.

Prueba:

Sea \mathbf{S} una matriz no singular tal que \mathbf{P} adquiere su forma diagonal por bloques:
 $\mathbf{A}=\mathbf{S}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{S}$; según el corolario 2, la matriz \mathbf{A} es de la forma:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & x & \lambda_2 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & x & x & \lambda_2 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_3 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \lambda_n & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \lambda_n \end{bmatrix}, \text{ con } |A_{ii}| < 1 \quad \forall i \neq 1$$

De esta forma $\mathbf{T}=\mathbf{SAS}^{-1}$ y

$$\lim_{k \rightarrow \infty} P^k = \lim_{k \rightarrow \infty} (\mathbf{SAS}^{-1})^k = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{S} \mathbf{A}^k \mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S} \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{A}^k \mathbf{S}^{-1} = \mathbf{SBS}^{-1}$$

Dado que k es mayor que el diámetro de la cadena, la matriz \mathbf{B} tiene todas sus entradas nulas salvo $B_{11}=1$; esta implicación es consecuencia inmediata de resultados anteriores.

Con esto se demuestra que el límite existe; estudiemos ahora su forma:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} P^k = S \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix} \cdot S^{-1} = S_{-,1} \cdot S_{1,-}^{-1}$$

donde la última igualdad representa el producto de la columna 1 de S por la fila 1 de S^{-1}
 Sea $b = S_{1,-}^{-1}$; dado que $S_{-,1} = j = (1,1,\dots,1)$ entonces :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} P^k = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \dots \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (b_{11} \quad b_{12} \quad \dots \quad b_{1n}) = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \end{bmatrix}$$

siendo $\sum_j b_{ij} = 1$ puesto que $\lim_{k \rightarrow \infty} P^k$ es estocástica (producto de matrices estocásticas)

Por otra parte si $\lim_{k \rightarrow \infty} P^k = P^\infty$, entonces $P \cdot P^\infty = P^\infty$ y $P^\infty \cdot P = P^\infty$

La primera de las anteriores expresiones implica que cada columna de P^∞ debe ser un autovector de P (por la derecha), asociado al valor propio unidad.

La segunda de las anteriores expresiones implica que cada fila de P^∞ es un autovector (por la izquierda) de P asociado al autovalor unidad y, por tanto:

$$(b_{11} \quad b_{12} \quad \dots \quad b_{1n}) = \lambda(1 \quad 1 \quad \dots \quad 1)$$

$$\text{Por tanto : } b_{11} = b_{12} = \dots = b_{1n}$$

$$\text{Como } \sum_j b_{ij} = 1 \Rightarrow b_{1k} = \frac{1}{n}$$

Tal y como se pretendía el vector b es el autovector asociado al autovalor unidad estandarizado.

Nota: Este importante teorema tiene una formulación probabilística equivalente. Puede enunciarse de la siguiente forma:

Para cualquier cadena de Markov reflexiva existe una función de densidad positiva $\delta : R \times \mathfrak{R} \rightarrow (0,1]$, definida como:

$$\delta(i,T) = \lim_{k \rightarrow \infty} P^k(j,i,T)$$

Además, el límite no depende de j (configuración inicial) y satisface las siguientes relaciones:

$$\delta(i,T) = \sum_{j \in R} \delta(j,T) \cdot P(j,i,T)$$

$$\sum_{j \in R} \delta(j,T) = 1$$

En otras palabras, si parto de N configuraciones iniciales diferentes entre si, con una misma matriz de transición asociada a una cadena de Markov reflexiva, el tanto por ciento de experimentos que llegarán al suceso i -ésimo tras m pasos será (si m es lo suficiente grande) : $N\delta(i,T)$

A dicha función (límite) se la llama función de equilibrio, que presenta la siguiente propiedad, conocida como ecuación de balance de la función de equilibrio:

$$\begin{aligned} \text{Dado que : } \sum_{j \in S} p(j,i,T) = 1 &\Rightarrow \delta(i,T) = \sum_{j \in S} \delta(j,T) p(j,i,T) = \\ &= \sum_{\substack{j \in S \\ j \neq i}} \delta(j,T) p(j,i,T) + \delta(i,T) p(i,i,T) = \sum_{\substack{j \in S \\ j \neq i}} \delta(j,T) p(j,i,T) + \delta(i,T) (1 - \sum_{\substack{j \in S \\ j \neq i}} p(i,j,T)) \Rightarrow \\ \sum_{\substack{j \in S \\ j \neq i}} \delta(j,T) p(j,i,T) &= \sum_{\substack{j \in S \\ j \neq i}} \delta(i,T) p(i,j,T) \end{aligned}$$

Conclusión:

En este capítulo se ha presentado una breve reseña sobre teoría matricial y general de cadenas de Markov. Para el caso particular de matriz de transición asociada a una cadena de Markov reflexiva, se ha demostrado su convergencia a un ente matricial conocido, por aplicación sucesiva de productos por ella misma. Visto esto de otra manera, se ha demostrado la convergencia del algoritmo con probabilidad uno, para cada ciclo de temperatura, a una distribución llamada función de equilibrio.

Dado que a medida que desciende la temperatura, el algoritmo se autorefinan, podemos asegurar la convergencia del algoritmo a un mínimo global de la función objetivo, con probabilidad uno, para temperatura suficientemente baja, concepto que se tratará a posteriori.

Pasamos ahora a dar una descripción completa y detallada del algoritmo del algoritmo, haciendo hincapié en sus aspectos más relevantes, tanto en optimización de variable continua como discreta, o una mezcla de ambas.

MÉTODO HÍBRIDO ENTRE MARQUARDT Y SIMULATED ANNEALING PARA LA RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA INVERSO. APLICACIÓN A HIDROLOGÍA SUBTERRÁNEA.

ANDRÉS ALCOLEA RODRÍGUEZ

El problema inverso consiste en la estimación de los parámetros de un modelo a partir de las respuestas del sistema y de información previa sobre los parámetros. Numerosas aproximaciones reducen el problema a la minimización de una determinada función, conocida como función objetivo. Una de las principales dificultades es hallar el mínimo global de la función objetivo, puesto que los métodos de optimización continua pueden quedar estancados en un mínimo local. Por otra parte, para algunos métodos de optimización combinatoria, la convergencia al mínimo global está asegurada en cualquier caso, al menos en teoría. No obstante, requieren un elevado esfuerzo computacional. En esta tesina de especialidad, se presenta un nuevo método de optimización, como génesis de dos bien conocidos, el método de Marquardt y Simulated Annealing.

1. INTRODUCCIÓN

El problema general de optimización consiste en hallar el máximo o el mínimo de una función determinada. El presente trabaja trata de la aplicación del problema inverso a Hidrología Subterránea, que consiste en la estimación de los parámetros de un acuífero a partir de medidas directas de los mismos y de variables dependientes de ellos.

Dependiendo del tipo de variable de la función a minimizar, se distinguen dos grandes grupos: la optimización continua y la optimización combinatoria, enfocada esta última para funciones de variable discreta o continua discretizada, si bien comienza a aplicarse, con mayor o menor fortuna, en problemas de variable continua.

Una de las tareas más frecuentes en el contexto de la Hidrología Subterránea es la generación de modelos de predicción, a partir de los cuales se pretende obtener una herramienta capaz de reproducir cualquier aspecto de un sistema real, con una precisión razonable. Uno de los pasos en el proceso de la modelización, es el de identificación de los parámetros del modelo, en el cual se engloba el presente documento. Con la formulación adoptada, el problema inverso termina reduciéndose a la minimización de la llamada función objetivo.

2. LOS PROBLEMAS DIRECTO E INVERSO. FORMULACIÓN

Aparte de la mencionada cuantificación de parámetros, otro de los pasos necesario en el proceso de modelización, es el de identificación de procesos, donde se transforman los procesos físico-químicos relevantes en una serie de ecuaciones, de forma que pueda ser tratado numéricamente. El resultado es un sistema de ecuaciones, cuya resolución se conoce como problema directo (suponiendo conocidos los parámetros que intervienen), a partir del cual se obtienen los valores de la variable de estado.

Para el caso de problema directo de flujo en medio poroso, la ecuación a resolver es [1]:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla(\mathbf{K}\nabla h) + q \quad \text{en } \Omega \quad (1)$$

siendo h [L] el nivel piezométrico en el dominio, \mathbf{K} el tensor de conductividad hidráulica, q un término fuente/sumidero, representando la recarga instantánea por unidad de longitud, superficie o volumen, (según la dimensión del problema) y S_s [L^{-1}] el coeficiente de almacenamiento específico.

Para resolver la ecuación (1), deben especificarse las condiciones iniciales y de contorno en el dominio:

$$\text{Condición inicial: } h(\mathbf{x},0)=h_0(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (2)$$

$$\text{Condiciones de contorno: } (\mathbf{K}\nabla h)\mathbf{n} = \alpha(H - h) + Q \quad \text{en } \Gamma \quad (3)$$

donde Γ representa el contorno de Ω , \mathbf{n} es un vector unitario normal a Γ dirigido hacia el exterior de Ω , H y Q son el nivel y el caudal prescrito respectivamente, y α es un coeficiente que determina el tipo de condición de contorno (Neuman, Cauchy o Dirichlet), conocido en la literatura como coeficiente de goteo.

Para la resolución de dicha ecuación, es común en Hidrología Subterránea el uso del método de los elementos finitos, por su versatilidad para adaptarse a contornos irregulares. Para la discretización temporal se usa el método de las diferencias finitas. En el caso más general, de flujo transitorio no lineal, la ecuación se puede resolver según numerosos métodos, de entre los que se escoge el de Newton-Raphson completo.

En cuanto al problema inverso, la formulación escogida trata de obtener un estimador de los parámetros de la ecuación del problema directo, utilizando información previa de los mismos y de la variable de estado. Existen diversas formulaciones para el problema inverso en Hidrología Subterránea, de entre las que se ha elegido la propuesta por Carrera y Neuman (1986) [2], basada en el método de la Máxima Verosimilitud, incorporando información previa. Dicha formulación termina reduciendo el problema inverso a la minimización de la llamada función objetivo, que tiene por expresión:

$$S = S_h + \sum_i \lambda_i S_i + \beta \quad (4)$$

donde el funcional S es la función a minimizar, S_h es la componente de la función objetivo referente a niveles, S_i la correspondiente al i -ésimo tipo de parámetro, β un término constante y los escalares λ_i se definen como:

$$\lambda_i = \frac{\sigma_h^2}{\sigma_i^2} \quad (5)$$

siendo σ_h y σ_i las desviaciones tipo asociadas al error de medida de niveles y del i -ésimo tipo de parámetro, respectivamente y la expresión de las componentes S_h y S_i es la siguiente:

$$S_h = (\mathbf{h} - \mathbf{h}^*)^t \mathbf{V}_h^{-1} (\mathbf{h} - \mathbf{h}^*) \quad (6)$$

$$S_i = (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_i^*)^t \mathbf{V}_i^{-1} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_i^*) \quad (7)$$

donde \mathbf{h} y \mathbf{h}^* son vectores que contienen los niveles piezométricos en los puntos del dominio discretizado calculados y medidos, respectivamente, y \mathbf{p}_i y \mathbf{p}_i^* contienen los valores estimados y la información previa del i -ésimo tipo de parámetro, respectivamente y las matrices \mathbf{V}_h y \mathbf{V}_i se obtienen a partir de las matrices de covarianza de niveles y del i -ésimo tipo de parámetro, respectivamente.

Puede entenderse que las dos expresiones anteriores corresponden a las componentes de la función a minimizar referidas a niveles y a parámetros, respectivamente, obtenidas por mínimos cuadrados ponderados de la diferencia entre los valores calculados (problema directo) y los medidos.

Así, se observa como la resolución del problema inverso termina reduciéndose a la minimización de la función (4). Los parámetros que conducen a un mínimo de ésta se consideran solución del problema, pues son aquéllos que minimizan la “diferencia” entre la respuesta calculada mediante el modelo y la respuesta medida del sistema real.

Para la resolución del problema inverso, se pueden utilizar numerosos métodos, típicamente de optimización continua, como los de gradientes conjugados, cuasi-Newton, de Marquardt, de Newton, etc.

3. EL MÉTODO DE MARQUARDT

El método de Marquardt [3] resuelve el sistema de ecuaciones siguiente:

$$\left(\mathbf{H}^{(k)} + \mu^{(k)} \mathbf{I} \right) \Delta \mathbf{p}^{(k)} = -\mathbf{g}^{(k)} \quad (8)$$

siendo $\mathbf{H}^{(k)}$ la matriz hessiana en el punto $\mathbf{p}^{(k)}$ o una aproximación de la misma, $\mathbf{g}^{(k)}$ el gradiente en dicho punto, $\Delta \mathbf{p}^{(k)}$ el incremento de parámetros ($\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{p}^{(k)} + \Delta \mathbf{p}^{(k)}$) y $\mu^{(k)}$ un escalar positivo que se actualiza de iteración a iteración mediante criterios empíricos, de los que se hablará más adelante. Éste controla la

dirección del vector de actualización. Si $\mu^{(k)}=0$, el método de Levenberg-Marquardt se convierte en el de Gauss-Newton. En cambio, si $\mu^{(k)} \neq 0$ aumenta, disminuye el módulo del vector de actualización y su dirección se aproxima a la del gradiente (cambiado de signo) de la función objetivo.

La principal ventaja de este método es su velocidad de convergencia en un entorno del mínimo, si bien, puede quedar estancado en un mínimo local de la función objetivo.

4. SIMULATED ANNEALING

El Simulated Annealing (SA) o recocido simulado se basa en la analogía entre la simulación del recocido de sólidos y la resolución de problemas de optimización combinatoria a gran escala. En Física [4], el recocido denota el proceso por el cual un sólido en un baño de calor se calienta mediante incremento de temperatura del mismo, hasta una temperatura máxima para la cual las partículas del sólido pierden su coherencia o estructura, pasando a un estado de entropía o desorden máximo. Acto seguido, se aplica al cuerpo un enfriamiento, disminuyendo la temperatura del baño de calor lenta y paulatinamente. Así, se produce un reordenamiento de las partículas del sólido hacia un nuevo estado de mínima entropía (al final del proceso), suponiendo que la temperatura inicial del baño haya sido lo suficientemente alta y el proceso de enfriamiento lo suficientemente lento. Abstrayendo esta idea a un problema de optimización cualquiera, las configuraciones (juegos de parámetros) asumen el papel de estados del sólido, mientras que la función objetivo asume el de función de energía y la temperatura representa un parámetro de control sobre la evolución del proceso.

El algoritmo puede resumirse como sigue: inicialmente, se asigna al parámetro de control (temperatura), un cierto valor. Además, se define un mecanismo tal que, dada una configuración determinada \mathbf{p}_i , pueda determinarse otra (\mathbf{p}_j) perteneciente a un entorno de la primera. Esto último corresponde a la aplicación de una perturbación de la configuración \mathbf{p}_i . Sea $\Delta f = f(\mathbf{p}_j) - f(\mathbf{p}_i)$; entonces, la probabilidad de aceptar la configuración \mathbf{p}_j , generada a partir de \mathbf{p}_i , viene dada por la expresión:

$$\text{pr}\{\text{aceptar } \mathbf{p}_j\} = \min\left\{1, \frac{1}{kT} \exp\left(-\frac{\Delta f}{kT}\right)\right\} \quad (9)$$

donde k es la constante de Boltzmann y T es el parámetro de control o temperatura.

La expresión (9) se conoce como criterio de Metropolis. Se observa como, dada la tendencia asintótica de dicho criterio a una probabilidad nula, el método puede aceptar configuraciones o juegos de parámetros que conduzcan a un empeoramiento, entendiéndose como tal un aumento en la función objetivo.

El principal problema que presenta este método y, en general, cualquiera de los englobados en la optimización combinatoria, como la mejora iterativa o los algoritmos genéticos, es el elevado número de simulaciones (resoluciones del problema directo) que deben realizar, si bien, la propiedad de aceptar configuraciones “malas” permite que el algoritmo eluda los mínimos locales, al menos en teoría.

5. EL MÉTODO HÍBRIDO

El objetivo de esta tesina de especialidad es el de concebir un nuevo método como génesis de los descritos anteriormente, intentando conjugar sus ventajas, reduciendo, en la medida de lo posible, sus inconvenientes. Es decir, se pretende aprovechar la velocidad de convergencia del método de Marquardt en un entorno del mínimo con la versatilidad de SA para eludir los mínimos locales, manteniendo un esfuerzo computacional razonable.

El flujo del algoritmo puede resumirse como sigue [5]:

- Generación aleatoria de una configuración o juego de parámetros.
- Simulación (resolución del problema directo) con los parámetros del paso anterior.
- Aplicación del método de Marquardt (una única iteración), obteniéndose una nueva configuración.
- Simulación (resolución del problema directo) con los parámetros del paso anterior.
- Elección de la mejor de las dos configuraciones halladas anteriormente (aquella que ofrezca un valor menor de función objetivo).
- Aceptación o rechazo de la misma, a instancias del criterio de Metropolis (9), por comparación con el valor menor de función objetivo obtenido en todo el proceso.
- Chequeo de convergencia/divergencia.

Para la aplicación del algoritmo, se actualizó un código de elementos finitos ya existente (TRANSIN-III) [6], que permitía la estimación de parámetros mediante el uso del método de Marquardt. El nuevo código permite multitud de opciones en cuanto a esquemas de perturbación y de variación de temperatura o enfriamiento. En este trabajo se han probado dos esquemas de perturbación de configuraciones, mediante elipsoides de búsqueda y mediante el uso de la matriz de covarianza a posteriori. En cuanto a la variación de temperatura, se tomó una variación geométrica de la misma.

6. APLICACIÓN A EJEMPLOS SINTÉTICOS

El código actualizado se aplicó a un total de diez ejemplos sintéticos, por su rapidez, dado el gran número de ejecuciones realizadas (unas quinientas, aproximadamente). La metodología seguida es bien conocida en cualquier proceso de verificación de un código de las características del presente [7].

Se partió de un modelo conceptual, cuyas características (en cuanto a geometría, parámetros, condiciones de contorno, etc.) se suponían conocidas. A partir de éste, resolviendo el problema directo (simulación), se obtuvieron los niveles piezométricos “reales” del sistema. En primer lugar, y para simular el error de cualquier proceso de toma de medidas, se añadió un ruido blanco (según una distribución normal de media nula y desviación conocida) a los niveles “reales”, obteniéndose así los niveles “medidos”. Se realizó lo propio con los parámetros, a los que se añadió el mismo tipo de ruido, resultando una variación de hasta dos órdenes de magnitud. De esta forma se obtuvo la información previa de los parámetros.

A partir del modelo real, se han probado varios modelos conceptuales, que son perturbaciones de aquél, en la forma y número de zonas de transmisividad y almacenamiento. En los ejemplos en los que se modificaba el número de zonas, se asignaba como información previa la media geométrica de los valores de las zonas originales que quedaban solapadas con las del ejemplo en cuestión, dotando así de una cierta coherencia estadística a los parámetros del modelo conceptual erróneo. En algunos casos, se asignó a los parámetros de la ecuación, valores iniciales sin coherencia alguna, para estudiar la influencia del juego de parámetros físicos iniciales.

El modelo que se tomó como base consiste en un dominio de $25 \times 16 \text{ m}^2$, cuyos contornos superior e inferior son impermeables, mientras que el izquierdo y el derecho son de caudal ($1.0 \text{ m}^3/\text{día}$) y de nivel prescrito (3.0 m), respectivamente. Además, en el interior del dominio se encuentra un pozo que bombea $5.5 \text{ m}^3/\text{día}$ y una serie de nudos con condición de contorno mixta o de goteo ($\alpha=0.7$, $H=0.5 \text{ m}$). Todo el dominio se ve afectado por una recarga, dividida en tres zonas (de izquierda a derecha), cuyos valores son de 1 , 3 y 6 mm . Se zonifica la transmisividad del dominio en cinco zonas, una de ellas anisótropa. El sistema tiene una única zona de almacenamiento.

7. CONCLUSIONES Y RESULTADOS

Uno de los principales problemas del nuevo algoritmo, y que dificulta su uso, es la incertidumbre acerca de los parámetros de los distintos esquemas de enfriamiento y perturbación, tales como la temperatura inicial, el coeficiente de enfriamiento o el radio de búsqueda inicial. Así, se centra el estudio en obtener unos valores estándar para los mismos, además de seleccionar el esquema de perturbación más adecuado.

En cuanto a la temperatura y radio de búsqueda inicial, si se perturba mediante el esquema de elipsoides de búsqueda, podemos afirmar que una elección errónea de dichos parámetros no afecta excesivamente a la convergencia, obteniéndose un valor final de función objetivo similar en cualquier caso. No obstante, si dicha elección es incorrecta, el esfuerzo computacional resulta ser mucho mayor que cuando la elección de las hipótesis de partida es apropiada. En la Figura 1 se presentan los resultados obtenidos, perturbando según elipsoides de búsqueda para tres valores de temperatura inicial distintos (10^4 , 10^6 y 10^8), para uno de los ejemplos, en los que Marquardt tuvo problemas de convergencia. En la misma se observa que dicho esquema de perturbación es prácticamente insensible a los valores de temperatura inicial.

Respecto a la velocidad de enfriamiento, se obtienen conclusiones análogas. Así, un esquema “rápido”, rebajando la temperatura en cada mejora de la función objetivo, ofrece mejores resultados que uno más lento. El coeficiente de reducción de temperatura que ofreció resultados más estables fue el de 0.9 , mientras que un valor de 0.7 provocó que el descenso de la temperatura fuese demasiado brusco, dando lugar al estancamiento del algoritmo en mínimos locales.

Se puede afirmar que el esquema de perturbación según la matriz de covarianza no es un buen método para perturbar las configuraciones, pues presenta un comportamiento muy similar al método de Marquardt. Es decir, cuando este último tuvo problemas de convergencia, también los tuvo el híbrido con este tipo de perturbación. En la Figura 2 se presenta la comparación entre el método de Marquardt y los distintos esquemas de perturbación, para un mismo ejemplo.

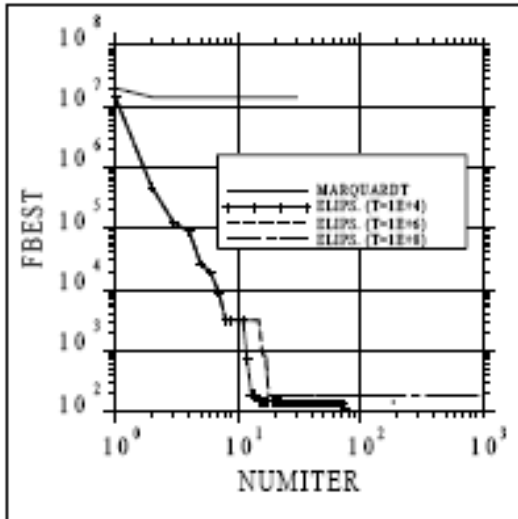


Figura 1. Comparación entre el método de Marquardt y el híbrido, perturbando según elipsoides de búsqueda bajo tres hipótesis de temperatura inicial.

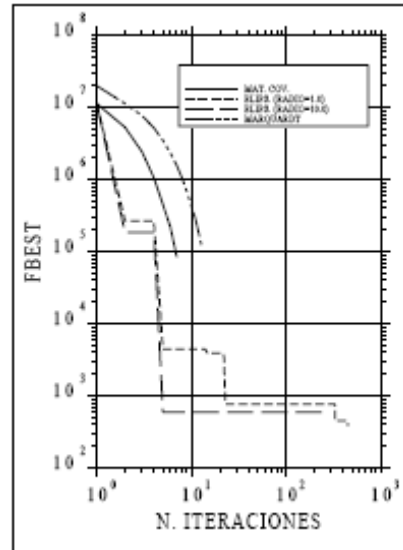


Figura 2. Comparación entre el método de Marquardt y el híbrido, en términos del esquema de perturbación, para un ejemplo donde Marquardt presenta problemas de convergencia.

El esquema de perturbación según elipsoides de búsqueda ofrece prácticamente el mismo resultado, independientemente de las hipótesis de partida, como se muestra en las figuras 1 y 3.

Por otra parte, ambos métodos aplican una restricción en el tamaño máximo de una componente del vector de actualización, de forma que el incremento de parámetros no supere un cierto valor predeterminado. Las conclusiones con respecto a dicha restricción son análogas a las obtenidas respecto al radio de búsqueda inicial, como se muestra en la Figura 4.

7. LINEAS FUTURAS

En base a los resultados de la presente tesina de especialidad, quedan abiertas una serie de cuestiones susceptibles de ser analizadas en detalle, tales como:

- Posible paralelización del código.
- Análisis en detalle del resto de esquemas de enfriamiento implementados
- Imposición de cotas en los parámetros inciertos de los distintos esquemas, utilizando información acerca de la aproximación cuadrática de la función objetivo.
- Implementación de nuevos esquemas de perturbación más sofisticados.
- Aplicación del algoritmo a ejemplos sintéticos incluyendo transporte, así como a casos reales.

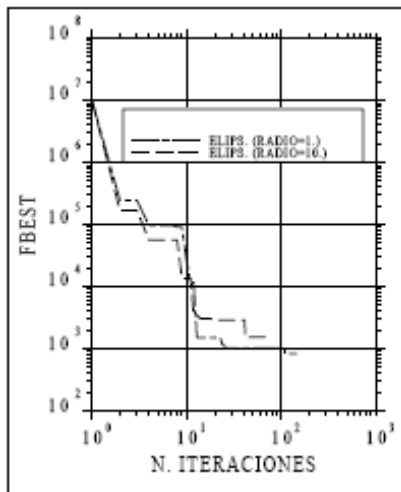


Figura 3. Sensibilidad del esquema de perturbación mediante elipsoides de búsqueda al radio estándar inicial.

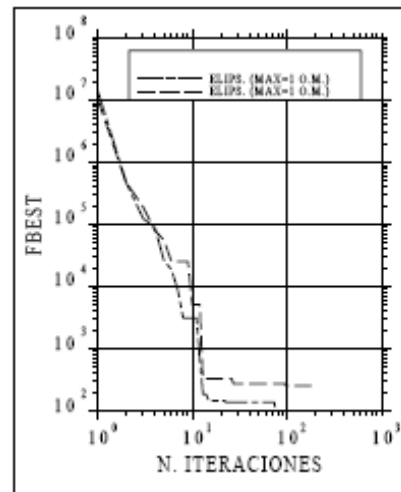


Figura 4. Comportamiento del esquema de perturbación mediante elipsoides de búsqueda, según el máximo cambio permitido en el espacio de parámetros (O.M. denota orden de magnitud).

8. BIBLIOGRAFÍA

- [1] Pinder, G.F., Gray, W.G. *Finite element simulation in surface and subsurface hidrology*. Academic press N.Y., 1977.
- [2] Carrera, J. , Neuman, S.P. Estimation of aquifer parameters under Transient and Steady State Conditions, I. Maximum Likelihood Method Incorporating Prior Information. *Water Resources Research*, Vol. 22, No. 2, (1986) 199-210.
- [3] Marquardt, D.W. An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters. *Journal of SIAM*, Vol. 11, No. 2, 1963.
- [4] van Laarhoven, P.J.M. , Aarts, E.H.L. *Simulated Annealing. Theory and applications*, Kluwer Academic Publishers, 1987.
- [5] Alcolea, A. , Medina, A. , Carrera, J. A hybrid Marquardt-Simulated Annealing method for solving the groundwater inverse problem. *Proceedings of ModelCare'99*. (En prensa).
- [6] Galarza, G., Medina, A., Carrera, J. *El Berrocal Project*, Topical Report 17, ENRESA (1996).
- [7] Medina, A. *Estimación conjunta de los parámetros de las ecuaciones de flujo y transporte*. Tesis doctoral, ETSECCPB-UPC, 1993.