

# AJUSTE DE PUNTOS EXPERIMENTALES POR SIMULACION DE TEMPLADO

G. Meyer\*

Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica,  
CC 435, 8400 San Carlos de Bariloche.

Adecuamos el método de optimización por simulación de templado para ajuste de puntos experimentales. Utilizamos la suma cuadrática de distancias de los puntos a la función de ajuste propuesto como la energía a minimizar, siendo los parámetros de dicha función las variables que determinan la configuración del sistema. Ejemplificamos para un caso simple (bidimensional) y otro de mayor complejidad (cuatro parámetros) interpretando los resultados.

## 1. INTRODUCCION

De los métodos de optimización existentes, el de simulación de templado es uno de los más poderosos por la posibilidad de evitar atascamientos en mínimos relativos. Ideado originalmente por Kirkpatrick<sup>1,2</sup> fue aplicado exitosamente en problemas de particionamiento y en el del viajante.

Presentamos una aplicación del método al problema de ajuste de funciones a puntos experimentales, ejemplificándolo para casos de distinta complejidad.

## 2. APLICACION DEL METODO

### 2.1. El problema

Sea el caso de  $n_m$  mediciones de  $n_v$  variables  $x_i$  que deben ser ajustadas por una función  $F$ , de la forma:

$$F(\{x_i\}) \equiv 0 \quad i = 1, \dots, n_v \quad (1)$$

En general, la expresión de  $F$  incluirá  $n_p$  parámetros, que son las variables del ajuste cuyos valores se desean determinar. La bondad de la aproximación asociada a un conjunto de valores  $\{p_j\}$  ( $j=1, \dots, n_p$ ) de los parámetros debe determinarse mediante una función de ellos. La forma usual de definirla es como suma cuadrática de las distancias a la expresión propuesta [1]:

$$E(\{p_j\}) = \sum_k [F(\{x_{ik}\}) - \{p_j\}]^2 \quad (2)$$

La solución al problema de ajuste puede interpretarse como la búsqueda del punto de menor  $E$  en el espacio de  $n_p$  dimensiones definido por los parámetros del ajuste. Sólo en pocos casos es posible la obtención de soluciones analíticas, en general en aquéllos que pueden expresarse como ajustes lineales.

El conocimiento de cada problema particular permitirá acotar el espacio. Cuando el número de mediciones y de parámetros ajustables es elevado resulta impracticable la evaluación de  $E$  en todo punto y debe emplearse otro procedimiento.

### 2.2 El metodo

Proponemos una discretización del espacio (acotado) de los parámetros que responda al grado de precisión con que se desea la solución. Llevamos a cabo el siguiente procedimiento iterativo:

i) Partimos de una configuración inicial  $\{p_j\}$  y calculamos  $E(\{p_j\})$

ii) A partir de  $\{p_j\} = \{p_1, \dots, p_{n_p}\}$  generamos una nueva configuración  $\{p_j^*\}$ , que por simplicidad puede conseguirse como:

$$\{p_j^*\} = \{p_1, \dots, p_x + \delta p_x, \dots, p_{n_p}\}$$

iii) Evaluamos  $E^* = E(\{p_j^*\})$ .

La aceptación de sólo aquellas nuevas configuraciones que mejoren el ajuste ( $E^* < E$ ) conduciría a posibles atascamientos en mínimos relativos. La base del método de optimización propuesto radica en introducir una temperatura ficticia  $T$  en el sistema, tal que permita seleccionar nuevas configuraciones de acuerdo con el criterio de Metrópolis<sup>3</sup>, entonces:

\* Becario CONICET

iv) se acepta la nueva configuración si  $\exp(-E^*/T) > \text{RND}$ , con  $0 < \text{RND} < 1$  y RND nro. al azar.

Desde el punto de vista físico,  $E$  representa la energía del sistema que hay que minimizar para optimizar el ajuste, y la existencia de una temperatura permite la posibilidad estadística de acceder a estados de mayor energía y sobrepasar las barreras que puedan flanquear los mínimos relativos.

El método de simulación de templado se completa comenzando con una temperatura inicial suficientemente alta para que sean aceptadas la mayoría de las configuraciones (más del 80%). A continuación se baja lentamente la temperatura de modo de asegurar equilibrio térmico en el sistema.

La elevada temperatura inicial facilita cambios en el sistema que se asemeja a un estado líquido. La lenta disminución de la temperatura busca el acomodamiento del mismo hacia estados de menor energía, tal como ocurre durante la solidificación. Esta analogía da lugar al nombre de simulación de templado propuesto previamente<sup>1</sup>.

### 3. RESULTADOS

#### 3.1. Un caso simple

Consideremos el caso de la determinación de los parámetros de red  $a$  y  $c$  de la estructura hexagonal del CdS en base a la medición de su espectro de difracción de R-X. La posición angular  $\Theta$  y los índices de Miller  $(h,k,l)$  asociados a cada pico del espectro, se relacionan con  $a$  y  $c$  mediante<sup>4</sup>:

$$F(\Theta, h, k, l; a, c) = 2 \sin(\Theta) - \lambda \sqrt{\frac{4}{3} \frac{h^2 + h.k + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}} = 0 \quad (3)$$

donde  $\Theta, h, k, l$  son los datos conocidos;  $a, c$  los parámetros a determinar y  $\lambda$  la longitud de onda de la radiación X (conocida y constante).

Acotamos el espacio de acuerdo con referencias existentes y discretizamos el mismo a razón de 100 intervalos por eje. Debido a la simplicidad del problema bidimensional, calculamos la energía del ajuste para todo punto del sub-espacio mencionado para poder analizar el comportamiento del sistema durante su evolución. La figura 1 muestra las líneas de energía constante y el camino seguido por el sistema (monitoreado cada 30 interacciones) al ser enfriado siguiendo la ley  $T_{i+1} = 0.999 \times T_i$  por

iteración. El comportamiento de la energía del ajuste, la fracción de nuevas configuraciones aceptadas y el valor de uno de los parámetros de ajuste al irse enfriando el sistema son exhibidos en la figura 2.

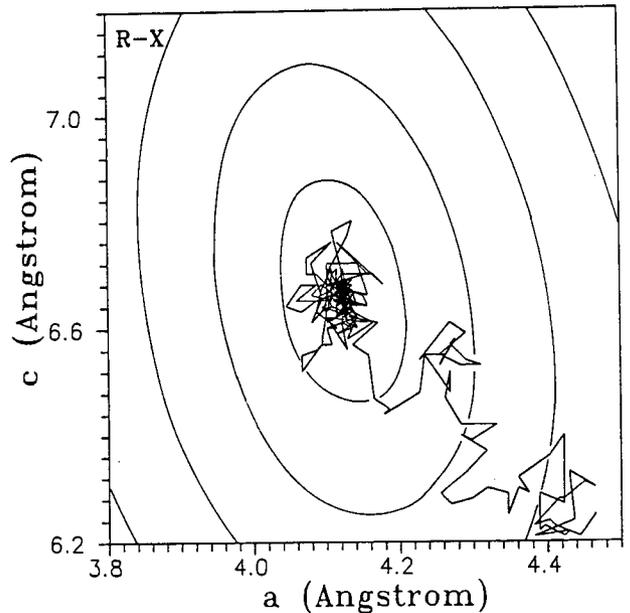


Figura 1: Líneas de energía constante y camino seguido por el sistema durante la simulación de templado para ajuste de un espectro de difracción de R-X.

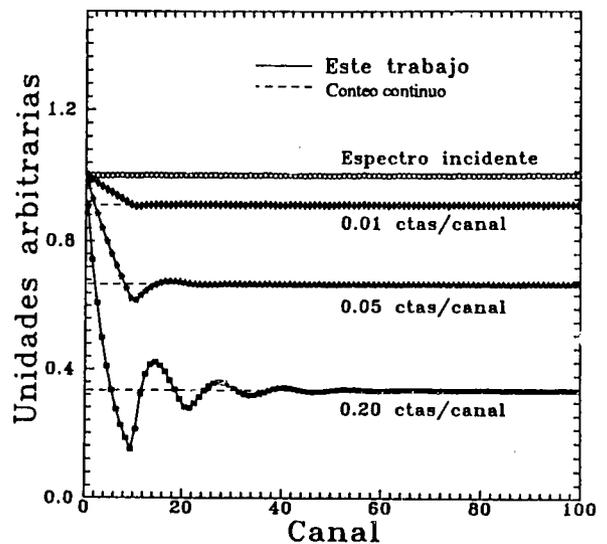


Figura 2: Evolución de la energía, aceptación de nuevas configuraciones y un parámetro del ajuste de un espectro de R-X del CdS.

A altas temperaturas el movimiento es totalmente el azar y las fluctuaciones energéticas son elevadas. Cuando la temperatura es tal que la aceptación ronda el 80%, las fluctuaciones son elevadas pero el movimiento se restringe a una zona reducida del sub-espacio. Para temperaturas en que la aceptación es inferior al 25% el ajuste está prácticamente definido.

### 3.2. Un problema complejo

La curva característica I-V de un dispositivo rectificante relaciona las magnitudes medidas: tensión  $V$  y corriente  $I$  por una expresión que involucra a parámetros de dicho dispositivo<sup>5</sup>:

$$I (1 + R_s/R_{sh}) - V/R_{sh} - I_0 \{ \exp [(V - I R_s)/(nkT)] - 1 \} = 0 \quad (4)$$

donde la resistencia en serie  $R_s$ , la resistencia en paralelo  $R_{sh}$ , la corriente de saturación  $I_0$  y el factor de diodo  $n$  son los 4 parámetros del ajuste,  $T$  es la temperatura de medición (conocida y constante) y no posee ninguna relación con la del templado.

Este tipo de sistema se caracteriza por la existencia de mínimos relativos y por lo tanto el método es de gran utilidad.

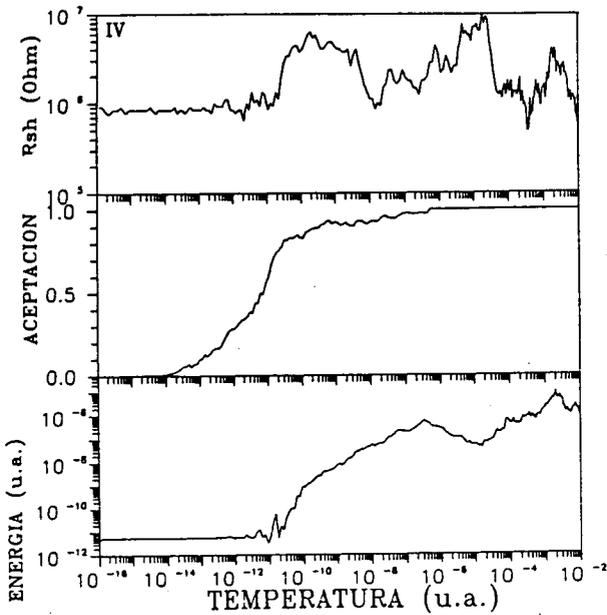


Figura 3: Evolución de la energía, aceptación y un parámetro del ajuste de una característica I-V.

La figura 3 muestra la evolución de la energía del ajuste, de la fracción de aceptación y de uno de los parámetros  $R_{sh}$  durante la simulación de templado de un conjunto de 40 puntos medidos. La figura 4 presenta las curvas de ajuste obtenidas a cuatro diferentes temperaturas. El análisis cualitativo del comportamiento del sistema es similar al problema anterior.

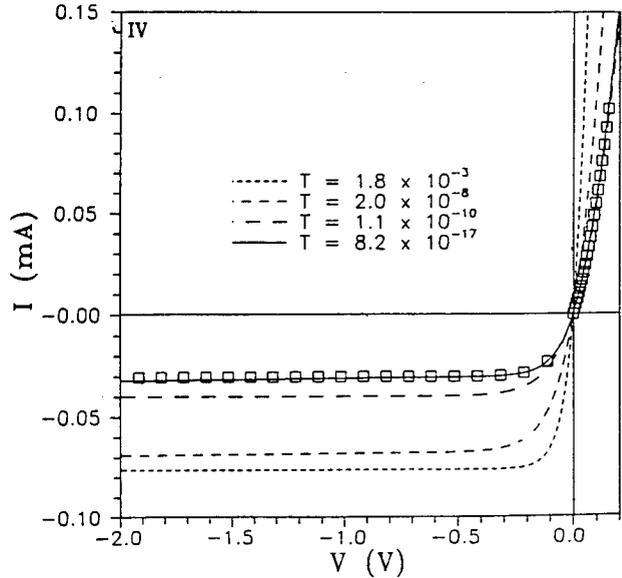


Figura 4: Ajustes a una característica I-V de acuerdo al estado del sistema, a distintas temperaturas, durante el templado.

### 4. ANALISIS Y CONCLUSIONES

Adaptamos el método de optimización por simulación de templado al problema de ajuste de puntos experimentales.

Lo aplicamos a un caso trivial con dos parámetros y sólo un mínimo, y a uno de mayor complejidad, en que pueden presentarse estados metaestables. Los ajustes obtenidos fueron satisfactorios.

Si bien el método cuenta con la posibilidad de evitar atascamientos, la convergencia al mínimo absoluto no está garantizada. Un ejemplo lo constituye la segunda aplicación presentada: de la observación de la evolución de la energía con la temperatura (fig. 3) puede notarse que la energía pasa por su mínimo a  $T \approx 2 \times 10^{-11}$  y se fija en un valor apenas superior a menor temperatura.

Estos atascamientos pueden minimizarse programando la opción de elegir configuraciones al azar cuando la aceptación es menor que cierto

umbral; las nuevas configuraciones serán aceptadas con el criterio de Métropolis.

Cuando el cálculo de la energía de una nueva configuración lleva demasiado tiempo computacional, puede obtenerse  $E^*$  a partir de un desarrollo de Taylor alrededor de algún punto, con validez en un entorno del mismo. Este último recurso permite acelerar el cálculo para el caso de ajustes a muchos puntos experimentales.

## REFERENCIAS

- 1- S. Kirkpatrick, C. D. Gelleatt Jr. Y M. P. Vecchi; *Science* 220 (1983) 671
- 2- S. Kirkpatrick; *J. Stat. Phys.* 34 (1984) 975
- 3- N. Metropolis, A. Rosenbluth, A. Teller y E. Teller; *J. Chem. Phys.* 21 (1953) 1087
- 4- J. G. Brown; *X-rays and their applications*, Plenum Pub. Corp. (1975)
- 5- K. L. Chopra y S. R. Das; *Thin Film Solar Cells*, Plenum Press (1979)