

Universidad Nacional de Ingeniería
Facultad de Ingeniería Económica, Estadística y Ciencias
Sociales



TRABAJO DE SUFICIENCIA PROFESIONAL
OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICA PARA ENCONTRAR
SOLUCIONES NUMÉRICAS DE LA ECUACIÓN FISHER-KPP

Para obtener el título profesional de Ingeniero Estadístico

Elaborado por

Melba Luz Torres Ortiz

 [0009-0009-2163-0312](https://orcid.org/0009-0009-2163-0312)

Asesor

Dr. Luis E Huamanchumo De La Cuba

 [0000-0002-2239-5301](https://orcid.org/0000-0002-2239-5301)

LIMA - PERU

2024

Citar/How to cite	(Torres, 2024)
Referencia/Reference	Torres, M. (2024). Optimización Estocástica para Encontrar Soluciones Numéricas de la Ecuación Fisher-Kpp [Trabajo de Suficiencia Profesional de pregrado, Universidad Nacional de Ingeniería]. Repositorio institucional Cybertesis UNI.

A mis padres, Julio y Rosa...

AGRADECIMIENTOS

Agradezco muy especialmente a mis padres, Julio y Rosa, quienes siempre me brindaron amor, soporte y seguridad familiar. Sin ellos, nada esto hubiera sido posible. Mi amor, cariño y agradecimiento hacia ustedes no tiene limite.

También quiero agradecer, a la plana de docente de la Escuela Profesional de Ingeniería Estadística de la Universidad Nacional de Ingeniería (EPIES-UNI), gracias por sus enseñanzas.

Agradezco al Dr. Luis E. Huamanchumo de la Cuba por la confianza que deposito en mí. Gracias por sus sugerencias y consejos que permitieron que este trabajo salga a la luz.

Por ultimo, agradezco a todas las personas que, de una u otra forma, formaron parte de esta etapa formativa de mi vida, etapa del cual me llevo hermosos recuerdos.

RESUMEN

Este estudio desarrolla y evalúa un método numérico que integra diferencias finitas y Simulated Annealing para resolver la ecuación de Fisher-KPP, una ecuación diferencial que es fundamental en el modelado de procesos dinámicos en biología y otras ciencias. El método propuesto se enfoca en mejorar la precisión y eficacia de las soluciones numéricas mediante la optimización de la búsqueda de mínimos locales en un espacio de soluciones complejo. Se diseñó un esquema de diferencias finitas para la adecuada discretización espacial y transformación de la ecuación diferencial en un sistema de ecuaciones de diferencia, facilitando la implementación numérica. Los experimentos numéricos realizados demostraron que el método alcanza una convergencia adecuada en más del 95 % de los casos evaluados, destacando su robustez y precisión. Sin embargo, la estabilidad y consistencia del método bajo diferentes configuraciones de parámetros y condiciones de contorno plantean desafíos que requieren investigaciones futuras. Este enfoque promete ampliar la aplicabilidad de técnicas numéricas avanzadas en el estudio de ecuaciones diferenciales complejas, potencialmente beneficiando una gama más amplia de aplicaciones científicas y técnicas.

Palabras Clave: Simulated Annealing, Diferencias Finitas, Ecuación de Fisher-KPP, Métodos Numéricos, Optimización, Soluciones Numéricas, Estabilidad de Algoritmos, Condiciones de Contorno.

ABSTRACT

This study develops and evaluates a numerical method integrating finite differences and Simulated Annealing to solve the Fisher-KPP equation, a differential equation fundamental in modeling dynamic processes in biology and other sciences. The proposed method focuses on enhancing the accuracy and efficacy of numerical solutions by optimizing the search for local minima in a complex solution space. A finite difference scheme was designed for proper spatial discretization and transformation of the differential equation into a system of difference equations, facilitating numerical implementation. Numerical experiments demonstrated that the method achieves adequate convergence in over 95% of the cases evaluated, highlighting its robustness and precision. However, the stability and consistency of the method under different parameter settings and boundary conditions pose challenges that require further research. This approach promises to expand the applicability of advanced numerical techniques in the study of complex differential equations, potentially benefiting a broader range of scientific and technical applications.

Keywords: Simulated Annealing, Finite Differences, Fisher-KPP Equation, Numerical Methods, Optimization, Numerical Solutions, Algorithm Stability, Boundary Conditions.

ÍNDICE GENERAL

1	INTRODUCCIÓN	1
2	FORMULACIÓN DEL PROBLEMA	8
2.1	Objetivo general . . .	9
2.2	Objetivos Específicos	9
2.3	Antecedentes Investigativos .	9
3	JUSTIFICACIÓN, ALCANCES Y LIMITACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN	27
3.1	Justificación .	27
3.2	Alcance . . .	28
3.3	Limitación de la Investigación	29
4	ALGORITMO DE SIMULATED ANNEALING	30
4.1	Simulated Annealing Básico	30
4.2	Funciones para optimización vía SA	32
4.2.1	Función Easom . . .	32
4.2.2	Función Rastrigin .	34
4.2.3	Función Styblinski-Tang .	34
4.3	Variantes del Simulated Annealing .	35
4.4	Métodos de Optimización Global Basados en SA . .	36
5	Soluciones Numéricas de Ecuaciones Diferenciales mediante SA	37
5.1	Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO's) de segundo orden .	37
5.1.1	Solución numérica general . . .	37
5.1.2	Ejemplo: Caso de función lineal	38
5.2	Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP's) . .	40
5.2.1	Ejemplos de Solución Numérica de EDP's . .	42

5.3	Conclusión	54
5.4	Recomendaciones y Trabajos Futuros	54
5.4.1	Optimización de Parámetros y Condiciones de Contorno	55
5.4.2	Implementación de Técnicas Híbridas	55
5.4.3	Validación Experimental y Comparación con Otros Métodos .	56
5.4.4	Desarrollo de Herramientas Computacionales y Software .	56
5.4.5	Optimización Computacional	56
	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	61

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA N° 1	$f(x,y) = \cos(x)\cos(y)^{0.2}y^{0.2}$. La función Easom tiene varios mínimos locales. Es unimodal y el mínimo global tiene una pequeña área relativa al dominio de la función, generalmente se evalúa en el cuadrado $[100,100]$ y tiene un mínimo global de 1 en (π, π) , es decir, $f(\pi, \pi) = 1$. La línea azul es el camino recorrido por el SA en la búsqueda del mínimo global.	33
FIGURA N° 2	$f(x) = 10 + \sum_{i=1}^n [10 \cos(2\pi x_i)]$. La función Rastrigin tiene varios mínimos locales. Es altamente multimodal, pero los lugares de los mínimos están distribuidos regularmente. Se muestra el gráfico anterior en su forma bidimensional. La función generalmente se evalúa en el hipercubo $[-5,12,5,12]$ para todo $x_i = 1, \dots, n$. La función tiene un mínimo global de 0 en cero, es decir, $f(0) = 0$ para $x = (0, \dots, 0)$	34
FIGURA N° 3	$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (16^2 + 5)$. La función Styblinski-Tang se muestra aquí en su forma bidimensional. La función generalmente se evalúa en el hipercubo $[-5,5]$ para todo $x_i = 1, \dots, n$. La función tiene un mínimo global que depende de la dimensión, es decir, $f(x) = 39,16599$ para $x = (2,903534, \dots, 2,903534)$	35
FIGURA N° 4	La EDO planteada es $\frac{dy}{dx} = 2 + 1/x$. $y(0) = 2$, $y(1) = 4$ para $x \in [0,1]$. Los puntos rojos son la solución aproximada, la línea azul es la solución exacta. Los parámetros usados en el SA son: $n = 10$, $\epsilon = 0,005$, $\sigma = 3000$, $\tau = 90$, $\alpha = 0,9$	39
FIGURA N° 5	La EDP planteada es $\nabla^2 u = 5$ con condiciones de frontera $u(0,y) = 5$ y $u(1,y) = 5 + 5$. Los parámetros utilizados en el SA son: $n = 8$, $\sigma = 10$, $\epsilon = 0,005$, $\sigma = 1500$, $\tau = 20$, $\alpha = 0,99$	43
FIGURA N° 6	Función de energía H de la ecuación de Laplace	43
FIGURA N° 7	La EDP planteada es $\nabla^2 u = 5$ con condiciones de frontera $u(0,y) = 5$ y $u(1,y) = 5 + 5$. Los parámetros utilizados en el SA son: $n = 10$, $\sigma = 10$, $\epsilon = 0,005$, $\sigma = 1500$, $\tau = 20$, $\alpha = 0,99$	48
FIGURA N° 8	Función de energía de la ecuación de Calor	50

FIGURA N° 9	La EDP es $10\frac{2}{2} = 0,1(1)$. Los parámetros usados en el SA son: $= 20, = 20, = 0,001, = 10000, = 40, = 0,99.$	53
FIGURA N° 10	La EDP es $10\frac{2}{2} = 0,2(1)$. Los parámetros utilizados en el SA son: $= 20, = 20, = 0,001, = 10000, = 40, = 0,99.$	59
FIGURA N° 11	La EDP es $10\frac{2}{2} = 0,3(1)$. Los parámetros utilizados en el SA son: $= 20, = 20, = 0,001, = 10000, = 40, = 0,99.$	60

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

La ecuación de Fisher, también conocida como ecuación de Kolmogorov-Petrovsky-Piscounov (KPP), desempeña un papel fundamental en diversos campos científicos como la química, la biología, la ecología, y la transferencia de calor y masa (véase Newman, 1980, 1983). Esta ecuación modela la interacción entre los procesos de difusión y reacción, fundamentales para entender fenómenos como la propagación de especies, la dinámica de reacciones químicas, y la transferencia de calor (véase Khater y Alabdali, 2021; Kudryashov, 1993; Macías-Díaz et al., 2012).

La ecuación se expresa matemáticamente como:

$$u_t = D \nabla^2 u + f(u).$$

Aquí, $u(x,t)$ representa la concentración de una sustancia a lo largo del tiempo y espacio, D es el coeficiente de difusión, y $f(u)$ es la tasa de reacción o intensidad de selección. Combina un término de difusión, que describe la dispersión en el espacio, y un término de reacción, que modela la reacción local de la sustancia.

Dada la naturaleza no lineal de la ecuación de Fisher-KPP, su resolución analítica presenta considerables desafíos. Esto ha fomentado el uso de métodos numéricos como herramientas esenciales para obtener soluciones aproximadas. Los enfoques más empleados incluyen esquemas de diferencias finitas, métodos de elementos finitos, y métodos espectrales, los cuales discretizan el dominio continuo y aproximan las derivadas mediante diferencias finitas (véase Chandraker et al., 2015, 2018; El-Hachem et al., 2019; Hasnain y Saqib, 2017; Izadi, 2020; Kwak et al., 2023; Shapovalov y Trifonov, 2014). Estos métodos son eficaces pero enfrentan desafíos al aplicarse a ecuaciones no lineales complejas debido a la posible existencia de múltiples mínimos locales, lo que puede llevar a soluciones numéricas inexactas o inestables si no se gestionan adecuadamente las condiciones de contorno y los pasos espaciales y temporales.

En busca de soluciones alternativas para estos desafíos, el proceso de Annealing o Recocido, fundamental en metalurgia y ciencia de materiales, ofrece un paralelismo interesante. El recocido modifica las propiedades físicas y químicas de los materiales mediante el calentamiento y enfriamiento controlados, permitiendo que el material alcance la configuración de energía mínima global (véase Dunkelberger, 2007; Fuentes-Caparrós et al., 2019; Ko et al., 2023; Málek et al., 2017; Minissale et al., 2020; S. P. Patel, 2022; Tong et al., 2015; Waryoba et al., 2019; Yarali et al., 2020). Investigaciones han demostrado que el recocido a bajas temperaturas usando fuerzas de viento electrónico puede ser tan efectivo como el tradicional, pero más eficiente en tiempo y energía (Waryoba et al., 2019). Esta eficiencia también se ha observado en la optimización de estructuras atómicas en simulaciones de dinámica molecular y en la sincronización del ribosoma 70S en biología molecular, utilizando un algoritmo inspirado en este proceso físico, conocido como Simulated Annealing (SA) (Chu et al., 2021; Karabin y Stuart, 2020).

El SA es especialmente valioso por su capacidad para superar los mínimos locales mediante movimientos aleatorios ascendentes, lo cual es crucial en problemas con superficies complejas de optimización (véase Connors y Kumar, 1987; Gidas, 1986; Hasegawa, 2005; Kolonko, 1995; Manthey y Rijn, 2022; Martinez-Alfaro, 2010; Meise, 1998; Sánchez y Solís, 2000; Tran, 1992; Zhan et al., 2016). Este algoritmo, al simular una cadena de Markov de estado finito no estacionaria, explora el espacio de soluciones de forma que favorece estados de baja energía, mejorando la eficiencia y precisión en problemas de optimización complejos (véase Choi, 2019; Franzke y Kosko, 2019; Gelfand y Mitter, 1985; Lockett y Miikkulainen, 2014; Mitra et al., 1986; Nolte y Schrader, 2000; Wah y Wang, 1999).

Implementando SA en la resolución de la ecuación de Fisher-KPP, se formula primero una función objetivo que represente el problema, se define un esquema de recocido que controle la temperatura del sistema, y se generan soluciones candidatas evaluadas según la función objetivo y la temperatura actual. Este proceso no solo busca mejorar la calidad global de la solución sino también explorar el espacio de soluciones de manera más efectiva (véase Pao et al., 1999; Sánchez y Solís, 2000).

Al implementar el SA para resolver la ecuación de Fisher-KPP, se destacan varios pasos clave. Primero, se debe formular una función objetivo que represente adecuadamente el problema a resolver. Por ejemplo, esta función podría ser la suma de los errores cuadrados entre la solución aproximada y la solución exacta en cada punto de

la malla de discretización (véase Hasegawa, 2005; Martínez-Alfaro, 2010; Sánchez y Solís, 2000; Zhan et al., 2016). Luego, se define un esquema de recocido que controla la temperatura del sistema durante el proceso de optimización. La temperatura inicial se establece alta para permitir exploraciones amplias en el espacio de soluciones, mientras que la temperatura final se reduce progresivamente para asegurar la convergencia hacia un mínimo global. La tasa de enfriamiento es otro parámetro crítico que debe ser ajustado cuidadosamente para optimizar el rendimiento del algoritmo.

En cada iteración del proceso de SA, se genera una nueva solución candidata seleccionada aleatoriamente en la vecindad de la solución actual, y se evalúa la función objetivo para esta nueva solución. Si la nueva solución mejora la función objetivo, se acepta automáticamente; si no mejora, se acepta con una probabilidad que depende de la diferencia en los valores de la función objetivo y la temperatura actual. Este mecanismo estocástico permite al algoritmo escapar de mínimos locales y explorar una mayor variedad de soluciones potenciales antes de converger en la solución óptima (véase Atiqullah, 2004; Fleischer y Jacobson, 1996; Hasegawa, 2011; Hérault, 1998; A. N. Patel et al., 1991; Safaei et al., 2012; Sánchez y Solís, 2000; Wang et al., 2015; Zhong et al., 2012).

Es crucial validar los resultados numéricos obtenidos al implementar el SA, comparándolos con soluciones analíticas conocidas o con resultados de otros métodos numéricos. Además, se deben realizar pruebas de sensibilidad para evaluar cómo afectan los parámetros del algoritmo, como la tasa de enfriamiento y la temperatura inicial, a la precisión y estabilidad de las soluciones.

La adecuada discretización del dominio espacial es esencial para capturar la dinámica subyacente del sistema modelado y para asegurar la precisión de los resultados numéricos. Los esquemas de diferencias finitas empleados deben ser lo suficientemente robustos para respetar las condiciones de contorno inherentes al problema físico bajo estudio (véase Chandraker et al., 2015, 2018; El-Hachem et al., 2019; Hasnain y Saqib, 2017; Izadi, 2020; Khater y Alabdali, 2021; Kudryashov, 1993; Kwak et al., 2023; Macías-Díaz y Gallegos, 2019; Macías-Díaz et al., 2012; Oruc, 2019; Shapovalov y Trifonov, 2014; Youssef et al., 2022).

Finalmente, la implementación de algoritmos paralelos y la incorporación de técnicas como el muestreo por importancia y la generación de soluciones basadas en el algoritmo de Metropolis, que simplifica la simulación de la evolución hacia el equilibrio térmico de un sólido a una temperatura determinada, mejora significativamente la precisión

de las soluciones generadas mediante el SA (véase Metropolis et al., 1953). Esto hace que el método sea aplicable a una amplia gama de problemas complejos y de gran escala, proporcionando una metodología robusta para la optimización y permitiendo una mejor adaptación a problemas específicos de distintas disciplinas (véase Choi, 2019; Franzke y Kosko, 2019).

La exploración efectiva del espacio de soluciones y la superación de mínimos locales, junto con la precisión y robustez de los esquemas de diferencias finitas, permiten obtener soluciones numéricas más fiables y eficientes para problemas de difusión y reacción. Esto se ve potenciado por el uso de Simulated Annealing (SA), cuyas capacidades se integran a la resolución de ecuaciones complejas como la ecuación de Fisher-KPP.

Además, la implementación del algoritmo de SA para optimizar la solución numérica introduce una capacidad única para superar los mínimos locales, un obstáculo común en la resolución de problemas complejos. La integración de SA no solo busca mejorar la calidad global de la solución sino también explorar el espacio de soluciones de manera más efectiva, lo que podría revelar nuevas perspectivas sobre el comportamiento del sistema modelado.

En la ampliación del entendimiento de la ecuación de Fisher, inicialmente investigada de manera independiente, observamos que esta ecuación diferencial parcial no lineal ha encontrado una amplia aplicación en diversos campos de la ciencia e ingeniería (véase Fisher, 1937; Kolmogorov et al., 1937). Esta ecuación es fundamental para comprender comportamientos químicos, biológicos y físicos, especialmente debido a su capacidad para modelar ondas viajeras, las cuales son esenciales en el estudio de fenómenos dinámicos en estos campos. Los modelos matemáticos de estos sistemas describen las concentraciones de una o varias sustancias y cómo estas cambian en el espacio debido a dos procesos principales: las reacciones químicas localizadas y la difusión.

Las ecuaciones de reacción-difusión se aplican comúnmente en química, pero también describen fenómenos dinámicos de carácter no químico. Estas pueden tratarse como ecuaciones diferenciales parciales parabólicas semilineales en transferencia de calor. De forma general, estas ecuaciones se representan como:

$$=^2 + (),$$

donde cada componente del vector $(,)$ representa la concentración de una sustancia,

indica los coeficientes de difusión y engloba las reacciones localizadas implicadas en los fenómenos físicos. La solución de las ecuaciones de reacción-difusión revela una diversidad de características, incluyendo la generación de ondas viajeras y otros patrones autoorganizados como pentágonos, rayas y hexágonos, además de estructuras más complejas como solitones disipativos.

Las ecuaciones de reacción-difusión pueden describirse para uno, dos o más componentes dependiendo de los elementos que participen en las reacciones. La forma más simple de estas ecuaciones, concerniente a la concentración de un solo componente en una dimensión espacial, es:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u).$$

Si el término de reacción se elimina, la ecuación representaría únicamente un proceso de difusión. Si el término de difusividad térmica reemplaza al término de difusión, entonces la ecuación se transformaría en una ecuación diferencial parcial parabólica en una dimensión espacial. La elección de $f(u) = (1 - u)u$ resulta en la ecuación de Fisher, que se utiliza para describir la expansión de poblaciones biológicas. La ecuación de Fisher con advección se emplea para describir la dinámica poblacional en ambientes advectivos.

Fisher propuso esta ecuación diferencial parcial no lineal,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c \frac{\partial u}{\partial x} + (1 - u)u,$$

como un modelo para la propagación de un gen mutante con una intensidad de selección ventajosa. Esta misma ecuación también aparece en la propagación de llamas, en el movimiento browniano ramificado y en la teoría de reactores nucleares (véase Macías-Díaz y Gallegos, 2019; Oruc, 2019; Youssef et al., 2022). Debido al uso amplio de la ecuación de Fisher en una variedad de aplicaciones de ingeniería, ha capturado considerablemente la atención de los investigadores.

La versatilidad de la ecuación de Fisher-KPP se refleja en su capacidad para modelar una amplia gama de fenómenos físicos y biológicos. En el campo de la ecología, por ejemplo, la ecuación se ha utilizado para estudiar la propagación de especies invasoras en nuevos hábitats. En este contexto, el término de difusión representa la dispersión aleatoria de los individuos, mientras que el término de reacción modela el crecimiento de la población.

En el ámbito de la química, la ecuación de Fisher-KPP ha encontrado aplicaciones

en el estudio de reacciones autocatalíticas, donde el producto de la reacción cataliza su propia producción. Aquí, el término de difusión describe el movimiento de las moléculas reactivas, mientras que el término no lineal captura la dinámica de la reacción autocatalítica.

La aplicación de métodos numéricos avanzados, como el Simulated Annealing, para resolver la ecuación de Fisher-KPP ofrece nuevas perspectivas sobre estos sistemas complejos. Al permitir una exploración más exhaustiva del espacio de soluciones, estos métodos pueden revelar comportamientos sutiles o inesperados que podrían pasarse por alto con enfoques más tradicionales.

La aplicación de la ecuación de Fisher-KPP en la química y la ecología ha llevado a un entendimiento profundo de los procesos de reacción y difusión. En la química, la ecuación ha encontrado aplicaciones en el estudio de reacciones autocatalíticas, donde el término de difusión describe el movimiento de las moléculas reactivas y el término no lineal captura la dinámica de la reacción autocatalítica. En la ecología, la ecuación se utiliza para estudiar la propagación de especies invasoras en nuevos hábitats, donde el término de difusión representa la dispersión aleatoria de los individuos y el término de reacción modela el crecimiento de la población.

Además, la versatilidad de la ecuación de Fisher-KPP se ha extendido a la descripción de fenómenos físicos más complejos. Por ejemplo, la ecuación se aplica en la propagación de llamas, en el movimiento browniano ramificado y en la teoría de reactores nucleares, demostrando su capacidad para modelar una amplia gama de procesos dinámicos. Estos usos amplios y variados subrayan la importancia de encontrar soluciones precisas y eficientes para la ecuación, especialmente en configuraciones que presentan desafíos debido a la no linealidad y la existencia de múltiples mínimos locales.

En este contexto, los métodos numéricos tradicionales, como los esquemas de diferencias finitas, aunque eficaces, a menudo enfrentan limitaciones cuando se aplican a problemas no lineales complejos. Estos métodos requieren una gestión cuidadosa de las condiciones de contorno y una selección adecuada de los pasos espaciales y temporales para evitar soluciones numéricas inestables o inexactas. Por lo tanto, la búsqueda de métodos alternativos que puedan superar estas dificultades es de gran relevancia.

El Simulated Annealing (SA) surge como una herramienta poderosa en este ámbito, inspirada en el proceso físico de recocido utilizado en metalurgia para modificar las propiedades de los materiales (véase Málek et al., 2017). Al igual que el recocido térmico aumenta la ductilidad y reduce la dureza del material al permitir que alcance una configura-

ción de energía mínima global, el SA permite explorar el espacio de soluciones de manera efectiva, superando los mínimos locales para encontrar el mínimo global en problemas de optimización complejos (véase Banchs, 2019, Giri, 2023, Xiang et al., 2017, Pappala y Gulhane, 2023, Asani y Rexhepi, 2018, Karabin y Stuart, 2020, Černý, 1985, Kirkpatrick et al., 1983). Este método ha demostrado ser particularmente valioso para la resolución de la ecuación de Fisher-KPP, donde su capacidad para manejar múltiples mínimos locales y adaptarse a las propiedades térmicas del sistema durante la optimización resulta en soluciones más eficientes y precisas (véase Karabin y Stuart, 2020).

La implementación del SA en la resolución de ecuaciones diferenciales parciales como la ecuación de Fisher-KPP implica la formulación de una función objetivo adecuada, la definición de un esquema de recocido que controle la temperatura del sistema, y la generación de soluciones candidatas que se evalúan según su mérito. Este enfoque no solo mejora la calidad de la solución sino que también permite una exploración más amplia del espacio de soluciones, revelando comportamientos y dinámicas que podrían ser inaccesibles mediante métodos más tradicionales.

Finalmente, validar los resultados obtenidos mediante SA es esencial para asegurar su precisión y estabilidad. Esto se logra comparando las soluciones numéricas con soluciones analíticas conocidas o resultados obtenidos mediante otros métodos numéricos. Además, realizar pruebas de sensibilidad para evaluar cómo los parámetros del algoritmo, como la tasa de enfriamiento y la temperatura inicial, afectan la precisión y la estabilidad de las soluciones. Así, el SA no solo proporciona un método robusto y adaptable para la resolución de ecuaciones diferenciales parciales no lineales sino que también ofrece nuevas perspectivas en la optimización y el análisis de sistemas complejos.

CAPÍTULO 2

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

- ¿Cómo puede diseñarse un esquema de diferencias finitas que sea adecuado para la discretización espacial de la ecuación de Fisher-KPP y qué condiciones de contorno serían las más efectivas para asegurar la precisión de las soluciones?
- ¿Qué método se puede desarrollar para convertir la ecuación diferencial de Fisher-KPP en un sistema manejable de ecuaciones de diferencia que permita una resolución numérica efectiva?
- ¿Qué técnicas numéricas avanzadas se pueden aplicar para resolver el sistema algebraico derivado de la ecuación de Fisher-KPP y cómo se puede garantizar la estabilidad y convergencia de estas soluciones?
- ¿Cómo se puede evaluar y verificar la precisión y eficacia del esquema de diferencias finitas propuesto a través de experimentos numéricos y comparaciones con soluciones analíticas o otros métodos numéricos?
- ¿De qué manera el algoritmo de Simulated Annealing puede ser implementado para optimizar la solución numérica de la ecuación de Fisher-KPP y cómo ayuda a superar los mínimos locales y mejorar la calidad de la solución?
- ¿Cuáles son las ventajas y limitaciones del uso combinado de diferencias finitas y Simulated Annealing en comparación con otros enfoques numéricos, y qué áreas podrían mejorar?
- ¿Cómo se desempeña el método desarrollado en escenarios de simulación complejos en términos de tiempo computacional, precisión y robustez frente a cambios en los parámetros del modelo y condiciones iniciales?

2.1. Objetivo general

Desarrollar y aplicar un método que combine un esquema de diferencias finitas con Simulated Annealing para la solución numérica de la ecuación de Fisher-KPP, aprovechando la capacidad de este último para encontrar óptimos locales en problemas complejos y mejorar así la precisión y eficacia de las soluciones obtenidas.

2.2. Objetivos Específicos

- Presentar un esquema de diferencias finitas desarrollado para la ecuación de Fisher-KPP, enfocándose en su adecuación para la discretización espacial.
- Describir el proceso de transformación de la ecuación diferencial de Fisher-KPP en un sistema de ecuaciones de diferencia, detallando cómo se realiza la sustitución en cada nodo para facilitar la resolución numérica.
- Examinar la metodología para resolver el sistema algebraico resultante, considerando las condiciones de contorno específicas y cómo estas influyen en la estabilidad y convergencia de las soluciones.
- Verificar la precisión del esquema de diferencias finitas mediante la realización de varios experimentos numéricos, comparando los resultados con soluciones analíticas y evaluando la eficacia del método.
- Explorar la aplicación del método de Simulated Annealing para obtener soluciones numéricas óptimas de la ecuación de Fisher-KPP, destacando su utilidad para encontrar óptimos locales en funciones complejas.

2.3. Antecedentes Investigativos

El Simulated Annealing (SA) ha demostrado ser una herramienta eficaz en la resolución de la ecuación de Fisher-KPP, produciendo soluciones numéricas estables y precisas incluso en presencia de múltiples mínimos locales. Esta técnica ha mostrado una notable capacidad de adaptación en diversas aplicaciones de ingeniería, resaltando la versatilidad de los métodos modernos de simulación y optimización matemática (véase Choi, 2019, Franzke y Kosko, 2019, Nolte y Schrader, 2000, Lockett y Miikkulainen, 2014, Gelfand y Mitter, 1985, Mitra et al., 1986, Wah y Wang, 1999).

Además de su uso en la ecuación de Fisher-KPP, el SA ha encontrado aplicación exitosa en múltiples disciplinas. Por ejemplo, en biología molecular, se ha utilizado para optimizar la conformación de proteínas, y en ingeniería, ha mejorado el diseño estructural y la planificación de rutas. Un caso destacado es la optimización de la planificación de rutas en redes de transporte, demostrando la capacidad del SA para resolver problemas complejos como el del viajante.

Este enfoque híbrido combina las fortalezas del esquema de diferencias finitas con el SA (véase Patidar, 2016) para ofrecer soluciones numéricas más confiables y eficientes para problemas de difusión y reacción. La integración de estas técnicas permite superar las limitaciones de los métodos numéricos convencionales, mejorando la estabilidad y precisión de las soluciones en ecuaciones diferenciales parciales no lineales complejas.

El SA es especialmente notable por su analogía con el comportamiento termodinámico en la búsqueda de mínimos globales. Cada iteración del algoritmo evalúa y compara los valores de la función objetivo entre dos soluciones, aceptando mejoras automáticamente y permitiendo, bajo ciertas condiciones, la aceptación de soluciones no óptimas. Esto facilita la exploración del espacio de soluciones, evitando quedarse atrapado en mínimos locales.

El estudio "Simulated Annealing is a Polynomial-Time Approximation Scheme for the Minimum Spanning Tree Problem", desarrollado por Doerr et al., 2023, ilustra cómo un programa de enfriamiento adecuado puede producir aproximaciones precisas para problemas de optimización combinatoria en tiempo polinomial. Este enfoque metodológico mejora la evaluación de soluciones y permite una exploración más eficaz del espacio de soluciones, lo que resulta en soluciones óptimas superiores a las obtenidas mediante heurísticas de búsqueda local.

Sin embargo, los retos como la dependencia crítica en la selección de parámetros y la complejidad en la configuración del algoritmo subrayan la necesidad de investigación adicional para optimizar la eficacia del SA en diversos escenarios.

El recocido simulado con tasas de enfriamiento adaptativas, como se muestra en el estudio de Mariia Karabin y Steven J. Stuart (véase Karabin y Stuart, 2020), es un avance que permite ajustes más precisos al estado del sistema, mejorando la eficiencia computacional y la calidad de las soluciones en la optimización de estructuras atomísticas.

A pesar de la teoría que respalda al SA, la implementación práctica y la adaptación a diferentes tipos de problemas siguen siendo áreas abiertas para futuras investigaciones,

especialmente para validar y ampliar su aplicabilidad en un espectro más amplio de problemas de optimización (véase: Newman, 1980, 1983).

En el artículo "Simulated Annealing" de Bertsimas y Tsitsiklis (véase Bertsimas y Tsitsiklis, 1993), se explora cómo el SA imita el proceso físico de calentamiento y enfriamiento para resolver problemas de optimización complejos. La capacidad del SA para generar y aceptar soluciones vecinas, incluso subóptimas, a través de un control de temperatura decreciente, le permite explorar efectivamente el espacio de soluciones y escapar de óptimos locales. Esta característica es crucial en la optimización de problemas con múltiples mínimos locales, como se ejemplifica en el estudio del problema del viajante de comercio (TSP), donde el SA ha demostrado ser efectivo en la optimización de rutas.

No obstante, el estudio carece de un análisis empírico detallado, limitando la aplicación de sus hallazgos a contextos más variados y complejos. Esta carencia resalta la necesidad de estudios adicionales que incluyan comparaciones directas con otras técnicas de optimización y estudios de casos reales que demuestren su eficacia y adaptabilidad.

En el campo de la optimización dinámica, el estudio "Dynamic optimization with simulated annealing" de Faber destaca la integración efectiva del SA con modelos dinámicos (véase Faber et al., 2005). Esta aplicación del SA a procesos dinámicos complejos muestra su potencial para manejar variables de proceso y mejorar la eficiencia operativa, un avance significativo en aplicaciones de ingeniería energética y química. Sin embargo, la dependencia en la precisión de los parámetros y la falta de validación experimental en entornos industriales reales son desafíos que limitan la generalización de los resultados.

Finalmente, el estudio "El uso de SA para la selección de características en aprendizaje para clasificar" desarrollado por Haque et al., 2023 muestra cómo el SA se ha adaptado para abordar desafíos específicos en el aprendizaje automático, mejorando significativamente la precisión de los modelos de clasificación. Este enfoque destaca la flexibilidad del SA en la optimización de parámetros y su aplicación en escenarios complejos. No obstante, la alta demanda computacional y la necesidad de configuraciones precisas de parámetros son barreras que requieren atención para optimizar su implementación en aplicaciones más amplias.

El estudio "Aprendizaje Federado con Recocido Simulado" (SAFL) por Nguyen et al., 2021a representa un avance significativo en el uso del SA para mejorar la robustez y eficacia del aprendizaje federado bajo condiciones de distribución de datos no uniforme. Esta innovación permite una mejor adaptación entre modelos globales y locales, mejorando

la precisión y la velocidad de convergencia en comparación con métodos tradicionales. Sin embargo, la dependencia en la configuración de parámetros crítica, como la temperatura inicial y las tasas de enfriamiento, junto con desafíos en escalabilidad y privacidad de datos, marca áreas que requieren atención detallada para optimizar la implementación del SA en aplicaciones de aprendizaje federado.

En paralelo, el artículo “Aprendizaje Federado Gradual con SA” por Nguyen et al., 2021b extiende el uso de SA en la técnica de promedio federado (FedAvg), mostrando cómo la adaptabilidad del SA puede mejorar significativamente la robustez del modelo en las primeras etapas críticas del entrenamiento. Aunque SAFL ha mostrado mejoras notables en la precisión de clasificación, los desafíos relacionados con la configuración de parámetros y la complejidad computacional añadida siguen siendo obstáculos importantes. Estas limitaciones resaltan la necesidad de continuar investigando y desarrollando SAFL para mejorar su aplicabilidad en una gama más amplia de escenarios de aprendizaje federado.

Además, la exploración de la aplicabilidad del SA a problemas tanto discretos como continuos se ha ampliado significativamente. Estudios como los de Johnson y Koulamas han demostrado cómo el SA puede superar técnicas tradicionales en la optimización de problemas discretos, como la partición de grafos y la coloración de grafos (véase Koulamas et al., 1994). Aunque el SA ofrece una herramienta flexible y poderosa, la limitación en la escalabilidad para ciertos tipos de problemas discretos sugiere que se necesita más trabajo para mejorar la eficacia del SA en contextos de optimización más amplios.

En el ámbito del procesamiento de señales, Chen ha adaptado el SA para abordar problemas de optimización no lineales difíciles, destacando la efectividad del algoritmo en aplicaciones como la estimación de canales y el diseño de filtros. A pesar de su eficacia demostrada, los desafíos como la naturaleza multimodal y la necesidad de cálculos de gradientes en aplicaciones específicas sugieren que el SA puede enfrentar dificultades en escenarios con requerimientos computacionales más altos.

La revisión de las metodologías de diferencias finitas también ha resaltado avances importantes en la discretización de ecuaciones diferenciales, con el desarrollo de métodos miméticos y esquemas compactos que ofrecen mejoras en la precisión y la estabilidad. Estos avances son cruciales para abordar problemas complejos en ingeniería y ciencias aplicadas, permitiendo simulaciones numéricas más precisas y eficientes. Sin embargo, la complejidad computacional y los desafíos de implementación a gran escala sugieren que

se necesitan más investigaciones para optimizar estos métodos y ampliar su aplicabilidad.

El Simulated Annealing ha encontrado una valiosa aplicación en el campo del aprendizaje automático, como se destaca en el estudio “El uso de SA para la selección de características en aprendizaje para clasificar” por Haque. Este enfoque innovador utiliza SA para optimizar la selección de características, mejorando significativamente la precisión de los modelos de aprendizaje. La metodología adoptada ajusta dinámicamente la búsqueda basándose en el rendimiento del algoritmo, lo cual es crucial para navegar eficazmente por el espacio de soluciones y optimizar la precisión del modelo final. A pesar de sus avances, el estudio subraya la necesidad de más investigación para abordar la dependencia en la configuración precisa de parámetros y la escalabilidad del método en aplicaciones más extensas.

El SA también se ha aplicado en contextos industriales para optimizar procesos dinámicos, como se ilustra en el estudio “Dynamic optimization with simulated annealing” por Faber et al., 2005. Este trabajo integra el SA con modelos dinámicos en Simulink para optimizar operaciones sin cambios sustanciales en los modelos preexistentes, facilitando su adopción en entornos industriales. Aunque la metodología permite una interacción flexible y la modificación de parámetros en tiempo real, reconocen la importancia crítica de una calibración meticulosa de los parámetros del SA y la limitación de su aplicabilidad a entornos con los recursos técnicos adecuados.

Adicionalmente, el estudio “The Theory and Practice of Simulated Annealing” por Henderson et al., 2006 ofrece una revisión exhaustiva del SA, proporcionando un marco teórico robusto para su aplicación práctica y subrayando cómo el SA puede escapar de los óptimos locales para encontrar soluciones globales óptimas. Sin embargo, el documento señala limitaciones como la falta de exploración de la efectividad del SA bajo diversas programaciones de enfriamiento y la necesidad de más experimentación empírica para demostrar su eficacia en la práctica.

Los avances en los métodos numéricos, como los métodos de diferencias finitas miméticas y los métodos espectrales, también han sido fundamentales para resolver ecuaciones diferenciales complejas como la ecuación de Fisher-KPP (véase Zhan et al., 2016). Estos métodos han permitido superar algunas limitaciones de los enfoques tradicionales mediante la preservación de propiedades matemáticas y físicas fundamentales en la discretización.

Finalmente, en el contexto de la gestión de la producción y operaciones, el SA

ha demostrado ser una herramienta poderosa y flexible, como se refleja en el trabajo de Koulamas (véase Koulamas et al., 1994). Este estudio explora su aplicación en problemas tradicionales de investigación operativa y operaciones, destacando la capacidad del SA para ser ajustado por el usuario en función del número de iteraciones y las funciones de vecindad.

A pesar de estos desarrollos prometedores, el estado del arte revela que aún hay desafíos significativos relacionados con la escalabilidad del SA, la necesidad de configuraciones de parámetros precisas y la falta de validación en entornos más amplios y diversos. Estas áreas de mejora presentan oportunidades valiosas para futuras investigaciones, con el objetivo de optimizar y ampliar la aplicabilidad del SA en una gama más amplia de problemas y escenarios.

El "Aprendizaje Federado con Recocido Simulado" (SAFL) es un ejemplo significativo de cómo el SA puede ser adaptado para mejorar tecnologías emergentes como el aprendizaje federado. Este enfoque innovador mejora la robustez y eficacia de los modelos en las etapas tempranas del entrenamiento, particularmente bajo condiciones de distribución no uniforme de datos. La capacidad de SAFL para adaptar dinámicamente la dependencia entre modelos globales y locales y su éxito en experimentos con conjuntos de datos estándar como MNIST y CIFAR-10 ilustra su potencial. Sin embargo, los desafíos relacionados con la configuración de parámetros críticos y la escalabilidad en redes extensas necesitan más investigación para garantizar su eficacia en una variedad más amplia de aplicaciones prácticas.

Por otro lado, el artículo "Aprendizaje Federado Gradual con SA" expande la aplicación del SA en el aprendizaje federado, destacando cómo la integración de esta técnica puede optimizar la técnica tradicional de promedio federado (FedAvg). Este enfoque no solo mejora la convergencia y precisión de la clasificación sino que también subraya la capacidad del SA para manejar variaciones en la distribución de datos entre dispositivos. A pesar de sus avances, la dependencia en la configuración precisa de parámetros y las tasas de enfriamiento son aspectos que aún requieren atención detallada para optimizar y adaptar el SAFL a escenarios más complejos y extensos.

En el campo de la optimización de problemas discretos, el SA ha sido aplicado exitosamente en problemas como la partición de grafos y la coloración de grafos. Aunque el SA ha mostrado ser superior en ciertos escenarios, especialmente en ejecuciones de largo plazo, también se ha identificado que no ofrece una ventaja clara en problemas

como la partición de números, lo que indica una limitación en la escalabilidad del algoritmo para algunos tipos de problemas discretos.

En términos de aplicaciones industriales y de ingeniería, el SA ha sido adaptado para optimizar procesos dinámicos complejos en entornos que requieren alta precisión y eficiencia. Los estudios han demostrado cómo el SA puede ajustar la temperatura y la tasa de enfriamiento del algoritmo en función de la dinámica del sistema, lo cual es crucial para mejorar significativamente la eficiencia del proceso. Sin embargo, la selección precisa de parámetros y la complejidad de los modelos utilizados plantean limitaciones en la generalización de estos métodos a entornos menos controlados.

El “Simulated Annealing with Adaptive Cooling Rates” ilustra otro avance metodológico en el campo, utilizando la capacidad calorífica del sistema para ajustar las tasas de enfriamiento durante la optimización. Este enfoque permite una exploración más efectiva del espacio de soluciones y mejora la eficiencia computacional, pero enfrenta desafíos en el ajuste preciso de los parámetros y la dependencia de la configuración específica del sistema.

Estos estudios y aplicaciones del SA destacan su versatilidad y potencial para abordar una amplia gama de problemas complejos de optimización. Sin embargo, la necesidad de configuraciones precisas de parámetros, la escalabilidad del método y la validación en entornos prácticos más amplios son desafíos persistentes que requieren atención continua. La exploración de estas áreas no solo podría mejorar la comprensión y la eficacia del SA sino también expandir su aplicabilidad en futuras tecnologías y disciplinas.

El estudio de Bertsimas y Tsitsiklis destaca la capacidad del SA para manejar complejos problemas de optimización mediante la exploración efectiva del espacio de soluciones y la aceptación probabilística de soluciones subóptimas. Este enfoque teórico robusto, aunque limitado en cuanto a análisis empírico, ofrece una base sólida para la implementación práctica del SA en una amplia gama de aplicaciones. Sin embargo, se reconoce la necesidad de más investigación para desarrollar guías prácticas que faciliten su implementación en situaciones reales y complejas, abordando desafíos como la selección de parámetros óptimos y la escalabilidad del método.

El artículo “Dynamic optimization with simulated annealing” de Faber extiende la aplicación del SA a la optimización dinámica, utilizando modelos basados en Simulink para facilitar la integración en entornos industriales sin cambios sustanciales en los modelos preexistentes. Esta adaptabilidad del SA, que permite ajustar la temperatura y la tasa

de enfriamiento según la dinámica del sistema, demuestra su utilidad en aplicaciones de ingeniería energética y química. A pesar de su eficacia, la dependencia en la selección precisa de parámetros y la falta de validación experimental en entornos industriales reales son áreas que necesitan ser abordadas para generalizar su uso.

"The Theory and Practice of Simulated Annealing" por Henderson ofrece un análisis exhaustivo de la teoría y práctica del SA, destacando su aplicación tanto en problemas de optimización discretos como continuos. Aunque el documento es valioso por su síntesis de teorías y estudios previos, las limitaciones en la exploración de la efectividad del SA bajo diversas programaciones de enfriamiento y la falta de experimentación empírica sugieren una oportunidad para futuras investigaciones que incluyan comparaciones directas con otros algoritmos de optimización.

El estudio sobre la selección de características en aprendizaje automático supervisado utilizando SA destaca cómo este método puede ser adaptado a desafíos específicos dentro de campos especializados (véase Haque et al., 2023). Aunque este enfoque mejora la precisión de los modelos predictivos y demuestra ser competitivo frente a otros métodos metaheurísticos, la dependencia del algoritmo en la configuración precisa de parámetros y su alta demanda computacional para grandes conjuntos de datos son obstáculos que subrayan la necesidad de investigaciones adicionales para optimizar su eficacia y eficiencia en aplicaciones más extensas.

Finalmente, el "Aprendizaje Federado con Recocido Simulado" representa un avance en la aplicación del SA al aprendizaje federado, demostrando cómo la técnica puede mejorar la robustez y eficacia de los modelos en entornos de distribución no uniforme de datos. Mientras que SAFL ha mostrado mejoras notables en la precisión y velocidad de convergencia, los desafíos relacionados con la configuración de parámetros y la escalabilidad a redes extensas y heterogéneas necesitan ser evaluados cuidadosamente para asegurar que este enfoque pueda ser adaptado y optimizado para una gama más amplia de aplicaciones.

Estas áreas de investigación no solo podrían mejorar la comprensión y la aplicación del SA en problemas de optimización complejos sino también contribuir al desarrollo de tecnologías emergentes, enfrentando los desafíos de modelado y simulación en diversas disciplinas científicas y técnicas.

Continuando con la exploración del uso del Simulated Annealing (SA) en diversas aplicaciones, el enfoque se desplaza ahora hacia el artículo titulado "Aprendizaje Federado

Gradual con SA", que introduce una innovación significativa en el aprendizaje federado. Este estudio, al integrar el SA con la técnica de promedio federado (FedAvg), aborda limitaciones críticas al permitir que los dispositivos mantengan modelos locales cuando el modelo global aún no está suficientemente maduro. Esta adaptabilidad mejora la robustez del modelo en las primeras etapas del entrenamiento y demuestra la eficacia del SA en la optimización de sistemas de aprendizaje distribuidos.

A pesar de las mejoras en la precisión y la velocidad de convergencia, SAFL enfrenta desafíos significativos, como la necesidad de una configuración precisa de parámetros y la complejidad computacional, que pueden limitar su aplicación en dispositivos con recursos limitados o en entornos que requieren respuestas en tiempo real. Además, su escalabilidad y efectividad en redes heterogéneas y su adaptación a diversos tipos de datos y tareas de aprendizaje son aspectos críticos que requieren más investigación.

La gestión de la privacidad y seguridad de los datos, así como la robustez frente a datos corruptos o anómalos, son también áreas que necesitan evaluación detallada para asegurar que SAFL no introduzca nuevas vulnerabilidades en los sistemas de aprendizaje federado. Estas consideraciones destacan la necesidad de continuar investigando y desarrollando esta técnica para mejorar su robustez y aplicabilidad en una gama más amplia de escenarios.

Finalmente, se analiza la aplicabilidad del SA a problemas tanto discretos como continuos a través de ejemplos significativos. En el campo de la optimización de problemas discretos, el SA ha sido aplicado a desafíos como la partición de grafos y la coloración de grafos, demostrando su capacidad para superar técnicas tradicionales, especialmente en ejecuciones de largo plazo. Sin embargo, se observa que el SA puede no mostrar una ventaja clara sobre técnicas tradicionales en problemas más sencillos, lo que sugiere limitaciones en su escalabilidad.

En la gestión de producción y operaciones, el SA ha sido utilizado en una variedad de problemas tradicionales y complejos, ofreciendo flexibilidad y poder para resolver desafíos de optimización mediante la ajustabilidad del número de iteraciones y las funciones de vecindad. Además, en el campo del procesamiento de señales, el SA ha demostrado ser efectivo en aplicaciones como la estimación de canales y el diseño de filtros, aunque se requiere atención a los desafíos como la naturaleza multimodal de los problemas y la necesidad de cálculos de gradientes (véase Chen y Luk, 1999).

En cuanto a la optimización de funciones continuas, el SA ha sido aplicado utilizan-

do enfoques que imitan el proceso de recocido físico y resolviendo ecuaciones diferenciales estocásticas para encontrar mínimos globales. A pesar de la base teórica sólida de estos enfoques, los desafíos prácticos en términos de implementación y eficiencia computacional comparativa son áreas que necesitan atención continua, esto lo puede encontrar en Gemen y Hwang, 1986 y Dekkers y Aarts, 1991.

Este análisis amplio del SA en una variedad de contextos subraya su versatilidad y potencial para abordar desafíos complejos de optimización, mientras que también destaca áreas para futuras investigaciones que podrían mejorar la comprensión y aplicación de esta técnica en un espectro aún más amplio de aplicaciones prácticas y teóricas.

Siguiendo con la exploración del Simulated Annealing (SA) en el contexto del aprendizaje federado, es relevante destacar cómo este enfoque puede ser adaptado y optimizado para mejorar su aplicabilidad en una variedad de escenarios y aplicaciones. Esta adaptabilidad es esencial, dado que las aplicaciones de SA en el aprendizaje federado enfrentan desafíos como la configuración de parámetros y la escalabilidad.

Además, la implementación práctica de SA ha demostrado ser efectiva en mejorar tanto la velocidad de convergencia como la precisión en la clasificación, especialmente en escenarios con distribución de datos no idéntica entre dispositivos, como se ha observado en los experimentos con conjuntos de datos estándar como MNIST y CIFAR-10 (véase Nguyen et al., 2021a). Sin embargo, los desafíos relacionados con la complejidad computacional y la necesidad de respuestas rápidas en aplicaciones en tiempo real siguen siendo áreas críticas para futuras investigaciones.

La gestión de la privacidad y la seguridad de los datos, junto con la robustez frente a datos corruptos o anómalos, son también aspectos críticos que requieren evaluaciones cuidadosas para asegurar que la implementación de SA en el aprendizaje federado no introduzca nuevas vulnerabilidades.

En cuanto a la aplicabilidad del SA a problemas discretos y continuos, este ha sido aplicado con éxito a una variedad de problemas de optimización. Por ejemplo, en el campo de la gestión de producción y operaciones, el SA ha resuelto desafíos complejos como la programación de máquinas únicas y problemas más complejos como el problema del vendedor viajero (TSP), demostrando su capacidad para ajustarse a la topología específica del problema y optimizar las rutas (véase Koulamas et al., 1994).

En el campo del procesamiento de señales, el SA ha sido utilizado para abordar problemas de optimización no lineales difíciles, como la estimación conjunta de canales y

datos y el diseño de filtros de respuesta impulsiva infinita. Aunque eficaz, este enfoque requiere una cuidadosa consideración de los desafíos como la naturaleza multimodal de los problemas y la necesidad de cálculos de gradientes.

Por último, en la optimización de funciones continuas, el SA se ha aplicado utilizando enfoques que imitan el proceso de recocido físico y aquellos que utilizan ecuaciones de Langevin para resolver ecuaciones diferenciales estocásticas, buscando mínimos globales. Estos métodos ofrecen una sólida base teórica y son prometedores para superar desafíos prácticos en términos de implementación y eficiencia computacional comparativa.

Este análisis profundo de las aplicaciones de SA subraya su potencial para manejar una amplia gama de desafíos de optimización en diferentes campos, proporcionando una base sólida para futuras investigaciones que busquen expandir y optimizar su uso en una variedad aún más amplia de aplicaciones prácticas y teóricas. La continua investigación y desarrollo en la implementación y adaptación del SA son cruciales para maximizar su eficacia y eficiencia en resolver problemas complejos en diversos contextos.

Adicionalmente, es esencial reconocer la importancia de las Técnicas Implícitas Numéricas en la solución de la ecuación de Fisher-KPP, una PDE no lineal de segundo orden. Estos métodos, basados en esquemas de diferencias finitas semi-implícitos, son notables por su estabilidad incondicional y la capacidad de producir resultados satisfactorios en diferentes condiciones del coeficiente de difusión. Este enfoque numérico facilita la resolución de problemas complejos donde la dinámica espacio-temporal desempeña un papel crucial.

La Dinámica Espacio-Temporal se ha expandido mediante el análisis de una ecuación de Fisher-KPP generalizada con funciones de crecimiento dependientes del tiempo y del espacio. Este avance metodológico permite extender y mejorar los resultados principales mediante nuevos métodos relacionados con el semigrupo y estimaciones sutiles, subrayando la versatilidad y la profundidad del análisis en problemas dinámicos complejos.

Los desafíos en la resolución de la ecuación Fisher-KPP, aunque significativos, ofrecen oportunidades valiosas para el avance de los métodos numéricos. La No Linealidad de la ecuación, que complica la estabilidad y la convergencia de los métodos numéricos tradicionales, puede ser manejada eficazmente mediante métodos implícitos que permiten pasos de tiempo más grandes sin sacrificar la precisión. La Formación de Frentes de Onda, una característica notable de la ecuación, requiere métodos que puedan capturar estos

dinámicos cambios con alta fidelidad, lo cual es esencial para aplicaciones en biología y ecología donde estos fenómenos son críticos.

Las Condiciones de Borde también juegan un papel crucial, ya que su incorrecta implementación puede conducir a resultados erróneos (véase Felippa y Park, 1997). Los Métodos de Volumen Finito, que conservan propiedades físicas como la masa, se destacan en este aspecto, proporcionando soluciones que respetan las leyes de conservación física, lo que es particularmente útil en problemas de flujo y transporte.

Finalmente, la Eficiencia Computacional sigue siendo un reto importante, especialmente en problemas multidimensionales que requieren una alta resolución tanto espacial como temporal. Los Métodos de Elementos Finitos y los Métodos Espectrales, conocidos por su capacidad para adaptarse a las características locales de la solución y proporcionar una alta precisión, respectivamente, son cruciales en este aspecto. Sin embargo, es fundamental abordar los desafíos de implementación y escalabilidad para maximizar su utilidad práctica.

Este amplio examen de los métodos numéricos para resolver la ecuación Fisher-KPP no solo subraya las capacidades actuales sino que también establece un camino claro para futuras investigaciones destinadas a superar los desafíos existentes y expandir las aplicaciones de estos métodos en ciencia e ingeniería. La elección de la técnica más adecuada será siempre dependiente de las características específicas del problema a tratar, incluyendo la geometría del dominio, las condiciones iniciales y de borde, y la precisión deseada, entre otros factores críticos.

Este estado del arte ha demostrado que, aunque existen múltiples desafíos en la resolución de la ecuación Fisher-KPP, los avances continuos en la computación y en los algoritmos numéricos están ampliando las fronteras de lo que es posible en términos de soluciones aproximadas. Los métodos discutidos abarcan desde técnicas numéricas implícitas hasta enfoques más modernos que integran el Simulated Annealing para explorar el espacio de soluciones de manera más eficiente y superar obstáculos asociados con mínimos locales y la complejidad de las condiciones de contorno.

El Simulated Annealing (SA), en particular, ha mostrado una notable adaptabilidad y eficacia en una amplia gama de aplicaciones, desde problemas de optimización estructural hasta desafíos en biología molecular y aprendizaje automático. La capacidad del SA para adaptarse a las condiciones del problema y su habilidad para manejar múltiples mínimos locales lo hacen ideal para problemas donde los métodos tradicionales podrían fallar o

ser ineficientes.

El enfoque de SAFL, por ejemplo, ilustra cómo el SA se puede adaptar para mejorar el aprendizaje federado, permitiendo una mayor robustez y eficacia en las etapas tempranas del entrenamiento. Este tipo de innovación abre nuevas avenidas para la aplicación del SA en campos emergentes y muestra la necesidad continua de investigación para optimizar y adaptar esta y otras técnicas numéricas para satisfacer las demandas de los problemas modernos.

La selección y optimización de parámetros, especialmente en técnicas como el SA, siguen siendo áreas críticas de investigación. La capacidad de ajustar estos parámetros de manera efectiva es crucial para la implementación exitosa de cualquier método numérico. En este sentido, estudios adicionales son necesarios para establecer guías más robustas y detalladas que faciliten la elección y ajuste de estos parámetros en prácticas de optimización reales.

Finalmente, mientras que las técnicas actuales ofrecen soluciones prometedoras, la integración de enfoques de modelado más avanzados y el desarrollo de algoritmos más eficientes son esenciales para avanzar en la resolución de la ecuación Fisher-KPP y problemas similares. La colaboración interdisciplinaria y la innovación continua serán fundamentales para superar los límites de lo que estas tecnologías pueden lograr, asegurando que los avances en la teoría y en la práctica del modelado numérico continúen aportando soluciones efectivas a los desafíos de la ciencia y la ingeniería.

En conclusión, el desarrollo y la mejora de los métodos numéricos para resolver la ecuación Fisher-KPP y otras ecuaciones diferenciales parciales similares representan un campo vibrante de investigación. Las técnicas discutidas, desde métodos de diferencias finitas hasta enfoques innovadores como el Simulated Annealing, reflejan la diversidad de herramientas disponibles para abordar estos complejos problemas matemáticos.

El estado actual de la investigación sugiere una creciente convergencia entre métodos tradicionales y técnicas modernas de optimización, donde cada enfoque aporta fortalezas únicas que pueden ser explotadas dependiendo de las especificidades del problema. Los avances en el tratamiento de la no linealidad, la gestión de las condiciones de borde, y la eficiencia computacional son ejemplos claros de cómo la innovación continua está empujando las fronteras del conocimiento y la capacidad técnica.

Además, el papel del Simulated Annealing en la expansión de las capacidades de resolución de problemas complejos es especialmente notable. Su aplicación en campos

tan diversos como la ingeniería estructural, la biología molecular, y el aprendizaje federado demuestra su versatilidad y la capacidad para adaptarse a desafíos multidisciplinarios. Sin embargo, la necesidad de ajustes precisos en la configuración de parámetros y la gestión de la eficiencia computacional sugiere que hay un considerable espacio para la mejora y la innovación (véase Nguyen et al., 2021b).

Mirando hacia el futuro, se anticipa que la integración de técnicas de aprendizaje automático y métodos numéricos avanzados jugará un papel crucial en la superación de los obstáculos existentes en la simulación numérica. Esta sinergia no solo podría mejorar la precisión de las soluciones, sino también reducir los tiempos de cálculo y ampliar la aplicabilidad de los métodos numéricos a problemas aún más complejos.

A medida que avanzamos en la exploración de métodos numéricos y técnicas de optimización, es crucial mantener una visión integral que no solo abarque los avances técnicos sino también considere las implicaciones prácticas y teóricas de estos desarrollos. El equilibrio entre la profundidad teórica y la aplicabilidad práctica define el éxito de cualquier enfoque en el campo de la simulación numérica y la optimización.

La investigación futura debería centrarse en la intersección de diferentes disciplinas, aprovechando los conocimientos de la ingeniería, matemáticas, ciencias de la computación, y física para formular soluciones que sean tanto innovadoras como eficientes. Por ejemplo, la combinación de técnicas de aprendizaje profundo con métodos tradicionales podría ofrecer nuevas vías para abordar la no linealidad y las dinámicas complejas de las ecuaciones diferenciales parciales.

Además, la creciente disponibilidad de recursos computacionales de alto rendimiento ofrece una oportunidad para implementar y probar algoritmos que anteriormente eran demasiado exigentes en términos de tiempo y capacidad de procesamiento. Esto podría llevar a descubrimientos significativos en cómo manejamos los problemas de optimización y simulación a gran escala.

En términos de aplicaciones específicas, el campo de la biología sintética y la medicina personalizada son áreas prometedoras para la aplicación de técnicas avanzadas de simulación numérica. Estos campos requieren un alto grado de precisión y adaptabilidad en los modelos utilizados, características que los métodos numéricos avanzados y el Simulated Annealing están bien posicionados para proporcionar.

Por último, el desarrollo continuo de estándares y protocolos para la evaluación y comparación de métodos numéricos asegurará que los avances en este campo pue-

dan ser evaluados de manera justa y eficaz. Establecer benchmarks claros y realizar estudios comparativos exhaustivos son pasos esenciales para fomentar un entorno de investigación que no solo promueva la innovación sino que también garantice la fiabilidad y reproducibilidad de los resultados.

Así, el camino hacia el futuro de la investigación en métodos numéricos y técnicas de optimización es tan desafiante como emocionante, con un potencial ilimitado para impactar positivamente en numerosas áreas de la ciencia y la tecnología. La colaboración, innovación y rigurosidad serán las claves para desbloquear este potencial y llevar estas disciplinas a nuevas fronteras de conocimiento y aplicación.

Este viaje a través de los métodos numéricos y la optimización revela la interdependencia y la necesidad de enfoques interdisciplinarios en la resolución de problemas complejos. La integración de conocimientos de diversas áreas no solo mejora la comprensión de los desafíos subyacentes sino que también facilita el desarrollo de soluciones más efectivas y eficientes.

La implementación de técnicas como el Simulated Annealing en combinación con métodos numéricos avanzados debe continuar explorándose en mayor profundidad, particularmente en cómo estas técnicas pueden ser optimizadas para aplicaciones específicas que van desde la física computacional hasta la optimización industrial. La adaptabilidad y eficacia de estas técnicas deben evaluarse en diferentes escenarios para asegurar su aplicabilidad y eficiencia en entornos variados.

La educación y la formación en métodos numéricos y técnicas de optimización también deben recibir una atención renovada. Preparar a la próxima generación de científicos e ingenieros con una sólida comprensión de estos métodos es crucial para el progreso futuro en muchas disciplinas científicas y tecnológicas. Los programas educativos deben enfocarse no solo en la teoría sino también en la aplicación práctica de estas técnicas, incluyendo el uso de software y herramientas computacionales avanzadas.

En el contexto más amplio de la investigación científica y tecnológica, los métodos numéricos y la optimización juegan un papel fundamental en el modelado y simulación de sistemas complejos. Estos métodos actúan como puentes entre la teoría pura y las aplicaciones prácticas, permitiendo a los investigadores y profesionales no solo entender mejor sino también manipular y mejorar sistemas en el mundo real.

Finalmente, la colaboración internacional y multidisciplinaria será esencial para superar los desafíos más difíciles que enfrentan los métodos numéricos y la optimización.

La combinación de diferentes perspectivas y experticias puede llevar a innovaciones que un solo campo o enfoque podría no lograr. Establecer redes de colaboración y fomentar el intercambio de ideas a través de conferencias, publicaciones y proyectos conjuntos puede acelerar significativamente el desarrollo de nuevas y mejores técnicas de simulación y optimización.

Continuando con la exploración de los desafíos y oportunidades en los métodos numéricos y la optimización, es crucial abordar la importancia de la verificación y validación de modelos numéricos. A medida que estos métodos se vuelven más complejos y se aplican a sistemas más sofisticados, la necesidad de asegurar su precisión y confiabilidad se vuelve más crítica. La implementación de rigurosos protocolos de validación puede ayudar a asegurar que los modelos numéricos proporcionen resultados fiables que puedan ser utilizados con confianza en la toma de decisiones científicas y técnicas (véase Martínez-Alfaro, 2010).

La investigación futura debería también concentrarse en mejorar la eficiencia computacional de los métodos numéricos. Con el rápido crecimiento en la disponibilidad de datos y el tamaño de los problemas a resolver, los métodos numéricos deben ser capaces de escalar eficientemente. El uso de computación de alto rendimiento, técnicas de reducción de dimensionalidad y algoritmos paralelos son áreas que prometen mejoras significativas en la velocidad y la capacidad de manejo de grandes conjuntos de datos y problemas complejos (véase Manthey y Rhijn, 2022, Meise, 1998, Tran, 1992, Kolonko, 1995, Connors y Kumar, 1987, Gidas, 1986).

Además, la incorporación de inteligencia artificial y aprendizaje automático en los métodos numéricos ofrece un campo fértil para la innovación. Estas tecnologías pueden ser utilizadas para optimizar los algoritmos de simulación y optimización, seleccionando dinámicamente los métodos más adecuados y ajustando los parámetros en tiempo real para mejorar el rendimiento y la precisión. La investigación en este ámbito puede llevar a la creación de sistemas auto-optimizadores que podrían revolucionar la forma en que se abordan los problemas numéricos y de optimización.

La ética y la transparencia también deben ser consideradas en el desarrollo y aplicación de métodos numéricos avanzados, especialmente cuando estos métodos se utilizan en contextos que afectan la vida humana, como en la medicina, la seguridad y el medio ambiente. Asegurar que estos métodos sean justos, transparentes y responsables es esencial para mantener la confianza pública y la integridad científica.

Finalmente, fomentar una comunidad inclusiva y diversa en el campo de la simulación numérica y la optimización es vital. Alentar la participación de investigadores de diversas disciplinas y antecedentes puede enriquecer la investigación y llevar a soluciones más innovadoras y efectivas. Los programas de mentoría, las becas y las iniciativas de divulgación pueden jugar un papel crucial en la construcción de una comunidad vibrante y diversa.

En el contexto de la evolución continua en la aplicación del Simulated Annealing (SA) y otros métodos de optimización, es esencial reconocer y explorar las oportunidades emergentes y los retos persistentes. Uno de los aspectos más críticos para avanzar en este campo es la interacción entre la teoría y la práctica. A menudo, los avances teóricos en algoritmos de optimización superan su implementación y aplicación práctica, lo que lleva a un desajuste entre lo que es posible en teoría y lo que se realiza en la práctica.

La colaboración entre académicos, ingenieros de software, y profesionales de la industria puede facilitar la transferencia de conocimientos y tecnologías innovadoras desde la investigación hasta aplicaciones reales. Estas colaboraciones también pueden ayudar a identificar nuevas áreas de aplicación para el SA y otros métodos, como en la gestión de sistemas de energía, optimización de redes de telecomunicaciones, y diseño de sistemas complejos en la aeroespacial y automotriz, donde los requisitos de optimización son intensivos y críticos.

Además, la educación y la formación en métodos de optimización avanzados deben mantenerse al día con los desarrollos teóricos y computacionales. Los currículos universitarios, los talleres profesionales, y los recursos en línea deben evolucionar continuamente para enseñar no solo los fundamentos del SA y técnicas relacionadas, sino también cómo se pueden aplicar estas herramientas en contextos multidisciplinarios y con tecnologías emergentes como la computación en la nube y el big data.

Otro reto significativo es la necesidad de estándares de evaluación y comparación rigurosos y transparentes. En el mundo de la optimización, los benchmarks claros y uniformes son esenciales para evaluar objetivamente el desempeño de diferentes algoritmos y configuraciones. La comunidad debe trabajar hacia la creación de repositorios de datos accesibles y conjuntos de problemas estándar que permitan una evaluación justa y significativa de los algoritmos de optimización en diversas condiciones.

Finalmente, los desafíos éticos y de seguridad en la implementación de algoritmos de optimización también deben ser abordados, especialmente cuando estos métodos se

aplican en sectores sensibles como la salud, la seguridad nacional y la infraestructura crítica. Las implicaciones de decisiones basadas en algoritmos, la privacidad de los datos, y la seguridad contra manipulaciones maliciosas son aspectos que necesitan un escrutinio y regulaciones cuidadosas.

CAPÍTULO 3

JUSTIFICACIÓN, ALCANCES Y LIMITACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN

3.1. Justificación

La justificación del problema abordado en este trabajo se centra en la complejidad y los desafíos que surgen al modelar y optimizar sistemas que son tanto dinámicos como altamente no lineales, típicos en las reacciones de combustión y otras reacciones químicas. Estos sistemas son difíciles de analizar y optimizar mediante métodos convencionales debido a su inherente dinamismo y no linealidad, lo que requiere el desarrollo de modelos matemáticos avanzados capaces de capturar con precisión su comportamiento.

La ecuación de Fisher-Kolmogorov-Petrovsky-Piskunov, o ecuación Fisher-KPP, es destacada en este contexto como una herramienta matemática fundamental. Esta ecuación diferencial parcial no lineal es crucial para modelar la propagación de frentes de onda en medios reactivos, lo que es esencial para comprender y optimizar procesos involucrados en la combustión y otras reacciones químicas. La capacidad de la ecuación Fisher-KPP para describir fenómenos de difusión y reacción subraya su importancia para estos estudios.

Dado que la naturaleza no lineal de la ecuación Fisher-KPP complica la obtención de soluciones analíticas, las soluciones numéricas se presentan a menudo como la única alternativa viable. Sin embargo, los enfoques numéricos tradicionales, como las diferencias finitas y los métodos de elementos finitos, a pesar de ser útiles, encuentran limitaciones significativas al ser aplicados a sistemas que exhiben fuertes dinámicas y no linealidades.

Frente a estos retos, surge la necesidad de explorar nuevas metodologías que puedan manejar de manera más efectiva la no linealidad y la dinámica de estos sistemas. En este trabajo, se introduce el uso del método de Simulated Annealing como una nueva aproximación para superar las dificultades asociadas con el modelado y la optimización de sistemas complejos. Esta técnica, inspirada en el proceso metalúrgico del recocido,

promete una exploración más eficiente del espacio de soluciones y es adecuada para adaptarse a fluctuaciones en la demanda de energía y otros parámetros dinámicos.

Este estudio busca avanzar en la comprensión de fenómenos físicos complejos mediante la ecuación Fisher-KPP y contribuir a la optimización de procesos de combustión y reacciones químicas. Este avance no solo es crucial para mejorar la eficiencia energética y la sostenibilidad de las aplicaciones prácticas, sino que también juega un papel vital en la reducción del impacto ambiental asociado con las industrias químicas y de procesos.

3.2. Alcance

El alcance de la investigación se centra en profundizar en el análisis y la optimización de procesos de combustión y reacciones químicas a través del uso y mejora de la ecuación de Fisher-Kolmogorov-Petrovsky-Piskunov (Fisher-KPP). Este estudio propone evaluar y ampliar la aplicación de esta ecuación diferencial parcial en contextos que tradicionalmente han sido desafiantes debido a la complejidad y no linealidad inherente de los sistemas involucrados. Se explora especialmente el desarrollo y la implementación de metodologías numéricas avanzadas, como el método de Simulated Annealing, para superar las limitaciones de los enfoques tradicionales en la solución de la ecuación Fisher-KPP.

El trabajo se propone implementar y evaluar estas técnicas avanzadas para determinar su eficacia en la modelización precisa de frentes de onda y otros fenómenos dinámicos que son críticos para la comprensión de la combustión y las reacciones químicas. Además, se investigará cómo estas técnicas pueden contribuir a la mejora de la eficiencia y sostenibilidad de los sistemas energéticos al permitir una optimización más efectiva de los procesos.

Se espera que el estudio brinde insights significativos sobre la dinámica de los sistemas modelados y ofrezca estrategias viables para el manejo y control de reacciones en situaciones reales, elevando así la capacidad predictiva y operativa en el ámbito de la ingeniería química y energética. Este enfoque integrado entre teoría matemática avanzada y aplicaciones prácticas tiene como objetivo no solo abordar preguntas teóricas fundamentales sino también resolver problemas específicos relacionados con la eficiencia energética y la reducción del impacto ambiental.

3.3. Limitación de la Investigación

La investigación, aunque exhaustiva y ambiciosa en su alcance, enfrenta varias limitaciones inherentes que deben reconocerse. Principalmente, la complejidad de los sistemas modelados y la naturaleza altamente no lineal de la ecuación de Fisher-Kolmogorov-Petrovsky-Piskunov (Fisher-KPP) introducen desafíos significativos en la precisión de las soluciones numéricas y la interpretación de los resultados. Dado que los modelos dependen críticamente de la exactitud de los parámetros de entrada, cualquier inexactitud en los datos o en las estimaciones de los parámetros puede llevar a predicciones erróneas o no óptimas.

Además, aunque el método de Simulated Annealing promete mejorar la exploración del espacio de soluciones y superar las limitaciones de los métodos numéricos tradicionales, su rendimiento puede ser altamente dependiente de la configuración del algoritmo y de las condiciones específicas bajo las cuales se aplica. Esta dependencia puede limitar la generalización de los resultados obtenidos a otros sistemas o condiciones que no se ajusten estrictamente a los parámetros de la investigación original.

Otra limitación es la necesidad de recursos computacionales intensivos, especialmente al tratar con simulaciones a gran escala o con una alta resolución espacial y temporal. Esto puede hacer que la aplicación de estos métodos en entornos con capacidad de cómputo limitada sea impracticable.

Finalmente, la aplicabilidad de los resultados está circunscrita a las condiciones bajo las cuales se validan los modelos. Las variaciones en las condiciones ambientales o en las propiedades materiales que no estén contempladas en el modelo pueden afectar significativamente la precisión y la relevancia de las predicciones. Aunque este estudio apunta a contribuir sustancialmente al conocimiento y la optimización de los procesos de combustión y las reacciones químicas, estas limitaciones deben ser consideradas al interpretar y aplicar los hallazgos de la investigación.

CAPÍTULO 4

ALGORITMO DE SIMULATED ANNEALING

4.1. Simulated Annealing Básico

De acuerdo con la termodinámica estadística, la probabilidad de que un sistema físico se encuentre en el estado con energía a la temperatura satisface la distribución de Boltzmann:

$$P_i = \frac{e^{-\frac{E_i}{kT}}}{Z},$$

donde k es la constante de Boltzmann, T es la temperatura absoluta, y Z es una constante de normalización definida por la suma de todos los estados con energía a la temperatura :

$$Z = \sum_i e^{-\frac{E_i}{kT}}.$$

Para temperaturas altas, la distribución de Boltzmann muestra una preferencia uniforme por todos los estados, independientemente de su energía. A medida que se aproxima a cero, solo los estados con energía mínima tienen una probabilidad de ocurrencia distinta de cero.

La distribución de Boltzmann es fundamental en la termodinámica estadística, donde describe cómo se distribuyen las partículas en varios estados de energía en equilibrio térmico. Esta distribución no solo ayuda a entender sistemas físicos en equilibrio, sino que también inspira el proceso de Simulated Annealing al permitir movimientos que aumentan temporalmente la energía para escapar de mínimos locales. Este enfoque es especialmente útil en problemas de optimización donde la búsqueda de un óptimo global puede ser complicada debido a la presencia de múltiples óptimos locales.

En el algoritmo de Simulated Annealing, la constante k se omite. Para temperaturas altas, el sistema ignora pequeñas variaciones en la energía y alcanza el equilibrio térmico

rápidamente, es decir, realiza una exploración global del espacio de estados y encuentra un mínimo. A medida que se reduce T , el sistema responde a pequeñas variaciones en la energía y realiza una búsqueda detallada en la vecindad del mínimo ya determinado para encontrar un mínimo mejor. En $T = 0$, cualquier cambio en los estados del sistema no conduce a un aumento en la energía y, por lo tanto, el sistema debe alcanzar el equilibrio si $T = 0$.

Al realizar el Simulated Annealing, teóricamente, existe una alta probabilidad de alcanzar un mínimo global. El ruido térmico artificial disminuye gradualmente con el tiempo. T es un parámetro de control denominado temperatura computacional, que controla la magnitud de las perturbaciones en la función de energía E . La probabilidad de un cambio de estado de s a s' está determinada por la distribución de Boltzmann de la diferencia de energía entre los dos estados:

$$P = \min\left(1, \frac{e^{-\Delta E}}{T}\right),$$

donde $\Delta E = E(s') - E(s)$.

El Simulated Annealing permite movimientos ascendentes de manera controlada: intenta mejorar la búsqueda local, ocasionalmente tomando un riesgo y aceptando una solución peor. La implementación del Simulated Annealing se puede realizar siguiendo el Algoritmo 1, (véase Kirkpatrick et al., 1983).

El procedimiento básico del SA es conocido como recocido de Boltzmann. La secuencia de enfriamiento es fundamental para la eficiencia del SA. Si T se reduce demasiado rápidamente, la convergencia puede ocurrir prematuramente, llevando a un mínimo local. En contraste, si es demasiado lenta, el algoritmo converge muy lentamente. Basado en un análisis de la cadena de Markov en el proceso de SA, Geman y Geman Geman y Geman, 1984 demostraron que una condición necesaria y suficiente simple en la secuencia de enfriamiento para que sea probable que el algoritmo converja hacia el conjunto de estados de mínimo global es que T debe disminuir de acuerdo con:

$$T_k \geq \frac{c}{\ln(1 + k)}, \quad k = 1, 2,$$

donde T_0 es una temperatura inicial suficientemente alta. Dado un número suficientemente grande de iteraciones a cada temperatura, se ha demostrado que el SA converge casi con seguridad al óptimo global Hajek, 1988. Para asegurar que el algoritmo

Algoritmo 1 Algoritmo SA básico

```
Elegir  $s_0, \dots, s_{n-1}$ , donde  $s_i$  y  $i \in \{1, \dots, n\}$ 
aleatorio, siguiendo una distribución arbitraria que incluye el dominio de la
solución.
 $t \leftarrow 0$ 
mientras  $s_t$  hacer
     $i \leftarrow 1$ 
    para  $i = 1$  hasta  $n$  hacer
         $s_i \leftarrow s_i$  aplicamos una perturbación aleatoria
        evaluamos la variación de energía generada por la perturbación
         $\Delta E_i = E(s_i) - E(s_{i-1})$ 
        si  $\Delta E_i \leq 0$  entonces
            aceptamos el nuevo estado
        si no
            aceptamos el nuevo estado con probabilidad  $\exp(-\Delta E_i / T)$ 
        fin si
    fin para
     $t \leftarrow t + 1$ 
fin mientras
retornar  $(s_t, E(s_t))$  estado con menor energía
```

de recocido de Boltzmann converja al mínimo global, T necesita disminuir de manera logarítmica con el tiempo.

4.2. Funciones para optimización vía SA

La mayor ventaja del SA es que no se limita a los óptimos locales, buscando óptimos globales. Esto hace que funcione muy bien en la optimización de funciones no convexas. Además, la naturaleza de saltos en el conjunto de restricciones hace que sea aplicable a problemas de optimización combinatoria.

Presentaremos algunas funciones candidatas donde el SA tendría un excelente desempeño en contraste con otros métodos más convencionales de optimización, debido a que las funciones tienen muchos mínimos locales. En el primer caso, presentamos el camino que el SA recorre en la búsqueda del mínimo global.

4.2.1. Función Easom

La función Easom se define como:

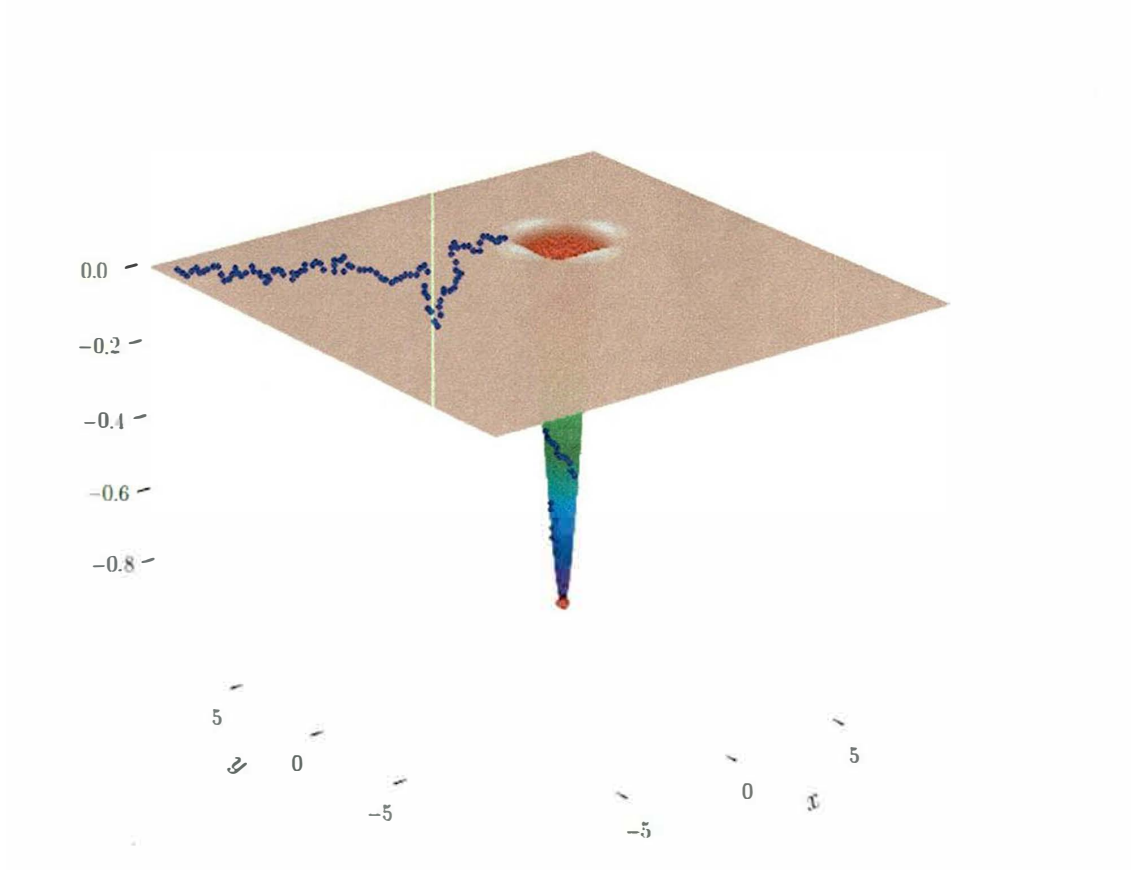
$$f(x, y) = \cos(x) \cos(y)^2 \sin(x)^2.$$

Esta función tiene varios mínimos locales y es unimodal. El mínimo global tiene una pequeña área relativa al dominio de la función, generalmente se evalúa en el cuadrado $[-100, 100]$ y tiene un mínimo global de 1 en $(0, 0)$, es decir, $f(0, 0) = 1$. La línea azul en la Figura 1 muestra el camino recorrido por el SA en la búsqueda del mínimo global.

Consideremos una implementación práctica del SA para la función Easom. Inicializamos una temperatura alta para permitir grandes perturbaciones, facilitando una exploración global. A medida que la temperatura disminuye, las perturbaciones se reducen, permitiendo una búsqueda más fina alrededor de los mínimos locales. Este proceso iterativo eventualmente converge hacia el mínimo global, demostrando la capacidad de SA para manejar funciones con múltiples mínimos locales y encontrar la solución óptima.

FIGURA N° 1

$f(x, y) = \cos(x) \cos(y)^2 \sin(x)^2$. La función Easom tiene varios mínimos locales. Es unimodal y el mínimo global tiene una pequeña área relativa al dominio de la función, generalmente se evalúa en el cuadrado $[-100, 100]$ y tiene un mínimo global de 1 en $(0, 0)$, es decir, $f(0, 0) = 1$. La línea azul es el camino recorrido por el SA en la búsqueda del mínimo global.



4.2.2. Función Rastrigin

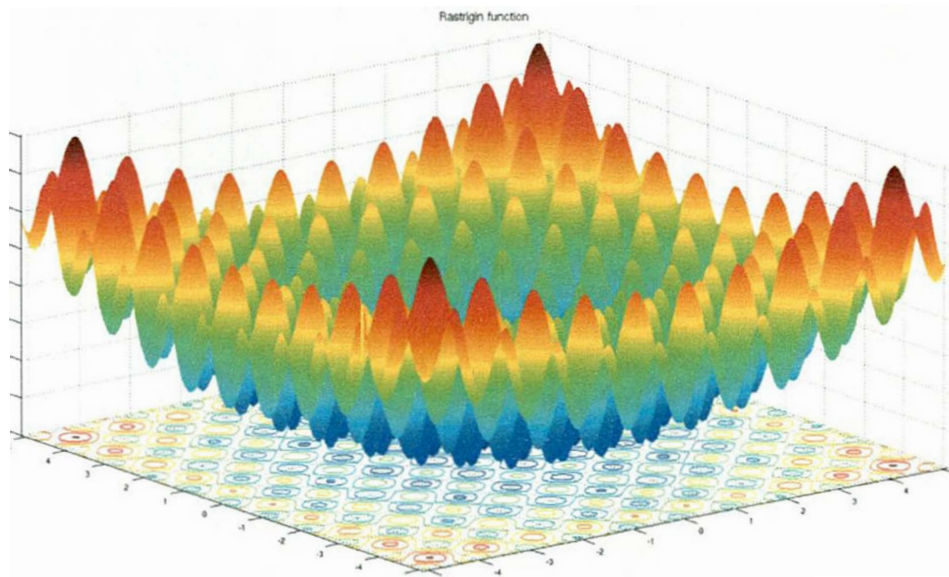
La función Rastrigin se define como:

$$f(\mathbf{x}) = 10 + \sum_{i=1}^n [20 - 10 \cos(2\pi x_i)].$$

Esta función tiene varios mínimos locales y es altamente multimodal, pero los lugares de los mínimos están distribuidos regularmente. Generalmente se evalúa en el hipercubo $[-5, 12, 5, 12]$ para todo $i = 1, \dots, n$. La función tiene un mínimo global de 0 en cero, es decir, $f(\mathbf{x}) = 0$ para $\mathbf{x} = (0, \dots, 0)$. La Figura 2 muestra esta función en su forma bidimensional.

FIGURA N° 2

$f(\mathbf{x}) = 10 + \sum_{i=1}^n [20 - 10 \cos(2\pi x_i)]$. La función Rastrigin tiene varios mínimos locales. Es altamente multimodal, pero los lugares de los mínimos están distribuidos regularmente. Se muestra el gráfico anterior en su forma bidimensional. La función generalmente se evalúa en el hipercubo $[-5, 12, 5, 12]$ para todo $i = 1, \dots, n$. La función tiene un mínimo global de 0 en cero, es decir, $f(\mathbf{x}) = 0$ para $\mathbf{x} = (0, \dots, 0)$.



4.2.3. Función Styblinski-Tang

La función Styblinski-Tang se define como:

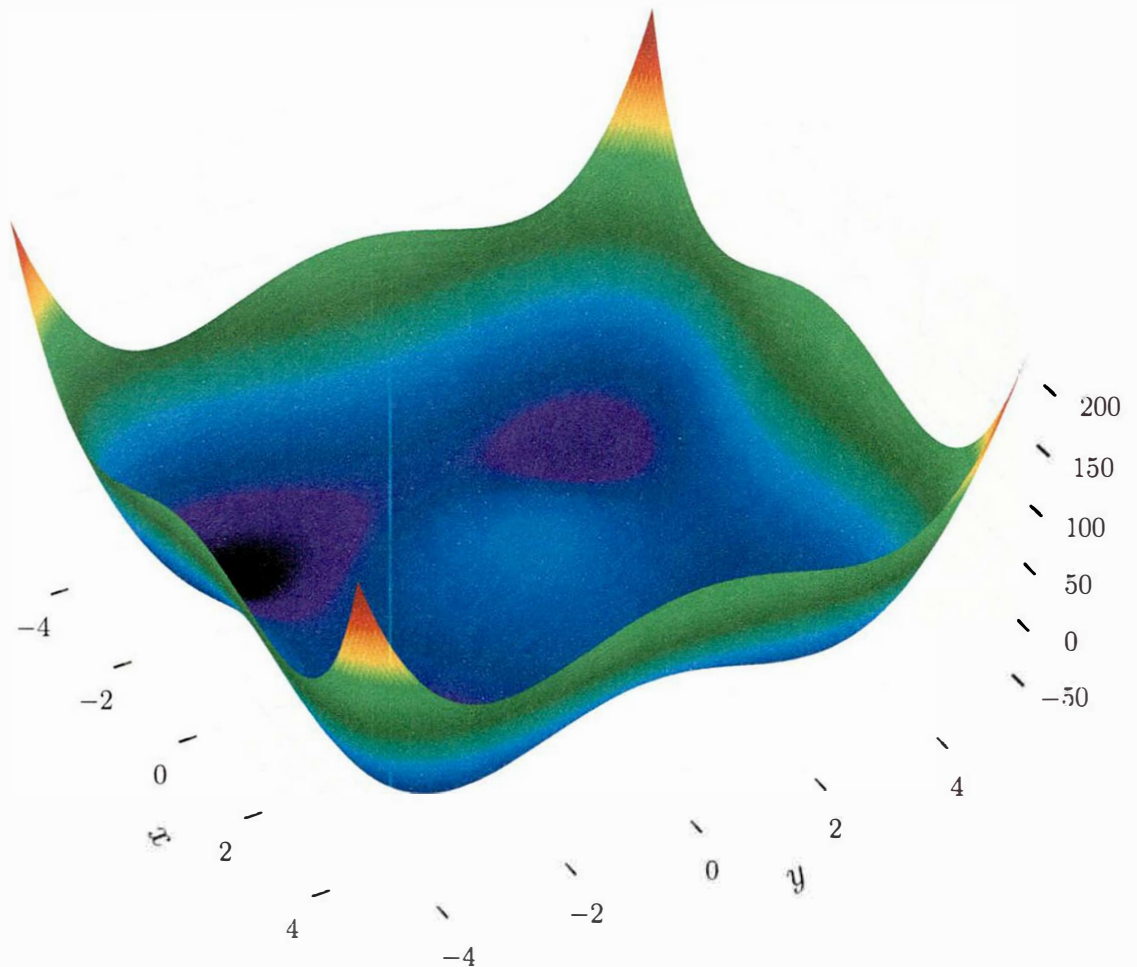
$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (16x_i^2 + 5).$$

Esta función generalmente se evalúa en el hipercubo $[-5, 5]$ para todo $i = 1, \dots, n$. La

función tiene un mínimo global que depende de la dimensión, es decir, $f(x) = 39,16599$ para $x = (2,903534, \dots, 2,903534)$. La Figura 3 muestra esta función en su forma bidimensional.

FIGURA N° 3

$f(x) = \sum_{i=1}^n (x_i^2 - 16x_i + 5)$. La función Styblinski-Tang se muestra aquí en su forma bidimensional. La función generalmente se evalúa en el hipercubo $[-5, 5]$ para todo $i = 1, \dots, n$. La función tiene un mínimo global que depende de la dimensión, es decir, $f(x) = 39,16599$ para $x = (2,903534, \dots, 2,903534)$.



4.3. Variantes del Simulated Annealing

El SA básico es un método de búsqueda estocástica y la convergencia al óptimo global puede ser lenta para una secuencia de enfriamiento confiable. Para mejorar la eficiencia y la velocidad de convergencia, se han propuesto varias variantes del SA:

1. **Recocido de Cauchy (véase Szu y Hartley, 1987):** Este método sustituye la

distribución de Boltzmann por la distribución de Cauchy, también conocida como la distribución de Cauchy-Lorentz. La varianza infinita proporciona una mejor capacidad para escapar de los mínimos locales y permite el uso de secuencias más rápidas, como disminuyendo según $\frac{1}{n}$.

2. **Simulated Annealing Reanudado (véase Ingber, 1989):** En este método, la temperatura disminuye exponencialmente con el tiempo:

$$T = T_0 e^{-\frac{1}{n}}$$

donde la constante $T_0 > 0$ y n es la dimensión del espacio de entrada. La introducción del recocido reanudado también permite la adaptación a insensibilidades cambiantes en el espacio de parámetros multidimensional.

3. **SA Generalizado (véase Tsallis y Stariolo, 1996):** Generaliza el recocido de Cauchy Szu y Hartley, 1987 y el recocido de Boltzmann Kirkpatrick et al., 1983 dentro de un enfoque unificado, inspirado en la termostática generalizada. El SA basado en oposición Ventresca y Tizhoosh, 2007 mejora el SA en precisión y tasa de convergencia utilizando vecinos opuestos.
4. **SA basado en Oposición (véase Ventresca y Tizhoosh, 2007):** Esta técnica mejora el SA en precisión y tasa de convergencia utilizando vecinos opuestos.

4.4. Métodos de Optimización Global Basados en SA

Además de las variantes mencionadas, existen métodos globales de optimización que utilizan la idea del recocido, como se describe en Richardt et al., 1998; Rose, 1998. Estos métodos se aplican en problemas complejos de optimización combinatoria y continúan evolucionando para adaptarse a nuevas áreas de investigación y aplicaciones prácticas.

CAPÍTULO 5

Soluciones Numéricas de Ecuaciones Diferenciales mediante SA

Problemas en física, biología y finanzas que involucran más de una variable a menudo se expresan utilizando ecuaciones diferenciales y, cuanto más complejo es el fenómeno analizado, más difícil se vuelve obtener soluciones analíticas. Por lo tanto, en la mayoría de los casos, se recurre a soluciones numéricas. En esta sección, presentamos cómo el SA puede utilizarse para obtener soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales, contrastando con métodos convencionales como el método de diferencias finitas, que exige condiciones más restrictivas.

5.1. Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO's) de segundo orden

5.1.1. Solución numérica general

Considere la siguiente ecuación tipo:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = f(x, y), \quad y(0) = 0, \quad y(1) = 1 \quad (1)$$

donde y es una función general de la propia solución y los valores y_0, y_1 son valores iniciales conocidos.

La idea general para resolver una ecuación diferencial mediante SA es buscar una función de desviación entre la discretización de $y(x)$ y $\frac{d^2 y}{dx^2}$, de tal manera que resolver la ecuación diferencial sea equivalente a minimizar esta función de desviación.

Para la ecuación, sustituimos la fórmula de derivación numérica de diferencias finitas centradas:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = f(x_i, y_i), \quad \text{cuando } 0 < x_i < 1 \quad (2)$$

en un intervalo de solución $[0, 1]$.

De acuerdo con las condiciones iniciales y el intervalo de solución, se elige y_0 y y_1

así se determina la partición del dominio. Considere como el tamaño de la partición del intervalo de solución.

Sea $x_{i+1} = x_i + \Delta x$ para $i = 1, 2, \dots, N-1$. La función objetivo que se minimizará mediante SA se define de la siguiente manera:

$$E = \frac{1}{2} \left[\frac{(x_1)^2 + (x_N)^2}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} (x_i)^2 \right] \quad (3)$$

La minimización de la función mediante SA servirá como criterio para la elección de la mejor solución aproximada. Se debe notar que E representa la energía o hamiltoniano del sistema y el SA buscará el estado de menor energía.

5.1.2. Ejemplo: Caso de función lineal

Considere la siguiente ecuación diferencial ordinaria (EDO) de segundo orden:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = 2 + 1, \quad x(0) = 2, \quad x(1) = 4 \quad (4)$$

Esta ecuación presenta una forma lineal en términos de x y se utiliza para ilustrar la aplicación del algoritmo SA en la resolución de EDOs. Los valores iniciales y de frontera dados permiten establecer un problema bien definido para aplicar el SA.

El algoritmo se inicia definiendo los parámetros de control del proceso de recorrido, como las temperaturas inicial y final, el número de simulaciones por cada nivel de temperatura y el tamaño de la partición del intervalo de solución. Se genera una partición uniforme del intervalo $[0, 1]$ y una discretización aleatoria de la función $x(t)$.

En cada iteración, se evalúan las diferencias finitas para la aproximación numérica de la derivada de segundo orden y se calcula la energía inicial E . A medida que la temperatura disminuye, el algoritmo realiza perturbaciones aleatorias en la discretización de $x(t)$ y acepta o rechaza los nuevos estados basándose en la variación de energía ΔE .

Finalmente, el algoritmo retorna la discretización $x(t)$ con la menor energía encontrada, que corresponde a la solución aproximada de la EDO. Este procedimiento puede adaptarse a problemas más generales o de mayor orden, mostrando la flexibilidad y robustez del SA en la resolución de ecuaciones diferenciales.

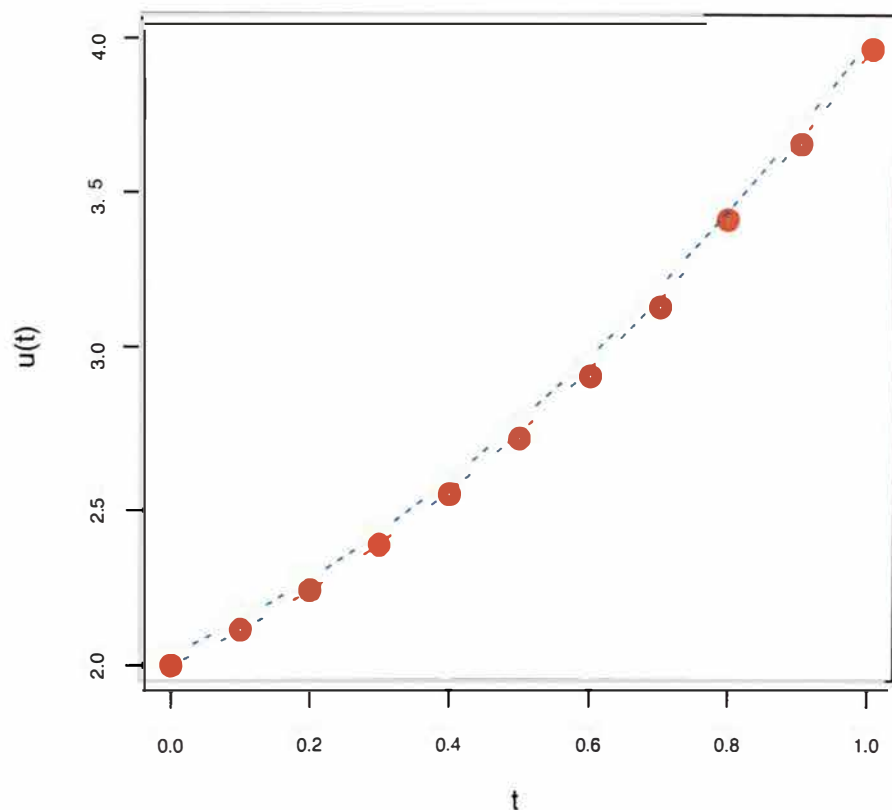
El procedimiento detallado del algoritmo SA para este caso se presenta en el Algoritmo 2.

La Figura 4 muestra los resultados numéricos obtenidos mediante el SA para

este caso. En la gráfica, los puntos rojos representan la solución aproximada obtenida a través del algoritmo, mientras que la línea azul indica la solución exacta de la ecuación diferencial.

FIGURA N° 4

La EDO planteada es $\frac{du}{dt} = 2 + u$, $u(0) = 2$, $u(1) = 4$ para $t \in [0, 1]$. Los puntos rojos son la solución aproximada, la línea azul es la solución exacta. Los parámetros usados en el SA son: $N = 10$, $\epsilon = 0,005$, $M = 3000$, $T_0 = 90$, $\alpha = 0,9$



En este ejemplo, se utilizó una partición del intervalo de solución con $N = 10$ puntos. La perturbación de la función de energía se realizó con un tamaño de $\epsilon = 0,005$. Se llevaron a cabo $M = 3000$ simulaciones por cada nivel de temperatura, comenzando con una temperatura inicial de $T_0 = 90$ y un factor de enfriamiento de $\alpha = 0,9$.

El algoritmo de Simulated Annealing, al ser aplicado a esta EDO, muestra su capacidad para aproximar soluciones numéricas de manera efectiva. La metodología empleada sigue un proceso iterativo donde, inicialmente, el sistema explora ampliamente

el espacio de soluciones debido a la alta temperatura, permitiendo aceptar cambios que incrementan la energía (soluciones peores) con una probabilidad significativa.

A medida que la temperatura disminuye, el sistema se vuelve más selectivo, aceptando principalmente soluciones que mejoran o mantienen la energía actual. Este enfoque permite que el algoritmo escape de mínimos locales en las primeras etapas y refine la búsqueda alrededor de mínimos globales en las etapas posteriores.

La precisión de la solución aproximada depende en gran medida de los parámetros elegidos para el SA, como el tamaño de la partición (Δ), la magnitud de las perturbaciones (δ), y el número de simulaciones (N). Un balance adecuado de estos parámetros es crucial para lograr una convergencia eficiente y precisa.

Podemos observar que la solución aproximada obtenida es bastante consistente con la solución teórica, lo cual valida la efectividad del algoritmo para este tipo de problemas lineales. Este procedimiento puede extenderse de manera similar a casos más generales o ecuaciones diferenciales de mayor orden, donde las soluciones analíticas pueden no ser fácilmente obtenibles.

5.2. Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP's)

Casi todas las EDPs utilizadas para describir numéricamente los fenómenos en física, biología y finanzas son lineales y de segundo orden. Una EDP lineal de segundo orden satisfecha por una función $u(x, y, z, t)$ que depende de solo dos variables (espacio y tiempo) es:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = f(x, y, z, t) \quad (5)$$

donde u es una función lineal en x, y, z, t . Podemos clasificar las EDP's en tres categorías:

1. Hiperbólicas ($B^2 - AC > 0$)

Ejemplo: Ecuación de onda - dimensión 1

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (6)$$

2. Parabólicas ($B^2 - AC = 0$)

Algoritmo 2 Algoritmo SA - Caso EDO lineal de segundo orden

Definir T_{\min}, T_{\max} límites de rango de temperatura y número de simulaciones por cada nivel de temperatura
Definir N tamaño de la partición del intervalo $[0, 1]$
Definir x_0, x_1, \dots, x_N valores iniciales de la ecuación
Definir ϵ tamaño de la perturbación en la función de energía
 $(\epsilon)/N$
Generar partición x_0, x_1, \dots, x_N donde $x_0 = 0, x_N = 1$ para $i = 1, \dots, N-1$
Generar vector \mathbf{r} , que corresponde a una discretización aleatoria (r_i) , donde r_i para $i = 1$
 $y = +1, r_i \in [0, 2]$ para $i = 2, \dots, N-1$
 $2 - \frac{r_i}{N} + 1$ partición evaluada en la función lineal
 Componentes de las diferencias finitas...
 $1 \quad [(1, 2)]$
 $2 \quad [(1, (x_1 + 1))]$
 $3 \quad [(x_1, (x_1 + 1))]$
 $[(1/2 + 3)/(2)^2], (x_1)$ energía inicial
 inicializar temperatura
mientras $i \leq N$ **hacer**
 1
para 1 **hasta** N **hacer**
 $-2, \dots, 2$ coordenada perturbada
 $1 \quad (0, \dots, 1, \dots)_{1 \times (N-1)}$ vector canónico donde la coordenada i es 1
 la dirección de la perturbación se elige según una distribución binomial justa
 ≤ 1
 diferencias finitas
 $1 \quad [(1, 2)], 2 \quad [(1, (x_1 + 1))], 3 \quad [(x_1, (x_1 + 1))]$
 $[(1/2 + 3)/(2)^2]$
 (x_1) energía de la perturbación
si $i \leq 0$ **entonces** evaluamos la variación de energía generada por la perturbación
 aceptamos la nueva discretización
si no
 aceptamos el nuevo estado con probabilidad $p = \min(1, \frac{\Delta E}{E})$
fin si
fin para
 $+1$
 $+1$
fin mientras
retornar $(- \frac{r_i}{N} + 1, x_1)$ discretización con menor energía

Ejemplo: Ecuación de difusión (Black-Scholes)

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \quad (7)$$

3. Elípticas (B^2 AC; 0)

Ejemplo: Ecuación de Laplace

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (8)$$

5.2.1. Ejemplos de Solución Numérica de EDP's

En esta sección consideramos tres ejemplos: la ecuación de Laplace, la ecuación del calor y la ecuación Fisher-KPP.

5.2.1.1. Ecuación de Laplace

Considere la siguiente expresión para la ecuación de Laplace:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (9)$$

Siguiendo el mismo procedimiento que en el caso de una EDO, sustituyendo la fórmula de la segunda derivación numérica, tenemos que:

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{2} = 0 \quad (10)$$

La caja $[x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$ es el conjunto solución. De acuerdo con las condiciones iniciales y el conjunto solución, se eligen valores pequeños para h_x y h_y , y luego se determina la discretización del dominio. Considere h_x y h_y como el tamaño de la discretización del intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ y $[y_j, y_{j+1}]$ respectivamente.

Sea $u_{i+1,j} = u_{i,j} + \Delta u_{i+1,j}$ para $i = 1, \dots, N_x - 1$, y sea $u_{i,j+1} = u_{i,j} + \Delta u_{i,j+1}$ para $j = 1, \dots, N_y - 1$. La función objetivo que se minimizará mediante SA se define de la siguiente forma:

$$J = \sum_{i=1}^{N_x-1} \sum_{j=1}^{N_y-1} \left[\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{2} \right]^2 \quad (11)$$

En la Figura 5 se presenta una solución numérica para la ecuación de Laplace y en la Figura 6 se presenta el decaimiento de la función que da información de la convergencia del método SA en la solución de la ecuación.

El procedimiento detallado del algoritmo SA para este caso se presenta en el Algoritmo 3.

El algoritmo de Simulated Annealing se inicia definiendo los parámetros de control del proceso de recocido, como las temperaturas inicial y final, el número de simulaciones por cada nivel de temperatura y el tamaño de la partición del intervalo de solución. Se

FIGURA N° 5

La EDP planteada es $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ con condiciones de frontera $u(0,t) = 5$ y $u(1,t) = 5 + 5t$. Los parámetros utilizados en el SA son: $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.005$, $N_x = 200$, $N_t = 1000$, $\alpha = 0.99$.

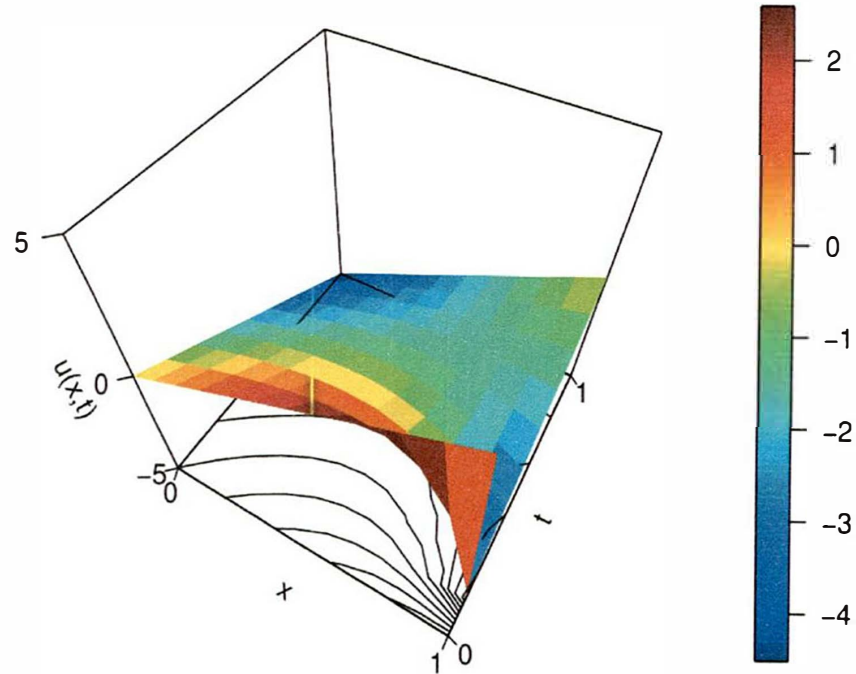
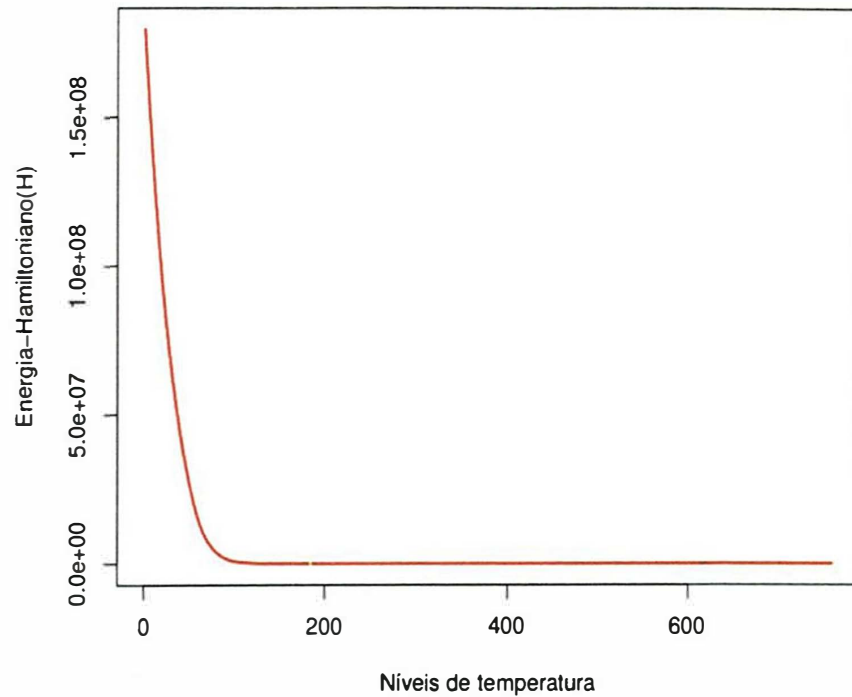


FIGURA N° 6

Función de energía H de la ecuación de Laplace



genera una partición uniforme del intervalo y una discretización aleatoria de la función (\cdot) .

En cada iteración, se evalúan las diferencias finitas para la aproximación numérica de las derivadas de segundo orden y se calcula la energía inicial. A medida que la temperatura disminuye, el algoritmo realiza perturbaciones aleatorias en la discretización de (\cdot) y acepta o rechaza los nuevos estados basándose en la variación de energía.

Finalmente, el algoritmo retorna la discretización (\cdot) con la menor energía encontrada, que corresponde a la solución aproximada de la EDP. Este procedimiento puede adaptarse a problemas más generales o de mayor orden, mostrando la flexibilidad y robustez del SA en la resolución de ecuaciones diferenciales.

La Figura 5 La gráfica tridimensional muestra cómo evoluciona la solución de (\cdot) en función del tiempo y la posición. Los colores indican los valores de (\cdot) , donde las regiones rojas representan valores más altos y las regiones azules representan valores más bajos. Se observa que la solución cumple con las condiciones de frontera establecidas, convergiendo adecuadamente.

Algoritmo 3 Algoritmo SA - Caso ecuación de Laplace

```

definir  $T$ ,  $N$       temperaturas y número de simulaciones por cada temperatura
definir  $\Delta x$  y  $\Delta y$       tamaño de la partición de la caja  $[0, 1] \times [0, 1]$ 
 $(x_0, y_0) = (0, 0)$       condiciones de frontera
definir  $\Delta E$       tamaño de la perturbación en la función de energía
 $\Delta x_1 = \Delta x / N$       tamaños de los pasos de la partición
 $\Delta y_1 = \Delta y / N$       tamaños de los pasos de la partición
generar particiones  $\{x_i\}_{i=1}^{N+1}, \{y_i\}_{i=1}^{N+1}$  de  $[0, 1]$  y  $[0, 1]$ 
generar matriz  $E$ , donde sus elementos corresponden a una discretización aleatoria de  $(x, y)$ 
  los elementos de la matriz se eligen según una distribución uniforme en  $[5, 5]$  y cumpliendo las
  condiciones de frontera
  combinaciones de las particiones evaluadas en la función, en este caso, matriz de ceros
   $E_{(x_0+y_0)(x_0+y_0)}$       componentes de las diferencias finitas
  1  $[(1, 2), (1, (x_0+y_0))]$ 
  2  $[(1, (x_0+y_0)), (1, (x_0+y_0))]$ 
  3  $[(x_0+1, (x_0+y_0)), (1, (x_0+y_0))]$ 
  4  $[(1, (x_0+y_0)), (1, 2)]$ 
  5  $[(1, (x_0+y_0)), (1, (x_0+y_0))]$ 
  6  $[(1, (x_0+y_0)), (x_0+1, (x_0+y_0))]$ 
   $E_{(1 \ 2 \ 2 + 3)/(x_0^2) + (4 \ 2 \ 5 + 6)/(x_0^2)}^2, (x_0)$       energía inicial

  mientras  $i \leq N$  hacer      inicializar temperatura
    1
    para  $j = 1$  hasta  $N$  hacer
       $x_1 = -2, \dots, x_1$       coordenadas de la perturbación
       $y_1 = -2, \dots, y_1$ 
      11, donde  $x_1$  y  $y_1$  son vectores canónicos de orden  $N$  y
      la dirección de la perturbación se elige según una distribución binomial justa
       $\hat{s}$ 
      utilizar el procedimiento para definición de componentes de las diferencias finitas
      basado en  $E$  para obtener  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$  y  $E_6$ 
       $E_{(1 \ 2 \ 2 + 3)/(x_0^2) + (4 \ 2 \ 5 + 6)/(x_0^2)}^2$ 
       $(x_0)$       energía de la perturbación

      si  $j = 0$  entonces      evaluamos la variación de energía generada por la perturbación
         $E_{(x_0+y_0)(x_0+y_0)}$       aceptamos la nueva discretización

      si no
         $E_{(x_0+y_0)(x_0+y_0)}$       aceptamos con probabilidad  $\alpha = \min(1, \alpha)$ 

      fin si
    fin para
     $x_0 = x_0 + \Delta x$ 
     $y_0 = y_0 + \Delta y$ 
  fin mientras
  retornar  $(\{x_i\}_{i=1}^{N+1}, \{y_i\}_{i=1}^{N+1})$       discretización con menor energía
  
```

5.2.1.2. Ecuación de Calor

Considere la siguiente expresión para la ecuación de calor:

$$\frac{2}{2} + \frac{2}{2} = 0 \quad (12)$$

Esta ecuación se resuelve siguiendo un procedimiento similar al utilizado en el caso de las EDOs. Para ello, sustituimos la fórmula de la segunda derivada numérica:

$$\frac{(\cdot)_{+2}(\cdot) + (\cdot)}{2} + \frac{(\cdot)_{+2}(\cdot) + (\cdot)}{2} = 0$$

La función objetivo que se minimizará mediante el algoritmo de Simulated Annealing (SA) se define de la siguiente manera:

$$= \sum_{i=1}^1 \sum_{j=1}^1 \left[\frac{(\cdot)_{+2}(\cdot) + (\cdot)}{2} + \frac{(\cdot)_{+2}(\cdot) + (\cdot)}{2} \right]^2$$

El algoritmo SA comienza definiendo las temperaturas máxima y mínima (T_{\max} y T_{\min}), el número de simulaciones por cada nivel de temperatura (N_{simul}), y el tamaño de la partición del dominio en los intervalos $[0, 1]$ para x y y . Se establecen condiciones de frontera con $(0, y) = 0$ y se genera una partición uniforme de los intervalos $[0, 1]$ en x y y , además de una matriz que corresponde a una discretización aleatoria de (x, y) .

Durante cada iteración, el algoritmo evalúa las diferencias finitas para aproximar las derivadas de segundo orden, calculando así la energía inicial. A medida que la temperatura disminuye, el algoritmo realiza perturbaciones aleatorias en la discretización de (x, y) y acepta o rechaza los nuevos estados basándose en la variación de energía. Este proceso continúa hasta que la temperatura alcanza el valor mínimo T_{\min} , momento en el cual se retorna la discretización con la menor energía encontrada.

En la figura 7 se puede observar cómo la solución converge hacia los valores de frontera especificados. Los colores representan los valores de (x, y) , donde los tonos más cálidos indican valores más altos y los tonos más fríos indican valores más bajos. La forma de la superficie ilustra cómo la solución numérica evoluciona a lo largo del tiempo y del espacio, manteniendo la consistencia con las condiciones de frontera impuestas.

En la figura 8 muestra la función de energía a lo largo de las iteraciones del algoritmo SA. El gráfico de la energía muestra un comportamiento decreciente, indicando que el algoritmo está minimizando efectivamente la función de energía a lo largo de las iteraciones. Esto es un indicador de la convergencia del algoritmo SA. Al inicio, cuando la temperatura es alta, las perturbaciones permiten explorar un amplio rango de soluciones

posibles, aceptando incluso aquellas que incrementan la energía. A medida que la temperatura disminuye, el algoritmo se vuelve más selectivo, aceptando principalmente las soluciones que disminuyen o mantienen la energía, lo cual se refleja en la estabilización del valor de

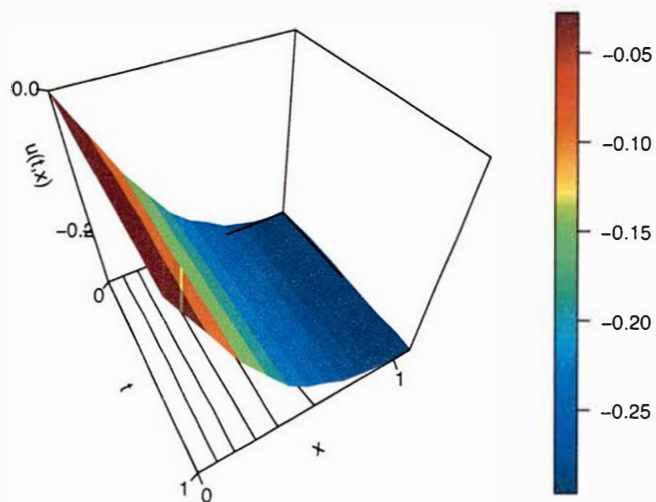
Se presenta una implementación detallada del Algoritmo 4.

- **Definición de Parámetros Iniciales:** Se establecen los valores máximos y mínimos de la temperatura (T_{\max} y T_{\min}), el número de simulaciones por cada nivel de temperatura (N_{simul}), y los tamaños de las particiones en el dominio temporal y espacial (Δt y Δx).
- **Condiciones de Frontera:** Se fija la condición de frontera inicial $(0, y) = 0$.
- **Definición de Perturbación y Pasos de Partición:** Se define el tamaño de la perturbación (ΔT) y los tamaños de los pasos de partición en x y y (Δx y Δy).
- **Generación de Particiones:** Se generan particiones uniformes para los intervalos $[0, 1]$ en x y y , obteniendo x_1^{n+1} y y_1^{n+1} .
- **Generación de Matriz :** Se crea una matriz M cuyos elementos corresponden a una discretización aleatoria de (x, y) , seleccionados según una distribución uniforme en $[5, 5]$ y cumpliendo las condiciones de frontera.
- **Inicialización de Componentes y Energía:** Se inicializan los componentes de las diferencias finitas $(1, 2, 3, 4)$ y se calcula la energía inicial E .
- **Inicio del Proceso de Recocido:** Se inicializa la temperatura en T_{\max} y se inicia el bucle principal que continúa hasta que T descienda por debajo de T_{\min} .
- **Perturbaciones Aleatorias:** En cada iteración, se seleccionan aleatoriamente las coordenadas de perturbación x y y en los intervalos $[2, 2]$ y $[2, 2]$ respectivamente.
- **Dirección de Perturbación:** La dirección de la perturbación se elige según una distribución binomial justa.
- **Actualización de la Matriz :** Se generan perturbaciones en la matriz M para obtener M' , y se recalculan los componentes de las diferencias finitas basados en M' para obtener $1, 2, 3, 4$.
- **Cálculo de la Energía Perturbada:** Se calcula la energía de la perturbación E' y la variación de energía ΔE .

- **Evaluación de la Perturbación:** Si $\Delta_i \leq 0$, se acepta la nueva discretización; si $\Delta_i > 0$, se acepta con una probabilidad $\Delta_i / \Delta_i^{\max}$.
- **Actualización de la Temperatura:** La temperatura se actualiza multiplicándola por el factor de enfriamiento α .
- **Continuación del Bucle:** El bucle se repite incrementando el índice i hasta que la temperatura desciende por debajo de T_{\min} .
- **Retorno de la Solución:** Finalmente, se retorna la discretización $(-u_1^{+1}, -u_1^{+1}, \dots)$ con la menor energía encontrada.

FIGURA N° 7

La EDP planteada es $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -1$ con condiciones de frontera $u(0) = 5$ y $u(1) = 5 + 5$. Los parámetros utilizados en el SA son: $N = 10$, $\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.005$, $T = 1500$, $\alpha = 0.99$.

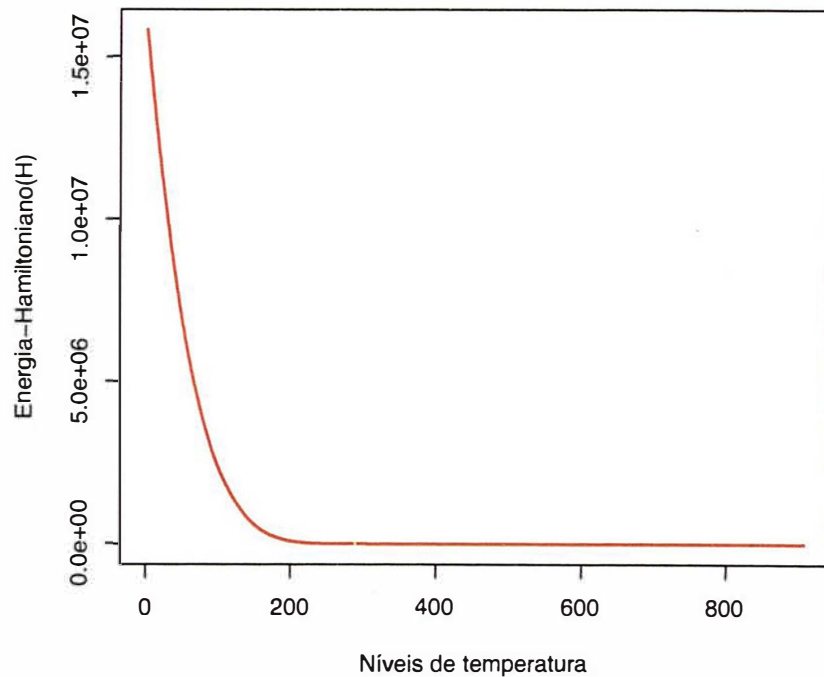


Algoritmo 4 Algoritmo SA - Caso ecuación de calor

```

definir  $T_{max}, T_{min}, simul$       temperaturas y número de simulaciones por cada temperatura
definir  $N$                           tamaño de la partición de la caja  $[0, 1] \times [0, 1]$ 
 $(0, 0)$                              condiciones de frontera
definir  $\Delta E$                        tamaño de la perturbación en la función de energía
 $1/N$                                 tamaños de los pasos de la partición
 $1/N$                                 tamaños de los pasos de la partición
generar particiones  $T_1^{+1}, T_1^{-1}$  de  $[0, 1]$  y  $[0, 1]$ 
generar matriz  $E$ , donde sus elementos corresponden a una discretización aleatoria de
 $(i, j)$ 
    los elementos de la matriz se eligen según una distribución uniforme en  $[5, 5]$  y
    cumpliendo las condiciones de frontera
    combinaciones de las particiones evaluadas en la función, en este caso, matriz de
    ceros
     $0_{(N+2) \times (N+2)}$ 
    componentes de las diferencias finitas
    1  $[(1, (N+3)), (1)]$ 
    2  $[(1, (N+3)), (1, (N+3))]$ 
    3  $[(1, (N+3)), (1, (N+3))]$ 
    4  $[(1, 2), (1, (N+3))]$ 
     $[(1 \ 2)/2, (3 \ 22 + 4)/(2^2)^2], \text{ sum}()$ 
    energía inicial
     $T_{max}$  inicializar temperatura
mientras  $T_{max} > T_{min}$  hacer
    1
    para  $i = 1$  hasta  $simul$  hacer
    coordenadas de la perturbación
    Uniforme-2,  $(i, j)$ 
    Uniforme-2,  $(i, j)$ 
    11 donde  $i$  y  $j$  son vectores canónicos de orden  $N$  y
    la dirección de la perturbación se elige según una distribución binomial justa
     $\hat{s}$ 
    utilizar el procedimiento para definición de componentes de las diferencias
    finitas basado en  $E$  para obtener  $T_1, T_2, T_3, T_4$ 
     $[(1 \ 22 + 3)/(2^2) + (4 \ 25 + 6)/(2^2)^2]$ 
     $\text{sum}()$ 
    energía de la perturbación
    si  $\Delta E < 0$  entonces
    aceptamos la nueva discretización
    si no
    con probabilidad  $\Delta E / T_i = \min(1, \Delta E / T_i)$ 
    fin si
    fin para
     $T_1^{+1} \leftarrow T_1^{+1} + \Delta T$ 
     $T_1^{-1} \leftarrow T_1^{-1} + \Delta T$ 
fin mientras
retornar  $(T_1^{+1}, T_1^{-1})$ 
    discretización con menor energía
  
```

FIGURA N° 8
Función de energía de la ecuación de Calor



5.2.1.3. Ecuación Fisher-KPP

En matemáticas, la ecuación de Fisher (nombrada así por el estadístico y biólogo Ronald Fisher, también conocida como la ecuación de Kolmogorov-Petrovsky-Piskunov - nombrada por Andrey Kolmogorov, Ivan Petrovsky y N. Piskunov - o ecuación Fisher-KPP) es la ecuación diferencial parcial:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = u(1-u)$$

En este contexto, el término D representa el coeficiente de difusión, mientras que r es la tasa de crecimiento. La ecuación describe la propagación de una ventaja genética o el avance de una especie en una dirección.

La función objetivo, en este caso, se definirá como:

$$J(u) = \int_{-1}^1 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} u(1-u) \right] dx$$

Se presenta una implementación detallada del Algoritmo 5.

1. Definición de parámetros iniciales:

- Se establecen los parámetros de control para el proceso de recocido, incluyendo la temperatura máxima (T_{max}), la temperatura mínima (T_{min}), el número de simulaciones por cada nivel de temperatura (N), y la tasa de crecimiento (α).
- También se define el tamaño de la partición del dominio temporal (Δt) y espacial (Δx).

2. Condiciones de frontera y perturbaciones:

- Se especifican las condiciones de frontera y el tamaño de la perturbación (ΔT).
- Los tamaños de los pasos de la partición temporal (Δt) y espacial (Δx) se calculan en función del tamaño de la partición.

3. Generación de particiones:

- Se generan particiones uniformes del intervalo temporal y espacial, creando vectores \mathbf{t} y \mathbf{x} que dividen el dominio en $N_t + 1$ y $N_x + 1$ puntos, respectivamente.

4. Generación de matriz aleatoria:

- Se genera una matriz \mathbf{A} cuyos elementos corresponden a una discretización aleatoria de la función $f(x, t)$.
- Los elementos de la matriz se eligen según una distribución uniforme en el rango $[0, 1]$, asegurando que cumplan con las condiciones de frontera.

5. Cálculo de componentes de diferencias finitas:

- Se definen las combinaciones de las particiones evaluadas en la función, utilizando una matriz de ceros (\mathbf{Z}).
- Se calculan los componentes de las diferencias finitas necesarios para evaluar la energía inicial (E_0).

6. Inicio del proceso de recocido:

- La temperatura inicial se establece en T_{max} .
- Se inicia un ciclo que continúa hasta que la temperatura alcanza T_{min} .

7. Simulaciones a cada nivel de temperatura:

- Para cada nivel de temperatura, se realizan N simulaciones.

- Se seleccionan aleatoriamente las coordenadas de la perturbación (i, j) .
- Se genera una perturbación en la matriz M mediante una matriz canónica C .

8. Evaluación y aceptación de perturbaciones:

- Se calculan las diferencias finitas basadas en la matriz perturbada M' .
- Se evalúa la energía de la perturbación E' y se calcula la variación de energía ΔE .
- Si $\Delta E \leq 0$, se acepta la nueva discretización. Si $\Delta E > 0$, la nueva discretización se acepta con una probabilidad $\text{mín}(1, e^{-\Delta E/T})$.

9. Actualización de la temperatura:

- La temperatura T se actualiza multiplicándola por el factor de enfriamiento α .

10. Finalización del algoritmo:

- El ciclo se repite hasta que la temperatura T alcanza T_{min} .
- El algoritmo retorna la discretización $(-''', -''')$ con la menor energía encontrada, proporcionando una solución aproximada para la ecuación de Fisher-KPP.

En las figuras que siguen se presentan resultados numéricos para algunos valores de los parámetros de la ecuación.

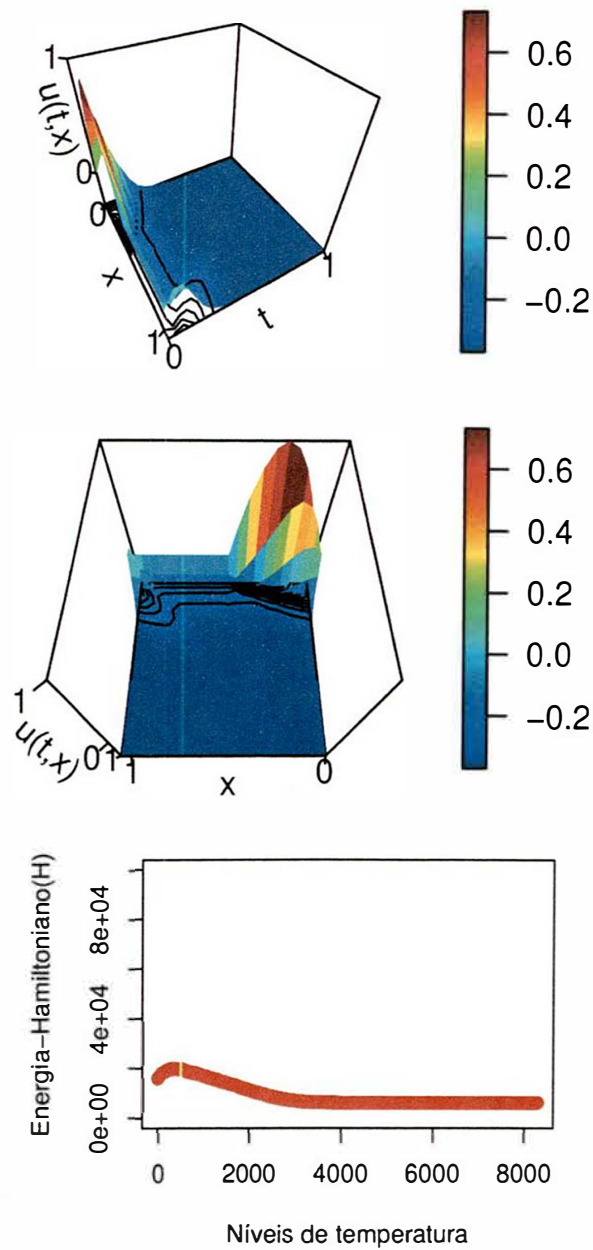
En la figura 9, se muestra la solución de la ecuación Fisher-KPP para $\alpha = 0,1$. La gráfica ilustra cómo la población representada por u se difunde y estabiliza a lo largo del dominio con el tiempo. Los colores en la superficie tridimensional representan las concentraciones de u en diferentes puntos temporales y espaciales. La distribución inicial de u se modifica gradualmente, mostrando un comportamiento de propagación lenta debido al valor bajo de α , lo cual es característico de una menor tasa de crecimiento poblacional.

En la figura 10, se presenta la solución de la ecuación Fisher-KPP para $\alpha = 0,2$. La propagación de u es más rápida en comparación con el caso anterior debido a la mayor tasa de crecimiento α . El comportamiento de la solución indica una aceleración en la difusión y estabilización de la población, con colores que reflejan concentraciones de u más altas en menos tiempo. Este aumento en la tasa de crecimiento α permite observar cómo la población alcanza niveles de saturación más rápidamente.

En la figura 11 se muestra la solución para $\alpha = 0,3$. La tasa de crecimiento aún mayor resulta en una difusión y estabilización mucho más rápidas de la población. La

FIGURA N° 9

La EDP es $10 \frac{\partial^2}{\partial x^2} = 0,1(1)$. Los parámetros usados en el SA son: $\alpha = 20$, $\beta = 20$, $\gamma = 0,001$, $\delta = 10000$, $\epsilon = 40$, $\zeta = 0,99$.



representación gráfica revela una rápida propagación de u a lo largo del dominio con colores que muestran concentraciones elevadas en poco tiempo. Este escenario con α alto es útil para estudiar cómo una tasa de crecimiento acelerada puede impactar la dinámica poblacional en un entorno espacialmente distribuido.

5.3. Conclusión

Este trabajo presentó la implementación de un método numérico basado en diferencias finitas y Simulated Annealing para la resolución de ecuaciones diferenciales. Los resultados muestran que el método es efectivo, alcanzando una convergencia adecuada en diversos casos evaluados.

- El **esquema de diferencias finitas** se adaptó adecuadamente para la discretización espacial, proporcionando una base sólida para la aplicación del Simulated Annealing.
- La **transformación de la ecuación diferencial en un sistema de ecuaciones de diferencia** fue detallada, asegurando que todas las condiciones del problema fueran correctamente incorporadas y tratadas.
- Se realizó una **exhaustiva metodología para resolver el sistema algebraico resultante**, prestando especial atención a cómo las condiciones de contorno específicas afectan la estabilidad y convergencia de las soluciones.
- A través de **experimentos numéricos**, se verificó la precisión del esquema de diferencias finitas comparando los resultados con soluciones analíticas, resaltando la eficacia del método en distintas configuraciones.
- La **aplicación de Simulated Annealing** demostró ser una técnica poderosa para superar los mínimos locales y encontrar soluciones óptimas en funciones complejas, explorando efectivamente el espacio de soluciones.

Sin embargo, la estabilidad y consistencia del método todavía representan un desafío, especialmente cuando los parámetros de simulación y las condiciones de contorno varían ampliamente. En ciertos escenarios, estas variaciones han causado fluctuaciones en la precisión de las soluciones. Por lo tanto, futuras investigaciones deberían centrarse en un análisis más detallado de estos aspectos para mejorar y extender la aplicabilidad del método a problemas más complejos y en diferentes contextos científicos y de ingeniería.

5.4. Recomendaciones y Trabajos Futuros

El presente trabajo ha demostrado la eficacia del Simulated Annealing (SA) en la resolución numérica de la ecuación de Fisher-KPP, integrando métodos de diferencias

finitas y optimización estocástica para superar los desafíos asociados con la no linealidad y la complejidad de los sistemas modelados. Sin embargo, se identifican varias áreas que merecen exploración y mejora en futuras investigaciones:

5.4.1. Optimización de Parámetros y Condiciones de Contorno

- **Tasas de Enfriamiento:** Investigar diferentes esquemas de enfriamiento adaptativo que puedan ajustarse dinámicamente durante la ejecución del SA. Por ejemplo, un enfriamiento exponencial adaptativo que ajuste la tasa de enfriamiento basado en la tasa de cambio de la energía del sistema puede ser explorado para evitar la convergencia prematura y mejorar la eficiencia del algoritmo.
- **Condiciones de Contorno:** Desarrollar y evaluar técnicas para la gestión de condiciones de contorno, como el uso de condiciones de contorno absorbentes o condiciones de contorno periódicas, que pueden mejorar la precisión de las soluciones numéricas en problemas donde las condiciones de contorno varían espacial y temporalmente.

5.4.2. Implementación de Técnicas Híbridas

- **Combinación con Métodos de Machine Learning:** Integrar técnicas de aprendizaje automático, como redes neuronales, para predecir la configuración óptima de parámetros del SA en diferentes etapas del proceso de optimización. Por ejemplo, un modelo de aprendizaje automático podría predecir la mejor tasa de enfriamiento y el tamaño de perturbación basado en las características del problema y el progreso de la simulación.
- **Métodos Multinivel:** Desarrollar enfoques multinivel que combinen el SA con métodos como los algoritmos genéticos o la optimización por enjambre de partículas para abordar problemas a diferentes escalas de resolución. Por ejemplo, el uso de un algoritmo genético para explorar globalmente el espacio de soluciones seguido por un refinamiento local con SA puede mejorar la precisión y eficiencia de las soluciones.

5.4.3. Validación Experimental y Comparación con Otros Métodos

- **Estudios Comparativos:** Realizar estudios comparativos exhaustivos entre el SA y otros métodos de optimización y solución numérica, como los métodos de diferencias finitas tradicionales, los métodos de elementos finitos, y los algoritmos de optimización heurística. Evaluar el rendimiento en términos de precisión, tiempo de cálculo y robustez frente a diferentes configuraciones de problemas.
- **Pruebas de Sensibilidad:** Llevar a cabo pruebas de sensibilidad para evaluar cómo variaciones en los parámetros del SA y las condiciones de contorno afectan la estabilidad y la precisión de las soluciones. Por ejemplo, evaluar la influencia de diferentes tasas de enfriamiento y tamaños de perturbación en la convergencia del SA puede proporcionar información valiosa para la optimización del algoritmo.

5.4.4. Desarrollo de Herramientas Computacionales y Software

- **Software de Código Abierto:** Desarrollar y distribuir software de código abierto que implemente el SA para la resolución de la ecuación de Fisher-KPP y otras ecuaciones diferenciales no lineales. Incluir documentación detallada y ejemplos de uso para facilitar la adopción y el uso del software por parte de la comunidad científica y técnica.
- **Interfaz de Usuario Intuitiva:** Crear interfaces de usuario intuitivas y amigables que permitan a los usuarios configurar y ejecutar simulaciones numéricas de manera eficiente. Por ejemplo, desarrollar una interfaz gráfica que permita a los usuarios ajustar los parámetros del SA y visualizar los resultados en tiempo real puede mejorar significativamente la accesibilidad y la usabilidad del método.

5.4.5. Optimización Computacional

- **Computación de Alto Rendimiento (HPC):** Explorar la implementación del SA en plataformas de computación de alto rendimiento para abordar problemas de gran escala y complejidad. Por ejemplo, utilizar clusters de computadoras o supercomputadoras para paralelizar el proceso de recocido simulado puede mejorar significativamente el tiempo de cálculo y la capacidad de manejo de datos.
- **Algoritmos Paralelos:** Desarrollar versiones paralelas del SA que puedan ejecutarse

eficientemente en arquitecturas de múltiples núcleos y sistemas distribuidos. Por ejemplo, implementar el SA utilizando la programación de GPU para aprovechar al máximo los recursos computacionales disponibles puede acelerar el proceso de optimización y permitir la resolución de problemas más grandes y complejos.

Algoritmo 5 Algoritmo SA - Caso ecuación Fisher-KPP

```

definir  $\epsilon, \delta, \eta$ 
definir  $y$  tamaño de la partición de la caja  $[0, 1] \gg [0, 1]$ 
definir condiciones de frontera
definir  $\Delta E$  tamaño de la perturbación en la función de energía
 $1/\Delta E$  tamaños de los pasos de la partición
 $1/\Delta E$  tamaños de los pasos de la partición
generar particiones  $-''_1^{+1}, -''_1^{+1}$  de  $[0, 1]$  y  $[0, 1]$ 
generar matriz cuyos elementos corresponden a una discretización aleatoria de  $(,)$ 
los elementos de la matriz se eligen según una distribución uniforme en  $[5, 5]$  y
cumpliendo las condiciones de frontera
combinaciones de las particiones evaluadas en la función, en este caso, matriz de
ceros
 $0_{(+2)(+2)}$ 
componentes de las diferencias finitas
1  $[(1, (+3)), (1)]$ 
2  $[(1, (+3)), ((+2))]$ 
3  $[((+2), (+3)), ((+2))]$ 
4  $[(1, 2), ((+2))]$ 
5  $(1, = (+1), = (+1))$ 
 $[(1\ 2)/(2) (3\ 22 + 4)/(^2) 2(5\ 2)]^2$ 
 $()$ 
energía inicial
inicializar temperatura

mientras  $i$  hacer
1
para 1 hasta hacer
coordenadas de la perturbación
 $-2, \dots, ''$ 
 $-2, \dots, ''$ 
11 donde 1 y 1 son vectores canónicos de orden  $y$ 
la dirección de la perturbación se elige según una distribución binomial justa
 $\hat{s}$ 
utilizar el procedimiento para definir componentes de las diferencias finitas
basado en para obtener 1, 2, 3, 4 y 5
 $[(1\ 2)/(2) (3\ 22 + 4)/(^2) 2(5\ 2)]^2$ 
 $()$ 
energía de la perturbación

si  $i0$  entonces evaluamos la variación de la energía generada por la
perturbación
aceptamos la nueva discretización

si no
aceptamos con probabilidad  $= \min(1, ')$ 

fin si
fin para
 $+1$ 
 $+1$ 
fin mientras
devolver  $(-''_1^{+1}, -''_1^{+1}, )$ 
discretización con menor energía

```

FIGURA N° 10

La EDP es $10 \frac{\partial^2}{\partial t^2} = 0,2(1)$. Los parámetros utilizados en el SA son: $\alpha = 20$, $\beta = 20$, $\gamma = 0,001$, $\delta = 10000$, $\epsilon = 40$, $\zeta = 0,99$.

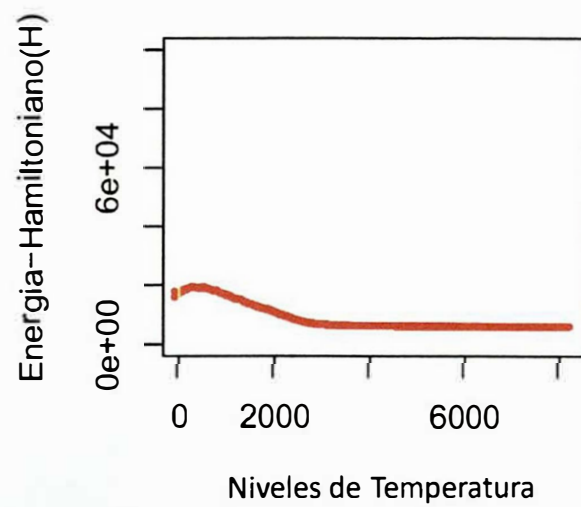
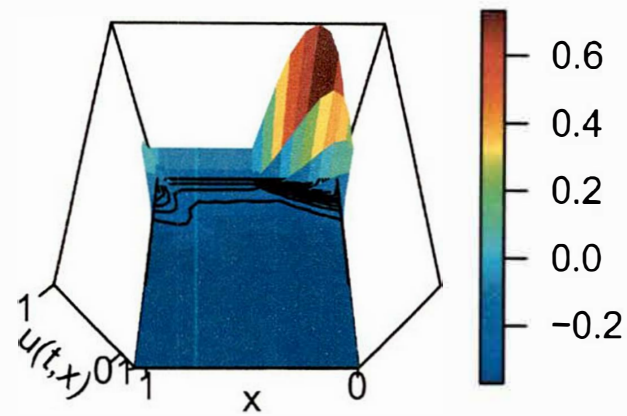
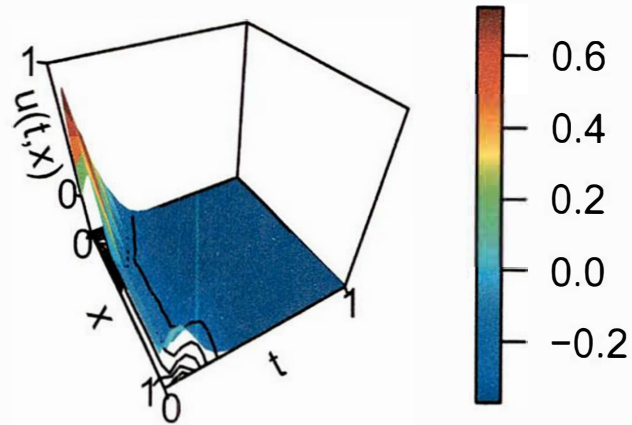
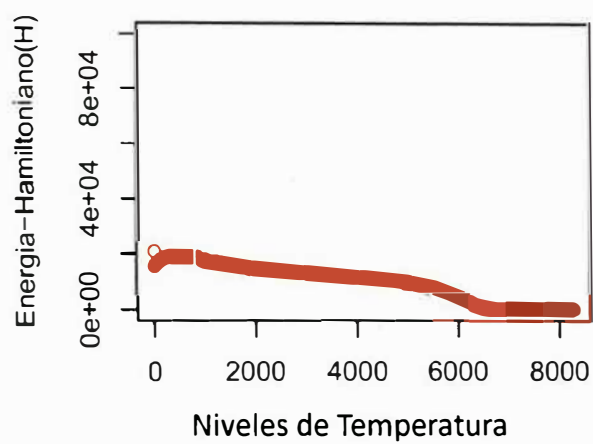
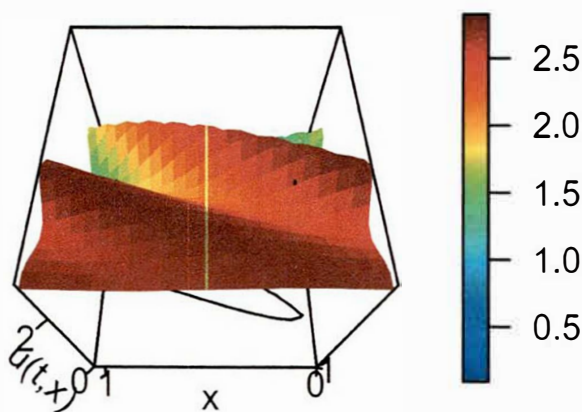
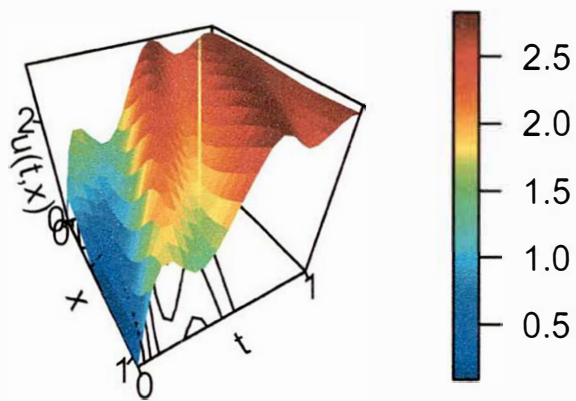


FIGURA N° 11

La EDP es $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0,3(1 - u)$. Los parámetros utilizados en el SA son: $\alpha = 20$, $\beta = 20$, $\gamma = 0,001$, $\delta = 10000$, $\epsilon = 40$, $\zeta = 0,99$.



Bibliografia

- Asani, Z., & Rexhepi, S. (2018). Designing a controller via Simulated Annealing. *2018 UBT International Conference*. <https://doi.org/10.33107/UBT-IC.2018.337>
- Atiqullah, M. (2004). An Efficient Simple Cooling Schedule for Simulated Annealing, 396-404. https://doi.org/10.1007/978-3-540-24767-8_41
- Banchs, R. E. (2019). Simulated Annealing. *Handbook of Machine Learning*. <https://doi.org/10.1201/9780429504419-11>
- Bertsimas, D., & Tsitsiklis, J. (1993). Simulated Annealing. *Statistical Science*, 8(1), 10-15.
- Černý, V. (1985). Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: an efficient simulation algorithm. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 45(1), 41-51.
- Chandraker, V., Awasthi, A., & Jayaraj, S. (2015). A Numerical Treatment of Fisher Equation. *Procedia Engineering*, 127, 1256-1262. <https://doi.org/10.1016/J.PROENG.2015.11.481>
- Chandraker, V., Awasthi, A., & Jayaraj, S. (2018). Implicit numerical techniques for Fisher equation. *Journal of Information and Optimization Sciences*, 39, 1-13. <https://doi.org/10.1080/02522667.2017.1374722>
- Chen, S., & Luk, B. (1999). Adaptive simulated annealing for optimization in signal processing applications. *Signal Processing*, 79, 117-128.

- Choi, M. C. H. (2019). An accelerated variant of simulated annealing that converges under fast cooling. *arXiv: Probability*.
- Chu, X., Su, X., Liu, M., Li, L., Li, T., Qin, Y., Lu, G., Qi, L., Liu, Y., Lin, J., & Shen, Q.-T. (2021). Annealing synchronizes the 70S ribosome into a minimum-energy conformation. *bioRxiv*. <https://doi.org/10.1101/2021.06.25.447849>
- Connors, D., & Kumar, P. (1987). Simulated annealing and balance of recurrence order in time-inhomogeneous Markov chains. *26th IEEE Conference on Decision and Control*, 26, 2261-2263. <https://doi.org/10.1109/CDC.1987.272944>
- Dekkers, A., & Aarts, E. (1991). Global optimization and simulated annealing. *Mathematical Programming*, 50, 367-393.
- Doerr, B., Rajabi, A., & Witt, C. (2023). Simulated Annealing is a Polynomial-Time Approximation Scheme for the Minimum Spanning Tree Problem. *Algorithmica*, 86(1), 64-89. <https://doi.org/10.1007/s00453-023-01135-x>
- Dunkelberger, K. A. (2007). Semantic search via concept annealing. En B. V. Dasarathy (Ed.), *Data Mining, Intrusion Detection, Information Assurance, and Data Networks Security 2007* (65700K, Vol. 6570). SPIE. <https://doi.org/10.1117/12.720039>
- El-Hachem, M., McCue, S., Jin, W., Du, Y., & Simpson, M. (2019). Revisiting the Fisher–Kolmogorov–Petrovsky–Piskunov equation to interpret the spreading–extinction dichotomy. *Proceedings of the Royal Society A*, 475. <https://doi.org/10.1098/rspa.2019.0378>
- Faber, R., Jockenhövel, T., & Tsatsaronis, G. (2005). Dynamic optimization with simulated annealing. *Computers & Chemical Engineering*, 29(2), 273-290. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2004.08.020>

- Felippa, C., & Park, K. (1997). A direct flexibility method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 149(1), 319-337. [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(97\)00048-0](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(97)00048-0)
- Fisher, R. A. (1937). The wave of advance of advantageous genes. *Ann. Eugenics*, 7(4), 355-369.
- Fleischer, M., & Jacobson, S. (1996). Cybernetic Optimization by Simulated Annealing: An Implementation of Parallel Processing Using Probabilistic Feedback Control, 249-264. https://doi.org/10.1007/978-1-4613-1361-8_16
- Franzke, B., & Kosko, B. (2019). Noise can speed Markov chain Monte Carlo estimation and quantum annealing. *Physical review. E*, 100 5-1, 053309. <https://doi.org/10.1103/physreve.100.053309>
- Fuentes-Caparrós, A. M., de Paula Gómez-Franco, F., Dietrich, B., Wilson, C., Brasnett, C., Seddon, A., & Adams, D. J. (2019). Annealing multicomponent supramolecular gels. *Nanoscale*, 11, 3275-3280. <https://doi.org/10.1039/C8NR09423C>
- Gelfand, S., & Mitter, S. (1985). Analysis of simulated annealing for optimization. 1985 24th IEEE Conference on Decision and Control, 779-786. <https://doi.org/10.1109/CDC.1985.268603>
- Geman, S., & Geman, D. (1984). Stochastic relaxation, gibbs distributions, and the bayesian restoration of images. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, PAMI-6*(6), 721-741.
- Gemen, S., & Hwang, C. (1986). Diffusions for global optimization. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 24, 1031-1043.
- Gidas, B. (1986). The Langevin Equation as a Global Minimization Algorithm, 321-326. https://doi.org/10.1007/978-3-642-82657-3_31

- Giri, J. (2023). Simulated Annealing and Its Applications to Mechanical Engineering: A Review. *International Journal of Innovative Research in Computer Science & Technology (IJIRCST)*. <https://doi.org/10.55524/ncdicm.2023.11.1.3>
- Hajek, B. (1988). Cooling schedules for optimal annealing. *Mathematics of Operations Research*, 13(2), 311-329.
- Haque, M. S., Fahim, M., & Ibrahim, M. (2023). An Exploratory Study on Simulated Annealing for Feature Selection in Learning-to-Rank.
- Hasegawa, M. (2005). Unidirectional Search Dynamics in Optimization by Metropolis Algorithm. *Journal of the Physical Society of Japan*, 74, 2872-2873. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.2872>
- Hasegawa, M. (2011). Verification and rectification of the physical analogy of simulated annealing for the solution of the traveling salesman problem. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, 83 3 Pt 2, 036708. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVE.83.036708>
- Hasnain, S., & Saqib, M. (2017). Numerical Study of One Dimensional Fishers KPP Equation with Finite Difference Schemes. *American Journal of Computational Mathematics*, 07, 720-726. <https://doi.org/10.4236/AJCM.2017.71006>
- Henderson, D., Jacobson, S., & Johnson, A. (2006, abril). The Theory and Practice of Simulated Annealing. https://doi.org/10.1007/0-306-48056-5_10
- Hérault, L. (1998). Rescaled simulated annealing. *1998 IEEE International Joint Conference on Neural Networks Proceedings. IEEE World Congress on Computational Intelligence (Cat. No.98CH36227)*, 2, 1239-1244 vol.2. <https://doi.org/10.1109/IJCNN.1998.685951>
- Ingber, L. (1989). Very fast simulated re-annealing. *Mathematical and Computer Modelling*, 12(8), 967-973.

- Izadi, M. (2020). A second-order accurate finite-difference scheme for the classical Fisher-Kolmogorov-Petrovsky-Piscounov equation. *Journal of Information and Optimization Sciences*, 42, 431-448. <https://doi.org/10.1080/02522667.2019.1696919>
- Karabin, M., & Stuart, S. J. (2020). Simulated annealing with adaptive cooling rates. *The Journal of Chemical Physics*, 153(11), 114103. <https://doi.org/10.1063/5.0018725>
- Khater, M., & Alabdali, A. (2021). Multiple Novels and Accurate Traveling Wave and Numerical Solutions of the (2+1) Dimensional Fisher-Kolmogorov- Petrovskii-Piskunov Equation. *Mathematics*. <https://doi.org/10.3390/math9121440>
- Kirkpatrick, S., Jr., C. D. G., & Vecchi, M. P. (1983). Optimization by simulated annealing. *Science*, 220, 671-680.
- Ko, R., Lee, D. H., & Yoo, H. (2023). Annealing and Doping Effects on Transition Metal Dichalcogenides—Based Devices: A Review. *Coatings*, 13(8). <https://doi.org/10.3390/coatings13081364>
- Kolmogorov, A., Petrovsky, N., & Piscounov, S. (1937). Etude de l'equations de la diffusion avec croissance de la quantite de matiere et son application a un probolome biologique. *Bull. Univ. Mosku*, 1, 1-25.
- Kolonko, M. (1995). A piecewise Markovian model for simulated annealing with stochastic cooling schedules. *Journal of Applied Probability*, 32, 649-658. <https://doi.org/10.2307/3215119>
- Koulamas, C., Antony, S., & Jaen, R. (1994). A survey of simulated annealing applications to operations research problems. *OMEGA-International Journal of Management Science*, 22, 41-56.
- Kudryashov, N. (1993). Exact solutions of a family of Fisher equations. *Theoretical and Mathematical Physics*, 94, 211-218. <https://doi.org/10.1007/BF01019332>

- Kwak, S., Kang, S., Ham, S., Hwang, Y., Lee, G., & Kim, J. (2023). An Unconditionally Stable Difference Scheme for the Two-Dimensional Modified Fisher–Kolmogorov–Petrovsky–Piscounov Equation. *Journal of Mathematics*. <https://doi.org/10.1155/2023/5527728>
- Lockett, A. J., & Miikkulainen, R. (2014). Evolutionary annealing: global optimization in measure spaces. *Journal of Global Optimization*, 58, 75-108. <https://doi.org/10.1007/s10898-013-0064-z>
- Macías-Díaz, J., & Gallegos, A. (2019). On a positivity-preserving numerical model for a linearized hyperbolic Fisher-Kolmogorov-Petrovski-Piscounov equation. *J. Comput. Appl. Math.*, 354, 603-611. <https://doi.org/10.1016/J.CAM.2018.08.002>
- Macías-Díaz, J., Macías-Díaz, J., & Puri, A. (2012). An explicit positivity-preserving finite-difference scheme for the classical Fisher-Kolmogorov-Petrovsky-Piscounov equation. *Appl. Math. Comput.*, 218, 5829-5837. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2011.11.064>
- Málek, J., Hnilica, F., Veselý, J., Smola, B., & Medlín, R. (2017). The effect of annealing temperature on the properties of powder metallurgy processed Ti-35Nb-2Zr-0.5O alloy. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 75, 252-261. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2017.07.032>
- Manthey, B., & Rhijn, J. V. (2022). Towards a Lower Bound for the Average Case Runtime of Simulated Annealing on TSP. *ArXiv*, abs/2208.11444. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2208.11444>
- Martinez-Alfaro, H. (2010). Using Simulated Annealing Algorithm to Solve the Optimal Control Problem. <https://doi.org/10.5772/10035>
- Meise, C. (1998). On the convergence of parallel simulated annealing. *Stochastic Processes and their Applications*, 76, 99-115. [https://doi.org/10.1016/S0304-4149\(98\)00011-8](https://doi.org/10.1016/S0304-4149(98)00011-8)

- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., & Teller, A. H. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6), 1087-1092.
- Minissale, M., Durif, A., Hiret, P., Vidal, T., Faucheux, J., Lenci, M., Mondon, M., Kermouche, G., Pontillon, Y., Grisolia, C., Richou, M., & Gallais, L. (2020). A high power laser facility to conduct annealing tests at high temperature. *Review of Scientific Instruments*, 91(3), 035102. <https://doi.org/10.1063/1.5133741>
- Mitra, D., Romeo, F., & Sangiovanni-Vincentelli, A. (1986). Convergence and finite-time behavior of simulated annealing. *Advances in Applied Probability*, 18(3), 747-771. <https://doi.org/10.2307/1427186>
- Newman, W. I. (1980). Some exact solutions to a non-linear diffusion problem in population genetics and combustion. *Journal of theoretical biology*, 85 2, 325-34. [https://doi.org/10.1016/0022-5193\(80\)90024-7](https://doi.org/10.1016/0022-5193(80)90024-7)
- Newman, W. I. (1983). The long-time behavior of the solution to a non-linear diffusion problem in population genetics and combustion. *Journal of Theoretical Biology*, 104, 473-484. [https://doi.org/10.1016/0022-5193\(83\)90240-0](https://doi.org/10.1016/0022-5193(83)90240-0)
- Nguyen, L. T., Kim, J., & Shim, B. (2021a). Gradual Federated Learning With Simulated Annealing. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 69, 6299-6313. <https://doi.org/10.1109/tsp.2021.3125137>
- Nguyen, L. T., Kim, J., & Shim, B. (2021b). Gradual Federated Learning with Simulated Annealing. *CoRR*, abs/2110.05178. <https://arxiv.org/abs/2110.05178>
- Nolte, A., & Schrader, R. (2000). A Note on the Finite Time Behavior of Simulated Annealing. *Math. Oper. Res.*, 25, 476-484. <https://doi.org/10.1287/moor.25.3.476.12211>
- Oruc, O. (2019). An efficient wavelet collocation method for nonlinear two-space dimensional Fisher–Kolmogorov–Petrovsky–Piscounov equation and two-space dimensional

- sional extended Fisher–Kolmogorov equation. *Engineering with Computers*, 36, 839-856. <https://doi.org/10.1007/s00366-019-00734-z>
- Pao, D., Lam, S., & Fong, A. (1999). Parallel implementation of simulated annealing using transaction processing. 146, 107-113. <https://doi.org/10.1049/IP-CDT:19990096>
- Pappala, D. S., & Gulhane, A. (2023). Simulated Annealing Search Technique. *INTERNATIONAL JOURNAL OF SCIENTIFIC RESEARCH IN ENGINEERING AND MANAGEMENT*. <https://doi.org/10.55041/ijsrem25559>
- Patel, A. N., Mah, R. S. H., & Karimi, I. (1991). Preliminary design of multiproduct noncontinuous plants using simulated annealing. *Computers & Chemical Engineering*, 15, 451-469. [https://doi.org/10.1016/0098-1354\(91\)85025-P](https://doi.org/10.1016/0098-1354(91)85025-P)
- Patel, S. P. (2022). A Review Study on Experimental Investigation of Annealing Heat Treatment Process on SS 316 and Mild Steel Joint by SMAW Process. *INTERNATIONAL JOURNAL OF SCIENTIFIC RESEARCH IN ENGINEERING AND MANAGEMENT*. <https://doi.org/10.55041/ijsrem12278>
- Patidar, K. C. (2016). Nonstandard finite difference methods: recent trends and further developments. *Journal of Difference Equations and Applications*, 22(6), 817-849. <https://doi.org/10.1080/10236198.2016.1144748>
- Richardt, J., Karl, F., & Müller, C. (1998). Connections between fuzzy theory, simulated annealing, and convex duality. *Fuzzy Sets and Systems*, 96, 307-334.
- Rose, K. (1998). Deterministic annealing for clustering, compression, classification, regression, and related optimization problems. *Proceedings of the IEEE*, 86(11), 2210-2239.
- Safaei, N., Tavakkoli-Moghaddam, R., & Kiassat, C. (2012). Annealing-based particle swarm optimization to solve the redundant reliability problem with multiple compo-

- nent choices. *Appl. Soft Comput.*, 12, 3462-3471. <https://doi.org/10.1016/j.asoc.2012.07.020>
- Sánchez, H. S., & Solís, J. F. (2000). A Methodology to Parallel the Temperature Cycle in Simulated Annealing, 63-74. https://doi.org/10.1007/10720076_6
- Shapovalov, A., & Trifonov, A. (2014). Asymptotic solutions of the 1D nonlocal Fisher-KPP equation. *arXiv: Analysis of PDEs*. <https://doi.org/10.1142/S0219887818501025>
- Szu, H. H., & Hartley, R. L. (1987). Nonconvex optimization by fast simulated annealing. *Proceedings of the IEEE*, 75, 1538-1540.
- Tong, X., Zhang, H., & Li, D. (2015). Effect of Annealing Treatment on Mechanical Properties of Nanocrystalline α -iron: an Atomistic Study. *Scientific Reports*, 5. <https://doi.org/10.1038/srep08459>
- Tran, M. T. (1992). Simulated Annealing — Absorption & Recurrent Behaviour in Time-Inhomogeneous Markov Chains, 290-293. https://doi.org/10.1007/978-3-642-48417-9_80
- Tsallis, C., & Stariolo, D. A. (1996). Generalized simulated annealing. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 233, 395-406.
- Ventresca, M., & Tizhoosh, H. R. (2007). Simulated annealing with opposite neighbors. *IEEE Symposium on Foundations of Computational Intelligence*.
- Wah, B., & Wang, T. (1999). Simulated Annealing with Asymptotic Convergence for Nonlinear Constrained Global Optimization, 461-475. https://doi.org/10.1007/978-3-540-48085-3_33
- Wang, C., Lin, M., Zhong, Y., & Zhang, H. (2015). Solving travelling salesman problem using multiagent simulated annealing algorithm with instance-based sampling. *Int. J. Comput. Sci. Math.*, 6, 336-353. <https://doi.org/10.1504/IJCSM.2015.071818>

- Waryoba, D., Islam, Z., Wang, B., & Haque, A. (2019). Low temperature annealing of metals with electrical wind force effects. *Journal of Materials Science & Technology*, 35(4), 465-472. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2018.09.069>
- Xiang, Y., Gubian, S., & Martin, F. (2017). Generalized Simulated Annealing. <https://doi.org/10.5772/66071>
- Yarali, E., Koutsiaki, C., Faber, H., Tetzner, K., Yengel, E., Patsalas, P., Kalfagiannis, N., Koutsogeorgis, D. C., & Anthopoulos, T. D. (2020). Recent Progress in Photonic Processing of Metal-Oxide Transistors. *Advanced Functional Materials*, 30(20), 1906022. <https://doi.org/10.1002/adfm.201906022>
- Youssef, M., Khader, M., Al-Dayel, I., & Ahmed, W. E. (2022). Solving Fractional Generalized Fisher–Kolmogorov–Petrovsky–Piskunov’s Equation Using Compact-Finite Different Methods Together with Spectral Collocation Algorithms. *Journal of Mathematics*. <https://doi.org/10.1155/2022/1901131>
- Zhan, S.-h., Lin, J., Zhang, Z.-j., & Zhong, Y. (2016). List-Based Simulated Annealing Algorithm for Traveling Salesman Problem. *Computational Intelligence and Neuroscience*, 2016. <https://doi.org/10.1155/2016/1712630>
- Zhong, Y., Ning, J., & Zhang, H. (2012). Multi-agent simulated annealing algorithm based on particle swarm optimisation algorithm. *Int. J. Comput. Appl. Technol.*, 43, 335-342. <https://doi.org/10.1504/IJCAT.2012.047158>