



Metaheurísticas Bio-Inspiradas para Optimización: La Última Frontera

Dr. Carlos A. Coello Coello

CINVESTAV-IPN

Email: carlos.coellocoello@cinvestav.mx

Organización de esta plática

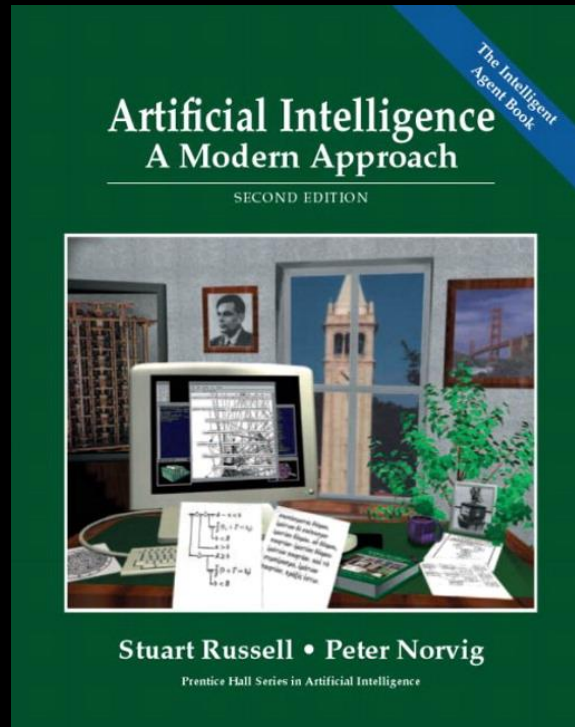
- ¿Qué es una metaheurística?
 - Definición (heurística y metaheurística)
 - Ventajas y desventajas
- Metaheurísticas bio-inspiradas
 - Definición
 - Ejemplos
 - Aplicaciones
- Conclusiones

¿Qué es una heurística?



La palabra “heurística” se deriva del griego *heuriskein*, que significa “encontrar” o “descubrir”. El significado del término ha variado históricamente. En los orígenes de la Inteligencia Artificial, se usó este término como un antónimo de “algorítmico”. Por ejemplo, Newell et al. dicen: “a un proceso que puede resolver un cierto problema, pero que no ofrece ninguna garantía de lograrlo, se le denomina una “*heurística*” para ese problema”.

¿Qué es una heurística?



Las heurísticas fueron un área predominante en los orígenes de la Inteligencia Artificial. Actualmente, el término suele usarse como un adjetivo, refiriéndose a cualquier técnica que mejore el desempeño en promedio de la solución de un problema, aunque no mejore necesariamente el desempeño en el peor caso [Russell & Norvig, 1995].

¿Qué es una heurística?



Una definición más precisa y adecuada para los fines de esta plática es la proporcionada por Colin Reeves [1993]:

Una **heurística** es una técnica que busca soluciones buenas (es decir, casi óptimas) a un costo computacional razonable, aunque sin garantizar factibilidad u optimalidad de las mismas.

¿Qué es una metaheurística?



El término **metaheurística** lo acuñó Fred Glover en su artículo seminal sobre búsqueda tabú de 1986.

Las metaheurísticas son procedimientos de búsqueda de alto nivel que aplican alguna regla o conjunto de reglas que se basa(n) en alguna fuente de conocimiento, a fin de explorar el espacio de búsqueda de manera más eficiente.

Ventajas y desventajas



En optimización, una **metaheurística** puede verse como un método numérico (de búsqueda directa) que utiliza cierta información del problema para hacer una búsqueda relativamente eficiente, sin garantizar que se obtendrá el óptimo global.

Pese a sus aparentes limitantes, las metaheurísticas se han vuelto muy populares en los últimos 25 años, porque los métodos exactos sólo pueden aplicarse a ciertas clases de problemas de optimización y los diseñados para problemas discretos se basan en el uso de búsquedas exhaustivas.

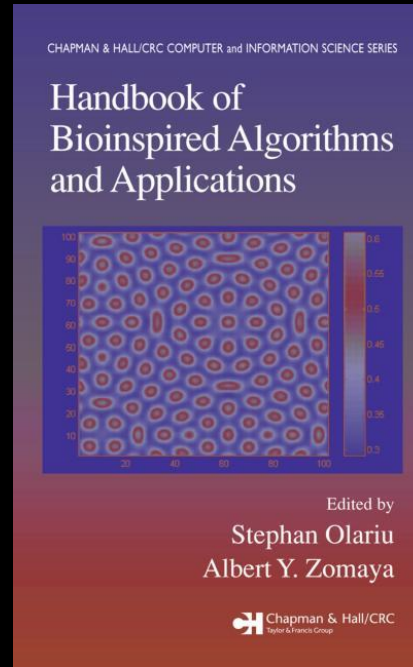
Ventajas y desventajas



Las metaheurísticas se han vuelto muy populares por su flexibilidad y facilidad de uso, además de constituir la última línea de defensa en optimización.

Sin embargo, su principal limitante es su costo computacional que puede hacer prohibitivo su uso en algunos problemas (p.ej., en ingeniería aeronáutica).

Metaheurísticas bio-inspiradas



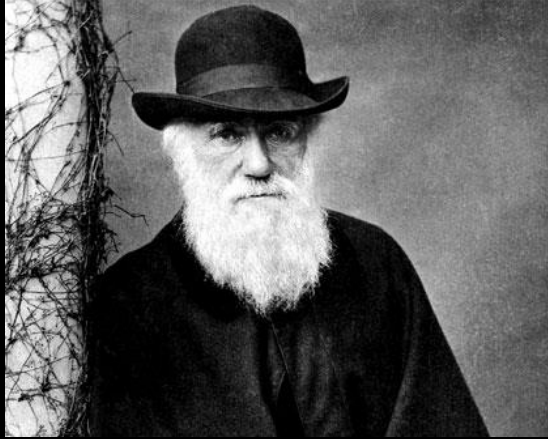
Existe una clase particular de metaheurísticas que se ha vuelto muy popular en los últimos años, en la cual las reglas para elegir soluciones se basan en conceptos biológicos tales como la evolución natural, los movimientos de las hormigas, los patrones de vuelo de las aves, etc.

A este tipo de técnicas se les conoce como metaheurísticas bio-inspiradas.

Algunos Ejemplos de Metaheurísticas Bio-inspiradas

- Algoritmos Evolutivos
- Cúmulos de partículas
- Colonia de hormigas

Algoritmos evolutivos



Son algoritmos de búsqueda estocásticos que se basan en el principio de “supervivencia del más apto” de Charles Darwin. Constan de los siguientes componentes mínimos:

- 1) Estructuras que se replican (los individuos).
- 2) Una función de aptitud.
- 3) Un mecanismo de selección.
- 4) Operadores que actúan sobre los individuos (cruza y mutación).

Algoritmos evolutivos

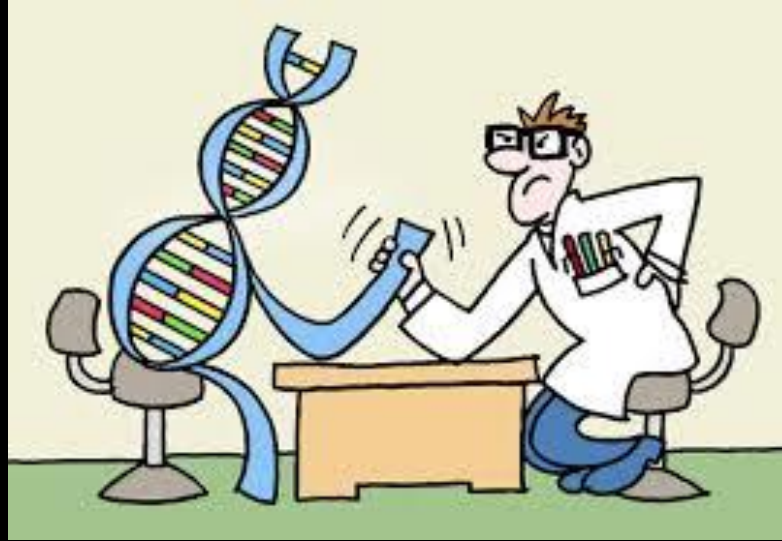
Los algoritmos evolutivos parten de un conjunto de soluciones generadas aleatoriamente (la **población**).

Para cada solución se calcula un valor que suele corresponder al de la función objetivo que queremos optimizar (aunque suele normalizarse). A este valor se le llama **aptitud**.

Posteriormente, se selecciona un conjunto de padres a los que suele aplicarse al menos un operador genético (v.g., cruza y/o mutación) con una cierta probabilidad (es decir, el operador no se aplica a todos los padres).

Los nuevos individuos son denominados **hijos** y posteriormente, se muta (o sea, se les hace un pequeño cambio). Estos nuevos individuos constituyen una nueva población que reemplazará parcial o totalmente a la anterior.

Algoritmos evolutivos



Existen 3 paradigmas principales dentro de los algoritmos evolutivos:

- 1) Programación Evolutiva
- 2) Estrategias Evolutivas
- 3) Algoritmos Genéticos

- Programación Genética

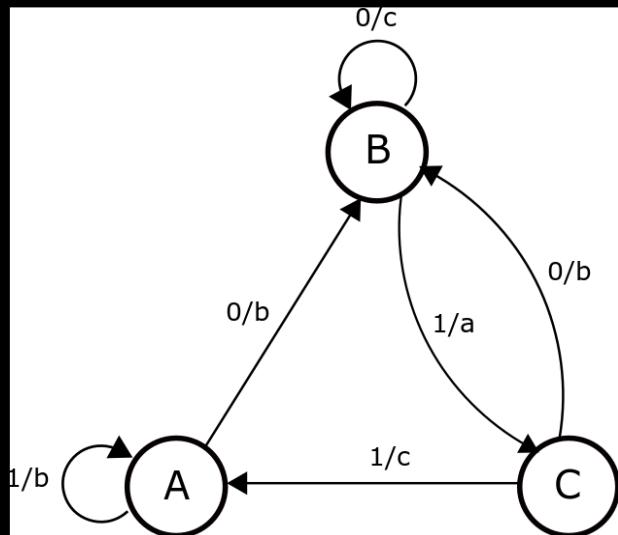
Programación Evolutiva



Lawrence J. Fogel concibió el uso de la evolución simulada en la solución de problemas hacia mediados de los 1960s. Su técnica se denominó **Programación Evolutiva** y enfatiza el nexo entre padres e hijos.

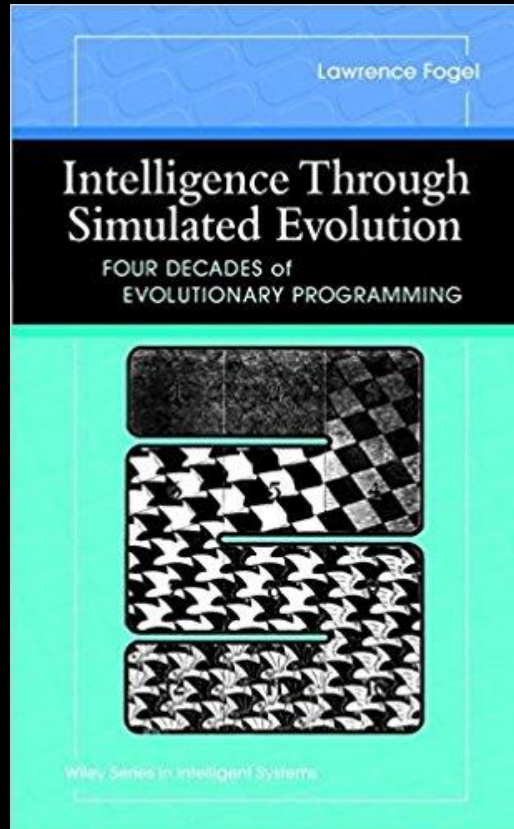
Programación Evolutiva

Estado actual	C	B	C	A	A	B
Símbolo de entrada	0	1	1	1	0	1
Estado siguiente	B	C	A	A	B	C
Símbolo de salida	b	a	c	b	b	a



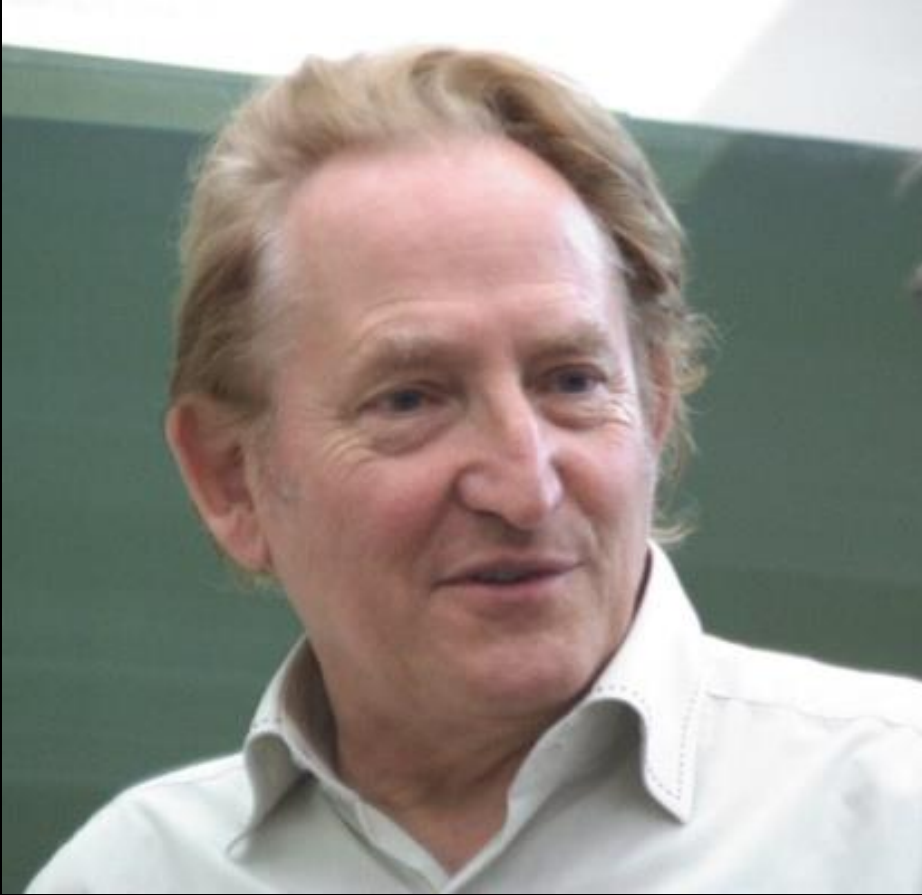
La programación evolutiva se utilizó originalmente para resolver problemas de predicción mediante autómatas de estados finitos.

Programación Evolutiva



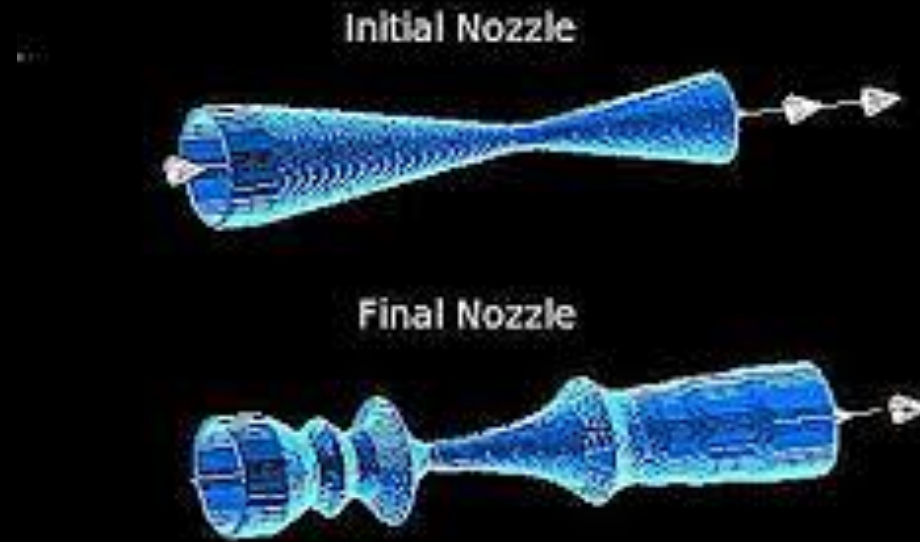
La **programación evolutiva** simula la evolución natural a nivel de las especies. Como especies diferentes no pueden recombinarse, esta metaheurística utiliza sólo mutación. Esta metaheurística es la menos utilizada de los 3 paradigmas y suele aplicarse a problemas de clasificación y predicción.

Estrategias Evolutivas



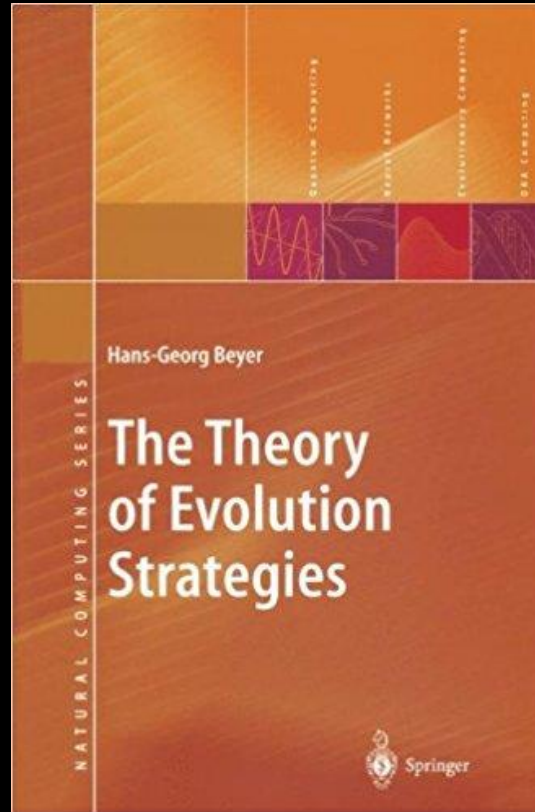
Ingo Rechenberg y Hans-Paul Schwefel desarrollaron, en Alemania, hacia mediados de los 1960s un método de optimización inspirado en la evolución al que luego denominaron "**estrategias evolutivas**".

Estrategias Evolutivas



La versión original, denominada (1+1)-EE usaba un solo padre y con él se generaba un solo hijo usando un operador de “mutación”. Este hijo se mantenía si era mejor que el padre, o de lo contrario se eliminaba. Esta técnica se usó con éxito para resolver un problema de hidrodinámica de alta complejidad.

Estrategias Evolutivas



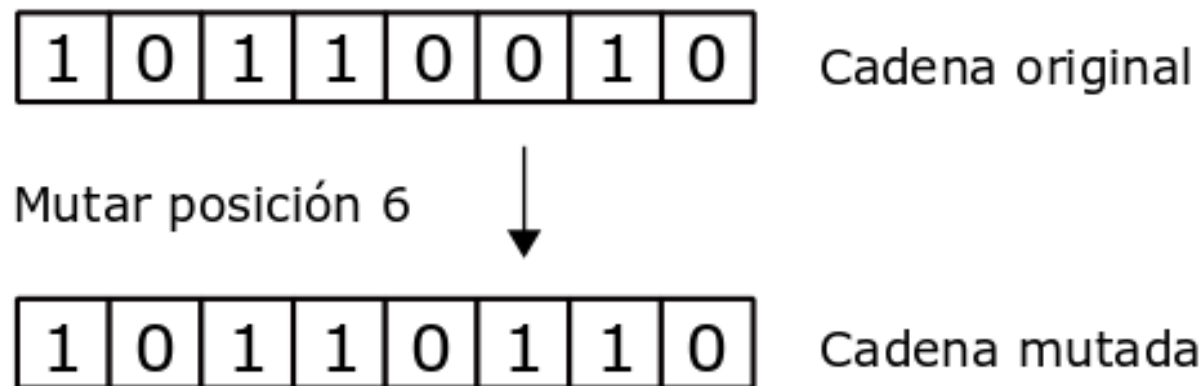
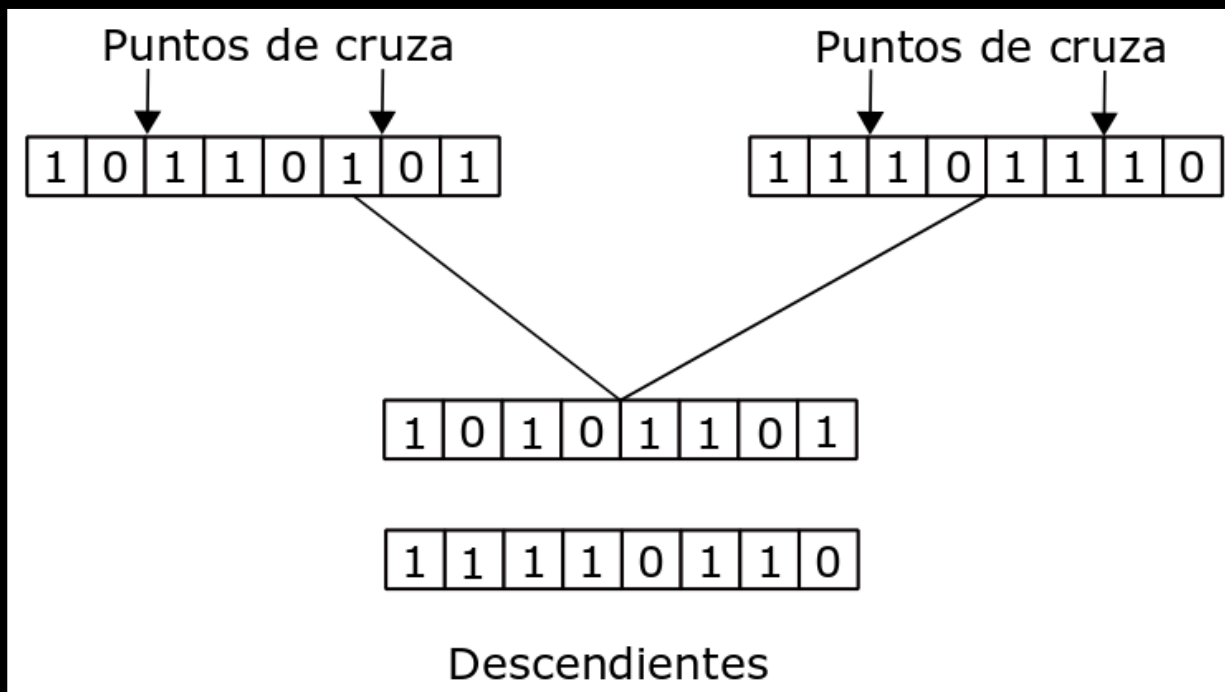
Las estrategias evolutivas simulan la evolución al nivel del “individuo”, por lo que la cruce (sexual) es posible, aunque este operador es secundario. El operador principal es la mutación. Esta metaheurística es particularmente adecuada para problemas de optimización numérica.

Algoritmos genéticos

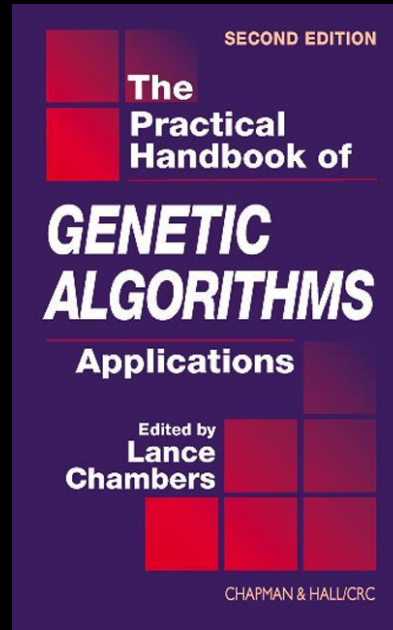


John H. Holland desarrolló a principios de los 1960s los "planes reproductivos" y "adaptativos" en un intento por hacer que las computadoras aprendan imitando el proceso de la evolución. Esta técnica sería después conocida mundialmente como el "**algoritmo genético**".

Algoritmos genéticos



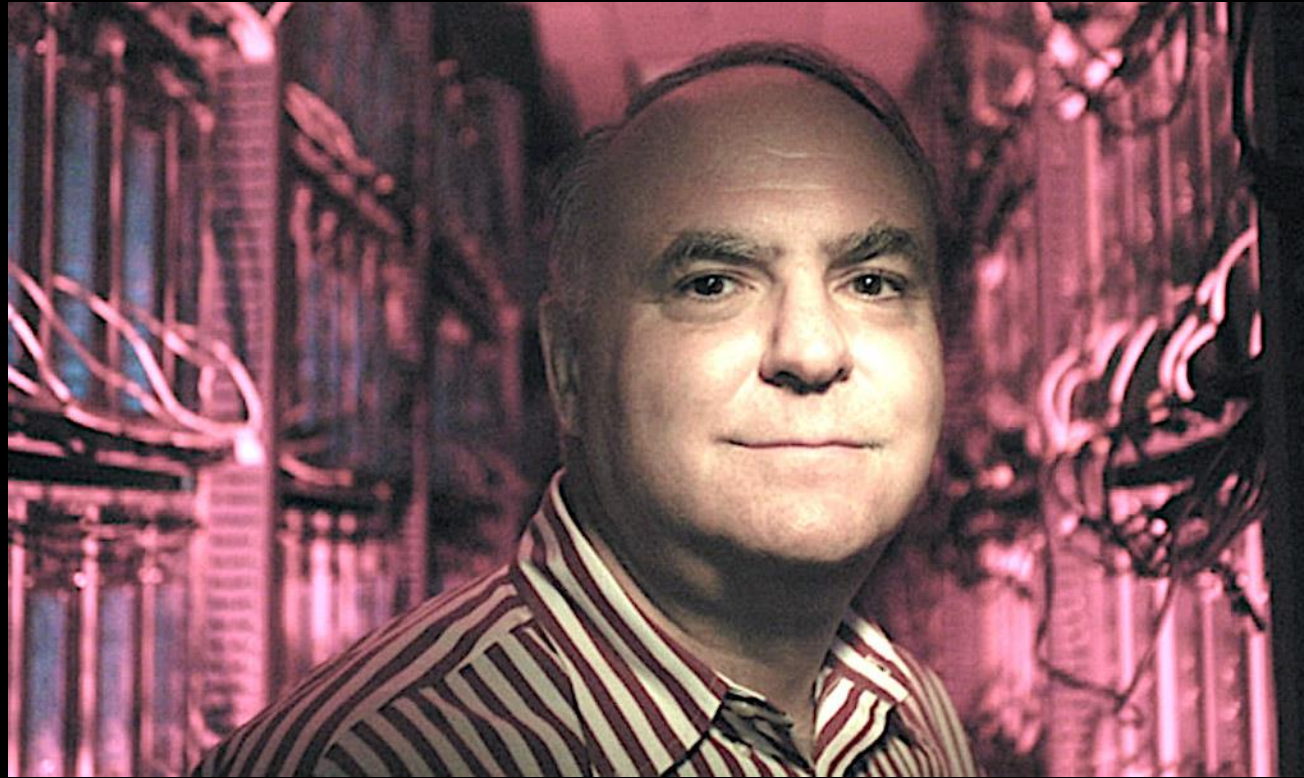
Algoritmos genéticos



En su versión original, el algoritmo genético requiere que las variables se codifiquen en binario (el alfabeto binario es universal). Utilizan tanto cruza como mutación, pero en este caso, la cruza (sexual) es el operador principal.

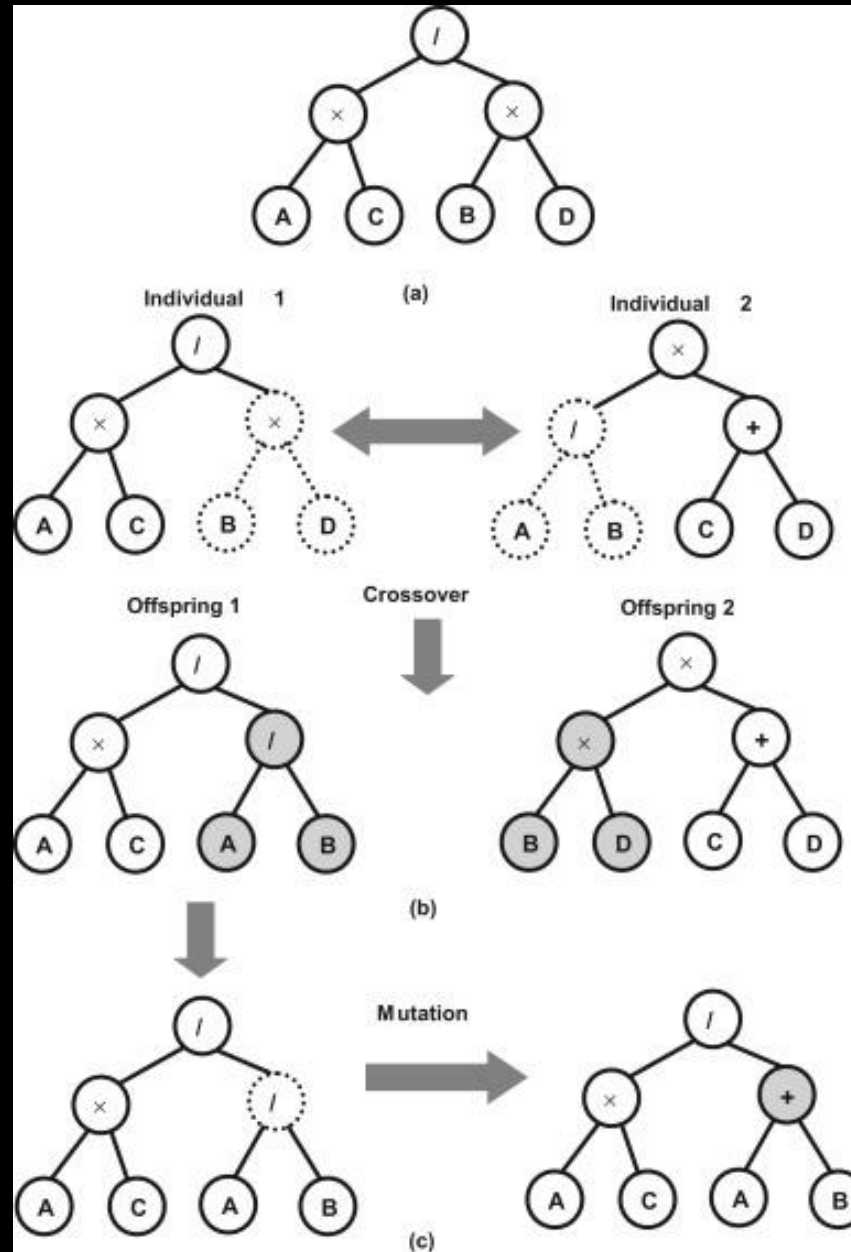
Los algoritmos genéticos son particularmente buenos para resolver problemas de optimización con variables mixtas.

Programación genética

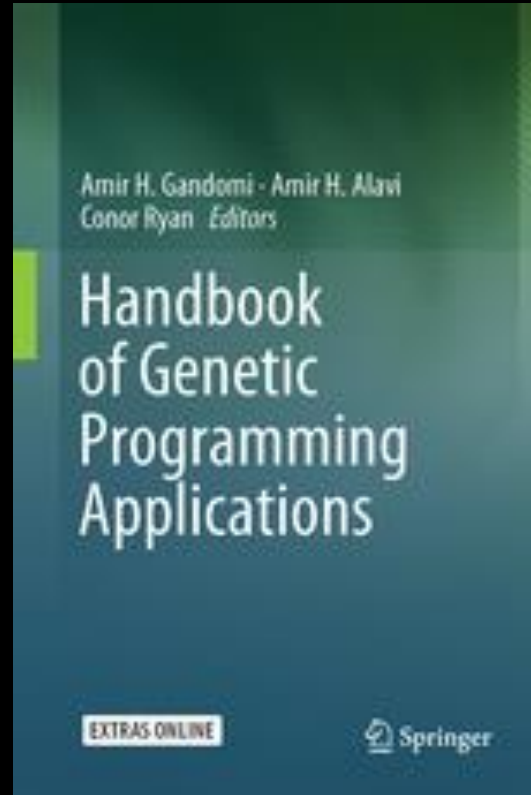


En los años 1980s, John Koza propuso una variante del algoritmo genético en la que se usa una representación de árbol. Esta técnica se conoce como “**Programación Genética**” y es muy popular hoy en día, aunque requiere de una cantidad considerable de recursos de cómputo.

Programación genética

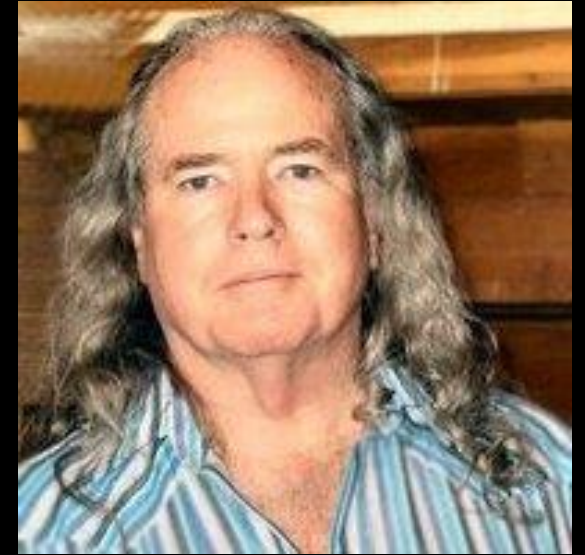


Programación genética

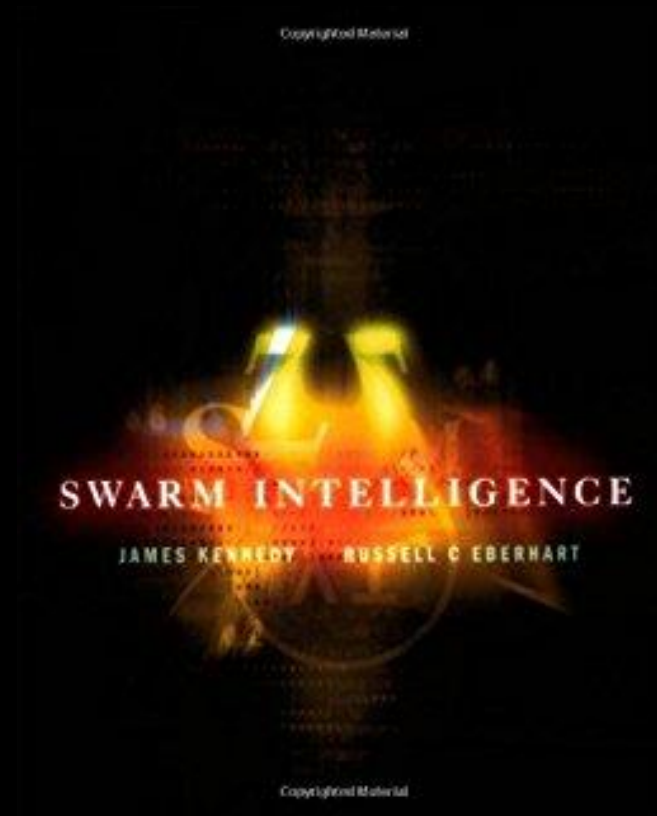


Originalmente, la programación genética se usó para regresión simbólica. Sin embargo, como su propósito es evolucionar programas de computadora de cualquier tipo, con los años se usó para evolucionar, entre otras cosas, algoritmos de ordenamiento, para diseñar circuitos (algunos de los cuales fueron patentados), antenas, etc.

Cúmulos de Partículas



Cúmulos de Partículas



La optimización mediante cúmulos de partículas es una metaheurística muy simple y rápida que, pese a tener algunas limitantes teóricas, ha sido muy popular. Se ha usado sobre todo para optimización continua (o sea, problemas en los que todas las variables son números reales).

Colonia de hormigas

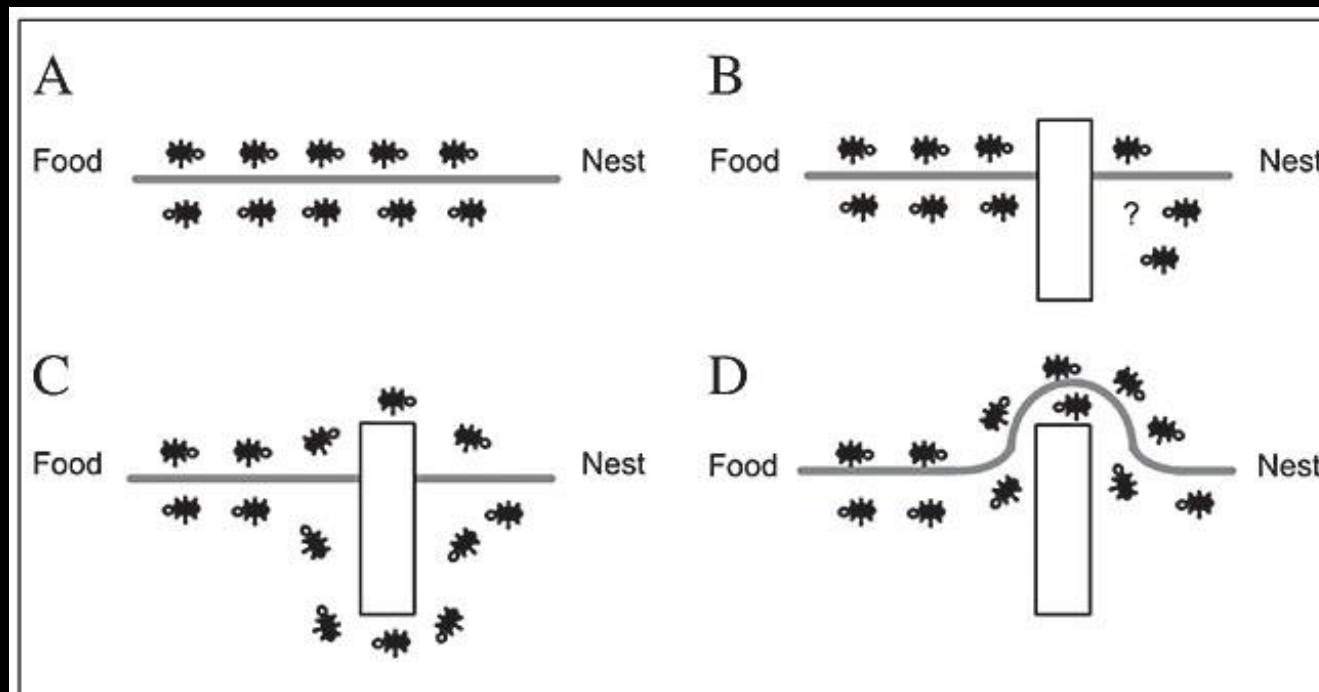
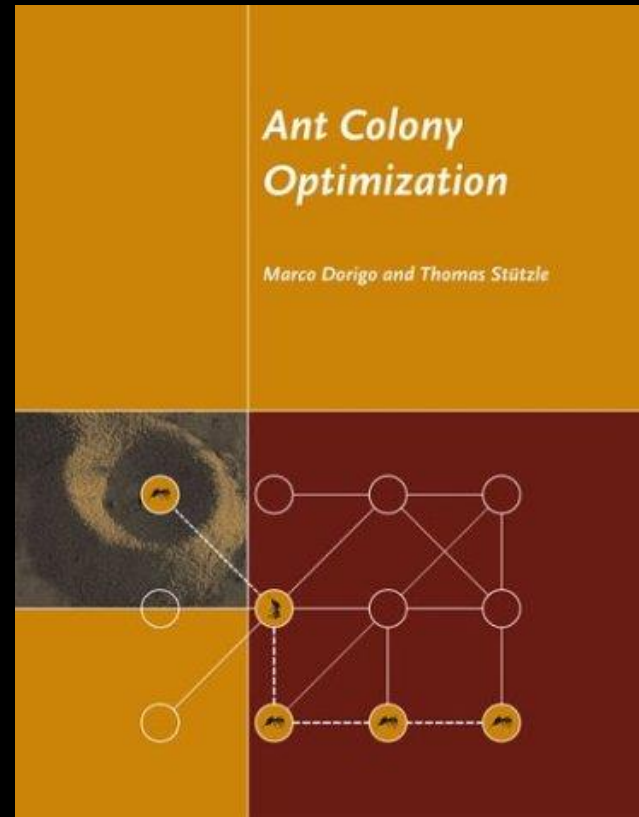


Figure 2. A. Ants in a pheromone trail between nest and food; B. an obstacle interrupts the trail; C. ants find two paths to go around the obstacle; D. a new pheromone trail is formed along the shorter path.

Colonia de hormigas



La colonia de hormigas se propuso originalmente para resolver un problema combinatorio muy famoso (el problema del viajero) y en sus orígenes sólo podía resolver problemas de este tipo. Sin embargo, hoy en día existen versiones de este algoritmo para problemas continuos, si bien sigue siendo muy popular en problemas combinatorios.

Aspectos a destacar

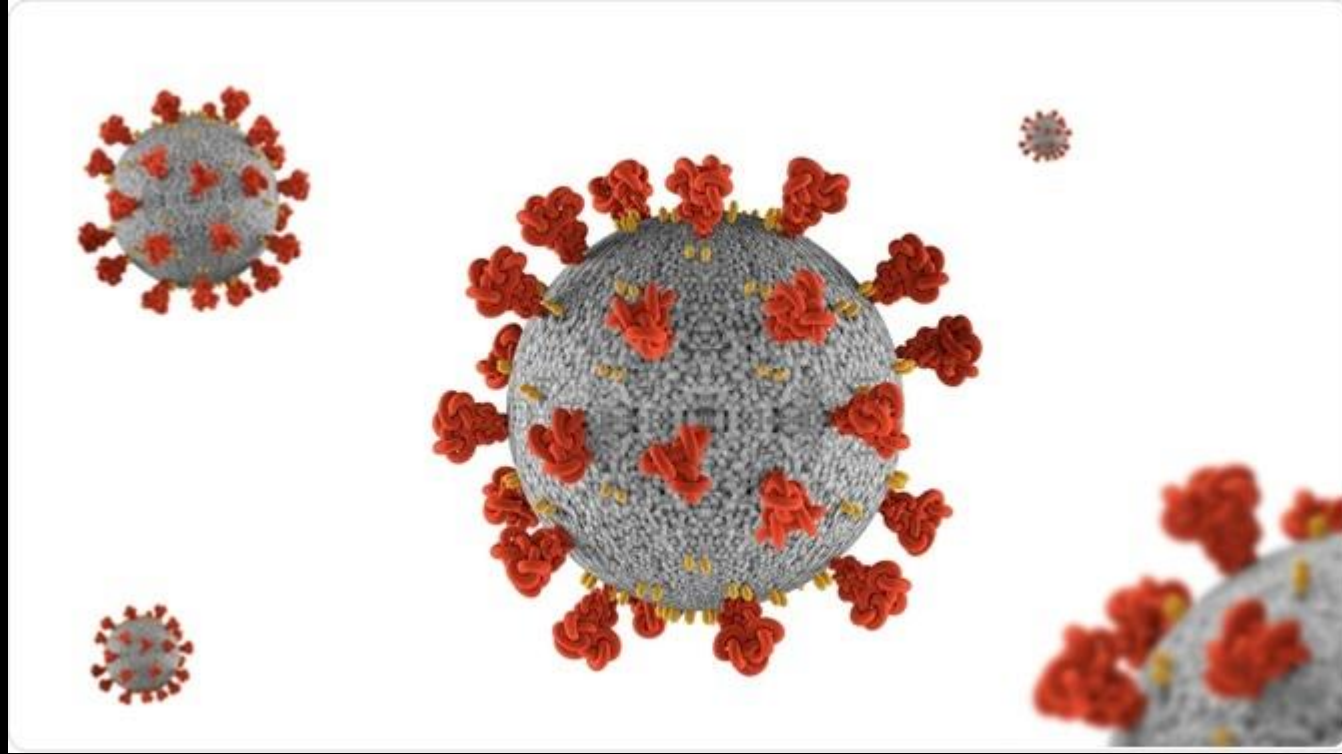
- Las metaheurísticas bio-inspiradas, en general, son algoritmos estocásticos. Por tanto, no siempre producen la misma salida aunque reciban la misma entrada.
- A pesar de que la investigación en metaheurísticas bio-inspiradas (sobre todo, en algoritmos evolutivos) es un área que tiene más de 50 años de existencia, aún hay muchas preguntas que no hemos podido responder. Tal vez las principales sean las relacionadas con su aplicabilidad.
- Uno de los resultados teóricos más importantes del siglo XX es que se pudo demostrar que no es posible diseñar una metaheurística bio-inspirada estocástica que pueda ser mejor que todas las demás en todas las clases de problemas (**No Free Lunch Theorem**).

Aplicaciones



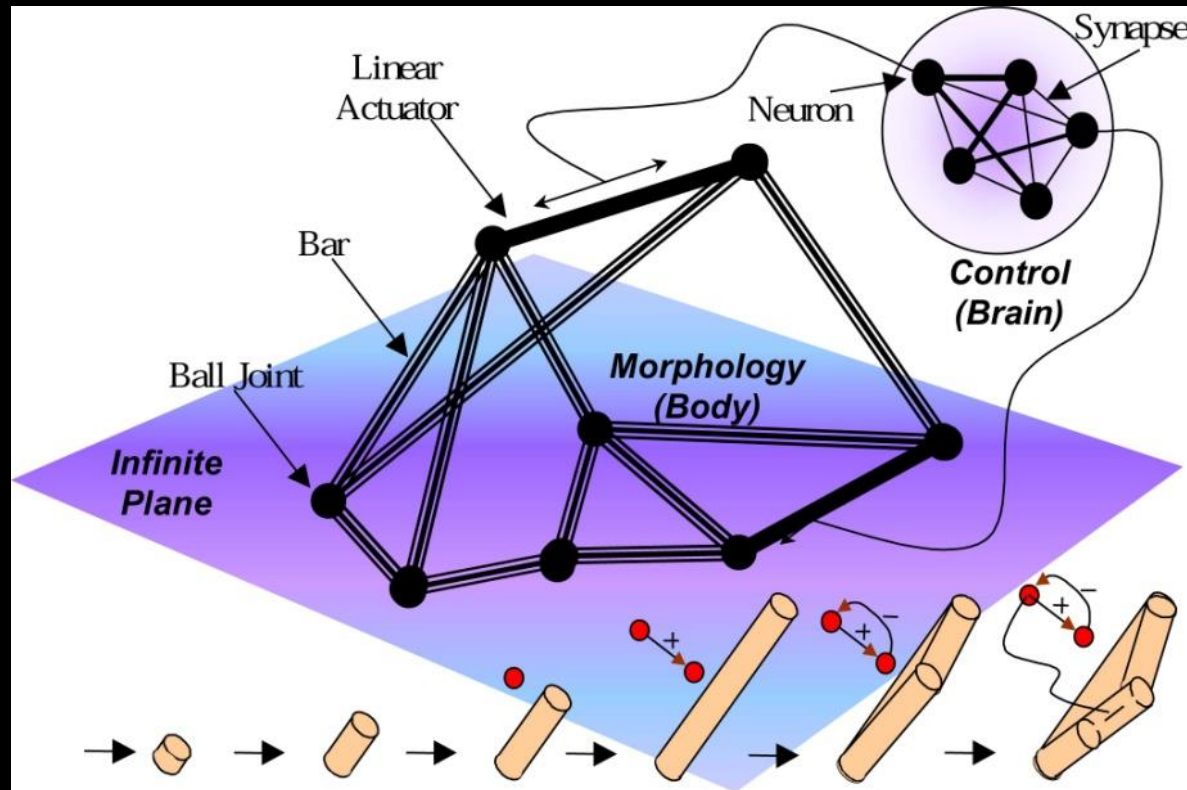
Se sabe que se usaron algoritmos genéticos para optimizar el diseño de la serie N700 del Shinkansen (tren bala japonés).

Aplicaciones



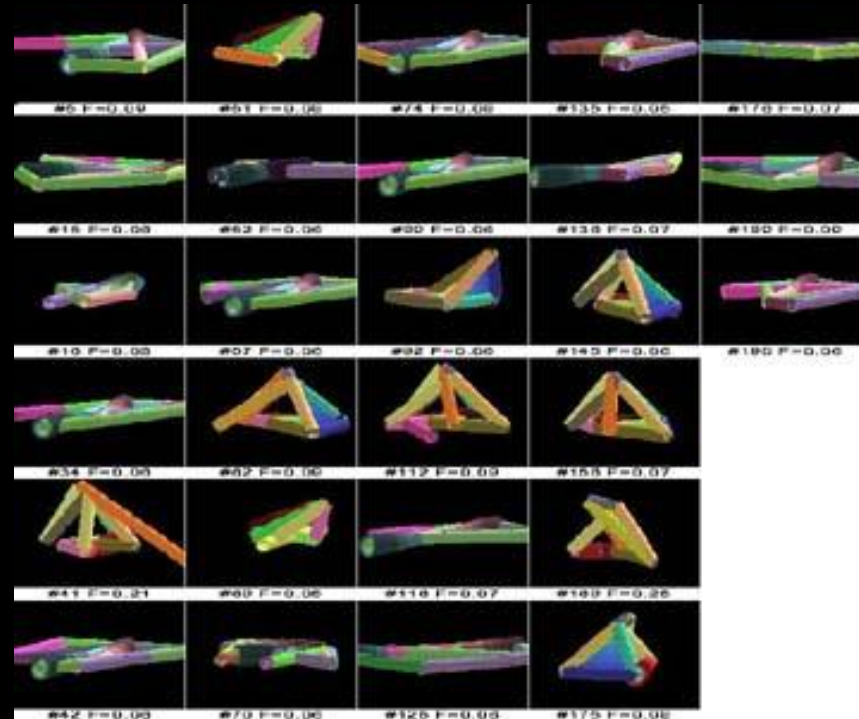
Investigadores norteamericanos mostraron recientemente que un algoritmo propuesto por ellos (**Evolutionary Surrogate-Assisted Prescription**) puede utilizarse para generar estrategias efectivas no farmacéuticas (p.ej., distanciamiento social) que ayuden a contener una pandemia como la del COVID-19.

Aplicaciones



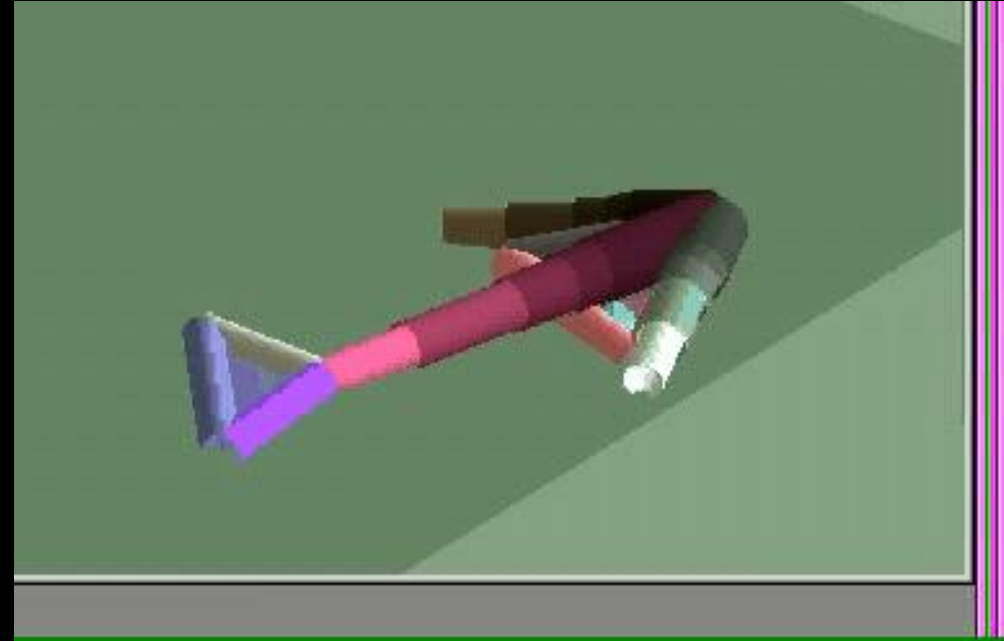
Investigadores de las Universidades de Brandeis y Cornell lograron producir robots que caminan a partir de un conjunto de bloques constructores y de los operadores de un algoritmo genético. Para ello, usaron barras y actuadores como los bloques constructores de la estructura y adoptaron neuronas artificiales como los bloques constructores del sistema de control de los robots.

Aplicaciones

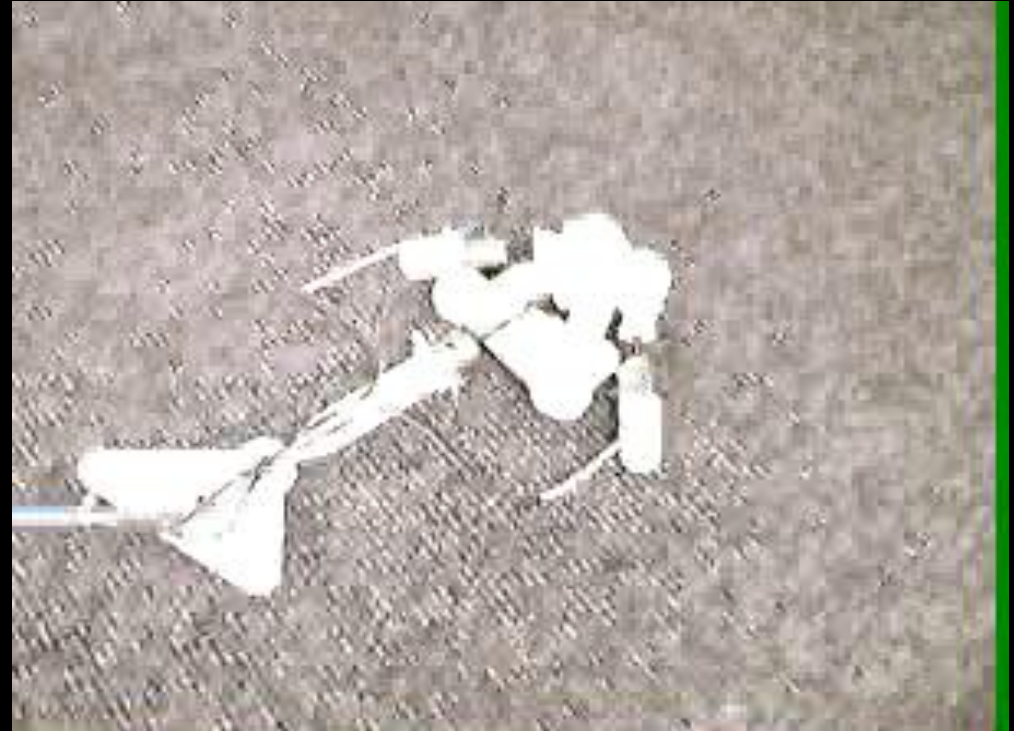


Los experimentos se realizaron partiendo de una población de 200 máquinas que comienzan con cero barras y cero neuronas. La aptitud de una máquina se determina por su capacidad locomotora. La forma (cuerpo) y el cerebro (control) del robot se co-evolucionan simultáneamente. Durante el proceso evolutivo, los investigadores notaron fenómenos tales como la emergencia de patrones de diseño y la extinción masiva.

Aplicaciones



Aplicaciones

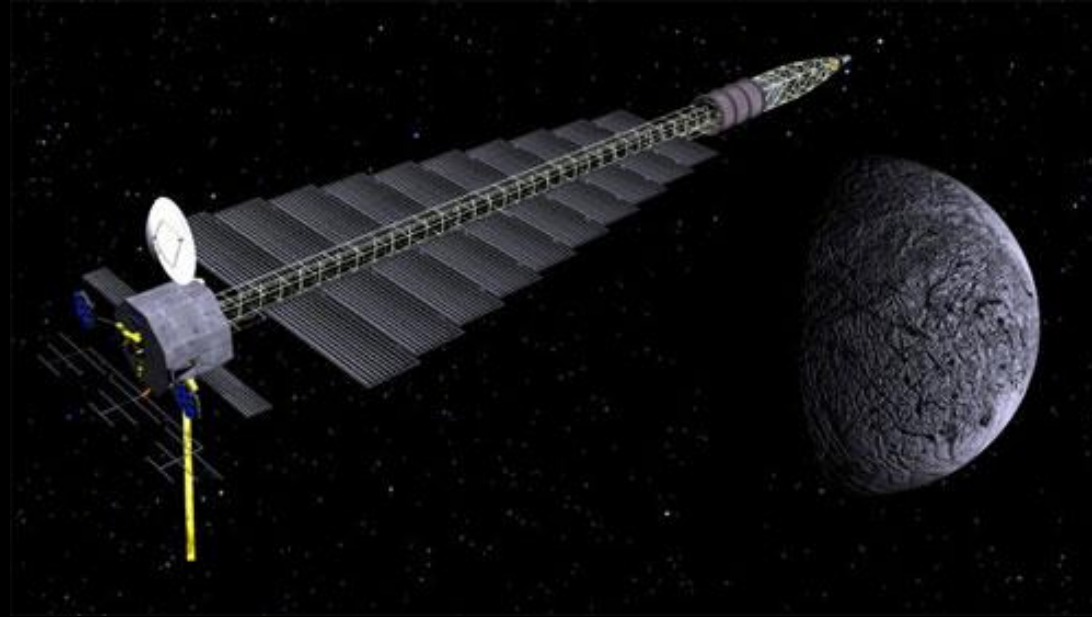


Aplicaciones



Uso de algoritmos evolutivos multi-objetivo en problemas con muchas funciones objetivo de la industria aeronáutica en la *Japan Aerospace Exploration Agency* (JAXA).

Aplicaciones



Las misiones espaciales futuras dependerán de las propulsiones de bajo empuje, tales como la solar-eléctrica. En una colaboración con la NASA, en 2004, desarrollamos un algoritmo evolutivo multi-objetivo para optimizar tanto el consumo de combustible de un vehículo espacial, así como su tiempo de vuelo durante los cambios de órbita. Este problema es sumamente interesante porque su número de variables no es fijo y presenta una muy alta dimensionalidad (llegamos a trabajar con instancias de hasta 16,000 variables).

Conclusiones

- El rápido crecimiento de la velocidad de los procesadores y el abaratamiento de las memorias de las computadoras que experimentamos hacia finales del siglo XX contribuyó a popularizar el uso de las metaheurísticas bioinspiradas.
- La flexibilidad y facilidad de uso que ofrecen las metaheurísticas las han vuelto una opción recurrente para resolver problemas (sobre todo de optimización) de alta complejidad. Sin embargo, debe evitarse su uso indiscriminado, pues no son adecuadas para todo tipo de problemas.
- Considero que en los próximos años, el uso de las metaheurísticas bioinspiradas se popularizará todavía más y se les utilizará para problemas cada vez más complejos y desafiantes (p.ej., diseño de fármacos).

