UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Optimización en el mundo real: la multimodalidad

Apellidos, nombre	Izquierdo Sebastián, Joaquín[1] (jizquier@upv.es)
Departamento	[1]Departamento de Matemática Aplicada
Centro	Universitat Politècnica de València

1 Resumen

En cualquier rama de la ciencia e incluso en la misma rutinaria actividad humana la optimización está permanentemente presente. Los conceptos y técnicas de optimización que se explican en muchos planes de estudios se reducen a lo más básico: lo relacionado, de manera exclusiva, con la derivación. Esto conduce, de manera inexorable, a que los ejemplos presentados deban ser realmente elementales y desprovistos de conexión práctica con los problemas de optimización del mundo real. Para este tipo de problemas, las técnicas básicas para explorar el espacio de búsqueda – si es que se pueden aplicar –, casi nunca garantizan la obtención del óptimo global que, generalmente, es el objetivo. Una de las dificultades estriba en que la mayor parte de problemas de optimización reales son multimodales, lo que significa que en el paisaje asociado a una función objetivo coexisten muchos óptimos locales, en los cuales los algoritmos de optimización habituales quedan fácilmente atrapados. En este artículo te mostramos las dificultades, con frecuencia insospechadas, que la multimodalidad plantea en la optimización. Para ello hacemos uso de un objeto de aprendizaje interactivo en el que se utiliza un conjunto de formas de visualización de diversas funciones del benchmarking de la literatura sobre optimización. El uso de este objeto de aprendizaje te proporcionará competencias imprescindibles para la compresión e interpretación de la multimodalidad en la optimización, punto de partida para una capacidad competencial transversal y multidisciplinar ante una futura necesidad profesional de resolver problemas de optimización como los que se presentan en las aplicaciones reales.

2 Introducción

Cualquier persona, cualquier empresa persigue conseguir los mejores resultados, realizar la mejor gestión posible, optimizar su actividad, en general. En determinadas ocasiones, los objetivos son cuantificables mediante mecanismos, por ejemplo funciones, que dependen de un conjunto de variables más o menos amplio. Encontrar la combinación de valores de tales variables que proporcione el mejor valor para la o las funciones objetivo consideradas es la meta de la optimización.

En los cursos elementales, el tratamiento de la optimización se centra, casi de manera exclusiva, en los aspectos de la optimización directamente relacionados con la derivación. Como consecuencia, de manera general, los problemas del mundo real, que típicamente están plagados de singularidades (discontinuidades, no-linealidades, mezcla de varios tipos de variables, alta dimensionalidad, etc.), quedan automáticamente excluidos. Es cierto que en esos cursos tan tempranos no se pueden abordar tales clases de problemas y, como consecuencia, los ejemplos que se estudian tienen conexión muy escasa con los problemas del mundo real. Sin embargo, el alumno, en particular el alumno de cualquier ingeniería, debería ser consciente de la existencia de tales problemas y conocer algunas de sus características, que los hacen inabordables por los métodos elementales, que se muestran incapaces de enfrentarse a la naturaleza de tales problemas.

Una de tales características es la multimodalidad, es decir, la existencia, dada la complejidad de muchas funciones objetivo, de múltiples buenas soluciones. Todas estas soluciones pueden ser globalmente buenas (mismo valor de la función objetivo para todas ellas), o pueden suponer una mezcla de soluciones buenas globalmente y soluciones buenas localmente. El objetivo de la optimización multimodal es encontrar todas estas soluciones o, al menos algunas de ellas. En teoría, la obtención del óptimo global es el objetivo ideal. Sin embargo, desde un punto de vista práctico, puede ser mejor disponer de una buena solución rápidamente que esperar demasiado a la mejor solución que nunca llega. Además, algunas soluciones óptimas localmente bien pueden proporcionar la mejor solución de un determinado problema real ante datos del problema ligeramente distintos a los actuales, que no pueden dejar de ser considerados, si se tiene en cuenta la incertidumbre inherente a la mayor parte de problemas del mundo real.

En este artículo utilizamos un objeto de aprendizaje que te va a permitir ser consciente de las dificultades, con frecuencia insospechadas, que la multimodalidad plantea en la optimización. El objeto de aprendizaje utiliza un conjunto de formas de visualización de diversas funciones del benchmarking de la literatura sobre optimización, que ponen de manifiesto algunas de las sorpresas que esconden los problemas de optimización del mundo real. Este objeto de aprendizaje puede ser libremente utilizado por cualquier usuario y se encuentra en el repositorio Riunet de la Universitat Politècnica de València [Izquierdo, J.].

En la siguiente sección comentamos brevemente la naturaleza de algunas de esas características. Después, describimos el objeto de aprendizaje. Un problema real sencillo, en todo caso, permite mostrar que realmente la multimodalidad está presente en los problemas reales. Finalmente cerramos este documento con las conclusiones y las referencias.

3 Objetivos

Una vez que hayas concluya la lectura de este documento, serás capaz de:

- Identificar y explicar la complejidad inherente a la optimización en los problemas del mundo real.
- Expresar y explicar las características más delicadas de la optimización, especialmente, en términos de la multimodalidad.

4 Desarrollo

Prácticamente, no necesitas requisitos para leer este artículo. Bastará que tengas nociones de:

Requisitos
1. Simbología matemática básica.
2. Funciones elementales usuales.
3. Representación gráfica de superficies en el espacio e interpretación de las curvas de nivel.

4.	Máximos y mínimos de funciones de varias variables.
5.	Concectos algebraicos básicos.
6.	Manejo básico de algún explorador web.

Tabla 1. Requisitos básicos

Con el fin de que las ideas básicas de este artículo puedan ser visualizadas, es esencial que utilices con efectividad el objeto de aprendizaje que te presentamos aquí. Para que lo puedas utilizar eficientemente te explicamos en este apartado, de manera intuitiva y somera, un catálogo de las principales características a detectar, que te van a servir de guía básica.

En todo caso, conviene que adviertas que las funciones test que el objeto incluye no son realmente funciones relacionadas con casos reales, sino funciones construidas de manera artificial con la finalidad de que muestren determinados comportamientos específicos y puedan poner a prueba la eficiencia de los algoritmos de optimización.

A lo largo del tiempo, en la literatura, se han introducido muchas de tales funciones test relacionadas con la optimización. Si estás interesado, puedes encontrar colecciones online de funciones test, tales como la librería GLOBAL [Hedar, A.-R], GAMS World [GAMS World], CUTE [Gold et al.], GO Test Problems [GO Test Problems]. Una referencia reciente que proporciona una exhaustiva lista de hasta 175 funciones diferentes es [Jamil y Yang, 2013].

4.1 Algunas sorpresas en optimización

Dado el carácter docente de este artículo, destacamos aquí, que nos centramos en optimización no condicionada, declarando que consideramos la optimización con restricciones (salvo por el hecho de tener que restringir la búsqueda a un dominio rectangular indeterminado) fuera del alcance del documento.

Las funciones ‘artificiales’ que vas a encontrar en el objeto de aprendizaje pueden incluir

- un óptimo local: esta situación se corresponde con muchos de los ejemplos elementales que se estudian en los cursos básicos; no te causarán (quizá sí) sorpresa;
- uno o varios óptimos globales posiblemente en presencia de muchos óptimos locales con dominios de atracción de tamaño muy variado: esto es básicamente la multimodalidad;
- valles largos y estrechos y amplias superficies planas: las funciones con estas características suponen también serios problemas a los algoritmos de optimización ya que es difícil obtener información adecuada sobre hacia dónde dirigir la búsqueda.

Finalmente, te proporcionamos una observación respecto de la dimensionalidad de los problemas planteados, ya que influencia de manera muy seria los procesos de optimización. Muchas de las funciones test que se pueden encontrar en la literatura y, en particular, en el objeto de aprendizaje propuesto en este documento, están diseñadas para un número arbitrario de dimensiones. En el objeto de aprendizaje, como es lógico, la visualización obliga a limitar el número de variables a dos, sin perjuicio de que las definiciones se den para un número indeterminado, n, de variables. Las sorpresas observables en dimensión dos son tales, que no tendrás dificultad en imaginar lo complejo que puede resultar un proceso de optimización, primero en dimensión más alta y, en segundo lugar, con la aparición de las singularidades que hemos observado más arriba y que típicamente exhiben los problemas del mundo real.

4.2 El objeto de aprendizaje

El objeto ofrece la posibilidad de observar algunas funciones del benchmarking sobre optimización frecuentes en la literatura, que ponen en evidencia la gran dificultad que existe en la búsqueda del óptimo (o los óptimos) global(es). Ante algunas de estas funciones, algoritmos como el 'de descenso rápido', el 'de gradiente conjugado' y, en general, todos los métodos de optimización clásicos basados en derivadas y gradientes, incluidos los de segundo orden, fracasan estrepitosamente. Ciertos algoritmos evolutivos (relativamente modernos) son capaces de obtener los extremos globales de algunas de estas funciones. De entre ellos te citamos ahora los basados en la evolución de las especies, como los algoritmos genéticos [Goldberg, 1989]; los basados en principios de inteligencia colectiva, tales como el denominado *particle swarm optimization* [Kennedy y Eberhart, 1995] o el *ant colony optimization* [Dorigo et al., 1996]; en principios físicos, como el algoritmo denominado *simulated annealing* [Kirkpatrick et al., 1983; Černý, 1985]; en principios sociales o sicológicos, como *harmony search* [Geem et al., 2011] y *memetic algorithms* [Moscato, 1989], entre otros muchos.

Para presentar en este documento una descripción general del objeto de aprendizaje, utilizaremos uno de entre los 16 problemas que el objeto aborda, el de Dixon & Price, que puedes encontrar en varias de las referencias dadas más arriba, dado por la función:

$$f(x) = (x_1 - 1)^2 + \sum_{i=2}^{n} i(2x_i^2 - x_{i-1})^2 .$$

Para cada función, el objeto de aprendizaje ofrece tres versiones de visualización, en todo caso en dimensión 2, aunque algunas de las funciones se definen para n variables, como ya hemos comentado. Para cada uno de los casos, el objeto puede proporcionar dos tipos de visualizaciones: 3D, presentando la superficie, y 2D, presentando curvas de nivel.

Las tres visualizaciones son:

1. 'Enunciado': presenta la fórmula, una idea inicial para el estudio, y una vista 'general' de la superficie (ver figura 1).

   Como usuario, debes observar el enunciado con detenimiento y realizar algún tipo de cálculo, incluyendo la utilización de algún optimizador favorito. La idea es que emplees una cantidad razonable de tiempo en este paso.

2. 'Sugerencia': presenta otra visión más elaborada y sugerente del problema consistente en una perspectiva más localizada de la superficie. En la figura 2 te mostramos esta visualización, ahora recurriendo a curvas de nivel.

   Esta fase puede desvelar parcialmente algunas características del problema, aunque requiere de nueva introspección y cálculo por tu parte.

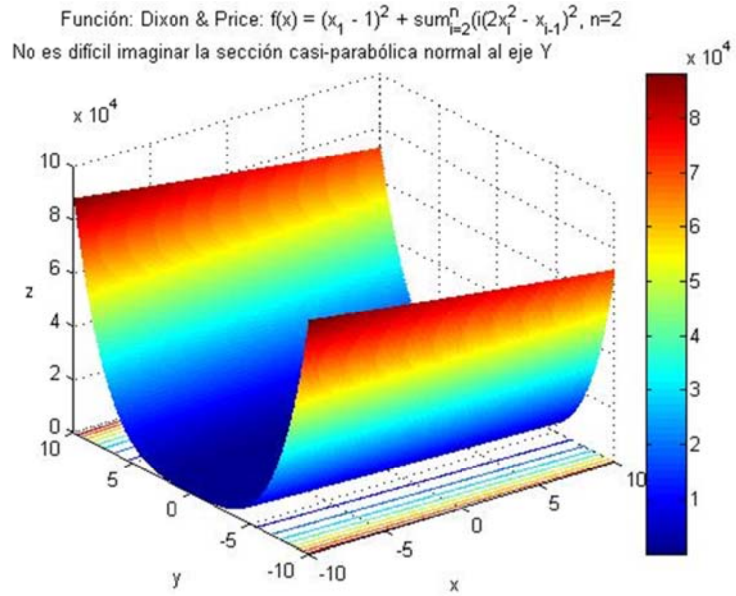

Fig. 1 'Enunciado' (problema de Dixon & Price), vista general

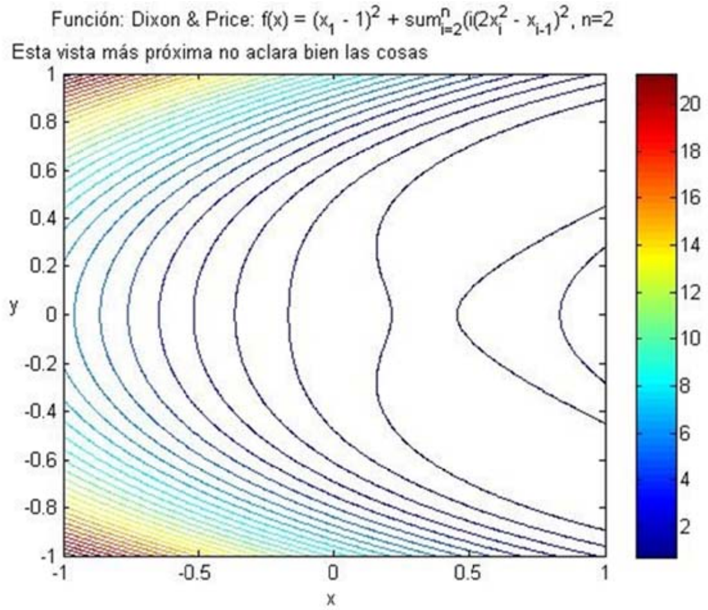

Fig. 2 'Sugerencia' (problema de Dixon & Price)

3. 'Solución': proporciona la solución del problema. Esta visualización solo debe ser realizada una vez agotados, por tu parte, todos los recursos posibles en la solución del problema. Finalmente, no puedes dejar de comprobar la solución utilizando tus propios recursos.

Queremos enfatizar aquí que las funciones presentadas no son sino funciones sintéticas sin conexión con el mundo real que, aunque ejemplificantes, no ponen de manifiesto en toda su crudeza, el efecto de la multimodalidad en la optimización. En la siguiente sección te presentamos un ejemplo de un problema real que permite mostrar cómo la multimodalidad puede aparecer de manera clara en las aplicaciones.

4.3 Un problema del mundo real: análisis modal de oscilaciones

El problema que te presentamos, aunque tomado de una situación real, corresponde a un sistema sencillo (simplificado), de tal modo que admita una representación gráfica que permita una visualización adecuada.

El estudio de las oscilaciones en el dominio de la frecuencia se basa en considerar la superposición de oscilaciones de las variables de interés sobre un estado estacionario medio, $F(x,t) = F_0(x,t) + f(x)e^{st}$, donde $f(x)$ es el valor complejo que representan la amplitud y la fase de las oscilaciones en los distintos puntos del sistema. La variable compleja $s = \sigma + j\omega$ es la llamada frecuencia (compleja), donde ω es la frecuencia de las oscilaciones y σ representa el amortiguamiento del sistema cuyo valor proporciona información sobre comportamientos asintóticos y/o posibles inestabilidades. Si se asume que las oscilaciones son pequeñas respecto al valor medio, las ecuaciones resultantes pueden linealizarse alrededor del valor medio, con lo que el sistema queda representado por medio de un conjunto de ecuaciones lineales. Estas ecuaciones pueden representarse en forma matricial para llevar a cabo el análisis del comportamiento oscilatorio del sistema.

Entre las diferentes formas de organizar las ecuaciones, en algunos sistemas aparece como más conveniente el Método de la Matriz de Estructura o de Rigidez [Breke, 1984], basado en los métodos matriciales del análisis de estructuras. El sistema se descompone en elementos de diferentes tipos, conectados entre sí en los nodos. Cada elemento viene representado por una matriz elemental. A partir de estas matrices elementales se puede ensamblar una matriz global del sistema A, de forma que el sistema queda representado por una ecuación matricial

$$A(s)f = g, \tag{1}$$

donde f es un vector formado por las amplitudes de una o varias magnitudes de interés en los nodos del sistema, y g una columna de términos independientes.

En el análisis de oscilaciones libres se supone que no existe ninguna excitación externa, o que la hubo pero ya ha dejado de actuar, y se estudian las oscilaciones que persisten en el sistema. Mediante este análisis pueden obtenerse las características dinámicas del sistema, esto es, las frecuencias naturales y los modos de oscilación. La parte imaginaria de la frecuencia compleja obtenida es la frecuencia natural del sistema, y la parte real proporciona información sobre la estabilidad del mismo. Para cada frecuencia compleja pueden obtenerse los modos de oscilación, que dan una idea sobre las amplitudes de la oscilación en todos los puntos del sistema.

Al estar estudiando las oscilaciones libres del sistema, en las que no actúa ninguna excitación externa, la ecuación (1) es homogénea. Esta ecuación debe tener solución distinta de la solución trivial puesto que se asume que el sistema está oscilando aunque no exista excitación externa (porque ya se extinguió). La condición necesaria para que esto sea así es que el determinante de la matriz del sistema sea nulo. Así, resolviendo la ecuación $\mathrm{Det}(A(s)) = 0$, o, equivalentemente, minimizando la función $\mathrm{Abs}(\mathrm{Det}(A(s)))$ se obtienen las infinitas frecuencias naturales complejas $s_i = \sigma_i + j\omega_i$, donde la parte imaginaria es la frecuencia natural propiamente dicha y la parte real indica la estabilidad o inestabilidad del sistema según sea negativa o positiva, respectivamente. Aunque un sistema real es un sistema de parámetros distribuidos y por tanto presenta infinitas frecuencias naturales, normalmente sólo son de interés las comprendidas en el rango de posibles excitaciones.

En [Izquierdo et al., 1996], estudiamos un sistema muy simple compuesto por 8 elementos y 9 nodos para el que la matriz de estructura, tras oportunas simplificaciones derivadas de los datos del problema, resulta ser tan solo de tamaño 6×6. Aun así, la función Abs(Det($A(s)$)) resultante está compuesta por 68 términos, uno de los cuales (elegido de manera aleatoria) escrito en formato TeX, puede verse en la figura 3.

```
TeXForm[mG[[1,Random[Integer,68]]]]
{{1.56268\,{{10}^{-13}}\,{{\left( {\it sig} + i\,w \right) }^3}\,
    \coth (0.0411612\,{\sqrt{\left( 0.0081288 +
            0.360528\,\left( {\it sig} + i\,w \right)  \right) \,
         \left( {\it sig} + i\,w \right) }})}\over
  {\left( 4.98088\,{{10}^{-6}} + 0.0901319\,\left( {\it sig} + i\,w \right)  \right) \,
    {\sqrt{\left( 0.0081288 + 0.360528\,\left( {\it sig} + i\,w \right)  \right) \,
       \left( {\it sig} + i\,w \right) }}}}
```

Fig. 3 Formato TeX de uno de los 68 términos de la función bajo estudio

Una representación gráfica (restringida a un determinado dominio dictado por la proximidad a posibles excitaciones, y con un rango controlado) se presenta en la figura 4, donde pueden observarse zonas posibles de algunas de las infinitas frecuencias complejas que son el objetivo principal del análisis modal desarrollado para el sistema en estudio.

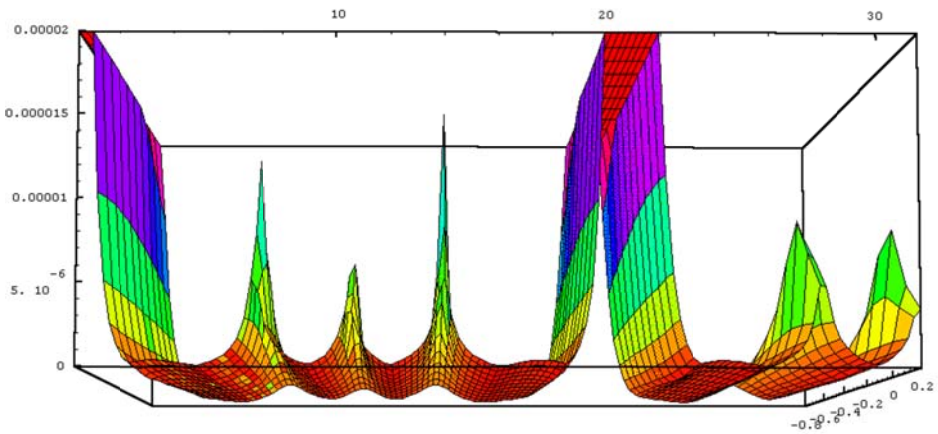

Fig. 4 Localización de algunos mínimos de la función en estudio

Como puedes observar, el número de variables de decisión es, una vez más, igual a dos, de modo que sea posible una visualización adecuada. En los problemas reales, no obstante, el número de variables puede contarse entre las centenas, los miles o incluso números más elevados. En tales casos las dificultades se multiplican exponencialmente. Te comento aquí un tipo de problema en el que el autor es experto: el diseño óptimo de redes de distribución de agua [Izquierdo et al., 2012, 2014], un problema de gran envergadura, debido a la complejidad y a la amplia distribución espacial de dichas redes. Actualmente, con el uso generalizado de los Sistemas de Información Geográfica (GIS), se construyen modelos de redes que contienen hasta cientos de miles de tuberías [Savic y Banyard, 2011]. El diseño de una red real (incluyendo los aspectos relacionados con la expansión y la rehabilitación de las redes ya existentes) involucra, en su formulación más simple, considerar un número de variables de decisión igual al número de tuberías de la red. Para cada tubería hay que decidir el diámetro más adecuado elegido entre una serie de diámetros comerciales. Es un hecho perfectamente conocido que este es un problema de los clasificados como *NP-hard*, para los que son necesarias técnicas muy potentes de optimización. El riesgo, en todo caso, de quedar atrapados en alguno de los innumerables óptimos locales es enorme. Esta es una manifestación en toda su virulencia de la multimodalidad y las dificultades que entraña.

5 Cierre

En este artículo te hemos presentado de manera sencilla un conjunto de ideas que te permitan captar las varias sorpresas, en particular, el concepto de multimodalidad, que aparecen en la optimización. Para que te sea más fácil adquirir esta competencia básica, te hemos propuesto un objeto de aprendizaje interactivo que pretende proporcionarte ejemplos suficientes, con los que puedes interactuar para que te permitan adquirir tal competencia. Esta competencia no es, en general, ofrecida en los cursos básicos de Cálculo diferencial, ya que, por razones obvias, los contenidos en estos cursos tienen que limitarse a proporcionar herramientas que exploten la conexión entre optimización y derivación. Sin embargo, dado que la mayor parte de problemas de optimización del mundo real son, en general, altamente complejos, resulta crucial que los estudiantes, en particular los que estudian alguna ingeniería, seáis conscientes de las dificultades inherentes a la optimización. En consecuencia, una competencia a largo plazo de este documento y del objeto de aprendizaje presentado consiste en que tú, como futuro ingeniero que necesites optimizar para resolver algún problema real, tengas una visión amplia de la naturaleza y la envergadura del problema que tienes que resolver. Este artículo te presenta, por tanto, un elemento claramente multidisciplinar que trata de transmitir competencias transversales claras, tales como pensamiento crítico, análisis y resolución de problemas y conocimiento de problemas contemporáneos.

6 Bibliografía

Brekke, H. *A Stability Study on Hydropower Plant Governing Including the Influence From a Quasi Nonlinear Damping of Oscillatory Flow and from the Turbine Characteristics*, Dr. Tech. Dissertation, The University of Trondheim, N-7034 NTH, 1984.

Černý, V. (1985). "Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: An efficient simulation algorithm" en *Journal of Optimization Theory and Applications*, vol. 45, p. 41–51.

Dorigo, M.; Maniezzo, V. y Colorni, A. (1996). "The ant system: optimization by a colony of cooperating ants" en *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics—Part B*, vol. 26, issue 1, p. 1–13.

GAMS World, GLOBAL Library, Disponible Online en: http://www.gamsworld.org/global/globallib.html.

Geem, Z.W.; Kim, J.H. y Loganathan, G.V. (2011). "A new heuristic optimization algorithm: Harmony search" en *Simulation*, vol. 76, issue 2, p. 60-68.

GO Test Problems, Disponible Online en: http://www-optima.amp.i.kyoto-u.ac.jp/member/student/hedar/Hedar_files/TestGO.htm

Goldberg, D.E. (1989). *Genetic algorithms in search, optimization and machine learning*. *Addison-Wesley*, Reading, Ma, 1989.

Gould, N. I. M.; Orban, D. y Toint, P. L. "CUTEr, A Constrained and Un-constrained Testing Environment, Revisited," Disponible Online en: http://cuter.rl.ac.uk/cuter-www/problems.html.

Hedar, A.-R. Global Optimization Test Problems. Disponible Online en: http://www-optima.amp.i.kyoto-u.ac.jp/member/student/hedar/Hedar_files/TestGO.htm

Izquierdo, J. Funciones Benchmarking Optimización. Disponible Online en: https://laboratoriosvirtuales.upv.es/eslabon/P/

Izquierdo, J.; Andreu, M. y Fuertes, V.S. (1996). "Aplicación del análisis modal a un caso real de oscilaciones hidráulicas". En Actas de *Mathematica 96*, Universidad Politécnica de Valencia, 1996.

Izquierdo, J.; Montalvo, I.; Pérez-García, R. y Matías, A. (2012). "On the complexities of the design of water distribution networks" en *Mathematical problems in engineering*, vol. 2012, issue 947961, p. 1-25.

Jamil, M. y Yang, X.S. (2013). "A literature survey of benchmark functions for global optimisation problems" en *International Journal of Mathematical Modelling and Numerical Optimisation*, vol. 4, issue 2, p. 150–194.

Kennedy, J. y Eberhart, R.C. (1995). "Particle swarm optimization" en *Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks*, Piscataway, NJ, 1942-1948.

Kirkpatrick, S.; Gelatt, C.D. y Vecchi, M.P. (1983). "Optimization by Simulated Annealing" en *Science* vol. 220, issue 4598, p. 671–680.

Montalvo, I.; Izquierdo, J.; Pérez-García, R. y Herrera, M. (2014). "Water Distribution System Computer-Aided Design by Agent Swarm Optimization" en *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering* vol. 29, issue 6, p. 433–448.

Moscato, P. (1989). "On Evolution, Search, Optimization, Genetic Algorithms and Martial Arts: Towards Memetic Algorithms". *Caltech Concurrent Computation Program* (report 826).

Savic, D.A. y Banyard, J.K., *Water distribution systems*, ICE Publishing, London, 2011.