OPTIMIZACIÓN SIMBÓLICA

CUANDO LA IA APRENDE A RESOLVER PROBLEMAS COMO UN CIENTÍFICO

Adonis García Anés, 12 de mayo de 2025

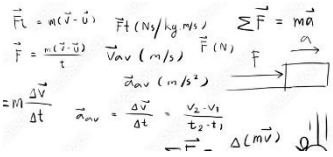
¿Te imaginas una inteligencia artificial capaz de **descubrir ecuaciones matemáticas ocultas en datos**, diseñar fármacos más eficaces o incluso proponer nuevas arquitecturas de redes neuronales?

Esto es precisamente lo que permite la **optimización simbólica**, una potente técnica de IA que busca soluciones en forma de *símbolos* (como fórmulas matemáticas o secuencias biológicas) en lugar de solo números.

¿En qué se parece una ecuación a un poema? La magia 🪄 de la optimización simbólica

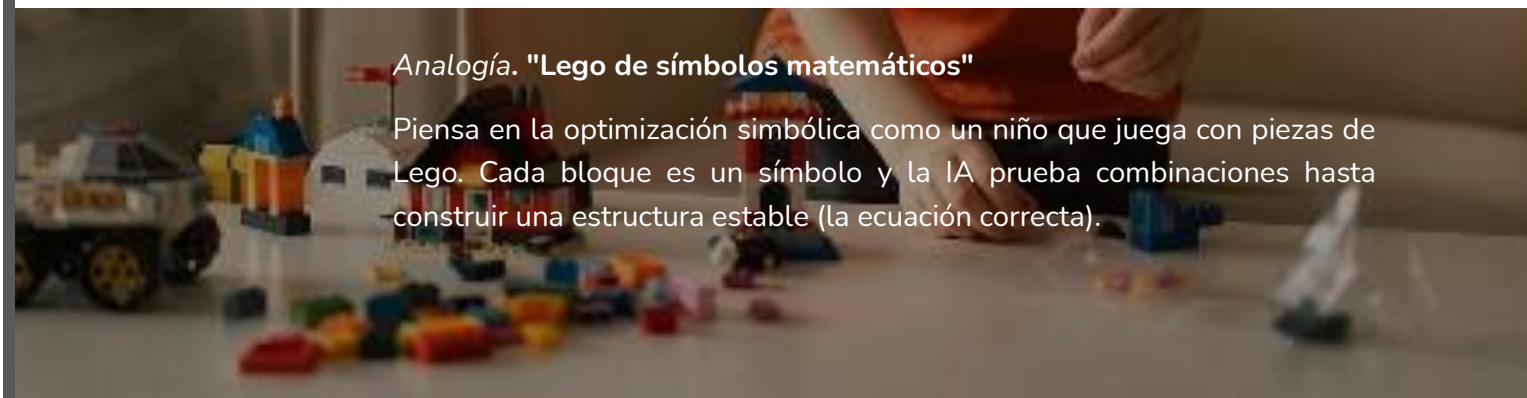
La optimización simbólica es como enseñarle a una IA a "escribir" ecuaciones, diseños de proteínas o arquitecturas de redes neuronales, pero en lugar de usar palabras, trabaja con símbolos matemáticos, operadores o secuencias biológicas.

Al igual que un poeta combina palabras para crear versos, estos sistemas exploran combinaciones de símbolos hasta encontrar la que mejor resuelve un problema.



Imagina que le das a una IA datos sobre planetas: sus masas, distancias al Sol y velocidades orbitales. Un sistema de **optimización** simbólica como DSO (Deep Symbolic Optimization) podría generar miles de ecuaciones candidatas (como $F = m \cdot a$, $F = G \cdot m_1 \cdot m_2 / r^2$, etc.) y evaluar cuál explica mejor los datos.

El proceso no es aleatorio: la IA **aprende qué combinaciones de símbolos tienen sentido** (por ejemplo, que una división no puede tener cero en el denominador) y prioriza aquellas que mejor se ajustan a los datos.



Analogía. **"Lego de símbolos matemáticos"**

Piensa en la optimización simbólica como un niño que juega con piezas de Lego. Cada bloque es un símbolo y la IA prueba combinaciones hasta construir una estructura estable (la ecuación correcta).

El gran desafío: cómo encontrar soluciones en un universo de posibilidades para elegir

Imagina que tienes que encontrar **una aguja en un pajar**, pero ese pajar es del tamaño de **100 millones de campos de fútbol**. ¡Eso es lo que enfrenta la IA en optimización simbólica!

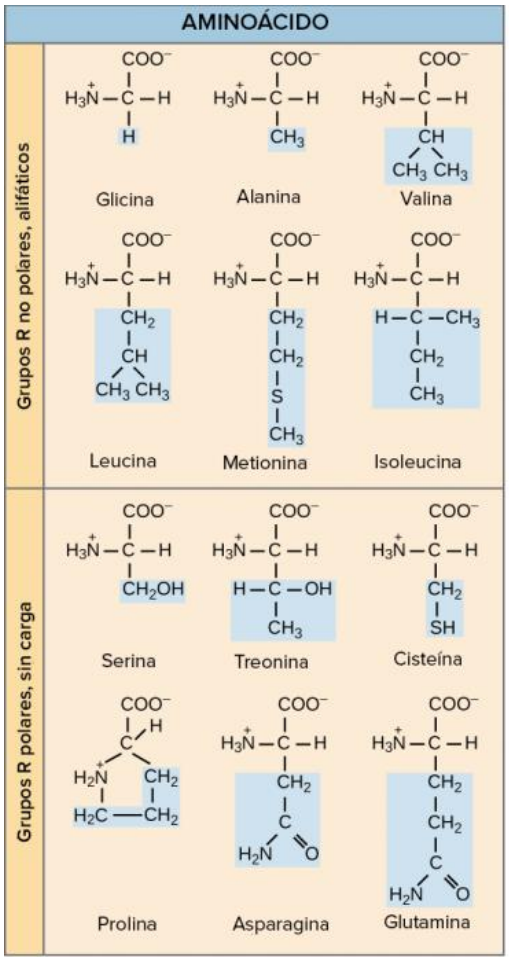
¿Por qué es tan difícil? Cada nuevo símbolo o variable multiplica las posibilidades:

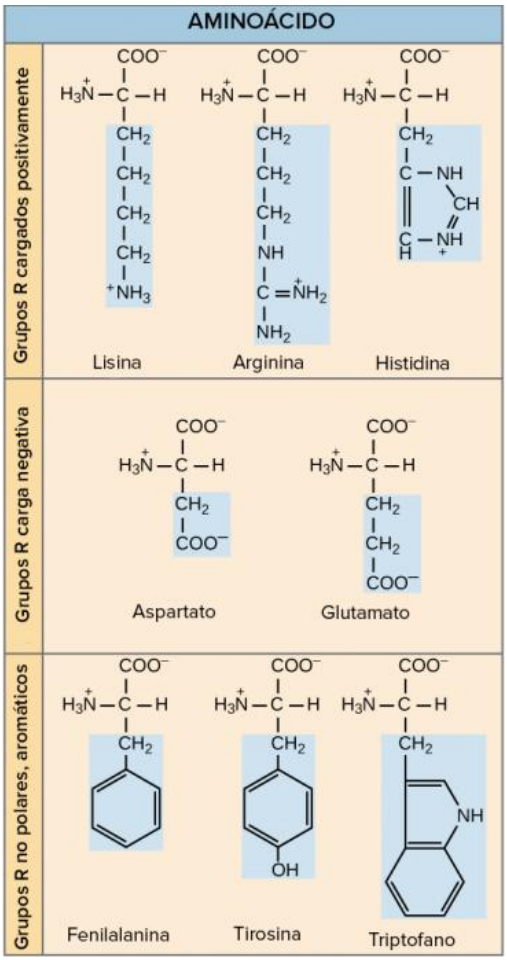
🔢 **Para ecuaciones matemáticas:**

- Con solo **10 símbolos básicos** (+, -, ×, ÷, números...), una fórmula de **5 términos** ya tiene **100,000 combinaciones posibles**.
- Es como intentar adivinar una contraseña, pero en lugar de 10 intentos, tienes que probar **todas las combinaciones del universo**.

🧬 **Para diseñar anticuerpos:**

- Hay **20 'letras' (aminoácidos)** que forman secuencias de **50 elementos**.
- El número de combinaciones supera **los átomos en la Tierra**.





LA-DSO: Cuando la IA "aprende a aprender"

Hasta ahora, los algoritmos **empezaban de cero cada vez**, imagina que un matemático tuviera que redescubrir el teorema de Pitágoras cada vez que enfrenta un problema nuevo ¡Un desperdicio de tiempo y energía!

Aquí entra la magia de los **modelos de lenguaje** (como los de ChatGPT).

Volviendo al ejemplo de Lego, en lugar de probar todas las combinaciones posibles (que serían millones), métodos como **LA-DSO usan modelos de lenguaje para "sugerir" piezas compatibles**, acelerando el proceso.

La verdadera revolución de LA-DSO está en cómo **combina lo mejor de dos mundos**:

1. **Optimización simbólica (DSO)**: genera y evalúa soluciones paso a paso. Prueba millones de combinaciones como un científico obstinado.
2. **Modelos de lenguaje**: proporcionan usan modelos de lenguaje (como BERT o GPT) **preentrenados** en miles de ecuaciones o secuencias biológicas para "aprender" patrones y acelerar la búsqueda. Actú an como un mentor experimentado

Sin LA-DSO, la IA explora el espacio de soluciones **a ciegas**. Con LA-DSO, el modelo de lenguaje actúa como un mapa 🗺️ que señala zonas prometedoras.

Resultados que sorprenden (hasta a los expertos)

¡LA-DSO no se queda en teoría! Los números hablan solitos:

- En tareas de razonamiento matemático el sistema demostró ser un **13% más preciso** que los métodos antiguos.
- **En diseño de anticuerpos** logró identificar estructuras moleculares con **mayor afinidad de unión** a patógenos como el SARS-CoV-2.

Es como si a un científico le diéramos 10 cafés y una biblioteca entera de papers.

¿Qué viene después? El futuro de la IA científica

El futuro se presenta con un potencial que supera los límites de la investigación tradicional ¿qué podemos esperar?:

- 💊 **Diseño computacional de fármacos:** IA que analiza bases de datos de proteínas para desarrollar medicamentos precisos
- 🔋 **Ingeniería de materiales:** descubrimiento de componentes energéticos optimizados mediante algoritmos
- 🧪 **Automatización inteligente:** plataformas experimentales que ejecutan y validan los diseños generados por IA, por ejemplo, laboratorios automáticos.

Pronto veremos Nobel compartidos con algoritmos.

Conclusión: La IA que piensa como científico

LA-DSO marca un **hito en la optimización simbólica** al demostrar que:

1. **Los modelos de lenguaje pueden "guiar" el razonamiento científico**, como un mentor que sugiere hipótesis plausibles (ej.: ecuaciones o diseños de proteínas).
2. **Reduce costes computacionales** (50% menos iteraciones en algunos casos) y **mejora resultados** (+13% precisión).
3. **Abre la puerta a IA más autónomas** en investigación, desde física cuántica hasta biomedicina.

🔍 **¿Te interesa el futuro de la IA científica?** ¿Cuál se te ocurre que puede ser un modo en que la IA científica nos sorprenda?