

Ajuste de parámetros

UAM-Iztapalapa.

Introducción

- Un balance adecuado entre las fases de diversificación e intensificación de una metaheurística depende primordialmente de una apropiada determinación del valor de los parámetros.
- El ajuste del valor de los parámetros es una actividad crucial para la implementación de una metaheurística, pues las decisiones emanadas de esta actividad, influirán en gran medida en los resultados obtenidos para algún problema.

Introducción

A manera de ejemplo: considérese que se está ejecutando un algoritmo genético (AG) para resolver un problema, a medida que la solución encontrada por el AG se aproxima a la solución óptima se esperaría que el factor de mutación decreciera y con ello se intensificara la búsqueda sobre la regiones prometedoras.

En el ajuste de los parámetros en los algoritmos evolutivos, pueden distinguirse principalmente: a) **la afinación de parámetros** (o calibración de parámetros) y b) el **control de parámetros**. La calibración de parámetros involucra determinar un valor estático (a través de la información disponible y experimentación) antes de la ejecución del método; en contraste el control involucra cambios dinámicos en el valor de un parámetro durante la ejecución del algoritmo.

Generalmente, se requiere un adecuado manejo de ambas técnicas para alcanzar solución satisfactoria a un problema, como se esquematiza en la siguiente figura.

El ajuste de parámetros es una tarea ardua; que involucra la toma de decisiones sobre los siguientes aspectos:

- Definir el espacio de soluciones.
- Representación de individuos
- Definir la estructura de vecindarios
- Función objetivo (función de aptitud)
- Valor de los parámetros y asociación de probabilidades

Se debe tener en cuenta que las decisiones tomadas tendrán un efecto muy significativo en la calidad de la solución final alcanzada; pues una apropiada configuración de parámetros tendrá un impacto substancial en el proceso de búsqueda de soluciones (en las fases de intensificación y diversificación) y en la calidad de la solución encontrada.

Afinación de parámetros

Un parámetro es factor (variable o argumento) necesario para analizar o valorar una situación.

Las metaheurísticas actuales establecen un conjunto de parámetros necesario para su operación.

Por lo tanto, antes de ejecutar a cualquier procedimiento metaheurístico para resolver algún problema, es necesario establecer una configuración del conjunto de argumentos. Dicha configuración puede ser estática (con lleva a una afinación de parámetros), o dinámica (implica un control de parámetros), considérese el siguiente ejemplo.

Afinación de parámetros

Ejemplo

Un tomador de decisiones TD_1 debe resolver el problema de la función de Rastrigin en dos dimensiones (su formulación matemática se muestra en 1), para ello TD_1 decide utilizar un algoritmo genético simple, para lo cual el científico deberá asignar los siguientes parámetros: a) tamaño de la población, b) número de generaciones c) probabilidad de cruce d) probabilidad de mutación, antes de ejecutar el AG.

$$\begin{aligned} \text{mín } f(x) &= \sum_{l=1}^2 x_l^2 - 10 \cos(2\pi * x_l) + 10 \\ -5,12 &\leq x_l \leq 5,12 \text{ for all } l = 1, 2 \end{aligned} \quad (1)$$

Definición

El problema de calibración de parámetros puede ser descrito de manera general como: dada una metahurística a , determinar la mejor configuración θ con base en un criterio \mathcal{C} dentro en un tiempo T .

Definición

El problema de calibración de parámetros formalmente se determina por una tupla $(\Theta, I, P_I, P_C, t, \mathcal{C}, T)$ una solución de este problema involucra encontrar una configuración $\bar{\theta}$ tal que:

$$\bar{\theta} = \arg \min_{\theta} \mathcal{C}(\theta)$$

donde:

Θ Es el conjunto de configuraciones candidatas $\Theta : \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k\}$.

I es generalmente un conjunto infinito de instancias.

P_I es una medida de probabilidad sobre el conjunto I de instancias, de forma que $P_I(i)$ es la probabilidad de que la instancia i sea seleccionada para ser resuelta.

$t : I \rightarrow \mathbb{R}$ es una función asociada a cada una de las instancias y el tiempo asociado para su computo.

J es una variable aleatoria que representa el costo de la mejor solución encontrada por utilizar la configuración θ sobre la instancia i para el tiempo $t(i)$.

$C \subseteq \mathbb{R}$ es el rango de J que es el posible valor de la mejor solución encontrada por una configuración $\theta \in \Theta$ sobre una instancia $i \in I$.

P_C es una probabilidad medida sobre el conjunto C , tal que $P_C(J|\theta, i)$ indica la probabilidad que J sea el costo de la mejor solución encontrada por una corrida en el tiempo $t(i)$ con una configuración θ sobre una instancia i .

$C(\theta) = C(\theta|\Theta, I, P_I, P_C, t)$ es el criterio que debe ser optimizado con respecto de θ . Formalmente, se define el criterio de C como:

$C(\theta) = E_{I,C}(C) = \int C dP_C(C|\theta, i) dP_I(i)$ que es la esperanza con respecto a P_C y P_I y la integración es en el sentido de la integral de Lebesgue ¹.

T es el total de tiempo disponible para la experimentación, antes de seleccionar la configuración.

¹La integral de Lebesgue es una construcción matemática que permite extender el concepto de la integral de Riemann de tal forma que se pueden integrar funciones más generales, tratar simultáneamente funciones acotadas y no acotadas y reemplazar el intervalo $[a, b]$ por conjuntos más generales.

Las propiedades y los valores obtenidos en configuración de parámetros depende de los siguientes factores:

- Características del criterio \mathcal{C} seleccionado.
- Características de la metaheurística para la cual se busca la configuración de parámetros.
- Conjunto de instancias de prueba.
- Mecanismo utilizado para la calibración.

La calibración de parámetros tiene los siguientes propósitos:

- Obtener una particularización de la metaheurística, la cual tenga un buen comportamiento con base a alguna criterio dado.
- Obtener una particularización de la metaheurística, la cual sea robusta a cambios específicos en las instancias a resolver.
- Obtener una particularización de la metaheurística, la cual se robusta a efectos aleatorios (ruido) durante su ejecución.
- Analizar la robustez de la metaheurística dada a cambios en los valores de la configuración.

Calibración Manual

La calibración manual depende de la experiencia y conocimiento adquirido del usuario. Esta práctica involucra alta subjetividad, por ende, se tiene poca confiabilidad de que la configuración encontrada de los parámetros sea la mejor posible.

Tomar una configuración disponible en literatura

Esta práctica consiste en asignar a los parámetros de una metaheurística “a” aquellos valores reportados en la literatura para instancias similares resueltas de manera exitosa con “a” (o alguna de sus variantes). En [?] se indica que esta práctica es común en las implementaciones de recocido simulado y los algoritmos genéticos.

Tomar una configuración disponible en literatura

Por ejemplo, para recocido simulado, White [?] sugiere como una estrategia para determinar T_0 calcular la desviación estándar de la función objetivo o energía ($\sigma(f(x))$) de un conjunto aleatorio de soluciones factibles; pues ($\sigma(f(x))$) de la distribución de energía define la máxima temperatura de modo tal que $T_0 \approx \sigma(f(x))$ [?] (en [?] $T_0 \approx \sigma(f(x)) \dots 2(f(x))$). Adicionalmente White propone que el mínimo cambio de energía observado sobre el conjunto aleatorio define la temperatura final [?]. Algunos trabajos han utilizado esta información sin evaluar si esta resulta adecuada dado el contexto de la investigación.

Tomar una configuración disponible en literatura

No existe una configuración general de los parámetros para las metaheurísticas existentes; pues la información necesaria para una calibración adecuada de los parámetros cambia de problema a problema.

Con base en lo anterior, y el teorema de “No Free Lunch” (NFL), es evidente que asignar los parámetros de la metaheurística “a” considerando solamente la información disponible en literatura sobre casos semejantes (resueltos exitosamente por “a” o alguna de sus variantes) a la instancia a resolver generará un arreglo de valores inadecuado; lo que repercutirá en el proceso de solución del problema de interés, considérese el ejemplo 2

Tomar una configuración disponible en literatura

Ejemplo

Continuando con el ejemplo 1. Con el fin de establecer una configuración adecuada de los parámetros el investigador I_1 realiza una revisión sobre los trabajos relacionados con algoritmos genéticos usados para resolver instancias de problemas de optimización no lineal (PLN). Al cabo de un tiempo I_1 da con el [?], en el cual se determina la mejor configuración de parámetros para un algoritmo genético simple usado para resolver un conjunto de instancias de problemas PLN (llamado Environment E), en la Tabla 1 se muestra la configuración encontrada por De Jong, que genera los mejores resultados para el conjunto de problemas de prueba [?, ?].

Cuadro: Configuración de parámetros de un AG para resolver Environment E

Parámetro	Valor
Tamaño de la población	50
Probabilidad de cruce	0.6
Probabilidad de mutación	0.001
Brecha generacional	100 %
Estrategía de selección	Elitismo

El tomador de decisiones TD_1 nota que en Environment E no se incluye la función de Rastrigin en dos dimensiones. Por lo anterior, TD_1 debe decidir si tomar la asignación propuesta por De Jong para un conjunto de problemas similares al que él desea resolver o bien utilizar algún otro procedimiento a fin de encontrar una asignación adecuada a los parámetros del AG sobre el caso de interés. Para tomar su decisión TD_1 consulta varias fuentes siendo una de ellas [?], en dicho artículo se indica que debido al estrecho rango de instancias consideradas en un estudio, se debe ser muy cuidadoso al tratar de generalizar los resultados. Por esta razón TD_1 decide no utilizar la configuración propuesta por De Jong.

Prueba y error

En la mayoría de las investigaciones, los parámetros de las metaheurísticas son calibrados a través de un procedimiento de prueba y error [?]. Esta práctica depende en gran medida del tomador de decisiones y consiste cambiar la configuración de los parámetros θ sobre I_M hasta que los resultados obtenidos sean satisfactorios para el usuario. Lo anterior, se muestra en el siguiente algoritmo.

Prueba y error

- Implementar la metahurística con una configuración θ de los parámetros.
- **While** Alcanzar resultados satisfactorios
 - ▷ Evaluar la metahurística con una configuración θ .
 - ▷ Modificar la configuración θ .

Prueba y error

Ajustar los parámetros mediante este método conlleva a los siguientes inconvenientes:

- Se requiere una cantidad considerable de recursos (computacionales y humanos) a fin de alcanzar una adecuada aproximación de los parámetros.
- Es necesario que el encargado de la calibración posea los conocimientos (sobre la metaheurística, el problema, la implementación, entre otros) suficientes a fin de tomar la mejor decisión posible.
- Generalmente los resultados no son los mejores posibles, pese a utilizar una gran cantidad de recursos.

Laguna señala que la mayoría de las investigaciones desarrolladas a través de esta práctica hacen poca referencia al proceso implicado en la asignación de los valores a los parámetros, así como un escaso análisis de sensibilidad sobre dichos valores [?].

A causa de la alta subjetividad implicada en este proceso, se tiene poca confianza de que la configuración de parámetros obtenida sea la mejor posible; así mismo, se conjetura que el desempeño de la metaheurística al resolver alguna instancia usando dicha asignación de valores tampoco será la mejor. Es decir, dado que la calibración de los parámetros depende del usuario, la reproducibilidad de una metaheurística resulta difícil; así mismo la comparación entre diferentes algoritmos paramétricos [?].

Ejemplo

Considere el ejemplo 3

Ejemplo

Se pide de manera independiente a los investigadores I_1 e I_2 calibrar los parámetros de los algoritmos A_1 y A_2 para resolver una instancia ϕ de un problema de optimización. Cuando ambos investigadores terminan el ajuste de los parámetros resulta que A_1 tiene un mejor comportamiento que A_2 al resolver ϕ al usar los valores determinados por I_1 , en contraste A_1 tiene un mejor comportamiento que A_2 sobre ϕ si fue ajustado por I_1 .

Calibración fina

La calibración fina de los parámetros es un proceso sistematizado para la asignación de valores a los parámetros, a través de técnicas y procedimientos propios del diseño de experimentos y/o la optimización. Independientemente del método de afinación de parámetros usado, debe hacerse notar que un conjunto único de valores no se pueden generalizar a todo los problemas. Es decir, por medio de este procedimiento se encuentran un conjunto *ad-hoc* para un subconjunto de instancias específico.

Las técnicas de calibración fina se utilizan en el estudio de la relación entre la respuesta y la configuración de los parámetros; estas técnicas tienen por objeto encontrar una configuración que genere la mejor respuesta posible, considerando el contexto de la investigación y los recursos disponibles.

Calibración fina: Diseño experimental

Esta práctica consiste en realizar un conjunto de experimentos (típicamente se calibra uno en uno a los parámetros); posteriormente, se analiza la información obtenida utilizando herramientas estadísticas. Es decir, una alternativa para la calibración es recurrir al diseño de experimentos (DoE) ²; pues la DoE es un marco de referencia para la conducción de experimentos representativos [?]. Laguna y Adenso-Díaz manifiestan que el diseño experimental involucra las reglas y los procedimientos mediante los cuales se asignarán y serán tratadas la unidades experimentales [?].

²Un experimento diseñado es una prueba o serie de pruebas en las cuales se inducen cambios deliberados en las variables de entrada de un proceso o sistema, de manera que sea posible observar e identificar las causas de los cambios en la respuesta de salida

Calibración fina: Diseño experimental

El DoE ofrece una manera objetiva y practica para determinar una configuración óptima de los parámetros [?]. De manera general, esta práctica involucra las siguientes actividades:

- Determinar los objetivos de la experimentación.
- Seleccionar el conjunto de parámetros a analizar.
- Elegir el procedimiento que se utilizara para buscar la apropiada configuración de parámetros.
- Ejecutar el procedimiento seleccionado.
- Analizar los resultados experimentales.
- Asignar a los parámetros la configuración determinada a partir de los resultados obtenidos.

Calibración fina: Diseño experimental

La calibración de parámetros por medio de la experimentación conlleva a los siguientes inconvenientes [?, ?]:

- Los parámetros no son independientes por lo que se deben analizar todas las combinaciones posibles, sin embargo, el costo asociado puede ser prohibitivo.
- Aunque no se consideraran las interacciones entre los parámetros y se calibrarán uno a uno los parámetros, dicho proceso requeriría un tiempo considerable.
- Existe la posibilidad que para un problema dado, la configuración obtenida no sea la óptima, pese a utilizar una gran cantidad de recursos.

Los procedimientos basados en DoE se clasifican como: A) Métodos muestrales y B) Métodos muestrales iterativos. A continuación, se describen cada uno de estos grupos; además, de mencionar algunos de los trabajos realizados en cada uno de ellos.

Métodos muestrales.

Son aquellos procedimientos que reducen el espacio de búsqueda a través de eliminar el número de parámetros a probar, con respecto al total requerido en un diseño experimental factorial [?]. En un DoE factorial se seleccionan k factores ($k \geq 2$) que afectan el comportamiento del sistema, cada uno con determinados “niveles”, se debe satisfacer que las unidades experimentales cubran todas las posibles combinaciones entre todos los niveles de los factores, considérese el ejemplo 4.

Ejemplo

En un sistema se tienen 3 factores (A, B, C), cada uno de los factores tiene 2 niveles; por lo tanto hay ocho combinaciones posibles; pues $2^k = 2^3 = 8$

Métodos muestrales

Sin embargo, en la calibración de parámetros generalmente el número de combinaciones en un diseño factorial completo es demasiado grande para ser procesado; por lo cual, se recurre a un DoE factorial fraccional (métodos muestrales), estos diseños utilizan un conjunto de experimentos tomados estratégicamente del total de experimentos posibles en un DoE factorial [?].

Los métodos muestrales más comúnmente utilizados en la configuración de parámetros son: **cuadro latino**³ y las **matrices ortogonales Taguchi** [?]. El cuadro latino fue ocupado por primera vez por Myers y Hancock en la configuración de parámetros de un AG [?]. Las matrices ortogonales Taguchi fueron introducidos por Taguchi como una alternativa para el DoE fraccional [?, ?, ?] .

³Arreglo matricial de las unidades experimentales

Métodos muestrales iterativos

Los métodos muestrales iterativos involucran una experimentación secuencial, pues la aproximación a la configuración de interés se realiza de forma iterativa utilizando experimentos que consideran la información obtenida en las etapas anteriores. En los últimos años se han desarrollado varios métodos muestrales iterativos.

Métodos muestrales iterativos

El método CALIBRA desarrollado por Adenso-Díaz y Laguna, 2006 [?], en este método se combina el diseño experimental (matrices ortogonales de Taguchi) y la búsqueda local. En la Figura ?? se esquematiza el método CALIBRA.

Métodos muestrales iterativos

La calibración de parámetros a través de un análisis experimental fue desarrollado por Ridge y Kudenko, 2007 [?], en este trabajo se utilizó un DoE factorial fraccional (2_{IV}^{12-5} con 8 réplicas y 24 puntos centro) para calibrar los parámetros de Sistema de colonia de hormigas (ACS) sobre instancias del problema del agente viajero (TSP); además, se utilizó un ANOVA para el análisis de datos.

Métodos muestrales iterativos

El método REVAC (Estimación de Relevancia de la Calibración de Valores) fue propuesto por Nannen y Eiben, 2007 [?] para la calibración de parámetros de algoritmos evolutivos de manera sistemática y semi-automática. Este método se basa en la teoría de medición de relevancia de los parámetros. El proceso de calibración por REVAC implica determinar la distribución de probabilidad por parámetro. De manera inicial, todos los parámetros se iniciaron con una distribución uniforme; en cada iteración se fue actualizando la probabilidad en función de la información obtenida de la función de entropía de Shannon ($H(A) = - \sum_{i=1}^n p_i \log_2 p_i$).

Técnicas de optimización

Buscar la configuración de parámetros mediante la optimización involucra modelar un problema complejo (las características y propiedades de las variables necesarias así como la interacción entre las mismas, un criterio de optimización no lineal, entre otros), resolverlo y tomar decisiones. Sin embargo, después de la modelación se obtiene una instancia de optimización difícil, la cual es similar a los casos donde se justifica el uso de técnicas heurísticas.

La idea central de esta práctica es utilizar una metaheurística (frecuentemente un algoritmo evolutivo) para buscar una configuración de los parámetros de alta calidad, que será utilizada por otra metaheurística.

Algunos de los métodos desarrollados con la idea anterior son.

Aproximación por fuerza bruta.

- Sí un experimento requiere t unidades de tiempo para ejecutarse, entonces el número total de experimentos que pueden ser realizados en un tiempo T es $M = \lfloor \frac{T}{t} \rfloor$.
- Bajo este enfoque el poder de cálculo requerido para cada una de las configuraciones candidatas se estima constante.
- Se considera un número de configuraciones Θ .
- Cada configuración es evaluada N veces, $N = \lfloor \frac{M}{|\Theta|} \rfloor$.

En el siguiente algoritmo, se muestra el pseudocódigo de una aproximación por fuerza bruta [?].

- 1 **Input:** Características del conjunto de parámetros a optimizar.
- 2 **Output:** $\tilde{\theta}$
- 3 Número de experimentos para cada candidato
 $N = \lfloor \frac{M}{\Theta} \rfloor$
- 4 $A = \text{Asignar la serie}(|\Theta|)$
- 5 **For** $k = 1; k \leq N; k++$
 - ▷ $i = \text{una instancia}()$
 - ▷ **For** cada θ en Θ
 - ★ $s = \text{ejecutar el experimento}(\theta, i)$
 - ★ $c = \text{evaluar la solución}(s)$
 - ★ $A[\theta] = \text{Actualizar_Media}(A[\theta], c, k)$
- 6 $\tilde{\theta} = \text{tomar el mínimo}(A)$

Sin embargo, un enfoque de fuerza bruta presenta algunos inconvenientes.

- El tamaño del conjunto de entrenamiento se debe definir antes de cualquier cálculo. Falta un criterio para evitar, a) muy pocos casos que podrían impedir la obtención de estimaciones fiables, o b) muchos casos que luego requeriría una gran cantidad de cálculo inútil.
- No hay un criterio para decidir el número de corridas de cada configuración en cada instancia con el fin de hacer frente a la naturaleza estocástica de las metaheurísticas.
- Los mismos recursos computacionales se asignan a cada configuración: configuraciones claramente pobres serán probadas el mismo número de veces que las mejores.

Familia de algoritmos Racing, introducidos por Maron y Moor para resolver el problema de aprendizaje de maquinas.

- Están diseñados para proporcionar una mejor asignación de los recursos computacionales entre las configuraciones candidatas.
- Permiten indirectamente fijar el número de instancias y el número de corridas que deben ser considerados.
- Evalúan las configuraciones candidatas y descartan las más pobres tan pronto como hay suficiente evidencia estadística en su contra.
- La eliminación de los candidatos inferiores acelera el procedimiento y permite evaluar las configuraciones prometedores en más casos y obtener estimaciones más fiables de su comportamiento.

- Se genera una secuencia anidada de posibles configuraciones: $\Theta_0 \supseteq \Theta_1, \supseteq \Theta_2, \dots$
- Entre Θ_{k-1} y Θ_k posiblemente se descartaron algunas configuraciones que parecen ser sub-óptimas de acuerdo a la información disponible hasta el paso k ,
- En el paso k , con Θ_{k-1} aún completa, se considera a la instancia i_k .
- Cada candidato $\theta \in \Theta_{k-1}$ es ejecutado en i_k , y su costo $c(\theta, i_k)$ es almacenado en su arreglo de costos.
- El paso k termina al eliminar las configuraciones que parecen inferiores con base a un análisis estadístico de los costos obtenidos hasta ahora.

Botee y Bonabeau, 1998 proponen utilizar un AG simple para determinar la mejor configuración de cinco parámetros de un ACO sobre instancias del TSP. Los autores expresan que los resultados preliminares encontrados fueron promisorios [?].

Control de parámetros

Generalmente, se tiene poca probabilidad de determinar *a priori* un conjunto de valores adecuado para los parámetros de una metaheurística aplicada sobre cualquier instancia.

Para usar métodos dinámicos es necesario plantearse las siguientes cuestiones antes de ejecutar una metaheurística al resolver alguna instancia.

¿Cuál componente o elemento se va a cambiar o se ajustar?

- Representación.
- Función de aptitud.
- Método de selección.
- Control de parámetros.
- Cambio en los operadores.

¿ Cómo se va realizar el cambio o ajuste?

- Determinístico.
- Adaptativo.
- Auto-adaptativo.

¿A qué nivel se va realizar el ajuste?

- Entorno.
- Población.
- Individuo.
- Componentes.

Control determinista

- El control de los parámetros determinista es una estrategia que consiste en alterar el parámetro a través de alguna regla determinista.
- Dicha regla se activa en momentos fijos provocando un cambio predefinido en las variables sin necesidad de utilizar otra información.

Control adaptativo

- Adaptarse significa cambiar de comportamiento para afrontar nuevas circunstancias.
- El control adaptativo es diseñar y aplicar un mecanismo que permita el cambio en la configuración de parámetros.
- El control adaptativo ocurre cuando hay algún tipo de mecanismo de retroalimentación.
- Tiene el propósito de servir como estrategia para decidir la dirección o la magnitud del cambio en el parámetro. La asignación de los valores de los parámetros implican considerar la información anterior.

Control auto-adaptativo

- La auto-adaptación de parámetros de control surge de la idea de la evolución.
- Implica que los parámetros que se desean adaptar deben ser codiciados dentro de los individuos de la población
- A medida que los individuos evolucionan y se adaptan también lo hacen los parámetros que utilizan.

Generalidades

- Modo operativo general de un método de descenso
 1. Seleccionar una solución inicial $s \in \mathcal{S}$.
 2. Generar un sub-conjunto $V^* \subseteq \mathcal{N}(s)$.
 3. Encontrar el mejor elemento $s' \in V^*$ ($\forall t \in V^*, f(s') \leq f(t)$).
 4. If $f(s') \geq f(s)$, detenerse; de lo contrario, sustituir $s \leftarrow s'$ y regresar al paso 2.
- Un método de búsqueda iterativa debería permitir movimientos “sin mejora” (deterioran el valor de f)

Generalidades

- El término Búsqueda Tabú (Tabu Search - TS) fue introducido en 1986 por Fred Glover
- Los principios fundamentales de la búsqueda fueron elaborados en una serie de artículos de finales de los años 80 y principios de los 90.
- Fueron unificados en el libro “Tabu Search” en 1997

Generalidades

- Movimientos sin mejora

- ▷ Posibilidad de aparición de **ciclos** en la búsqueda:
 $s \rightarrow s' \rightarrow s$
- ▷ Memoria **prohíbe movimientos** que llevan a soluciones visitadas anteriormente
- ▷ Estructura de V^* depende de la trayectoria de búsqueda reciente (*vecindario dinámico*)

Descripción general

- Modificación del modo operativo general para TS
 1. Seleccionar una solución inicial $s \in \mathcal{S}$. Hacer $s^* = s$ y $k = 0$.
 2. Hacer $k = k + 1$ y generar un sub-conjunto $V^* \subseteq \mathcal{N}(s, k)$.
 3. Encontrar el mejor elemento $s' \in V^*$ ($\forall t \in V^*, f(s') \leq f(t)$) y sustituir $s \leftarrow s'$.
 4. If $f(s) < f(s^*)$, sustituir $s^* \leftarrow s$.
 5. Si cumple el criterio de paro, detenerse; de lo contrario, regresar al paso 2.

Descripción general

- Posibles criterios de paro

- ▷ $\mathcal{N}(s, k + 1) = \emptyset$
- ▷ k es mayor al número máximo de iteraciones permitidas
- ▷ El No. de iteraciones desde la última mejora rebasó un número pre-especificado
- ▷ Se puede comprobar que el óptimo global fue encontrado

Descripción general

- Manejo de la **lista tabú \mathcal{T}**

- ▶ Inicialmente: remover las $|\mathcal{T}|$ últimas soluciones visitadas de $\mathcal{N}(s)$:

$$\mathcal{N}(s, k) = \mathcal{N}(s) \setminus \mathcal{T}$$

- ▶ Este procedimiento garantiza que no habrá ciclos de longitud **menor o igual a $|\mathcal{T}|$** en la trayectoria de búsqueda
- ▶ Esta forma de operar es muy poco práctica: se prefiere trabajar con una lista de **movimientos**
- ▶ Sea $M(s)$ el conjunto de movimientos posibles m desde s produciendo s' : $s' = s \oplus m$. Entonces:

$$\mathcal{N}(s) = \{s' | \exists m \in M(s) \text{ con } s' = s \oplus m\}$$

Descripción general

- Manejo de la lista tabú \mathcal{T} mediante movimientos
 - ▷ Se ocupan, en general, vecindarios tales que los movimientos son reversibles: m^{-1} es el movimiento inverso de m si $(s \oplus m) \oplus m^{-1} = s$
 - ▷ Se mantiene en \mathcal{T} los inversos de los últimos $|\mathcal{T}|$ movimientos: son **movimientos prohibidos**
 - ▷ Implicaciones:
 - ★ Pérdida de información: no evita ciclos de longitud menor o igual a $|\mathcal{T}|$
 - ★ Puede llevar a asignar un estatus “tabú” a soluciones aún no visitadas \Rightarrow **relajación** del estatus

Descripción general

- Relajación del estatus tabú de algunas soluciones
 - ▷ Cuando la solución resultante del movimiento prohibido parece **atractiva**
 - ▷ Condición(es) de **nivel de aspiración**: por ej., si la solución prohibida es mejor que la mejor solución encontrada hasta este momento
 - ▷ En este caso se levanta el estatus “tabú” y la solución candidata reemplaza la actual

Memoria

- Elemento esencial de TS: **memoria**
 - ▷ Recuerda la trayectoria de búsqueda reciente
 - ▷ Guía la elección de una solución candidata nueva dentro de $\mathcal{N}(s)$
- Las estructuras de memoria de TS funcionan mediante referencia a cuatro propiedades: ser reciente, frecuencia, calidad, e influencia
- Las memorias basadas en lo reciente y en frecuencia se complementan la una a la otra para lograr el balance entre intensificación y diversificación.

Memoria

- Calidad se refiere a diferenciar la bondad de las soluciones visitadas, para identificar elementos comunes a soluciones buenas o a ciertos caminos que conducen a ellas.
- La calidad es un aprendizaje basado en incentivos, se refuerzan las acciones que conducen a buenas soluciones y se penalizan aquellas que conducen a soluciones pobres.
- La influencia considera el impacto de las decisiones tomadas durante la búsqueda, en lo referente a la calidad de las soluciones, y en lo referente a la estructura de las mismas.

Memoria explícita e implícita

- El uso de memoria es tanto explícita como implícita.
- En el primer caso, se almacenan en memoria soluciones completas, soluciones elite visitadas durante la búsqueda.
- En algunos casos, la memoria explícita es usada para evitar visitar soluciones más de una vez pero es necesario implementar estructuras de memoria muy eficientes para evitar requerimientos de memoria excesivos.

Memoria explícita e implícita

- En la memoria implícita, se almacena información sobre determinados atributos de las soluciones que cambian al pasar de una solución a otra.
- Estos dos tipos de memoria son complementarios. La memoria explícita permite expandir los entornos de búsqueda mediante la inclusión de soluciones élite, mientras que la memoria basada en atributos los reduce prohibiendo determinados movimientos.

Memoria a corto y largo plazo

- El efecto de ambos tipos de memoria puede verse como la modificación del vecindario de la solución actual.
- TS mantiene una historia selectiva H de los estados encontrados durante la búsqueda.
- La historia determina, qué soluciones pueden ser alcanzadas por un movimiento desde la solución actual.
- En las estrategias de periodo intermedio y largo, la memoria puede contener soluciones que no estén en el vecindario de la solución actual. Generalmente son soluciones élite.

Memoria a corto y largo plazo

- Un proceso basado únicamente en estrategias a corto plazo puede permitir que una solución sea visitada más de una vez, pero es probable que el entorno reducido sea diferente en cada una de las exploraciones.
- Cuando la memoria a corto plazo va acompañada de memoria a largo plazo, se reduce en gran medida la probabilidad de tomar decisiones que visiten repetidamente un subconjunto limitado del espacio de soluciones.

Función de evaluación modificada

- Usa la historia para generar una función de evaluación modificada de las soluciones accesibles.
- TS reemplaza la función objetivo $c(x)$ por una función $c(H; x)$, que tiene el propósito de evaluar la calidad relativa de las soluciones accesibles actualmente, en función de la historia del proceso.
- La eficiencia de TS puede verse afectada por cómo se defina y utilice la historia almacenada H , y de cómo se determinen el entorno candidato Candidato $N(x_{Actual})$ y la función evaluación $c(H; x)$.

Función de evaluación modificada

- En los casos más simples $c(x) = c(H; x)$, ignorando enfoques de investigación del entorno y la memoria a largo plazo que introduce características de soluciones élite.
- Sin embargo, las estrategias de listas de candidatos que reducen el espacio de movimientos considerados son enormemente importantes para una implementación efectiva.

Función de evaluación modificada

- Posibilidad de trabajar con una función de aptitud alternativa: $f \rightarrow \tilde{f}$
 - ▷ Proceso de **intensificación** en regiones prometedoras
 - ★ Se asigna una mayor prioridad a soluciones compartiendo características comunes con la solución actual
 - ★ Penalización a los individuos lejos de la sol. actual
 - ▷ Puede resultar útil explorar regiones diferentes: procesos de **diversificación**
 - ★ Se asigna una mayor prioridad a soluciones con características muy diferentes de las de la solución actual
 - ★ Penalización a los individuos cercanos de la sol. actual
 - ▷ Procesos de intensificación y diversificación alternados a lo largo de la búsqueda

Intensificación y diversificación

- Las estrategias de intensificación y diversificación constituyen dos elementos altamente importantes en un TS.
- Las estrategias de intensificación se basan en la modificación de reglas de selección para favorecer la elección de buenas combinaciones de movimientos y características de soluciones encontradas.
- Implica identificar soluciones élite cuyos buenos atributos puedan ser incorporados a nuevas soluciones.
- Las estrategias de diversificación tratan de conducir la búsqueda a zonas del espacio de soluciones no visitadas anteriormente, y generar nuevas soluciones que difieran significativamente de las ya evaluadas.

Descripción general

- Algoritmo de TS

1. Seleccionar una solución inicial $s \in \mathcal{S}$. Hacer $s^* = s$ y $k = 0$.
2. Hacer $k = k + 1$ y generar un sub-conjunto $V^* \subseteq \mathcal{N}(s, k)$ en base a la lista tabú \mathcal{T} y a la condición de aspiración
3. Encontrar el mejor elemento $s' = s \oplus m \in V^*$ en términos de f y sustituir $s \leftarrow s'$.
4. If $f(s) < f(s^*)$, sustituir $s^* \leftarrow s$.
5. Actualizar \mathcal{T} .
6. Si cumple el criterio de paro, detenerse; de lo contrario, regresar al paso 2.

Descripción general

- Diseño del vecindario

- ▷ Condición crucial:

$\forall s \in \mathcal{S}$, existe un camino entre s
y la solución óptima i^*

- ▷ Ejemplo del problema de coloración de gráficas

- ★ Necesidad de utilizar **caminos infactibles**
 - ★ Relajación de restricciones implica penalización asociada en la F.O.
 - ★ En algunos casos, diseñar vecindarios que cumplan esta condición es muy difícil

Descripción general

- Función objetivo

- ▷ f induce una **topología** sobre la gráfica de vecindario
 - ★ Existencia de **valles** con óptimos locales: evitar un gran número de valles
 - ★ **Plateaux** implicando una caminata aleatoria: evitar plateaux muy “anchos”
 - ★ Ejemplo de coloración de gráficas

Descripción general

- Función objetivo

- ▷ Cálculo eficiente

- ★ En muchos casos, resulta mucho más sencillo calcular $\Delta(s, m) = f(s \oplus m) - f(s)$ que $f(s \oplus m)$
 - ★ Ejemplo: problema de ruteo (resolución de varios TSP en cada iteración)
 - ★ Posibilidad de almacenar cierto número de $\Delta(s, m)$
 - ★ Ejemplo: problema de asignación cuadrática (complejidad computacional pasa de $\mathcal{O}(n^2)$ a $\mathcal{O}(1)$)

Criterio de aspiración

- Aspiraciones de movimiento y aspiraciones de atributo.
- Cuando se satisface una aspiración de movimiento, se revoca la clasificación tabú del movimiento.
- Cuando se satisface una aspiración de atributo, se revoca el estado tabú del atributo.
- En el último caso el movimiento principal puede no cambiar su clasificación tabú, dependiendo de si la restricción tabú se activa a partir de más de un atributo.

Criterio de aspiración

- **Aspiración por Defecto:** Si todos los movimientos disponibles están clasificados tabú, y no se han hecho admisibles mediante algunos otros criterios de aspiración, entonces se selecciona el movimiento menos tabú.
- **Aspiración por objetivo:**
 - ▶ *Forma Global:* Se satisface una aspiración de movimiento, cuando el costo de la nueva solución es mejor que la mejor conocida.

Criterio de aspiración

- **Aspiración por objetivo:**

- ▷ *Forma Regional*: Subdividimos el espacio de búsqueda en regiones $R \subseteq X$, identificadas mediante cotas sobre los valores de funciones $g(x)$ (o por intervalos de tiempo de búsqueda). Un criterio de aspiración puede ser el mejor costo de cada región.
- ▷ Aspiración por Dirección de Búsqueda: Se satisface una aspiración de atributo cuando un movimiento produjo mejoras en su última realización, y ahora es tabú pero vuelve a producir una mejora.

Manejo de \mathcal{T}

- Lista tabú \mathcal{T} principalmente considerada como memoria de corto plazo para evitar ciclos en la búsqueda
- Diferentes técnicas de manejo de la lista
- Permite alternar entre intensificación y diversificación

Lista tabú Intensificación

- Generalidades

- ▷ Una lista demasiado corta no impide los ciclos
- ▷ Una lista demasiado larga podría crear restricciones excesivas
- ▷ Balance correcto es muy difícil de determinar
- ▷ Parece ser que el valor promedio de soluciones visitadas aumenta con el tamaño de la lista
- ▷ Posibilidad de variar el tamaño de la lista en el curso de la búsqueda, elementos conservados un número acotado de iteraciones

Lista tabú Intensificación

- Intensificación

- ▷ Procedimiento sencillo

- 1 Regresar a una de las mejores soluciones (élite) visitadas
- 2 Limpiar la lista
- 3 Disminuir el tamaño de la lista durante un No. limitado de iteraciones

- ▷ “Congelar” un(as) componente(s) durante cierto número de iteraciones

- ▷ Más elaborados

- ★ Por ejemplo basado en memoria de largo plazo
- ★ Componentes de buenos/as movimientos / soluciones almacenados
- ★ Penalización de movimientos / soluciones que no incluyan estas “buenas” componentes

Lista tabú Diversificación

- Diversificación

- ▷ Técnica más común: arranques múltiples y aleatorios
- ▷ Introducción de componentes o combinación de componentes aleatorios
- ▷ Penalización de movimientos realizados / soluciones visitadas frecuentemente, suficientemente fuerte para escapar de óptimos locales
- ▷ El proceso de relajación / penalización de restricciones puede ser vista también como una técnica de diversificación (exploración del espacio infactible)

Intensificación y Diversificación

- Diversificación frente a aleatorización
 - ▷ Soluciones diversas, es muy diferente de soluciones aleatorias.
 - ▷ Se buscan soluciones de buena calidad, pero suficientemente diferentes entre si
 - ▷ Es necesario establecer medidas de diferenciación y un conjunto de referencia

Intensificación y Diversificación

- Refuerzo por restricción

- ▷ Uno de los primeros tipos de estrategias de intensificación.
- ▷ Selecciona un conjunto S de soluciones élite
- ▷ Crear penalizaciones e incentivos, con el objetivo de incorporar atributos a la solución actual que tenga altas medidas de frecuencia sobre S
- ▷ Ayuda a reducir el número de alternativas examinadas, y a identificar características claves en el problema

Soluciones evaluadas, pero no visitadas

- Existen atributos, o soluciones que se evalúan varias veces pero no se emplean en ningún momento
 - ▷ Llevar un registro de la frecuencia con que se evalúa una opción
 - ▷ Visitar las opciones con una frecuencia alta dentro del registro

Entornos compuestos

- Es una versión de vecindades variables

Oscilación Estratégica

- Opera movimientos hasta chocar con una frontera, representada por la factibilidad, que normalmente representaría un punto donde el método se pararía.
- El vecindario se extiende o el criterio de evaluación se modifica para permitir que la frontera se cruce.
- El método entonces continúa más allá de la frontera y luego vuelve.
- Después se vuelve a aproximar a la frontera y se cruza, en dirección opuesta, procediendo a un nuevo punto de giro.

Oscilación Estratégica

- El proceso de acercarse repetidamente y cruzar la frontera desde diferentes direcciones crea una forma de oscilación que da al método su nombre.
- El control sobre esta oscilación se establece generando evaluaciones modificadas y reglas de movimiento
- Se puede tomar en cuenta la región en la que se está, y la dirección de la búsqueda
- La posibilidad de recorrer de nuevo una trayectoria anterior se evita con los mecanismos tabú estándares.

Oscilación Estratégica

- La frontera incorporada no necesita definirse en términos de factibilidad, puede ser una región donde la búsqueda parece gravitar. La oscilación obliga a la búsqueda a salir de esta región y permitirle volver.

Manejo de \mathcal{T}

- *Robust Tabu Search* (Taillard, 1991)
 - ▷ Permanencia elegida aleatoriamente entre cotas predefinidas
 - ▷ Diversificación: movimientos forzados cuando no han sido realizados durante un gran número de iteraciones ($>k$)
 - ▷ Una de sus variantes es el mejor algoritmo conocido para SAT

Manejo de \mathcal{T}

- *Reactive Tabu Search* (Battiti & Tecchiolli, 1994)
 - ▷ Hace uso del histórico de búsqueda para ajustar la permanencia de forma dinámica
 - ★ Si una solución es visitada repetidamente, se incrementa la permanencia de las soluciones en \mathcal{T}
 - ★ Si no se observan repeticiones durante cierto No. de iteraciones, la permanencia es disminuida gradualmente
 - ▷ Mecanismo de escape de óptimos locales mediante cambios aleatorios

Extensiones multi-objetivo

- Hansen (1997): población de soluciones evolucionadas con TS + archivo externo
- Hertz (1994): con restricciones ϵ se observó un buen comportamiento
- Kurahashi y Terano (2000): híbrido entre TS y AG, con dos listas tabú (a corto/largo plazo) para los mejores individuos (mejores de cada generación / globales)