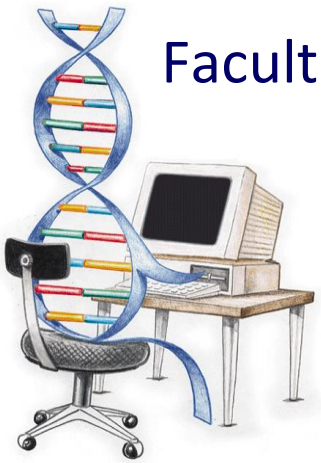
ALGORITMOS EVOLUTIVOS
Curso 2023

Tema 1: Introducción

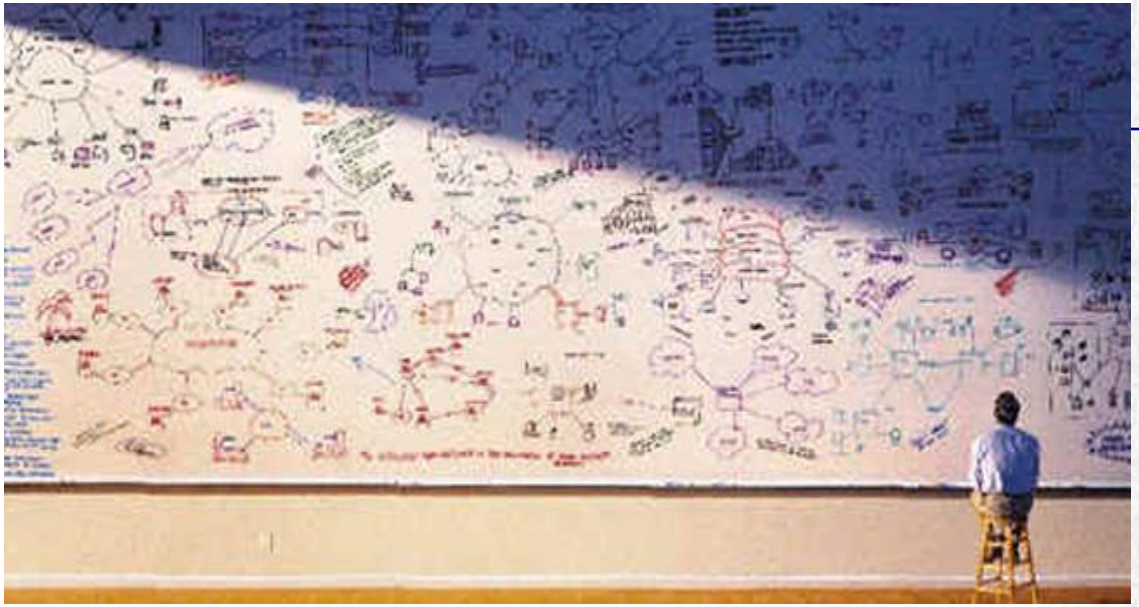
Centro de Cálculo, Instituto de Computación
Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Uruguay



cecal

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

1



UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

INTRODUCCIÓN

1 - Introducción

Contenido

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

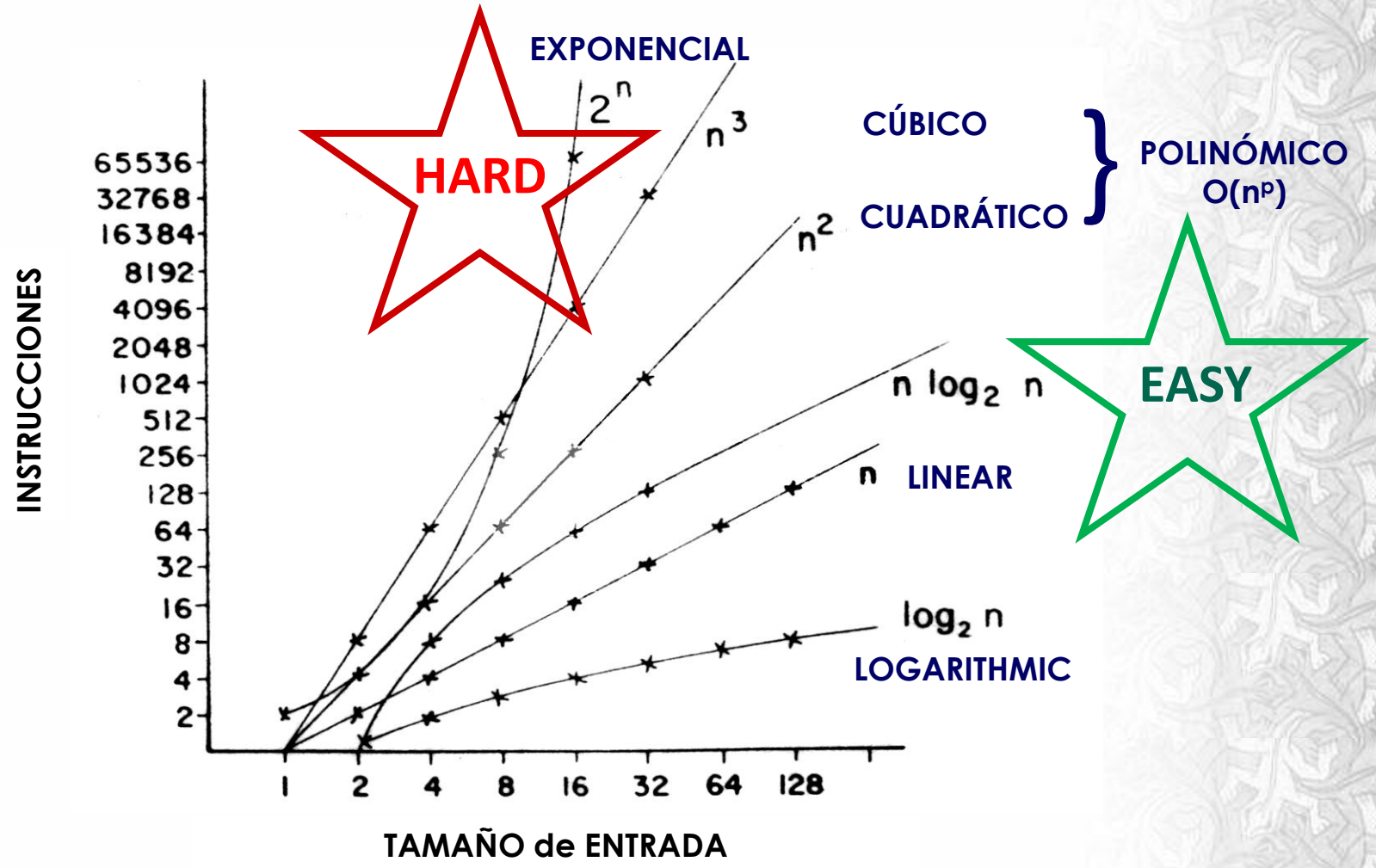
1. Problemas computacionales y complejidad algorítmica
2. Problemas de optimización
3. Técnicas heurísticas
4. Metaheurísticas

Problemas computacionales

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

- Problemas “sencillos” y problemas “difíciles”
  - Sencillos: Ordenamiento de valores, multiplicación de matrices
  - Difíciles: problemas combinatorios
- ¿ Cómo evaluar la complejidad computacional ?
  - Comportamiento en caso promedio y peor caso.
  - Independiente de la arquitectura y lenguaje de programación (a priori)
  - Se analiza el orden de magnitud del número de instrucciones de un algoritmo, en función del tamaño de la entrada
  - Un algoritmo de complejidad O($g(n)$) ejecutado con datos de tamaño n, tendrá un tiempo de ejecución menor a $|g(n)|$

Complejidad algorítmica



Clases de complejidad

- Clase P
  - Un problema pertenece a la clase P si puede ser resuelto en tiempo polinomial en una computadora determinística
  - Ejemplos: Ordenamiento, búsqueda binaria, multiplicación matricial
- Clase NP
  - Un problema pertenece a la clase NP si puede ser resuelto en tiempo polinomial, pero usando una computadora no determinística
  - Fácil de verificar una solución, pero difícil hallarla

Clases P y NP

- La clase P contiene problemas que pueden resolverse de modo eficiente (rápidamente)
- La clase NP contiene problemas cuya solución puede verificarse de modo eficiente
- En 1971 se planteó la pregunta: ¿Es P = NP?
- Desde entonces, sigue siendo una pregunta abierta para los teóricos (es la principal conjetura de la teoría de la computación)
- Se cree que P ≠ NP, pero no ha podido ser demostrado

Problemas NP

- Es la clase de los problemas difíciles de resolver
- Ejemplos: TSP, ciclo hamiltoniano, SAT
- TSP (Travelling Salesman Problem)

"Encontrar una permutación que represente el recorrido de una serie de ciudades de tal forma que todas sean visitadas (sólo una vez), minimizando la distancia total viajada"

Ejemplo: TSP para doce ciudades de Alemania

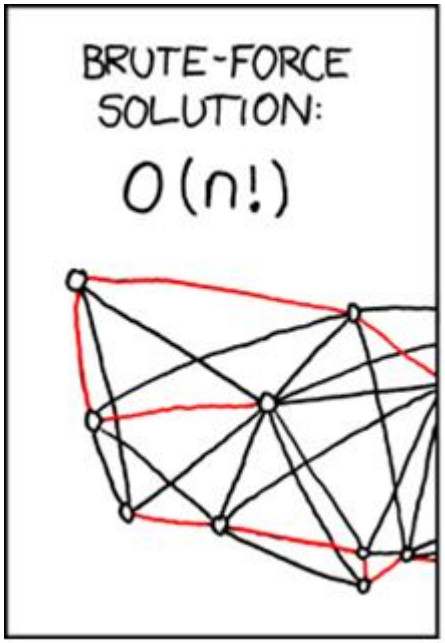
TSP

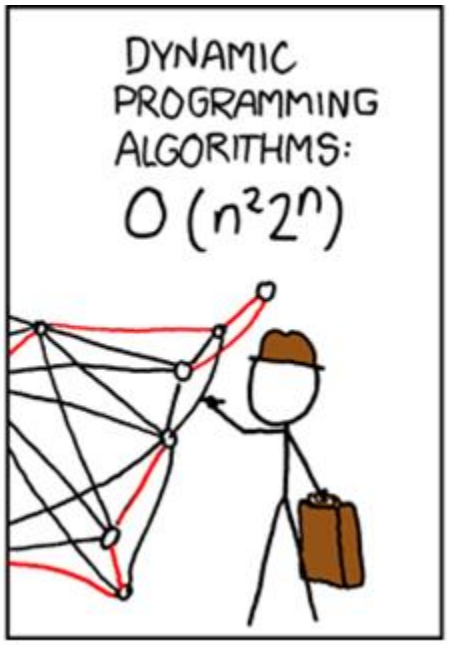
UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

- ¿ Es realmente difícil de resolver ?
  - Considerando n ciudades (tamaño de la entrada = n), la dimensión del espacio de búsqueda (permutaciones) es: (n-1)!/2
    - Para *n*=10, hay 181.440 permutaciones posibles
    - Para *n*=12 (caso del ejemplo para Alemania) hay 19.958.400 permutaciones posibles
    - Para *n*=20 hay 60.822.550.204.416.000 permutaciones posibles
- Explorando 1.000 permutaciones por se… …squeda exhaustiva demandaría un tiempo estimado de:
  - n=10 → 3 m
  - n=12 → 5h 30 m
  - n=20 → 1.928.670 años !

SE NECESITAN ALGORITMOS MÁS EFICIENTES

Resolviendo problemas NP-difíciles



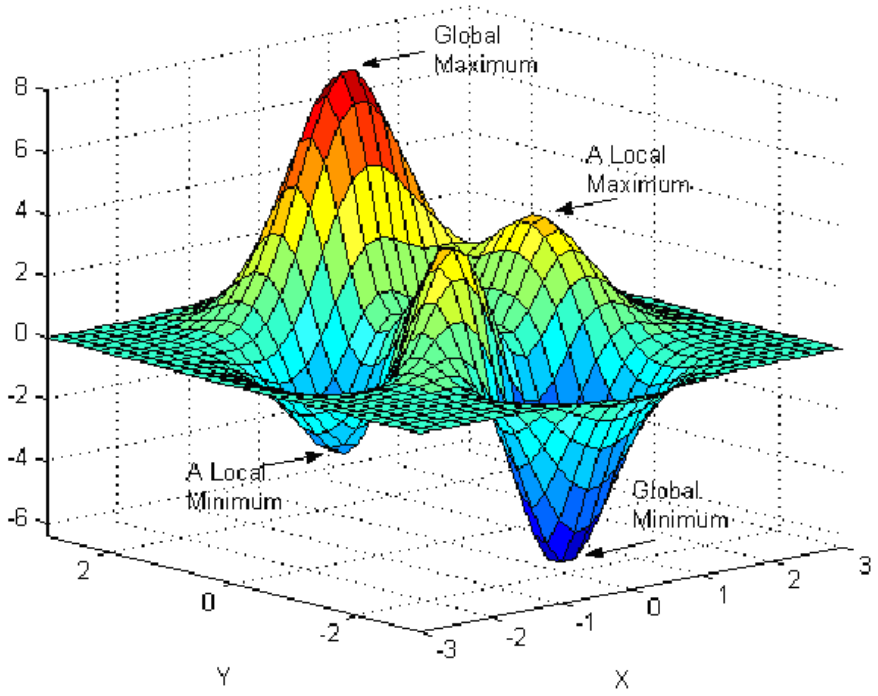


Hallar métodos inteligentes para su resolución

Problemas NP

- Es necesario utilizar algoritmos de resolución más eficientes que la búsqueda exhaustiva, a medida que se incrementa el tamaño del problema
- La complejidad del algoritmo de resolución del problema se incrementa de manera superpolinomial con el tamaño de la entrada. Ejemplo: TSP $O(n^2 * 2^n)$
- Una clase particular de problemas NP son los problemas de optimización
  - Objetivo: hallar la(s) solucione(s) óptima(s) de un problema (de acuerdo a una función objetivo determinada)

2



UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

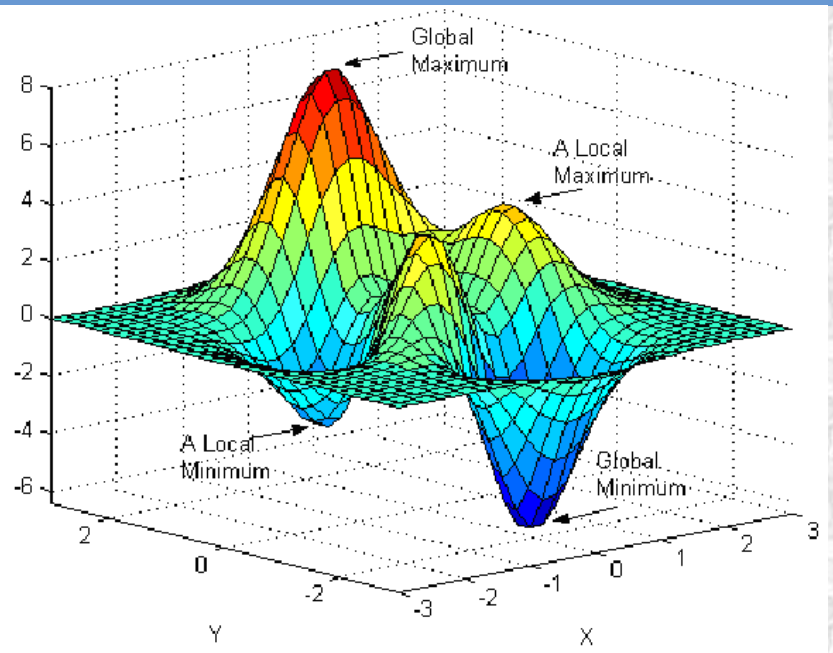
OPTIMIZACIÓN

Problemas de optimización

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

- Optimización numérica

$$Min / Max \quad f(\vec{x})$$
$$\text{sujeto a}$$
$$g_i(\vec{x}) > 0 \qquad i = 1,\ldots, p$$
$$h_j(\vec{x}) = 0 \qquad j = 1,\ldots, r$$



$\vec{x}$ son las variables de decisión del problema, $\vec{x} = (x_1,\ldots, x_k)$

$g_i(\vec{x})$ y $h_j(\vec{x})$ son las restricciones (de desigualdad y de igualdad, respectivamente)

$f(\vec{x})$ es la función a optimizar

Problemas de optimización

- Optimización combinatoria
  - Variables de decisión discretas (dominio discreto)
  - Soluciones se representan como permutaciones o combinaciones
  - Ejemplo: TSP
- Problemas de búsqueda
  - Encontrar un elemento que cumple un conjunto de propiedades, entre un conjunto finito de elementos
  - Pueden formularse como problemas de optimización (minimizar la distancia al elemento buscado)

Técnicas de resolución

- Técnicas analíticas
  - Aplicables a un número muy reducido de problemas

- Métodos exactos
  - Utilizan técnicas de enumeración total o parcial:
    - Backtracking
    - Programación dinámica
    - Branch & Bound
  - Basados en Programación Matemática:
    - Método Simplex
    - Método del punto interior
  - Únicos errores: redondeo (y eventualmente truncamiento)

2 - Optimización

Técnicas de resolución

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

- Métodos de aproximación
  - Encuentran una solución con error conocido a priori
  - Error fijo o derivado de un compromiso con el esfuerzo computacional requerido (mayor esfuerzo computacional, menor error)
  - Ejemplos: métodos markovianos, inferencia probabilística
- Métodos aleatorios
  - Con cierta probabilidad, encuentran una solución aproximada al problema, con un error máximo dado
  - Ejemplos: método Monte Carlo, método Las Vegas
- Heurísticas y metaheurísticas
  -

3

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

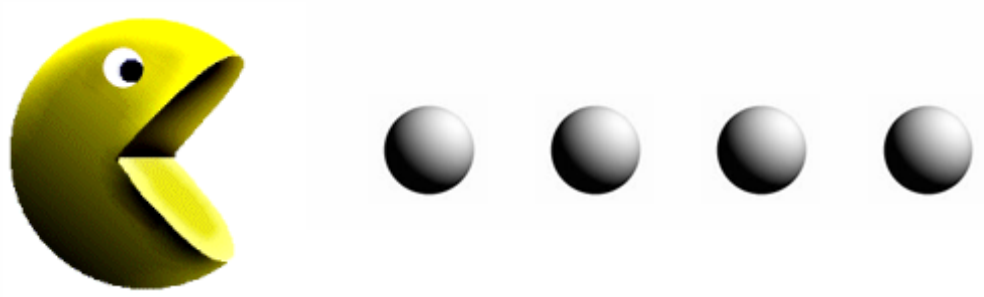
HEURÍSTICAS

Conceptos

- Métodos de resolución basados en procedimientos conceptualmente simples para encontrar soluciones de buena calidad (no necesariamente hallan la solución óptima) a problemas difíciles, de un modo sencillo y eficiente
- Los procedimientos de búsqueda a menudo están basados en el sentido común o emulación de fenómenos bien conocidos
- “Heurística” deriva del griego heuriskein (υρισκειν), que significa “encontrar” o “descubrir”

Heurísticas constructivas

- Agregan iterativamente elementos para construir una solución
- Hasta que se completa una solución o se llega a algún criterio de parada
- El criterio de construcción es clave !
- Ejemplo: métodos greedy

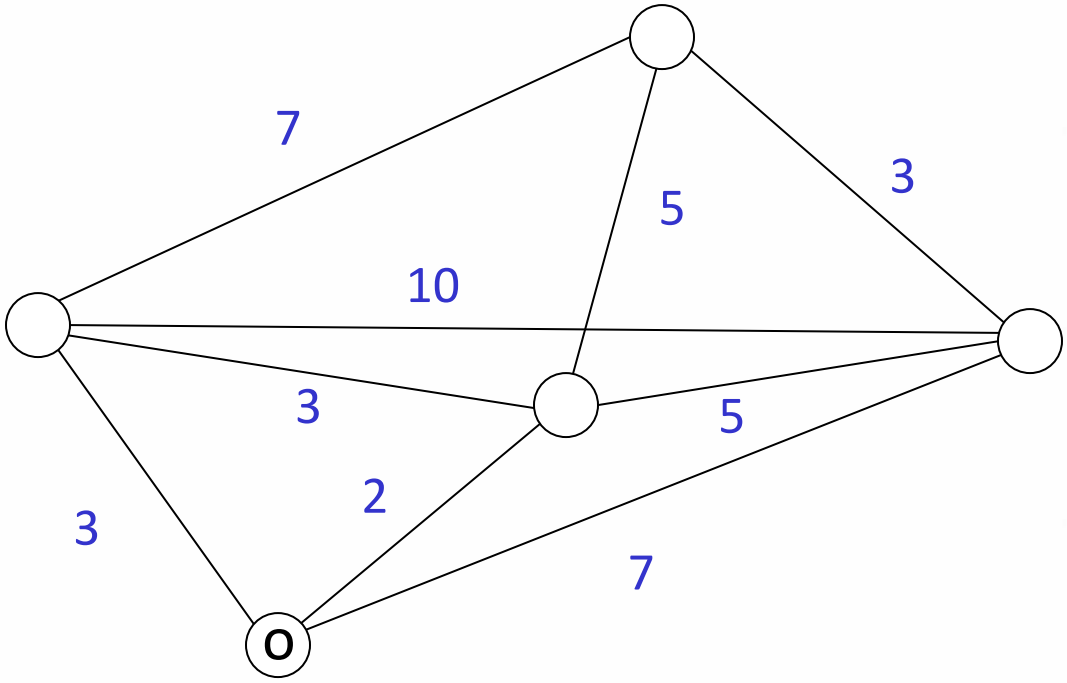


Heurísticas constructivas: método greedy

- greedy = “ávido” o “goloso”
- Idea: tratar de construir una solución seleccionando iterativamente elementos componentes de menor costo
- Para algunos problemas con estructura particular, la solución construida es una solución óptima (en general, NO es el caso)

Ejemplo: greedy para el TSP

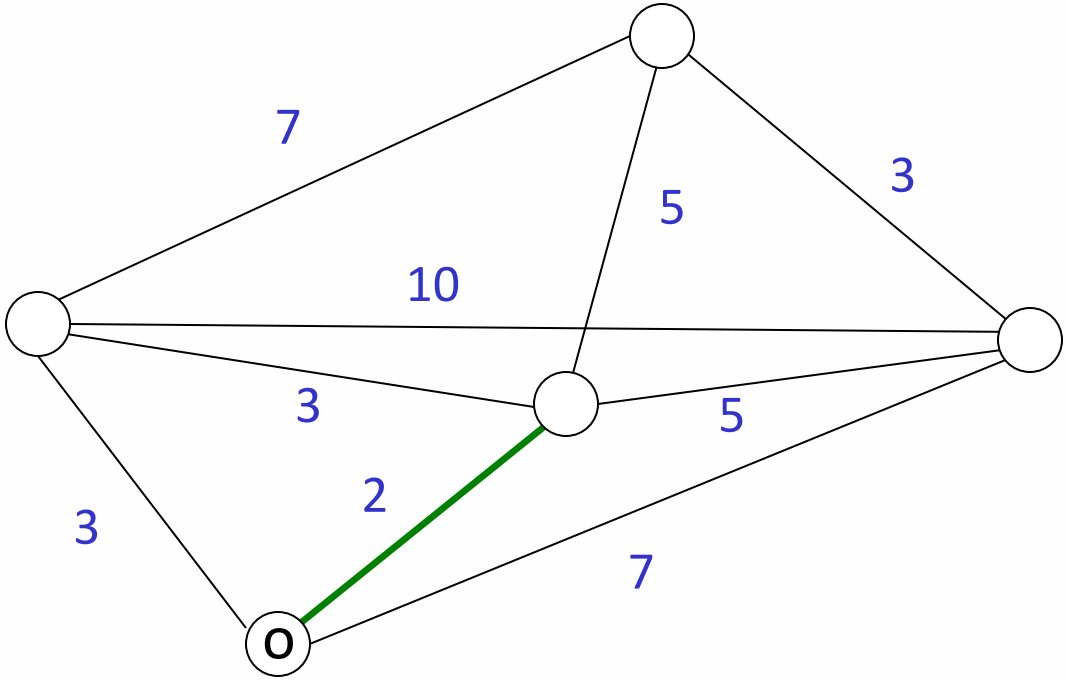
- Método greedy para la instancia del TSP definida por el grafo:



Origen del ciclo

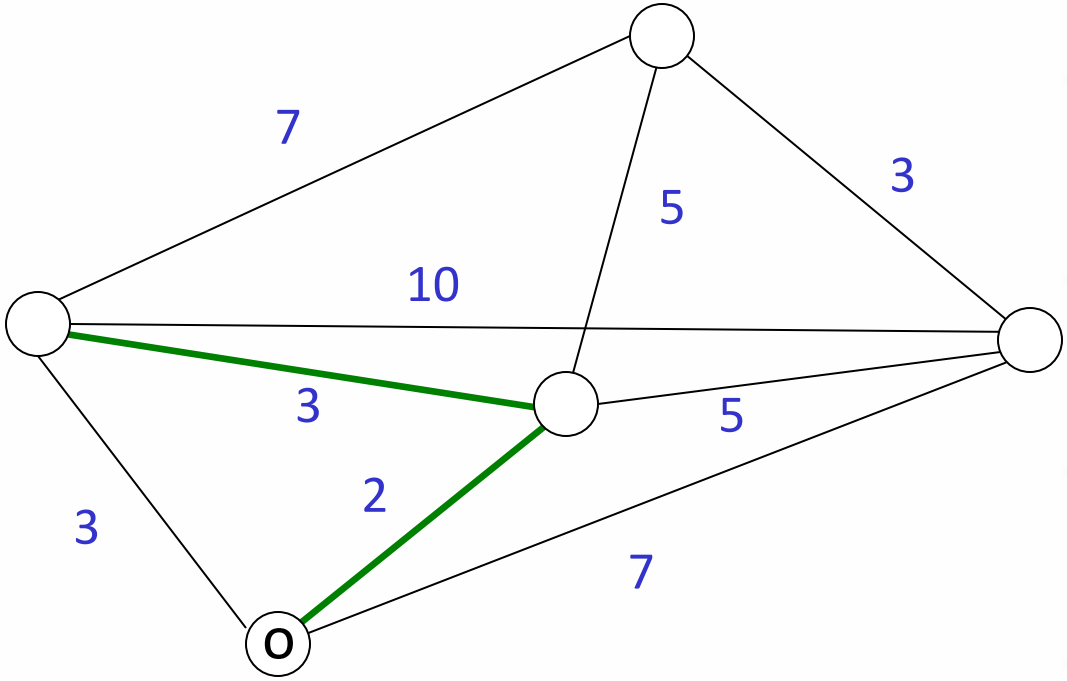
Ejemplo: greedy para el TSP

- Greedy - Paso 1:



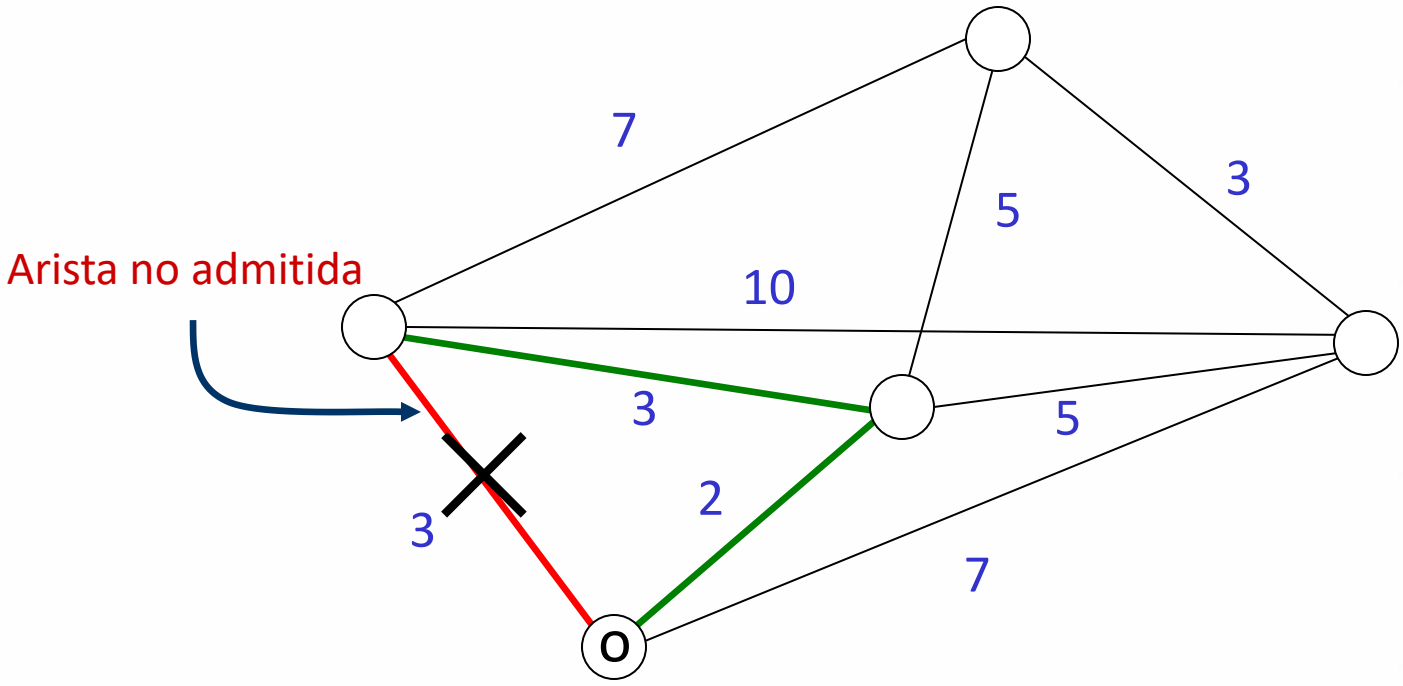
Ejemplo: greedy para el TSP

- Greedy - Paso 2:



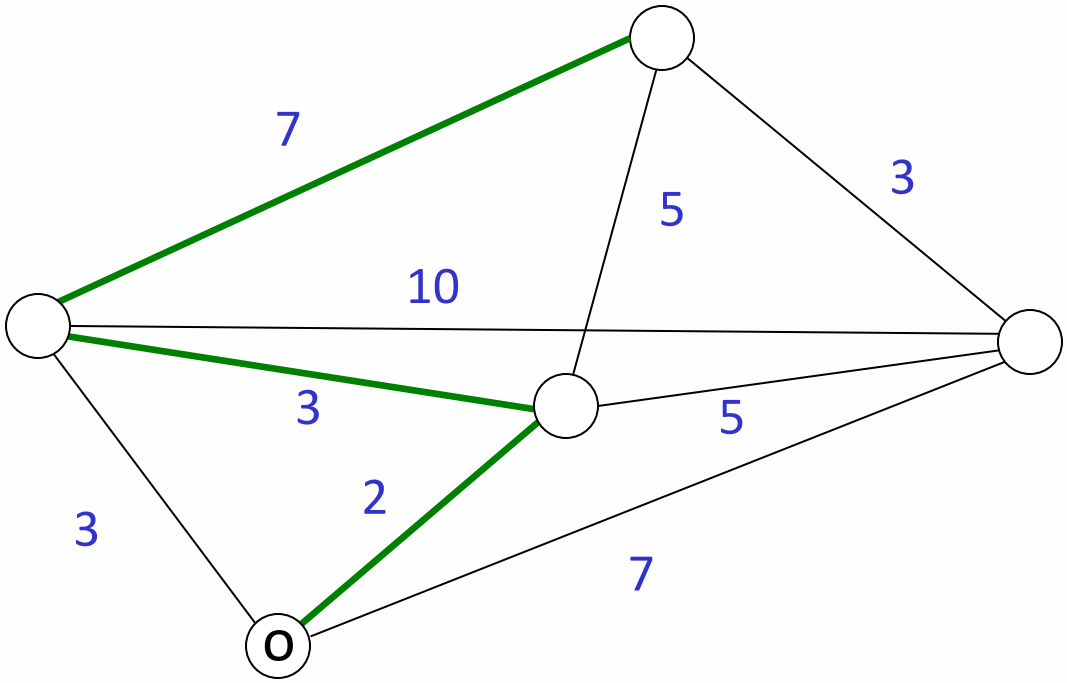
Ejemplo: greedy para el TSP

- Greedy - Paso 3:



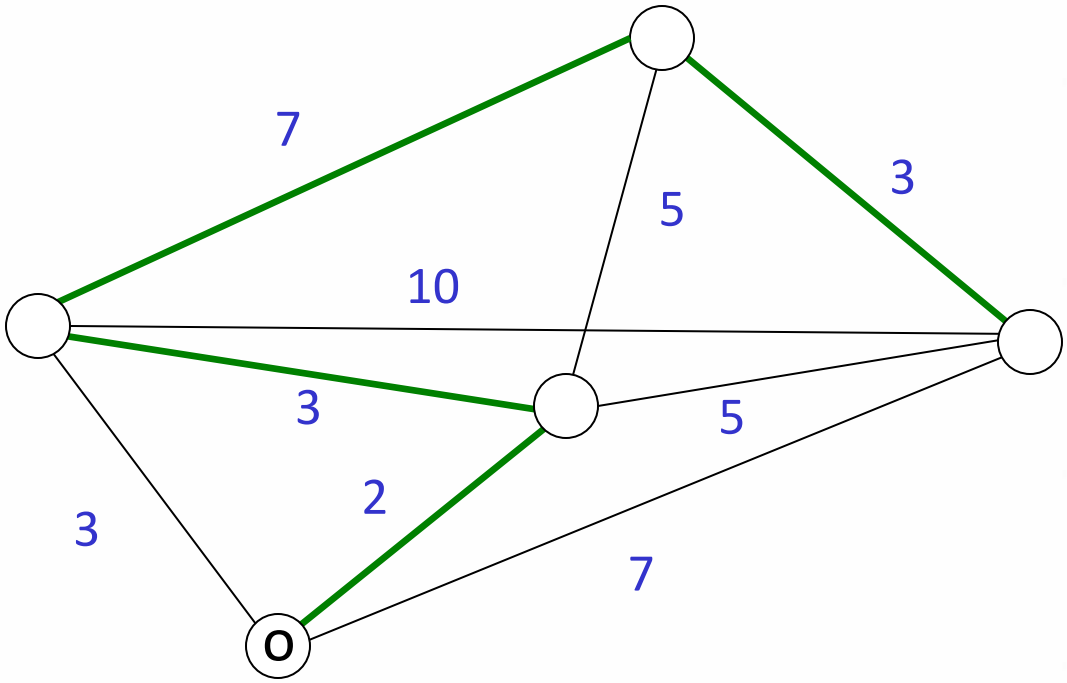
Ejemplo: greedy para el TSP

- Greedy - Paso 3:



Ejemplo: greedy para el TSP

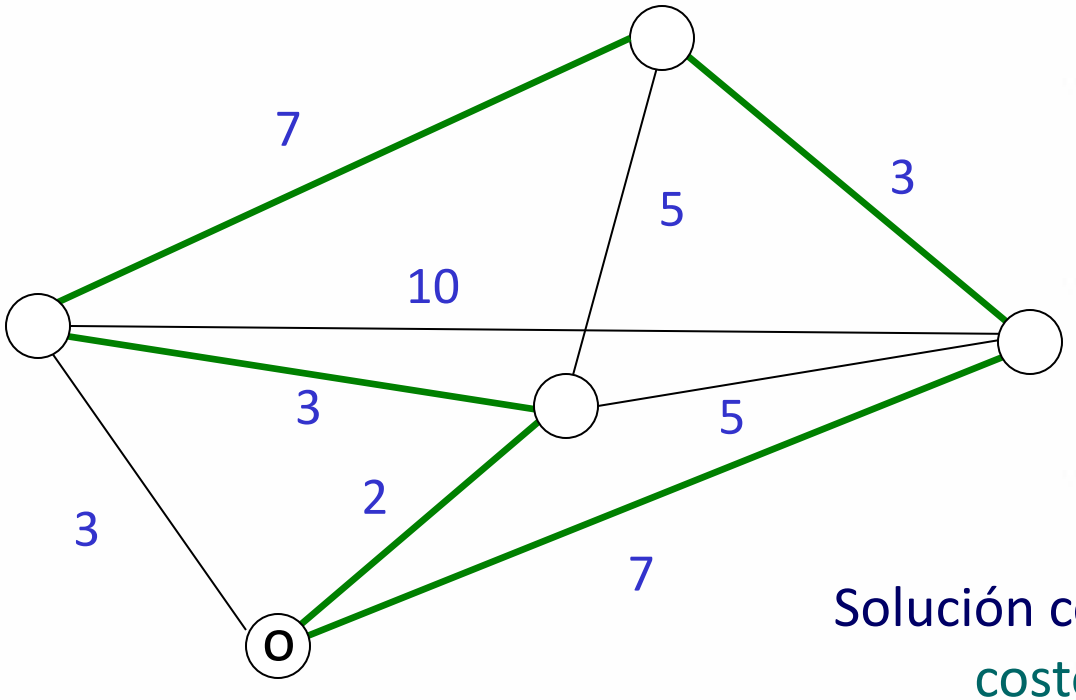
- Greedy - Paso 4:



Ejemplo: greedy para el TSP

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

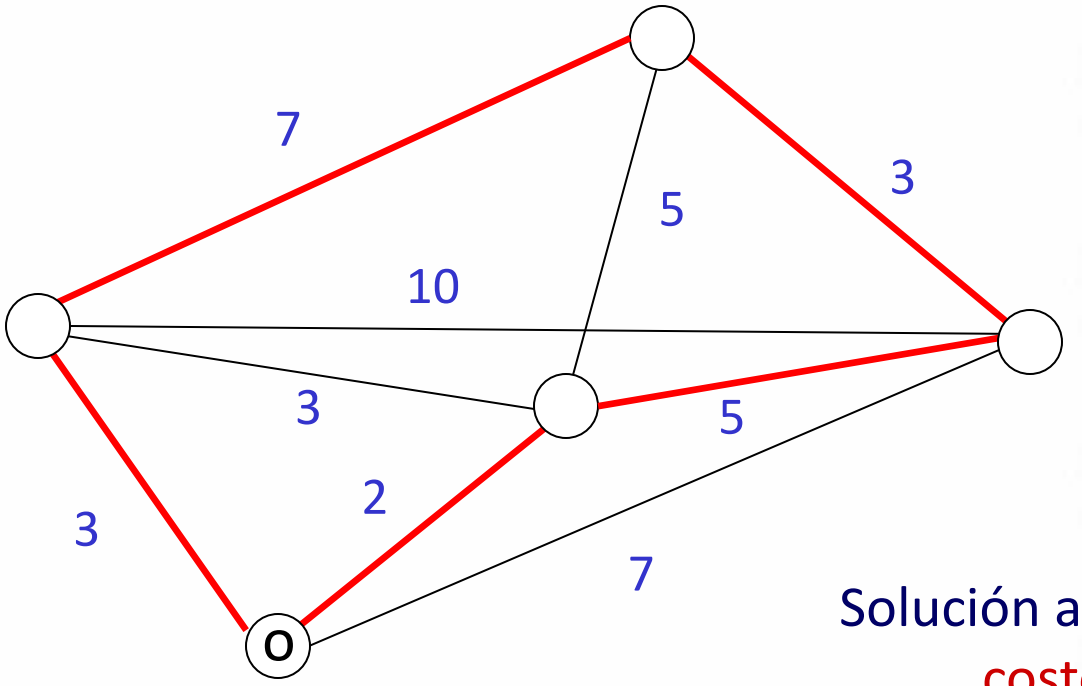
- Greedy - Paso 5:



Solución construida:
costo 22

Ejemplo: greedy para el TSP

- Sin embargo, es posible obtener:



Solución alternativa:
costo 20

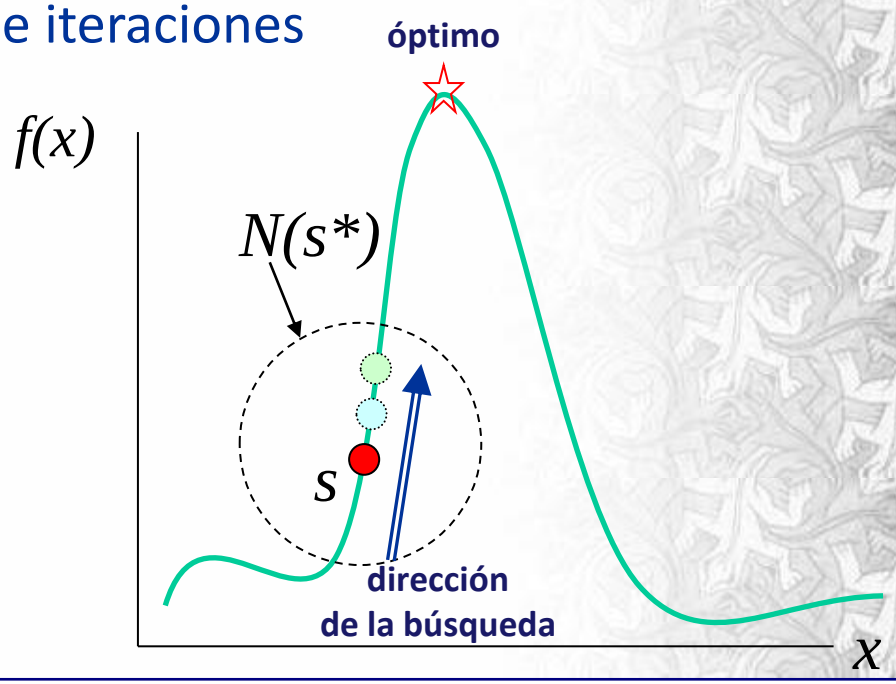
Búsqueda local (local search, LS)

- Mejor alternativa para la optimización. Obtiene mejores resultados que los métodos greedy
- Como contrapartida, requiere mayor esfuerzo computacional
- Vecindad: $N : S \rightarrow 2^s$ a cada solución *s* se le asigna un conjunto de vecinos $N(s) \subseteq S$
- En general, se define $N(s)$ especificando los cambios sobre *s* para obtener sus vecinos (movimiento)
- Se reemplaza la solución inicial por una mejor solución de su vecindad

Búsqueda Local Iterada (IILS)

- Búsqueda iterativa de mejores soluciones en una estructura de vecindades $N(s)$
  - $N(s)$: soluciones que pueden alcanzarse a través de una transformación (movimiento) en s
- El algoritmo se detiene luego de encontrar un óptimo local/global o luego de realizar un número dado de iteraciones

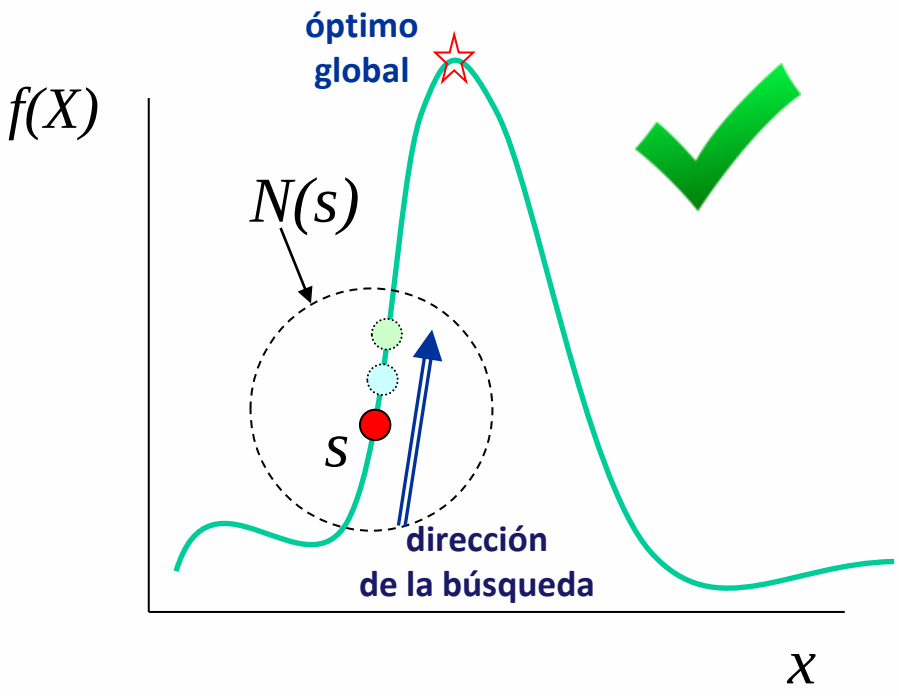
```
1: s ← GenerateInitialSolution()
2: repeat
3:     s ← Improve(N(s))
4: until no improvement is possible
```



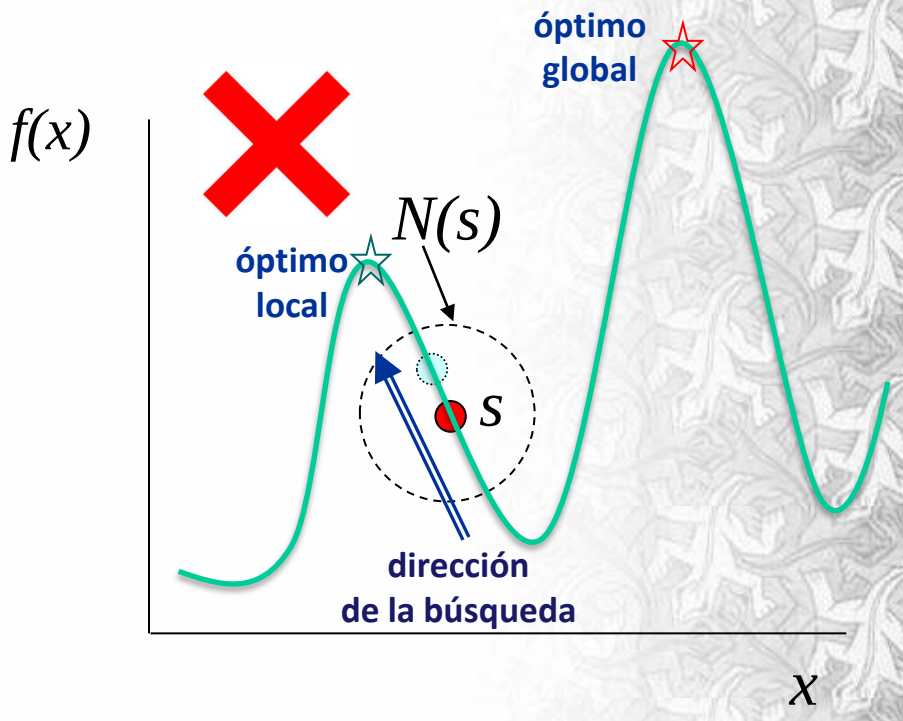
Búsqueda Local Iterada (IILS)

- Qué tan efectiva es la Búsqueda local Iterada ?

a – función unimodal



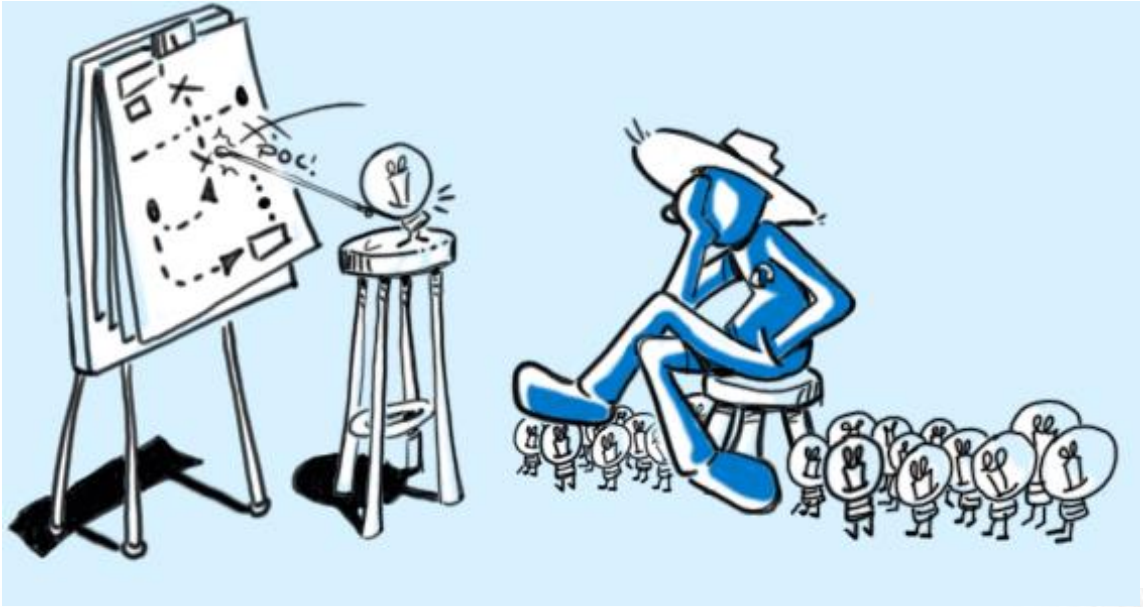
b – función multimodal



- La Búsqueda local Iterada puede quedar atrapada en óptimos locales

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

4



METAHEURÍSTICAS

4 – Metaheurísticas

Conceptos

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

- Métodos eficientes y precisos para hallar soluciones de calidad a problemas de optimización complejos
- “High-level strategy that combines a set of underlying simpler operation techniques (usually heuristics) aimed at obtaining a more powerful procedure” (Glover, 1986)
- Principales características:
  1. Estrategias que guían la búsqueda, usualmente empleando heurísticas subordinadas
  2. Admiten una descripción abstracta de alto nivel
  3. Tienen utilización genérica (no específica para una clase de problemas)
  4. Deben ser instanciadas para clase concreta de problemas a resolver

Principales objetivos

- Hallar eficientemente (i.e. rápidamente) soluciones de buena calidad (con valores de la función objetivo cercanos al óptimo)
- Cubrir el espacio de soluciones sin quedar atrapadas en zonas específicas (especialmente óptimos locales)

Un ejemplo: Simulated Annealing

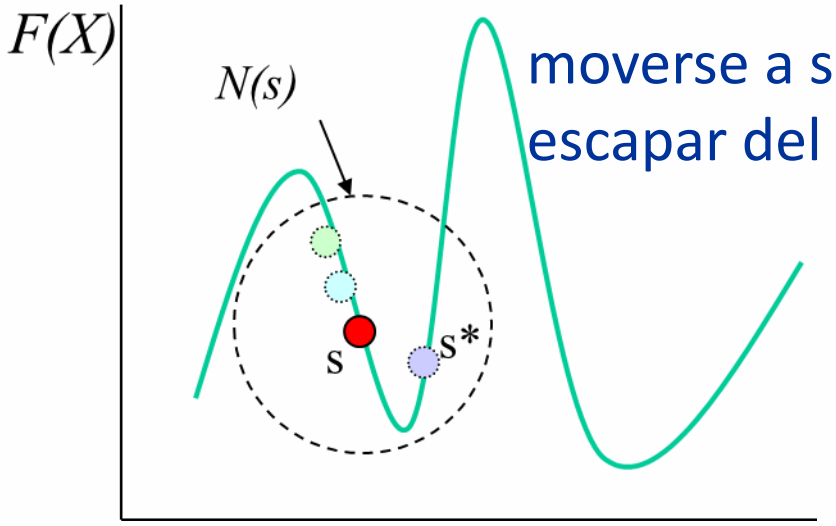
- Heurística: Búsqueda Local Iterada
  - Búsqueda en la vecindad de la solución actual
  - Si se encuentra una mejor solución, reemplazar a la actual
  - Desventaja: puede quedar atrapada en un óptimo local
- Metaheurística: Simulated Annealing (SA)
  - Búsqueda local iterada, pero una solución peor que la actual puede ser aceptada de acuerdo a una cierta probabilidad

Simulated annealing


```
1:  s ← GenerateInitialSolution()
2:  T ← T_0
3:  while termination conditions not met do
4:      s* ← PickAtRandom(N(s))
5:      if f(s*) < f(s) then
6:          s ← s*
7:      else
8:          Accept s* as new solution with probability p(T, s, s*)
9:      end if
10:     Update(T)
11: end while
```

búsqueda local

Idea clave: permite seleccionar peores soluciones que la actual, tratando de escapar de óptimos locales



moverse a s* permite escapar del óptimo local

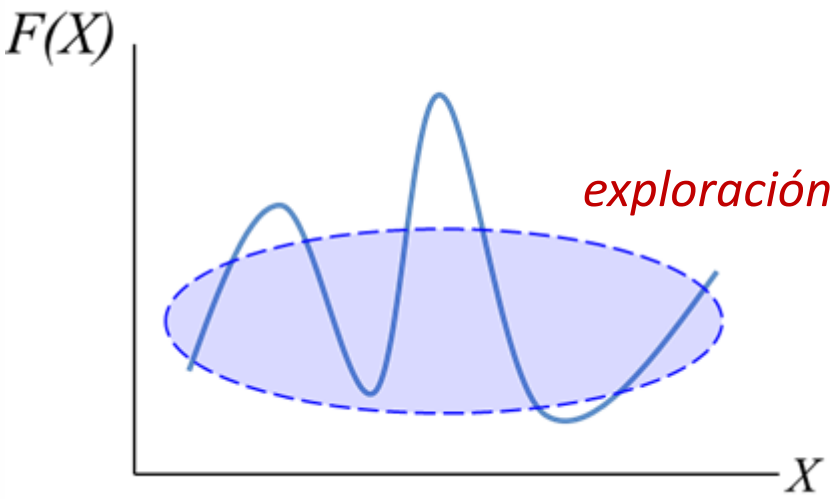
SA combina una heurística con un procedimiento de alto nivel que permite aceptar peores soluciones

Simulated annealing

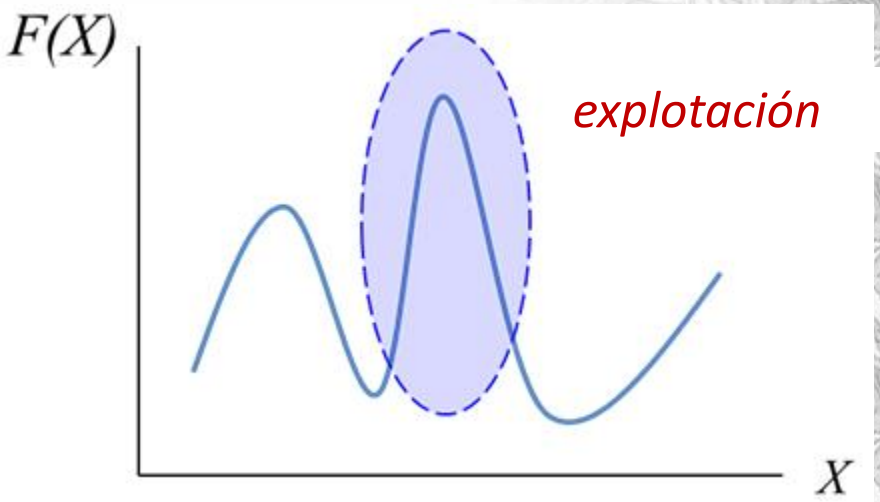
Combinar resulta siempre una buena idea, no es así ?

Características y conceptos

- Principales objetivos:
  1. Hallar (eficientemente) soluciones de buena calidad para problemas de optimización
  2. Cubrir el espacio de búsqueda sin quedar atrapadas en zonas específicas
- Dos conceptos fundamentales
  - Exploración del espacio de búsqueda o *diversificación*
  - Explotación de bunas soluciones encontradas o *intensificación*



cubrir el espacio de búsqueda



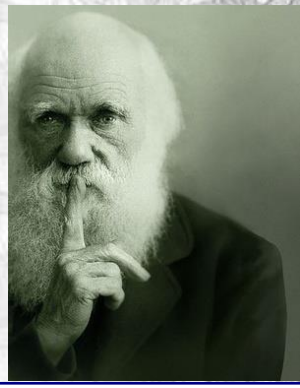
hallar soluciones de gran calidad

Metaheurísticas y clasificación

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

- Lista de ejemplos (no exhaustiva)
  - Simulated Annealing
  - Tabu Search
  - Greedy Randomized Adaptive Search Procedure
  - Variable Neighborhood Search
  - Guided Local Search
  - Ant Colony Optimization
  - Particle Swarm Optimization
  - Evolutionary Algorithms

- Existen múltiples criterios de clasificación
- Considerando el número de soluciones tentativas: *basadas en trayectoria* vs. *basadas en población*



4 - Metaheurísticas

Basadas en trayectoria y en población

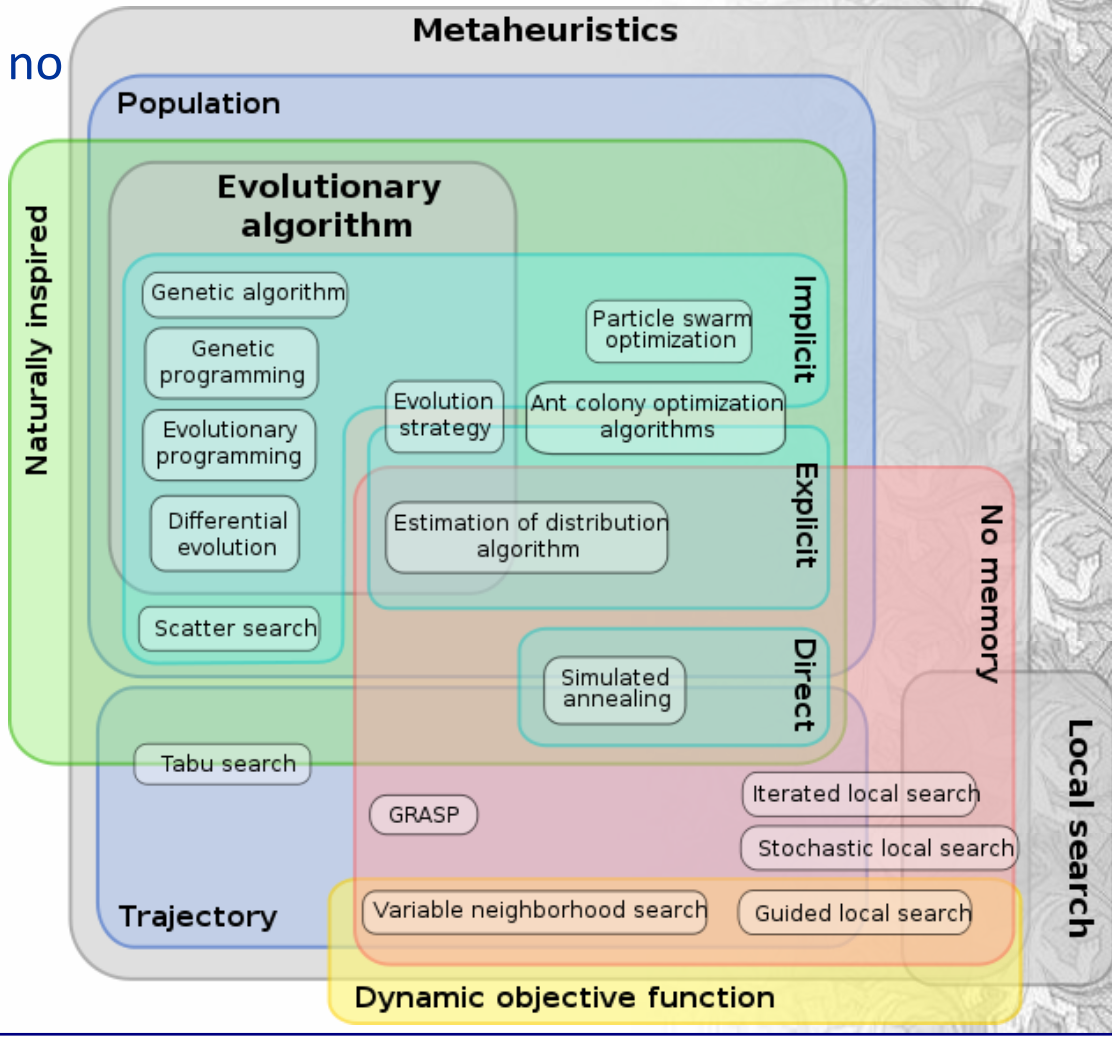
UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

- Basadas en trayectoria: solución única
  - Una única solución que se reemplaza en cada paso
  - Define una *trayectoria* en el espacio de búsqueda
  - Ejemplos:
    - Simulated annealing, Tabu search, etc.

- Basadas en población: usan un conjunto de soluciones (la *población*)
  - Algunas soluciones se reemplazan en cada iteración
  - Permite la *recombinación* de soluciones
  - Ejemplos :
    - Ant Colony Optimization
    - Particle Swarm Optimization
    - Algoritmos Evolutivos, etc.

Metaheurísticas y clasificación

- Otros criterios de clasificación
  - Inspiradas en la naturaleza o no
  - Aleatorias/deterministas
  - Constructivas o no
  - Con o sin memoria
  - Implícitas/explícitas/directas



UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

Autoestudio:
Introducción a las Metaheurísticas

Slides 51 a 61 y texto “Essentials of metaheuristics”
http://cs.gmu.edu/~sean/book/metaheuristics/

Lista (no exhaustiva) de ejemplos

- Simulated Annealing (SA)
- Tabu Search (TS)
- Greedy Randomized Adaptive Search Procedure (GRASP)
- Variable Neighbourhood Search (VNS)
- Guided Local Search (GLS)
- Iterated Local Search (ILS)
- Scatter Search (SS)
- Path Relinking (PR)
- Ant Colony Optimization (ACO)
- Particle Swarm Optimization (PSO)
- Computación Evolutiva (CE): variantes y derivados

Simulated annealing

- Basado en el procedimiento físico del enfriamiento de los cristales
- Idea: permitir movimientos a soluciones que empeoren la función objetivo para escapar a óptimos locales
- La probabilidad de realizar ese tipo de movimientos decrece durante la búsqueda
- Las soluciones que mejoran la función objetivo siempre son aceptadas
- Es un algoritmo probabilístico de búsqueda local
- Es una técnica aleatoria, que mantiene un único individuo, sin memoria, y basada en trayectoria

Tabu Search

- Búsqueda local con memoria a corto plazo para escapar de mínimos locales y evitar ciclos
- Algunas soluciones examinadas recientemente son incluidas en la memoria y se vuelven tabú (prohibidas) al tomar decisiones acerca del siguiente punto de búsqueda
- Generalmente, la lista tabú se maneja en forma FIFO
- Es determinística, aunque se le pueden agregar elementos probabilísticos
- Es una técnica determinística (en general), que mantiene un único individuo, con memoria, y basada en trayectoria

Greedy Randomized Adaptive Search Procedure (GRASP)

- Combina procedimientos constructivos y de búsqueda local
- Es un procedimiento iterativo en dos etapas: una de construcción de la solución y otra de mejora
- La construcción se realiza a partir de la selección de subpartes en forma aleatoria de conjuntos de candidatos
- La etapa de mejora consiste en aplicar búsqueda local a la solución construida
- Es una técnica aleatoria, que mantiene un único individuo, sin memoria, y constructiva

Variable Neighbourhood Search

- Se define un conjunto de estructuras de vecindad (en general se utilizan vecindades de cardinalidad creciente)
- La técnica opera en tres fases
  - *Shaking*: seleccionar aleatoriamente una solución s' perteneciente a la vecindad k-ésima de la presente solución s
  - *Búsqueda local*: s'' partiendo de s'
  - *Movimiento*: se acepta s'' si mejora s
- Una mala solución en una vecindad puede ser buena en otra
- Existen múltiples variantes:
  - Variable Neighbourhood Descent (VND)
  - Variable Neighbourhood Descomposition Search (VNDS)
  - Skewed Variable Neighbourhood Search (SVND)
- Es una técnica aleatoria, que mantiene un único individuo, sin memoria, y constructiva

Guided Local Search

- La búsqueda se conduce a través de cambios dinámicos en la función objetivo
- Idea: salir de óptimos locales, empeorando el óptimo local, mediante el cambio de la función objetivo
- Basado en características o propiedades de la solución que se usan para discriminar una solución de otra
- Es una técnica determinística, que mantiene un único individuo, sin memoria, y basada en trayectoria

Iterated Local Search (con perturbación)

- Consiste en una aplicación iterativa de una búsqueda local
- Se aplica la búsqueda local a una solución inicial hasta encontrar un óptimo local
- Luego se *perturba* la solución (se aplica un movimiento altamente disruptivo) y se realiza nuevamente la búsqueda local
- Es una técnica aleatoria, que mantiene un único individuo, sin memoria y basada en trayectoria

Scatter Search

- Se genera un conjunto de soluciones combinando subconjuntos de un conjunto de soluciones de referencia (factibles)
- Las soluciones generadas no necesariamente son factibles, deben factibilizarse (mediante un algoritmo de “reparación”) y pueden ser mejoradas mediante búsqueda local
- El conjunto de referencia se actualiza con las soluciones generadas
- Las soluciones se codifican como puntos en un espacio euclideano. Las nuevas soluciones se obtienen mediante combinaciones lineales de las soluciones de referencia (se permite utilizar pesos positivos y negativos, siendo posible salir de la región factible
- Es una técnica poblacional, sin memoria, y constructiva. Puede ser determinística ó aleatoria (de acuerdo al procedimiento que genera las nuevas soluciones)

Path Relinking

- Surgió como una generalización de Scatter Search
- El espacio euclideano se sustituye por espacios de vecindades. En este caso, las combinaciones lineales son caminos entre soluciones en el espacio de vecindades
- Caminos habilitados: desde la solución inicial los movimientos deben introducir sucesivamente atributos seleccionados en una búsqueda guiada
- Al igual que SS, es una técnica poblacional, sin memoria, y constructiva. Puede ser determinística ó aleatoria (de acuerdo al procedimiento que genera las nuevas soluciones)

Ant Colony Optimization

- Se basan en el comportamiento social de las hormigas (cada hormiga tiene capacidades restringidas, pero en conjunto logran un comportamiento “inteligente”)
- Existe comunicación indirecta a través de sustancia química (feromona) que sirve de referencia a otras hormigas
- Idea del algoritmo: cada hormiga artificial construye una solución agregando componentes a una solución parcial en consideración
- La decisión sobre qué componentes agregar es probabilística, a partir de la feromona depositada y un factor heurístico (para asegurar la exploración)
- Al terminar de construir la solución, la regla de actualización incrementa la feromona en las componentes con “mejor calidad”
- Es una técnica aleatoria, poblacional, con memoria, y constructiva

Particle Swarm Optimization

- Técnica inspirada en el comportamiento de los enjambres de aves e insectos
- Si un insecto encuentra un camino atractivo, el resto del enjambre lo puede seguir rápidamente, incluso si están en el lado opuesto del enjambre
- Se modela con partículas que tienen atributos de posición y velocidad en un espacio multidimensional
- Las partículas se mueven en ese espacio y recuerdan la mejor posición que conocen
- Las posiciones de mejor calidad son comunicadas, y las partículas ajustan sus atributos en base a ellas
- Es una técnica aleatoria, poblacional, sin memoria, y basada en trayectoria

Computación evolutiva

- Técnicas de optimización que trabajan sobre una población de soluciones que evoluciona mediante mecanismos de selección y construcción de soluciones candidatas por recombinación de características de las soluciones anteriores
- Etapas:
  - Evaluación de la función de fitness (evalúa calidad de las soluciones)
  - Selección de individuos adecuados (de acuerdo al fitness)
  - Aplicación de operadores evolutivos
  - Reemplazo o recambio generacional
- Múltiples variantes y derivados: Algoritmos Genéticos, Programación Evolutiva, Estrategias de Evolución, Algoritmos Meméticos, Algoritmos de Estimación de Distribuciones, etc.
- Son técnicas aleatorias, poblacionales, sin memoria, y constructivas

Aplicaciones

- La mayoría de los problemas complejos del mundo real no pueden resolverse usando algoritmos en tiempo polinomial
- En muchas aplicaciones prácticas, no es posible ni siquiera determinar la existencia de una solución eficiente
- Hay muchos problemas para los cuales el mejor algoritmo que se conoce requiere tiempo exponencial

HEURÍSTICAS Y METAHEURÍSTICAS CONSTITUYEN ALTERNATIVAS PARA HALLAR SOLUCIONES DE BUENA CALIDAD EN TIEMPOS RAZONABLES