Introducción a la Computación Evolutiva

Dr. Carlos A. Coello Coello

Departamento de Computación

CINVESTAV-IPN

Av. IPN No. 2508

Col. San Pedro Zacatenco

México, D.F. 07300

email: ccoello@cs.cinvestav.mx

http: //delta.cs.cinvestav.mx/~ccoello

Conceptos Básicos de Análisis de Algoritmos

- Análisis a *priori* de algoritmos
- Orden de magnitud de un algoritmo

Análisis a *priori* de algoritmos

Se ignoran los detalles que sean dependientes de la arquitectura de una computadora o de un lenguaje de programación y se analiza el orden de magnitud de la frecuencia de ejecución de las instrucciones de un algoritmo.

Orden de magnitud de un algoritmo

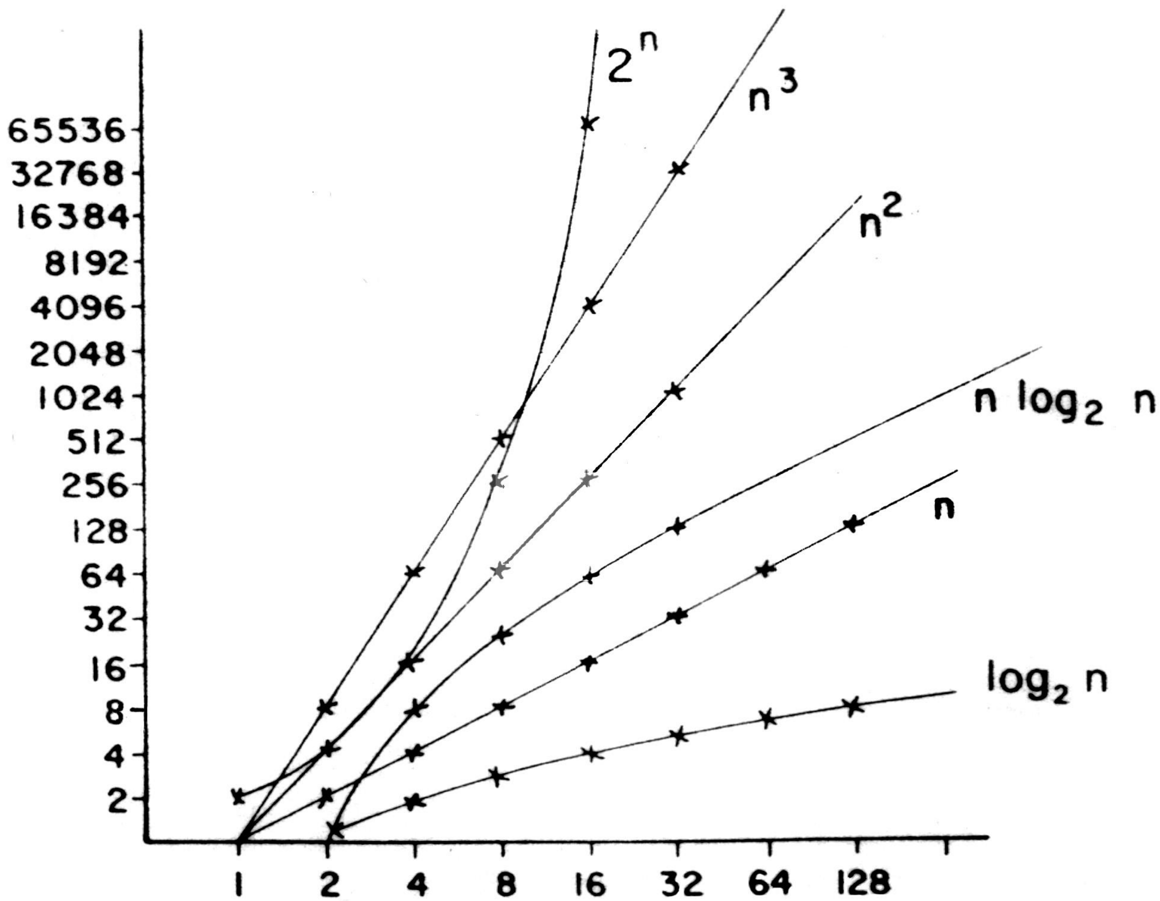
- Suele usarse la notación "O" (big-O)
- Si un algoritmo tiene complejidad $O(g(n))$ significa que al correrlo en una computadora con los mismos datos, pero valores incrementales de n, los tiempos resultantes de ejecución serán siempre menores que $\mid g(n) \mid$

Orden de magnitud de un algoritmo

Los tiempos más comunes de los algoritmos son:

$$O(1) < O(\log n) < O(n) < O(n \log n) < O(n^2) < O(n^3) < O(2^n)$$

Orden de magnitud de un algoritmo



Clase P

Un problema pertenece a la clase **P** si puede ser resuelto en tiempo polinomial en una computadora determinística.

Ejemplos: Quicksort, 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.

P vs NP

- La clase **P** contiene problemas que pueden resolverse rápidamente.
- La clase **NP** contiene problemas cuya solución puede verificarse rápidamente.
- En 1971 se planteó la pregunta: ¿Es **P** = **NP**? Desde entonces, sigue siendo una pregunta abierta para los teóricos.
- Se cree que **P**!=**NP**

Problemas NP Completos

- Todos los algoritmos requeridos para resolverlos requieren tiempo exponencial en el peor caso.
- Es decir, estos problemas son sumamente difíciles de resolver.

Ejemplos: el problema del viajero, $O(n^2 2^n)$

El problema del viajero

- Encontrar una permutación que represente el recorrido de una serie de ciudades de tal forma que todas sean visitadas minimizando la distancia total viajada.

El problema del viajero

Si consideramos n ciudades:

- El tamaño del espacio de búsqueda es: $(n-1)!/2$
- Para n=10, hay unas 181,000 soluciones posibles.
- Para n=20 hay unas 10,000,000,000,000,000 soluciones posibles.

El problema del viajero

- Para n=50 hay unas 100,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000 soluciones posibles.

El problema del viajero

- Sólo hay 1,000,000,000,000,000,000,000 litros de agua en el planeta

Técnicas Clásicas de Búsqueda y Optimización

Existen muchas técnicas clásicas para resolver problemas con ciertas características específicas.

Es importante saber al menos de la existencia de estas técnicas, pues cuando el problema por resolverse se adecúa a ellas, no tiene ningún sentido usar heurísticas.

Técnicas Clásicas de Búsqueda y Optimización

Para optimización lineal, el método Simplex sigue siendo la opción más viable. Para optimización no lineal, hay métodos directos (p. ej. la búsqueda aleatoria) y métodos no directos (p. ej. el método del gradiente conjugado).

Técnicas Clásicas de Búsqueda y Optimización

Existen también técnicas que construyen parcialmente una solución a un problema. Por ejemplo, la programación dinámica y el método de ramificación y búsqueda (*branch & bound*).

Técnicas Clásicas de Búsqueda y Optimización

Cuando enfrentamos un cierto problema de optimización, si la función a optimizarse se encuentra en forma algebraica, es importante intentar resolverla primero con técnicas clásicas, antes de utilizar cualquier heurística.

Lo que el mundo real demanda

- Existen problemas que no pueden resolverse usando un algoritmo que requiere tiempo polinomial.
- De hecho, en muchas aplicaciones prácticas, no podemos siquiera decir si existe una solución eficiente.
- Hay muchos problemas para los cuales el mejor algoritmo que se conoce requiere tiempo exponencial.

¿Qué es una heurística?

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

¿Qué es una heurística?

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

¿Qué es una heurística?

Una definición más precisa y adecuada para los fines de este curso es la proporcionada por Reeves (1993):
Una heurística es una técnica que busca soluciones buenas (es decir, casi óptimas) a un costo computacional razonable, aunque sin garantizar factibilidad u optimalidad de las mismas. En algunos casos, ni siquiera puede determinar qué tan cerca del óptimo se encuentra una solución factible en particular.

¿Realmente necesitamos técnicas heurísticas?

Cuando enfrentamos espacios de búsqueda tan grandes como en el caso del problema del viajero, y que además los algoritmos más eficientes que existen para resolver el problema requieren tiempo exponencial, resulta obvio que las técnicas clásicas de búsqueda y optimización son insuficientes.

Ejemplos de técnicas heurísticas

- Búsqueda tabú
- Recocido simulado
- Escalando la colina

Búsqueda Tabú

- Usa una "memoria" para guiar la búsqueda.
- Algunas soluciones examinadas recientemente son "memorizadas" y se vuelven tabú (prohibidas) al tomar decisiones acerca del siguiente punto de búsqueda.
- Es determinística, aunque se le pueden agregar elementos probabilísticos.

Recocido Simulado

- Basado en el enfriamiento de los cristales.
- El horario de enfriamiento es crucial.
- Requiere de una temperatura inicial, una final y una función de variación de la temperatura.
- Es un algoritmo probabilístico de búsqueda local.

Escalando la Colina

- Se aplica a un punto a la vez (técnica local).
- Se generan varios estados posibles y se selecciona el mejor.
- No hay retroceso ni registro histórico.
- Puede quedar atrapado fácilmente en óptimos locales.
- Es un algoritmo determinístico.

Optimización Global

El objetivo principal de cualquier técnica de optimización es encontrar el óptimo (o los óptimos) globales de cualquier problema. En matemáticas, existe un área que se ocupa de desarrollar los formalismos que nos permitan garantizar la convergencia de un método hacia el óptimo global de un problema.

Optimización Global

Desgraciadamente, sólo en algunos casos limitados, puede garantizarse convergencia hacia el óptimo global.
Por ejemplo, para problemas con espacios de búsqueda convexos, las condiciones de Kuhn-Tucker son necesarias y suficientes para garantizar optimalidad global de un punto.

Optimización Global

En problemas de optimización no lineal, las condiciones de Kuhn-Tucker no son suficientes para garantizar optimalidad global. De hecho, todas las técnicas usadas para optimización no lineal pueden localizar cuando mucho óptimos locales, pero no puede garantizarse convergencia al óptimo global a menos que se usen técnicas exhaustivas o que se consideren tiempos infinitos de convergencia.

Optimización Numérica

Existen muchos tipos de problemas de optimización, pero los que nos interesan más para los fines de este curso, son de los de optimización numérica, que pueden definirse de la siguiente manera:

$$\text{Minimizar } f(\vec{x})$$

sujeta a:

$$\begin{aligned} g_i(\vec{x}) \leq 0 \qquad & i = 1, ..., p \\ h_j(\vec{x}) = 0 \qquad & j = 1, ..., n \end{aligned}$$

Optimización Numérica

Llamaremos a $(\vec{x})$ las variables de decisión del problema, $g_i(\vec{x})$ son las restricciones de desigualdad, y $h_j(\vec{x})$ son las restricciones de igualdad. Asimismo, $f(\vec{x})$ es la función objetivo del problema (la que queremos optimizar).

Optimización Numérica

A las restricciones de igualdad y desigualdad expresadas algebraicamente, se les denomina "restricciones explícitas". En algunos problemas, existen también "restricciones implícitas", relacionadas sobre todo con las características del problema.

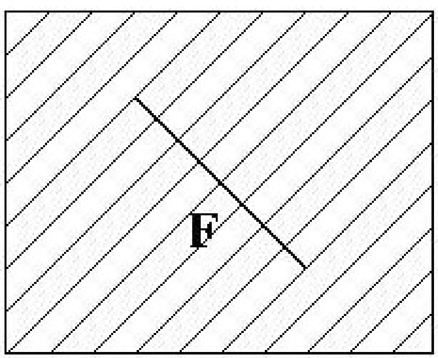
Optimización Numérica

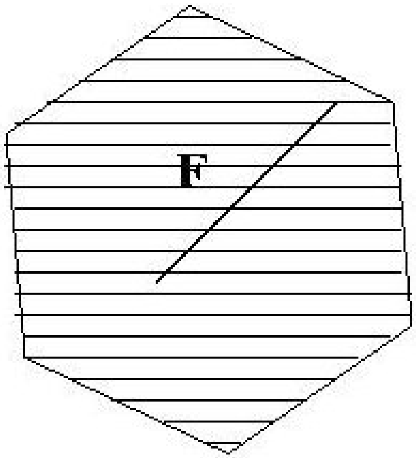
Por ejemplo, si decimos:

$$10 \leq x_1 \leq 20$$

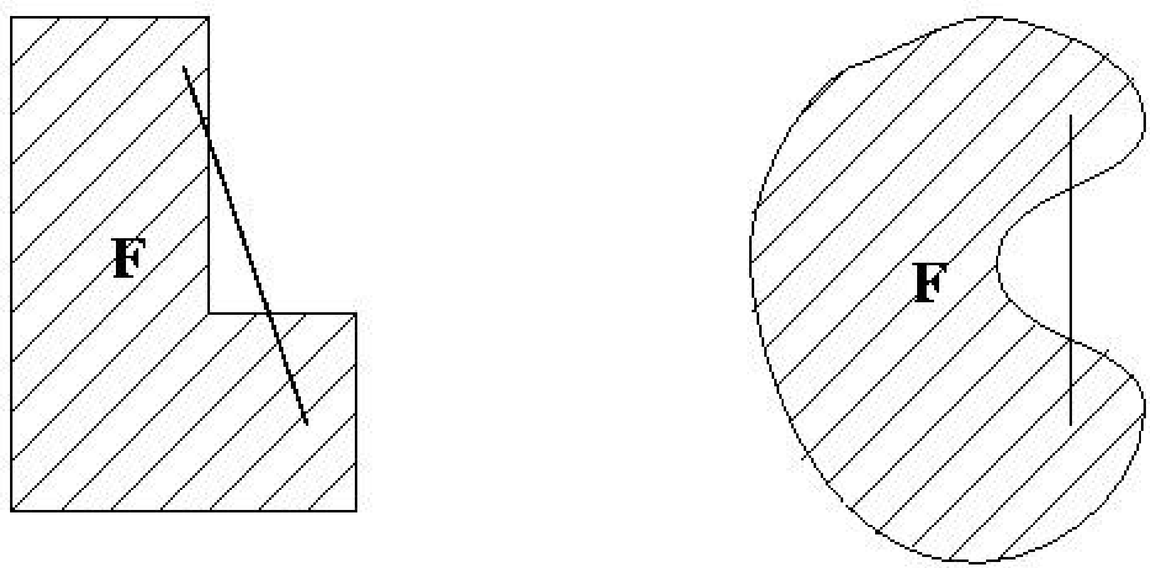
estamos definiendo que el rango de una variable de decisión debe estar contenido dentro de un cierto intervalo. De tal forma, estamos "restringiendo" el tipo de soluciones que se considerarán como válidas.

Ejemplos de espacios de búsqueda convexos





Ejemplos de espacios de búsqueda no convexos

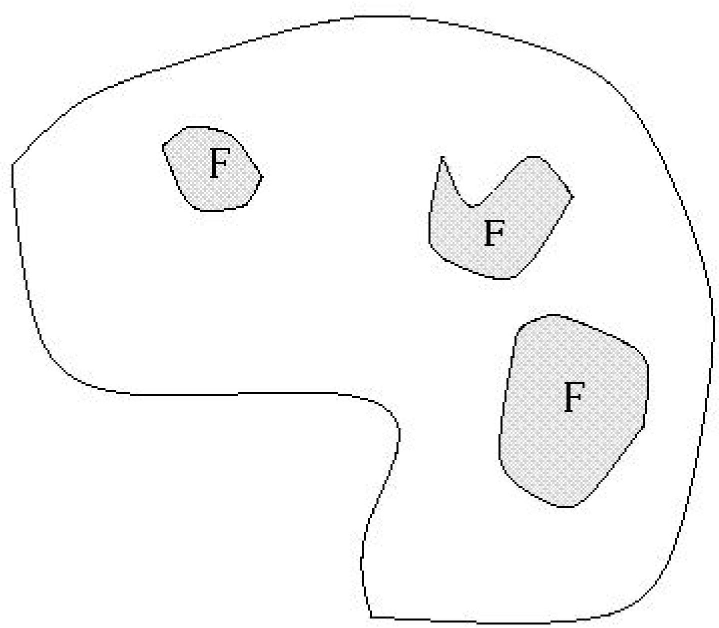


Zona factible y no factible

Todas las soluciones a un problema que satisfagan las restricciones existentes (de cualquier tipo), se consideran ubicadas dentro de la zona factible. De tal forma, podemos decir que el espacio de búsqueda de un problema se divide en la región (o zona) factible y la no factible.

Zona factible y no factible

Esta imagen ilustra la diferencia entre la zona factible y no factible de un problema:



Optimización Combinatoria

Existe una clase especial de problemas que también serán de interés para este curso, en los cuales las variables de decisión son discretas y las soluciones suelen presentarse en la forma de permutaciones. A estos problemas se les denomina de “optimización combinatoria” (p. ej. el problema del viajero).

Durante muchos años, la tesis más aceptada sobre el origen de las especies fue el creacionismo: Dios creó a todas las especies del planeta de forma separada.

Además, según el creacionismo, las especies estaban jerarquizadas por Dios de tal manera que el hombre ocupaba el rango superior, al lado del creador.

Georges Louis Leclerc (Conde de Buffon) fue tal vez el primero en especular (100 años antes que Darwin) que las especies se originaron entre sí, e incluso especuló sobre la posible existencia de un ancestro común entre el hombre y los simios, aunque después, él mismo refutó esta hipótesis. Varias de sus ideas fueron, sin embargo, revolucionarias para su época.

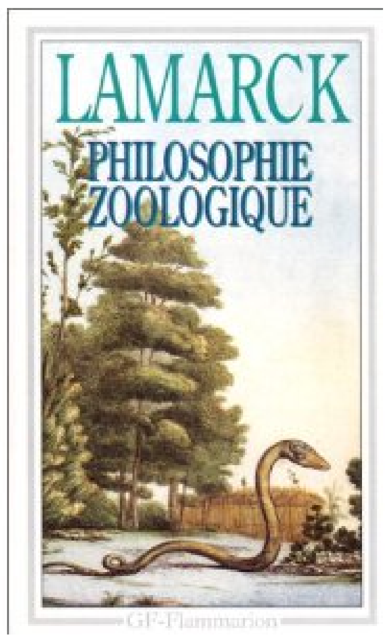
Leclerc sugirió que las especies pudieron haberse "mejorado" y "degenerado" después de haberse dispersado a partir de un eje central de la creación. En el volumen 14 de su *Histoire naturelle, générale et particulière*, argumenta que todos los cuadrúpedos del mundo se desarrollaron a partir de un conjunto original de sólo 38 cuadrúpedos. Es por ello que algunos lo consideran un "transformista" y precursor de las ideas de Darwin.

Leclerc también indicó que el cambio climático pudo haber facilitado la dispersión de las especies. La interpretación correcta de sus ideas es, sin embargo, muy difícil, dado que las retoma varias veces en su extenso trabajo, cambiando en muchas ocasiones su punto de vista al respecto.

El biólogo francés Jean-Baptiste Lamarck enunció la que se considera como la primera teoría evolutiva coherente de la historia (en 1808).

Lamarck indicó correctamente que el ambiente da pie a los cambios en los animales. Esto lo ilustró con ejemplos tales como la ceguera de los topos, la presencia de dientes en los animales y la ausencia de dientes en las aves que para él constituían evidencia de esta teoría.

En sus trabajos, señaló que existían dos fuerzas principales que conformaban la evolución: una que forzaba los cambios en los animales, pasándolos de formas simples a otras más complejas, y una segunda que adaptaba a los animales a sus ambientes locales y que los diferenciaba entre sí. Lamarck creía que estas fuerzas debían ser explicadas como una consecuencia necesaria de principios físicos básicos.



Los aspectos más importantes a tener en cuenta sobre la teoría evolutiva de Lamarck son los siguientes:

1. Su teoría se centra únicamente en la evolución de los organismos y no en su origen ya que, en aquel entonces se aceptaba que los organismos surgían espontáneamente en sus formas más simples.
2. Propuso que los cambios que sufren los organismos para adaptarse eran heredables. Años después se demostró que esto era incorrecto.

3. La teoría evolutiva de Lamarck constituía una clara oposición a la creencia de la época de que las especies permanecían inmutables desde su creación.

4. Curiosamente, durante el siglo XX han existido evolucionistas que han defendido el llamado *Lamarckismo*, a través de las voces de varios biólogos y evolucionistas que han buscado reivindicar el trabajo de Lamarck.