Algoritmos de vuelta atrás

Algoritmia y optimización
Grado en Ingeniería en Inteligencia Artificial

Vuelta atrás

Introducción

- Hay determinados problemas cuya única solución es **enumerar todas las posibles soluciones** y guardar la mejor.
- Este enfoque es óptimo **por definición** pero lleva a complejidades asintóticas **exponenciales**.
- La **vuelta atrás** es un estrategia para enumerar todas las posibles soluciones, adecuada para añadir **mejoras prácticas a la eficiencia**.

El problema de la mochila (general)

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general)

Variante del problema de la mochila	**Solución**
Mochila 0/1 o discreta • Objetos 0/1 no fraccionables • Pesos discretos	Programación dinámica
Mochila continua • Objetos fraccionables • Pesos continuos (por ser fraccionable)	Voraz
Mochila general • Objetos 0/1 no fraccionables • Pesos continuos	Vuelta atrás

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general)

- Requisitos:
  - Solo se permite hasta una unidad de cada objeto (0-1).
  - Los objetos no se pueden fraccionar.
  - Los pesos pueden ser continuos.
    - Programación dinámica **no recomendable**.

Vuelta atrás

El problema de la mochila

Instancia

Valores $(v_1, v_2, \ldots, v_n)$

Pesos $(w_1, w_2, \ldots, w_n)$

Peso máximo W

Problema (versión general)

$$\arg \max_{\mathbf{x} \in \{0,1\}^n} \sum_{i=1}^{n} v_i x_i$$

$$\text{s.t.} \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \leq W$$

$$\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}$$

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general)

- Posibles soluciones:
  - **Programación dinámica**: infinitos subproblemas.
  - **Estrategia voraz**: no es óptima.
- **Enumerar** todas las posibles formas de llenar la mochila:
  - Soluciones que **cumplen con la restricciones** (soluciones factibles)
  - Solución que **maximiza el valor** (solución óptima)

Vuelta atrás

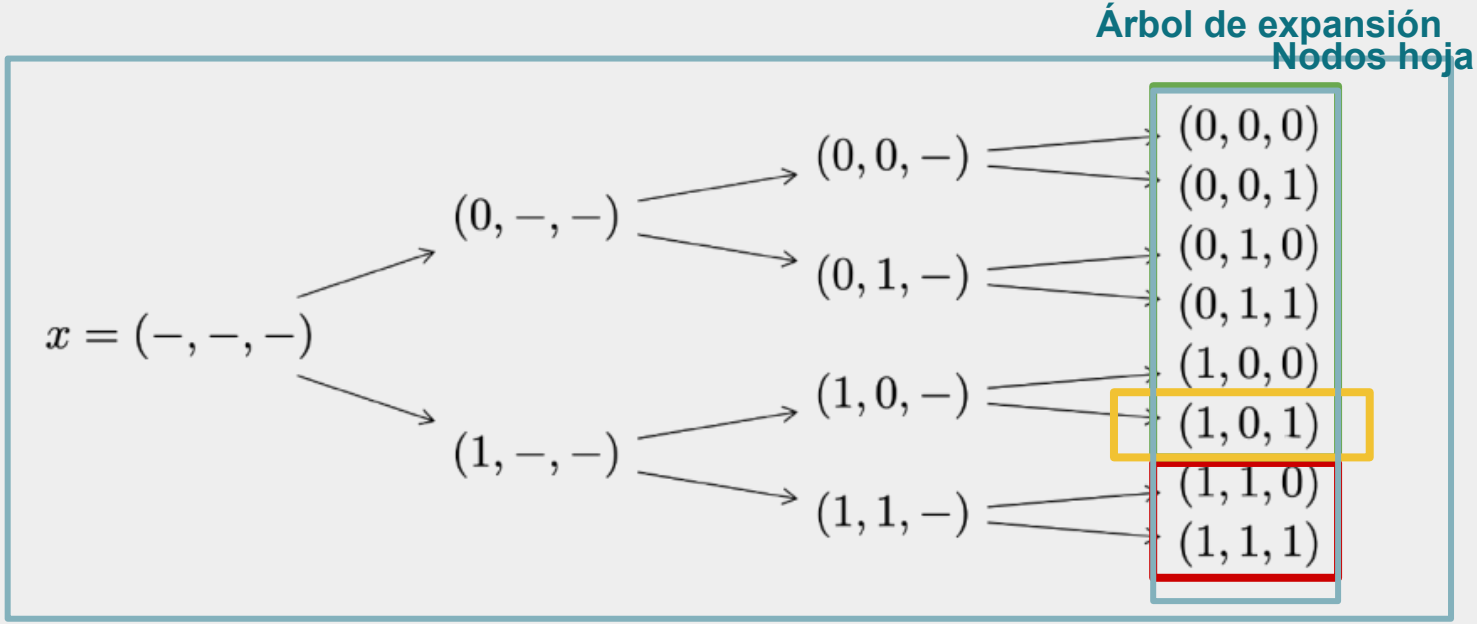
El problema de la mochila (general)

- Pasos generales en vuelta atrás:
  - Encontrar una **codificación** que permita generar todas las soluciones posibles.
    - Normalmente, un vector que pertenezca al espacio de soluciones.
  - Generar todas las soluciones posibles.
    - Se suele representar como un **árbol de recorrido o de expansión**.
    - En la asignatura nos centramos en el árbol de recorrido **en profundidad**.

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general)

Asumiendo v = {6, 5, 1}, w = {25, 10, 5} y W = 30.



Vuelta atrás

El problema de la mochila (general)

- **Vuelta atrás**: forma sistemática de generar todas las posibles configuraciones de la mochila.
  - **Codificamos** la solución en una tupla (vector binario).
  - **Recursividad**: cada expansión del árbol es una llamada recursiva considerando una opción en un índice concreto de la tupla.
    - Cuando la llamada *vuelve*, se considera la siguiente opción.
    - Una vez agotadas las opciones, se *vuelve atrás* al elemento anterior del vector solución.

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general): enumeración

Asumimos v, w, W accesibles globalmente (no cambian)

Llamada inicial: v_atras(0,|x|=n, best=0)

```
función v_atras(i, x, best):
    si i = n
        si peso(x,w) <= W:
            best = max(best, valor(x,v))

    si no
        x[i] = 0
        v_atras(i+1, x, best)
        x[i] = 1
        v_atras(i+1, x, best)
```

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general): enumeración

Asumimos v, w, W accesibles globalmente (no cambian)

Llamada inicial: v_atras(0,|x|=n, best=0)

```
función v_atras(i, x, best):
    si i = n
        si peso(x,w) <= W:
            best = max(best, valor(x,v))

    si no
        x[i] = 0
        v_atras(i+1, x, best)
        x[i] = 1
        v_atras(i+1, x, best)
```

peso y *valor* tienen coste lineal: ¿podemos mejorar?

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general): aprovechando cálculos

Llamada inicial: v_atras(0,|x|=n, best=0, v_acc=0, w_acc=0)

```
función v_atras(i, x, best, v_acc, w_acc):
    si i = n
        si w_acc <= W:
            best = max(best, v_acc)

    si no
        x[i] = 0
        v_atras(i+1, x, best, v_acc, w_acc)
        x[i] = 1
        v_atras(i+1, x, best, v_acc + v[i], w_acc + w[i])
```

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general): aprovechando cálculos

Llamada inicial: v_atras(0,|x|=n, best=0, v_acc=0, w_acc=0)

```
función v_atras(i, x, best, v_acc, w_acc):
    si i = n
        si w_acc <= W:
            best = max(best, v_acc)

    si no
        x[i] = 0
        v_atras(i+1, x, best, v_acc, w_acc)
        x[i] = 1
        v_atras(i+1, x, best, v_acc + v[i], w_acc + w[i])
```

¿Debemos esperar a una hoja para mirar la restricción de peso?

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general)

- A modo de referencia:
  - Un problema de la mochila con **50 objetos**, asumiendo que cada nodo tarda 0.001 segundos, el algoritmo se completaría en unos **35.000 años**.
  - **Complejidad exponencial**.
  - Además, los algoritmos no son de un solo uso. Se suelen usar con cierta frecuencia.

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general): podando

Llamada inicial: v_atras(0,|x|=n, best=0, v_acc=0, w_acc=0)

```
función v_atras(i, x, best, v_acc, w_acc):
    si w_acc <= W:
        si i = n
            best = max(best, v_acc)

        si no
            x[i] = 0
            v_atras(i+1, x, best, v_acc, w_acc)
            x[i] = 1
            v_atras(i+1, x, best, v_acc + v[i], w_acc + w[i])
```

Vuelta atrás

Cotas optimistas

- Hemos visto podas para descartar subárboles no factibles.

- Supón el siguiente caso:
  - Si supiéramos con antelación que en la mochila podemos alcanzar un **valor de 8**, ¿tendría sentido explorar una rama del árbol si sabemos que el valor máximo que se podrá alcanzar en esa rama es 4?

Vuelta atrás

Cotas optimistas

- Definimos como **solución parcial prometedora** aquella que **podría** mejorar al mejor valor obtenido hasta el momento.
- Interesa **podar** cualquier solución parcial **no prometedora**.
- ¿Podemos saber si una solución parcial es **prometedora**?
  - Asumiendo que todos los objetos restantes van a caber.
  - Asumiendo que todos los objetos restantes se pueden fraccionar.
- A estas estimaciones se les llama **cota optimista**.

Vuelta atrás

Cotas optimistas

- **Relajar las restricciones** del problema para obtener un cálculo optimista desde una solución parcial.
  - **Restricciones muy relajadas**: cota demasiado optimista, menos podas.
  - **Restricciones demasiado estrictas**: podrían podar soluciones prometedoras (*no es cota optimista*).

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general): poda optimista

Llamada inicial: v_atras(0,|x|=n, best=0, v_acc=0, w_acc=0)

```
función v_atras(i, x, best, v_acc, w_acc):
    si w_acc <= W && es_prometedora_optimista(i, v_acc, w_acc, best):
        si i = n
            best = max(best, v_acc)

        si no
            x[i] = 0
            v_atras(i+1, x, best, v_acc, w_acc)
            x[i] = 1
            v_atras(i+1, x, best, v_acc + v[i], w_acc + w[i])
```

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general): poda optimista

```
función es_prometedora_optimista(i, v_acc, w_acc, best):
    Wrem := Wmax - w_acc
    cota := v_acc
    ordenar w[i:] y v[i:] de mayor a menor según v[j]/w[j]
    mientras que j <= |w| y Wrem > 0:
        si w[j] <= Wrem
            cota := cota + v[j]
            Wrem := Wrem - w[j]
        sino
            cota := cota + Wrem * v[j]/w[j] #Fracción del objeto
            Wrem := 0
    devuelve (cota > best)
```

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general): poda optimista

```
función es_prometedora_optimista(i, v_acc, w_acc, best):
    Wrem := Wmax - w_acc
    cota := v_acc
    ordenar w[i:] y v[i:] de mayor a menor según v[j]/w[j]
    mientras que j <= |w| y Wrem > 0:
        si w[j] <= Wrem
            cota := cota + v[j]
            Wrem := Wrem - w[j]
        sino
            cota := cota + Wrem * v[j]/w[j] #Fracción del objeto
            Wrem := 0
    devuelve (cota > best)
```

¿Y si hacemos la ordenación una única vez antes de empezar el algoritmo?

Vuelta atrás

Cotas optimistas

- **Ejemplo**
  - Wmax = 10
  - v = [36, 45, 28, 8] w = [3, 5, 4, 2] v/w = [12, 9, 7, 4]
  - Primer nodo: cota = 95 x = [1, 1, 0.5, 0]
  - En los siguientes nodos:
    - Se selecciona el primero
      - cota = 95 x = [1, 1, 0.5, 0] -> **best = 89** al terminar la rama
    - No se selecciona el primero
      - cota = 77 x = [0, 1, 1, 0.5]

Vuelta atrás

Solución inicial

- No podemos **podar** hasta hasta tener una primera solución.

  Necesitamos un valor de **best** para realizar podas.
- ¿Podemos adelantarnos? → Utilizando una cota pesimista.
  - Una **cota pesimista** es una solución (sub)óptima de un problema.
  - Es importante que la solución sea **posible** (cumpla los requisitos del problema) y **eficiente** (para que sea útil).
  - Podemos utilizar un **algoritmo voraz**.
  - Si los objetos no se pueden fraccionar, no asumir que se puedan fraccionar.

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general): solución voraz

Llamada inicial: v_atras(0,|x|=n, best=cota_pesimista(0,v,w,W), 0, 0)

```
función v_atras(i, x, best, v_acc, w_acc):
    si w_acc <= W && es_prometedora_optimista(i,v_acc,w_acc,best):
        si i = n
            best = max(best, v_acc)

        si no
            x[i] = 0
            v_atras(i+1, x, best, v_acc, w_acc)
            x[i] = 1
            v_atras(i+1, x, best, v_acc + v[i], w_acc + w[i])
```

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general): uso de cota pesimista

Llamada inicial: v_atras(0,|x|=n, best=0, 0, 0)

```
función v_atras(i, x, best, v_acc, w_acc):
    best = max(best, v_acc + cota_pesimista(i, v, w, W))

    si w_acc <= W && es_prometedora_optimista(i, x, best):
        si i = n
            best = max(best, v_acc)
        si no
            x[i] = 0
            v_atras(i+1, x, best, v_acc, w_acc)
            x[i] = 1
            v_atras(i+1, x, best, v_acc + v[i], w_acc + w[i])
```

Vuelta atrás

El problema de la mochila (general): poda optimista

```
función cota_pesimista(i, w_acc, v_acc, best):
    Wrem := W - w_acc
    cota := v_acc
    ordenar w[i:] y v[i:] de mayor a menor según v[j]/w[j]
    mientras que j <= |w| y Wrem > 0:
        si w[j] <= Wrem
            cota := cota + v[j]
            Wrem := Wrem - w[j]
    devuelve cota
```

Asumimos que la solución voraz en mochila 0/1 será subóptimo (pesimista)

Vuelta atrás

Resumen mejoras prácticas

Promedio del número de llamadas para 100 instancias aleatorias del problema de la mochila con 100 objetos.

Básico	Optimista	Inicio voraz	Pesimista
2,5e+30	4491	277	253

Esquema general

Vuelta atrás

Esquema general

- **Vuelta atrás**: forma sistemática de generar todas las soluciones.
- Para el elemento i-ésimo del vector solución:
  - Considerar una de las posibles opciones y continuar con el siguiente recursivamente.
  - Cuando la solución *vuelve*, considerar la siguiente opción.
  - Una vez agotadas las opciones, se *vuelve atrás* al elemento anterior del vector solución.

Vuelta atrás

Esquema general

Llamada inicial: v_atras(|x|=n, 0, n, –)

```
función v_atras(x, i, n, best):
    si i = n
        si factible(x):
            best = mejor(best, valor(x))

    si no
        para cada o en opciones(i)
            x[i] = o
            v_atras(x, i+1, n, best)
```

Vuelta atrás

Esquema general

- **Vuelta atrás**: forma sistemática de generar todas las soluciones.
- ¿Podemos hacerlo mejor?
  - Si una solución parcial no es prometedora, se “poda”.
  - ¿Podemos adelantar si una solución es prometedora? **Cota optimista**
  - ¿Podemos empezar a podar sin ninguna hoja? **Solución inicial voraz**
  - ¿Podemos actualizar la “mejor solución” antes de una hoja? **Cota pesimista**

Vuelta atrás

Esquema general

Llamada inicial: vuelta_atras([], 0, n, voraz())

```
función v_atras(x, i, n, best):
    si factible(x):
        si i = n
            best = mejor(best, valor(x))
        si no
            best = mejor(best, pesimista(x))
            si optimista(x) > best:
                para cada o en opciones(i)
                    x[i] = o
                    v_atras(x, i+1, n, best)
```

Vuelta atrás

Puntos claves

- **Formulación:** cómo codificar un vector solución.
- **Ahorrar cálculos:** reutilizar algunos cálculos relacionados con el valor de la solución o sus restricciones.
- **Cota optimista**: relajar las restricciones del problema para calcular rápidamente si la solución parcial es prometedora.
- **Cota pesimista**: calcular rápidamente una posible solución a partir de una solución parcial (o inicial), asegurando que sea factible.

Vuelta atrás

Consideraciones

- La vuelta atrás hace un recorrido en **profundidad**.
  - Existen variantes que exploran por **prioridad** (*ramificación y poda*).
- La versión recursiva se puede convertir a una **versión iterativa**.
- Las mejoras prácticas no reducen la complejidad asintótica sino únicamente empírica: **dependiente del problema y la instancia**.

El viajante de comercio

El viajante de comercio

Introducción

- El **problema del viajante de comercio** (*Travelling Salesman Problem*, o TSP):
  - Imaginemos a un vendedor que debe visitar una lista de ciudades exactamente una vez y regresar al punto de partida.
  - Su objetivo es encontrar la ruta más corta posible para minimizar el tiempo y el coste de viaje.

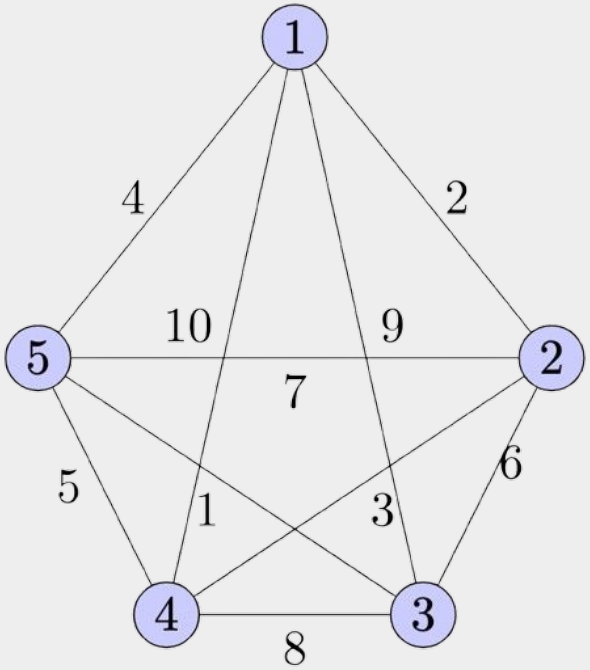
El viajante de comercio

Introducción

- Dado un grafo ponderado **g = (V, E)** con pesos no negativos, el problema es encontrar un ciclo hamiltoniano de mínimo coste.
  - Un **ciclo hamiltoniano** es un recorrido en el grafo que recorre todos los vértices sólo una vez y regresa al de partida.
  - El **coste** de un ciclo viene dado por la **suma de los pesos de las aristas** que lo componen.
  - Es posible que **no haya arista** entre dos nodos**.**

El viajante de comercio

Ejemplo



Ciclo de coste mínimo:

1 → 2 → 4 → 5 → 3 → 1

Coste:

2 + 3 + 5 + 1 + 9 = 20

El viajante de comercio

Formulación

- Antes de implementar, hay que considerar:
  - Vector solución
  - Bucle de expansión
  - Reusar cálculos
  - Cota optimista
  - Cota pesimista