

Algorísmica Algorismes de cerca Jordi Vitrià

Algorismes de cerca

El concepte de cerca inclou diferents conceptes:

- Cerca d'un determinat element en una llista (màx, x="a", el que compleix una certa condició, etc.).
- Cerca d'un determinat element en una llista ordenada.
- Cerca de l'element més semblant en una llista.
- Cerca en un arbre.
- Cerca en un graf.
- Satisfacció de restriccions.
- Etc.

Ens centrarem en la cerca en llistes.

Algorismes de cerca: cerca lineal

L'algorisme que implementa amb una estratègia de força bruta la cerca d'un element en una llista es diu cerca sequencial o lineal.

```
def search(list,ele):
    i=0
    while i<len(list) and list[i] != ele:
        i += 1
    if i<len(list): return i
    else: return -1</pre>
```

La complexitat de l'algorisme és O(n) en el pitjor cas!

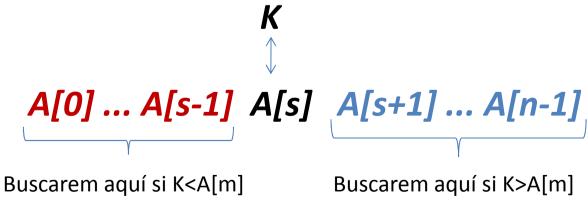
Algorismes de cerca: cerca lineal

Podem fer una petita millora si afegim l'element que busquem al final de la llista:

```
def search(list,ele):
    list.append(ele)
    i=0
    while list[i] != ele:
        i += 1
    if i<len(list)-1: return i
    else: return -1</pre>
```

I si la llista està ordenada (un diccionari, els nombres de la loteria, etc.) ho podem fer millor?

La cerca binaria ho fa comparant l'element cercat *K* a l'element central de la llista: si hi ha correspondència ja l'hem trobat, sinó, busquem a la subllista que correspon.



```
def recbinsearch(x, nums, low, high):
      if low>high: return -1
      mid = (low + high) / 2;
      items = nums[mid]
      if items == x: return mid
      elif x < items:</pre>
            return recbinsearch(x,nums,low,mid-1)
      else: return recbinsearch(x,nums,mid+1,high)
>>> recbinsearch(3,[1,2,3,4,5,6,7,8,9], 0, 8)
2
```

Anem a veure com funcionaria per K=70.

Índex	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Valor	3	14	27	31	39	42	55	70	74	81	85	93	98
It 1	1						m						h
It 2								1		m			h
It 3								l,m	h				

Per analitzar la seva complexitat calcularem el nombre de vegades que la clau de la cerca, A, es compara amb un element de la llista.

En el pitjor dels casos (quan l'element no hi és), tenim aquesta relació de recurrència:

$$C_{pitjor} = C_{pitjor} \left(\frac{n}{2}\right) + 1$$

Segons el teorema Master això és $O(\log_2 n)$: per una llista de 1.000.000 elements són 20 comparacions!

Evidentment és un algorisme recursiu, però és pot implementar fàcilment de forma no recursiva.

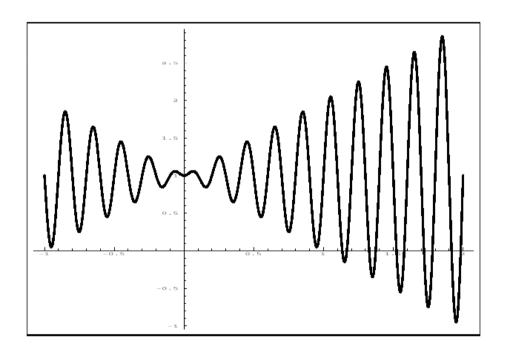
```
def binsearch(A, value):
    low = 0
    high = len(A)-1
    while low <= high:
        mid = (low + high) / 2
        if A[mid] > value: high = mid - 1
        elif A[mid] < value: low = mid + 1
        else: return mid
    return -1</pre>
```

El cas promig és més difícil d'analitzar, però es pot demostrar que és només una mica millor que el pitjor cas (tot i que del mateix ordre).

Observació: La cerca binària no és un algorisme de "dividir i vèncer". No transformem el problema en un conjunt de problemes més petits! Tot i això, ho podem escriure com un algorisme recursiu també...

Algorismes de cerca: cerca random

Imaginem ara que tenim un vector no ordenat, o una funció multimodal. Com busquem el màxim? Té sentit fer una cerca aleatòria?



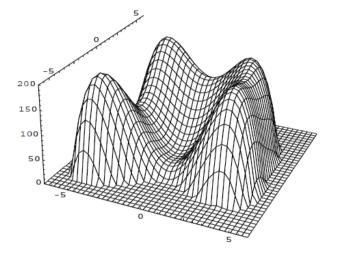
Imaginem ara que tenim un vector no ordenat, o una funció multimodal. Com buscar el màxim, o el mínim? Podem aplicar-hi cerca exhaustiva:

```
def func1d(x):
    import math
    y = x * math.sin(10*math.pi*(x))+1.0
    return y
```

```
def search1d():
    coo=0.0
    maxim=0.0
    for i in frange1d(-1.0,2.0,0.01):
        if func1d(i)>maxim:
            maxim=func1d(i)
            coo=i
    print maxim
La complexitat és O(n)
```

Si el nombre de punts a mostrejar és molt gran tenim

un problema!



Té sentit fer una cerca aleatòria? (= anar generant nombres de forma aleatòria dins del rang de les variables i quedar-se el màxim).

```
def rsearchld():
    import random
    coo=0.0
    maxim=0.0
    for i in range(1000):
        x = (random.random()*3.0)-1.0
        if funcld(x)>maxim:
            maxim=funcld(x)
        coo=x
    return maxim
```

	2.77824636954		2.85027049997		2.8502736913
100 proves	2.76633333502	1.000 proves	2.84068071726	100.000 proves	2.85026970833
	2.49830837751		2.82585079483		2.85026429332
	2.84180575738		2.82441879719		2.8502737353
	2.67472858999		2.84078409458		2.8502710006
	2.84721009237		2.83748038425		2.85026302851
	2.60189299072		2.84883426411		2.85027375351
	2.81619415008		2.8497277592		2.85023546116
	2.81493367995		2.84184730168		2.85027214716
	2.64975396079		2.84990510016		2.8502538051

En general, la cerca aleatòria <u>no és una bona</u> solució:

Tenim el cost de la cerca afitat, però depèn molt de l'aleatorietat i té un resultat molt semblant, sinó equivalent, a mostrejar la funció en punts equidistants.

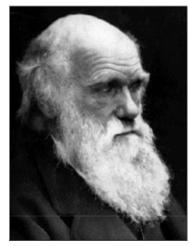
Anem a veure una tipus d'algorisme aproximat que ens fa una cerca, amb un cert component aleatori, més intel·ligent de l'espai de solucions: la cerca basada en algorismes genètics.

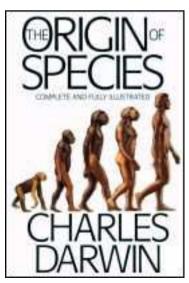
Precedents

La idea de **selecció natural** va ser introduïda per Charles Darwin el 1859 dins del seu llibre "L'Origen de Les Espècies".

Aquesta idea pot servir d'analogia per a construir mètodes de **cerca** en problemes d'optimització combinatòria i mètodes d'aprenentatge.

El terme algorismes genètics s'utilitza per a referir-se a una família bastant àmplia de models computacionals de càlcul basats en els mecanismes d'evolució biològica.





Precedents

Darwin va assentar les bases del principi d'evolució per selecció natural amb les següents idees:

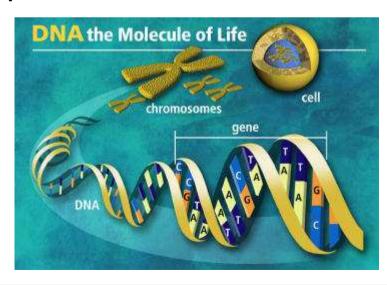


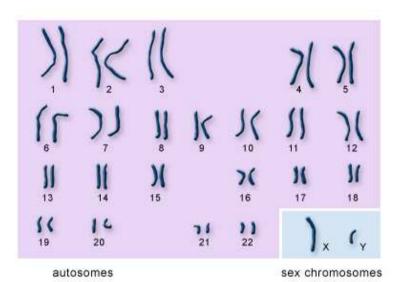
- Cada individu tendeix a passar els seus trets característics a la seva descendència.
- Tot i així, la natura produeix individus amb trets diferents.
- Els individus més adaptats tendeixen a tenir més descendència, i a la llarga, la població tendeix a ser "millor".
- Sobre grans períodes, l'acumulació de canvis pot produir espècies totalment noves, adaptades al seu entorn.

A més a més la natura disposa d'una sèrie de mecanismes reguladors externs a aquest procés però igualment interessants: el mecanisme de diversitat, els paràsits, les organitzacions socials, etc.

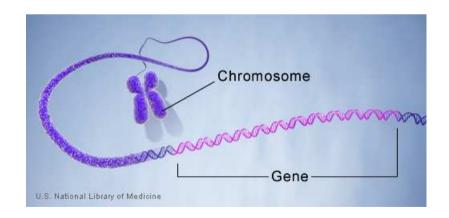
Els mecanismes biològics que fan possible l'evolució són avui coneguts. A la natura, podem veure com la transmissió de la informació genètica (genoma) es fa a través d'un tipus de reproducció anomenat sexual. Aquest procediment permet als descendents ser diferents dels seus antecessors, tot i que conservant la majoria de trets. El mecanisme sobre el que està basat això es troba a nivell molecular, i consisteix en l'aparellament de cromosomes (lloc on trobem el genoma), l'intercanvi d'informació, i la posterior partició. D'això n'hi direm **creuament**. La probabilitat de que dos individus es creuin depèn de la seva **adaptació** al medi.

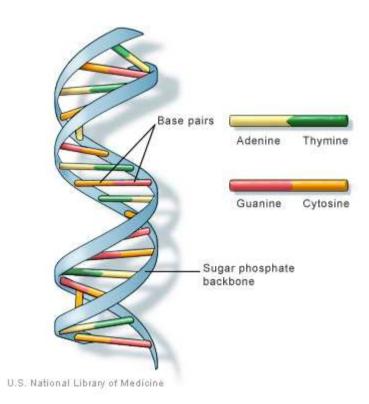
- Genoma
- Cromosomes
- Creuaments i mutacions.
- Funció d'adaptació.
- Mecanismes correctors/moduladors: diversitat, parasitisme, organització social, etc.





U.S. National Library of Medicine





- Els algorismes genètics són un model computacional basat en la creació i manipulació d'un conjunt d'individus, representats mitjançant cromosomes, que entren dins d'un procés evolutiu.
- Aquests individus, en el cas més simple, representen solucions hipotètiques a un problema.

- El procés evolutiu ens assegura que tots els "nous" individus generats també formaran part del conjunt de solucions hipotètiques del problema.
- La qualitat d'un individu dins d'aquell entorn determinarà la seva supervivència, i per tant la probabilitat de passar els seus trets a les generacions futures.

- L'element que conté l'objectiu del problema és la funció d'adaptació.
- Utilitzem processos aleatoris, però no és recerca aleatòria.

```
INICI
  initpob P(t);
  avaluar P(t);
  MENTRE no acabem FER
    INICI
      t := t+1;
      P' := seleccionar P(t);
      recombinar P'(t);
      mutar P'(t);
      avaluar P'(t);
      P := supervivents(P(t),P'(t));
    FINAL
FINAL
```

El cicle normal d'un algorisme genètic és: avaluar l'adaptació de tots els individus de la població; crear una nova població mitjançant creuament, reproducció i mutació dels cromosomes dels individus; descartar la població antiga; i iterar sobre la nova població.

Cada una de les iteracions d'aquest cicle es coneix com generació.

La solució del problema es pot representar mitjançant un conjunt de paràmetres, que anomenarem gens. Els gens s'uneixen per a formar un conjunt anomenat cromosoma.

Normalment es considera que la millor representació possible és la binària, a causa de certes propietats matemàtiques.

Operadors genètics

El creuament, la mutació, i d'altres operacions que es poden utilitzar, són aleshores simples operacions a nivell de bit.

Hem d'assegurar que <u>el resultat d'aplicar els</u> <u>operadors té sentit.</u>

En el cas concret de representar en forma binària nombre naturals, s'ha vist que hi ha una codificació que per alguns problemes funciona millor que la clàssica: el codis de Gray.

Aquests codis representen cada nombre de la seqüència $0...2^N$ com una seqüència de bits de longitud N tal que dos sencers adjacents tenen una representació que difereix només en un bit. D'això se'n diu la propietat d'adjacència.

Codi Binari: (000, 001, 010, 011, 100, 101, 110, 111)

Codis de Gray (000, 001, 011, 010, 110, 111, 101, 100).

Disseny d'algorismes genètics

Abans d'implementar el mètode hem de decidir algunes questions:

- 1. Quina és la funció d'adaptació?
- 2. Com representarem els individus/solucions?
- 3. Com seleccionarem els individus?
- 4. Com reproduirem els individus?
- 5. Quina és la probabilitat de mutació?
- 6. Necessitem mecanismes moduladors?

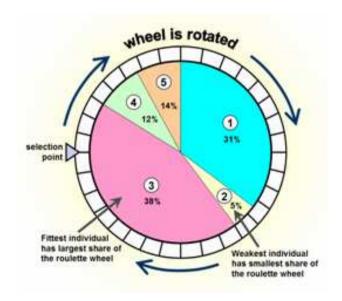
Suposem que tenim una població inicial de quatre individus amb les següents característiques:

Individu	Valor Adaptació	Probabilitat de Selecció
000110010111	8	32%
111010101100	6	24%
001110101001	6	24%
111011011100	5	20%

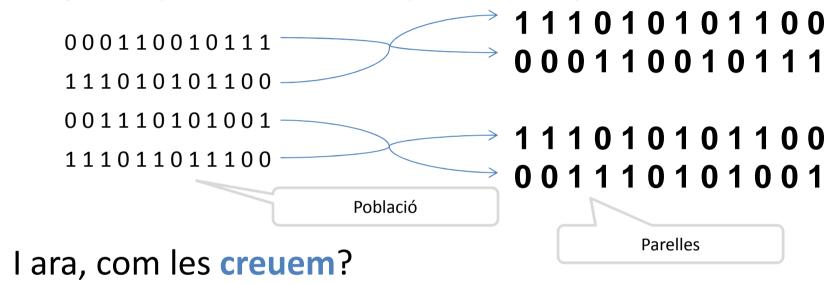
Suposem que la seva probabilitat de selecció pel creuament és <u>directament proporcional al seu</u> valor d'adaptació relatiu.

Com els **seleccionem** i els **creuem**?

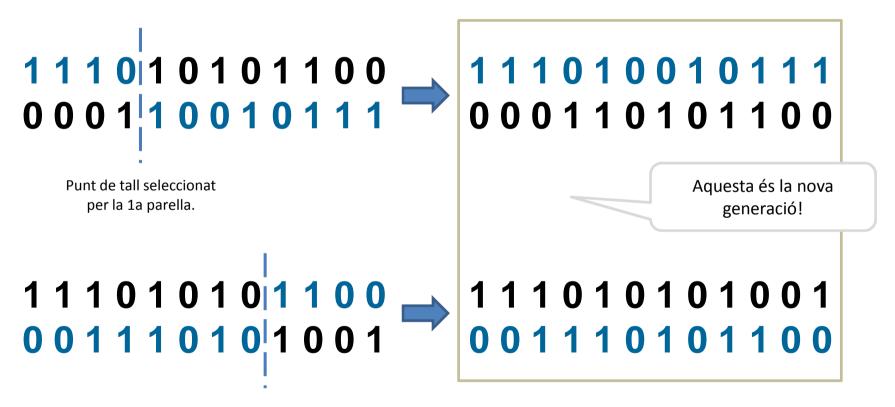
Una primera alternativa per la selecció és generar parelles per selecció aleatòria a partir de la seva probabilitat de selecció (imaginem que fem rodar una ruleta i ens va donant individus)



Imaginem que ens ha donat aquestes dues parelles:



La forma més simple de creuament és generar un punt de tall aleatòriament i intercanviar:



Punt de tall seleccionat per la 2a parella.

El procés de mutació consisteix en canviar el valor d'un quants bits de la població de forma aleatòria.

La probabilitat de que un bit canviï de valor és β i la que probabilitat de no canviar és (1- β), però sempre $\beta << (1-\beta)$

Resum fins ara...

La **representació** òptima, és en la majoria de casos i si no hi ha motius fonamentats per dubtar-ho, la **binària**.

La **representació** ha facilitar que el resultat d'aplicar els operadors genètics sigui vàlid.

Aquestes dues restriccions no

Aquestes dues restriccions no formen part de l'algorisme genètic!

L'operació de creuament crea dos nous individus seleccionant punts de creuament en els cromosomes seleccionats i intercanviant les seves parts.

L'operació de **mutació** consisteix en la selecció aleatòria d'algun dels gens del cromosoma i el canvi del seu valor. La probabilitat de mutació ha de ser petita (sinó ho convertim en recerca aleatòria!).

La funció d'avaluació.

La funció d'avaluació de cada individu, i per tant la seva probabilitat de supervivència a la següent generació, depèn del problema concret, però ha de ser ponderada de forma més o menys estàndard.

Hi ha varies formes de ponderació: el mètode estàndard, el mètode d'ordenació, el mètode de la diversitat, etc.

La funció d'avaluació.

Tot i que es pot fer de moltes maneres, a partir d'ara suposarem que la generació següent es formarà, mitjançant algun dels mètodes que anem a explicar, a partir dels cromosomes progenitors + els cromosomes descendents.

També assumirem una estratègia elitista: el/s millor/s cromosome/s passen automàticament (així assegurem que una bona solució no es perd mai).

La funció d'avaluació.

Mètode Estàndard. Donat un cromosoma i, aquest és avaluat com a possible solució al problema en qüestió. Com a resultat obté un valor d'adaptació q_i . Llavors definim la seva probabilitat de selecció com:

$$f_i = \frac{q_i}{\sum_j q_j}$$

Individu	Valor Adaptació	Probabilitat de Selecció
000110010111	8	32%
111010101100	6	24%
001110101001	6	24%
111011011100	5	20%

La funció d'avaluació.

Mètode d'Ordenació.

Un dels inconvenients associat al mètode anterior és el **poc pes que dóna al cromosomes "dolents",** fet que els impedeix de passar a les futures generacions, i per tant, transmetre les poques coses que tinguin bones.

Un altre possible inconvenient és que moltes vegades la **funció d'avaluació és qualitativa**: ordena de forma correcta però els seus valors no són precisos.

La funció d'avaluació.

Mètode d'Ordenació.

Per insensibilitzar el mètode de selecció respecte a la funció d'avaluació del problema, podem ordenar els cromosomes segons la seva qualitat segons aquesta regla:

«Assignem a l'i-èssim cromosoma una probabilitat p d'èsser seleccionat donat que no ho han estat els (i-1) anteriors»

La funció d'avaluació.

Mètode d'Ordenació.

0.333 = 1 - (0.667) és la probabilitat de que no hagi sortit el primer cromosoma.

Per exemple, suposem que p=0.667. Llavors:

Crom (x,y)	q_{i}	Ordre	Prob M. Estànd.	Prob M. Ordenació
	-			
0001,0100	44	1	0.22	0.667
0011,0001	32	2	0.16	0.222= 0.667x0.333
0001,0010	22,5	3	0.125	0.073= 0.667x0.111
0001,0001	1,5	4	0.075	0.025=
0111,0101	0	5	0.0	0.012

Aquests cromosomes representen punts del pla

0.111 = 1 - (0.667 + 0.222) és la probabilitat de que no hagi sortit ni el primer ni el segon cromosoma.

La funció d'avaluació.

Mètode de Diversitat.

Aquest mètode es basa en l'anomenat principi de diversitat: és casi tant bo ser diferent com estar adaptat.

Definim la diversitat d'un grup de cromosomes com:

La distància que usem pot ser des del nombre de bits diferents entre cada cromosoma a una funció definida per l'usuari a partir del coneixement del problema.

$$Div = \sum_{i} \frac{1}{d_{i}^{2}}$$

En el nostre exemple considerarem la distància euclidiana sobre punts del pla.

on d_i és una mesura de distància entre cromosomes.

La funció d'avaluació.

Mètode de Diversitat.

Com l'apliquem?

- 1. El millor cromosoma passa automàticament a la següent generació.
- 2. Calculem la diversitat de tots els cromosomes respecte als que han passat a la següent generació i els ordenem.
- 3. Ordenem els cromosomes segons la seva funció d'avaluació.
- 4. Sume els nombre que representa l'ordre obtingut per cada cromosoma als passos 2 i 3.
- 5. Triem el cromosoma que passa a la següent generació segons el mètode d'ordenació i si queden cromosomes per triar, i tornem al punt 2.

La funció d'avaluació.

Mètode de Diversitat.

Exemple:

Cromosomes	q_i
0100 0001	100
0001 0100	44
0011 0001	32
0001 0010	22,5
0001 0001	1
0111 0101	0

El cromosoma millor passa a la següent generació. En el nostre cas és el cromosoma (0100001).

Per tant resten per triar 2 cromosomes entre (00010100), (0011001), (00010010), (00010001), (01110101).

La funció d'avaluació.

Mètode de Diversitat.

Exemple:

Construirem la taula segons el mètode de diversitat segons la diversitat de cada cromosoma amb respecte al que ja ha passat:

Cromosomes	diversitat	ord div	ord est	div+ord	Probab.
0001 0100	0.040	1	1	2	0.667
0011 0001	0.250	5	2	7	0.073
0001 0010	0.059	3	3	6	0.222
0001 0001	0.062	4	4	8	0.012
0111 0101	0.050	2	5	7	0.025

La distància que usem pot ser des del nombre de bits diferents entre cada cromosoma a una funció definida per l'usuari a partir del coneixement del problema. En aquest cas, la diversitat és només la inversa de la distància euclidiana 2D de cada cromosoma al que ja ha passat.

La funció d'avaluació.

Mètode de Diversitat.

Exemple:

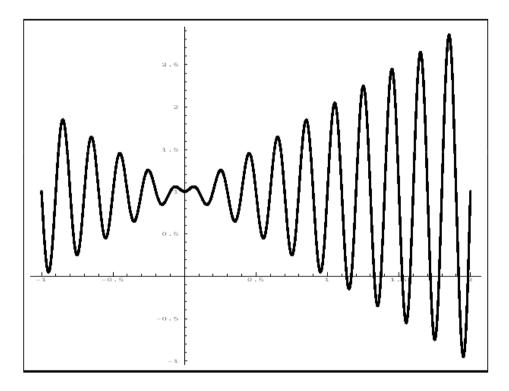
Llavors triem aleatòriament el següent que passa, i resulta que és el cromosoma (0001 0100). A partir d'aquest moment repetim el procés anterior, però <u>calculant la diversitat</u> respecte al dos cromosomes que ja han passat:

Cromosomes	diversitat	ord div	ord est	div+ord	Prob
00110001	0.327	4	1	5	0.667
00010010	0.309	3	2	5	0.222
00010001	0.173	2	3	5	0.073
01110101	0.077	1	4	5	0.025

En el cas d'empats per a l'ordenació resultat de la suma div+ord desempatem segons el valor d'ordenació pura.

Exemple: Optimització d'una funció multimodal

$$f(x) = x\sin(10\pi x) + 1.0$$



El problema és trobar la x dins del rang [-1 ... 2] que maximitza f.

Exemple: Optimització d'una funció multimodal

Utilitzarem un vector binari com a cromosoma per a representar el valor real de la variable x. La longitud del vector dependrà de la precisió desitjada. Suposem que volem 6 decimals.

El domini de la variable té longitud 3, i la precisió implica que necessitem mostrejar el rang en 3000000 posicions, o sigui, 22 bits:

$$2.097.152 = 2^{21} < 3.000.000 < 2^{22} = 4.194.304$$

Exemple: Optimització d'una funció multimodal

La transformació d'una seqüència binària $[b_{21},...,b_0]$ a un nombre real x es fa en dos passos:

1. Primer convertim la seqüència de base 2 a base 10:

$$([b_{21}, ..., b_0])_2 = (\sum_{i=0}^{21} b_i 2^i)_{10} = x'$$

2. Després trobem el nombre real corresponent:

$$x = -1.0 + x' \frac{3}{2^{22} - 1}$$

on -1.0 és el límit esquerra de l'interval i 3 la longitud.

Exemple: Optimització d'una funció multimodal

Escollim com a població inicial 50 individus de forma aleatòria.

```
# Creem la població inicial
def initpop(n,long):
    import random

# Generem una poblacio de n cromosomes de longitud long.
    pop = [[0] * long for x in range(n)]
    for i in range(n):
        for j in range(long):
            if random.random()>0.5: pop[i][j] += 1
    return pop
```

Exemple: Optimització d'una funció multimodal

La funció d'avaluació serà equivalent a la funció f:

```
v1 = (1000101110110101000111), cost(v1) = 1.5886345

v2 = (000000111000000010000), cost(v2) = 0.078878

v3 = (1110000000111111000101), cost(v3) = 2.250650
```

```
# Definim la funcio d'avaluacio d'un cromosoma de len(r) bits.
def cost(r):
    import math
    # Transformem els bits en un valor real a l'interval [-1,2]
    sum=0.0
    for i in range(len(r)):
         sum = sum + r[i]*(2**i)
    x = -1.0 + sum * (3.0/(2.0**(len(r))-1.0))
    # Avaluem el cromosoma
    y = x * math.sin(10*math.pi*(x))+1.0
    return y
```

Exemple: Optimització d'una funció multimodal

Utilitzarem dos operadors clàssics: la **mutació** i el **creuament**. La **mutació** consistirà en canviar el valor del bit. Imposem una probabilitat de mutació $p_m = 0.01$ per a cada bit.

Per exemple, si tenim el cromosoma

v3 = (11100000001111111000101)

i seleccionem el cinquè bit per mutar, obtindrem

v3' = (11101000001111111000101).

Aquest cromosoma representa el valor x3'=1.721638, i per tant f(x3') = 2.343555, que s'ha incrementat respecte f(x3) = 2.250650.

Exemple: Optimització d'una funció multimodal

```
# Definim la mutació amb probabilitat mutprob
def mutacio(r,mutprob):
    import random
    for i in range(len(r)):
        if random.random()<mutprob:
            if r[i]==0: r[i]=1
            else: r[i]=0
    return r</pre>
```

Exemple: Optimització d'una funció multimodal

Utilitzarem dos operadors clàssics: la mutació i el creuament.

El creuament consisteix en escollir aleatòriament un punt de tall i intercanviar informació.

```
# Definim el creuament
def creuament(r1,r2):
    import random
    i=random.randint(1,len(r1)-2)
    return r1[:i]+r2[i:],r1[i:]+r2[:i]
```

Exemple: Optimització d'una funció multimodal

Si iterem l'algorisme 150 generacions trobem que el millor és v_{max} = (1111001101000100000101), que correspon al valor x_{max} = 1.850773.

L'evolució de l'algorisme es pot avaluar a partir del millor valor de la funció aconseguit en cada generació.

Generació	Avaluació de f
1	1.441942
6	2.150003
8	2.250283
9	2.250284
10	2.250363
12	2.328077
39	2.344251
51	2.733893
99	2.849246
137	2.850217
145	2.850227

Exemple: Optimització d'una funció multimodal

Observació valida per a qualsevol problema de recerca amb algorismes genètics:

Quin és el factor que més pesa en el càlcul de la complexitat computacional de l'algorisme? El nombre d'avaluacions!

En el nostre problema hem fet 50x150=7.500 avaluacions!

Els operadors genètics tenen un cost computacional nul, per tant la complexitat de l'algorisme és el nombre d'avaluacions per la complexitat de l'avaluació.