

Problema de Máxima Diversidad (MDP)

Técnicas basadas en poblaciones

Metaheurísticas: Práctica 2, Grupo 1

José Antonio Álvarez Ocete - 77553417Q
joseantonioao@correo.ugr.es

5 de mayo de 2019

Índice

1. Introducción: práctica 2	3
2. El problema	3
2.1. Descripción del problema	3
2.2. Casos considerados	3
3. Descripción de la aplicación de los algoritmos	3
3.1. Práctica 1	4
3.1.1. Representación de la soluciones	4
3.1.2. Función objetivo	4
3.2. Práctica 2	5
3.2.1. Representación de la soluciones	5
3.2.2. Función objetivo	5
3.2.3. Operadores	6
4. Algoritmos	9
4.1. Práctica 1	9
4.1.1. Greedy	10
4.1.2. Búsqueda local	11
4.1.3. Búsqueda local determinista	13
4.1.4. Búsqueda local con greedy	16
4.2. Práctica 2	16
5. Procedimiento de desarrollo	16
6. Experimentos realizados	17
6.1. Experimentos 1: resultados iniciales	17
6.1.1. Análisis	19
6.2. Experimento 2: exploración del vecindario	20
6.2.1. Análisis	21
6.3. Experimento 3: búsqueda del óptimo	22
6.3.1. Análisis	24
6.4. Experimento 4: estudio evolutivo de la exploración del entorno	25
6.4.1. Análisis	26

1. Introducción: práctica 2

De cara a la segunda práctica se han añadido a la memoria las secciones 2.2, 3.X, 4.2 y 5.2. El resto permanece invariante.

2. El problema

2.1. Descripción del problema

El **problema de la máxima diversidad** (en inglés, *maximum diversity problem*, MDP) es un problema de optimización combinatoria que consiste en seleccionar un subconjunto M de m elementos ($|M| = m$) de un conjunto inicial N de n elementos (con $n > m$) de forma que se maximice la diversidad entre los elementos escogidos. El MDP se puede formular como:

$$\begin{aligned} \text{Maximizar } z_{MS}(x) &= \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n d_{ij} \cdot x_i \cdot x_j \\ \text{Sujeto a } \sum_{i=1}^n x_i &= m \\ x_i &\in \{0, 1\}, \forall i \in \{1, \dots, n\} \end{aligned}$$

Donde:

- x es una solución al problema que consiste en un vector binario que indica los m elementos seleccionados.
- d_{ij} es la distancia existente entre los elementos i y j .

2.2. Casos considerados

Se utilizarán 30 casos seleccionados de varios de los conjuntos de instancias disponibles en la *MDPLIB* (<http://www.optsim.es/mdp/>), 10 pertenecientes al grupo **GKD** con distancias Euclideas, $n = 500$ y $m = 50$ ($GKD - c_i_n500_m50$ para $i \in \{1, \dots, 10\}$), 10 del grupo **SOM** con distancias enteras entre 0 y 999, $n \in \{300, 400, 500\}$ y $m \in \{40, \dots, 200\}$ ($SOM - b_11_n300_m90$ a $SOM - b_20_n500_m200$) y 10 del grupo **MDG** con distancias enteras entre 0 y 10, $n = 2000$ y $m = 200$ ($MDG - a_i_n2000_m200$ para $i \in \{21, \dots, 30\}$).

Puesto que la numeración utilizada es unívoca se hará referencia a estas entradas simplemente como **MDP-a.i** con $i \in \{1, \dots, 10\}$, **SOM-b.i** con $i \in \{11, \dots, 20\}$ y **GKD-c.i** con $i \in \{21, \dots, 30\}$.

3. Descripción de la aplicación de los algoritmos

En esta sección describiremos las consideraciones comunes a los distintos algoritmos. Este incluye la representación de las soluciones, la función objetivo y los operadores comunes a los distintos algoritmos. Ya que los únicos puntos en común de la búsqueda local y la técnica greedy son la función objetivo y la representación de las soluciones no estudiaremos ningún operador común. Tampoco se han incluido los detalles específicos de un algoritmo a pesar de que sean comunes a varios algoritmos finales, ya que estos son pequeñas variaciones unos y otros.

El lenguaje utilizado para la implementación de la práctica ha sido $C++$.

3.1. Práctica 1

3.1.1. Representación de la soluciones

El esquema de representación de una solución es el siguiente:

```
struct solution {  
    vector<int> v;  
    double fitness;  
};
```

Donde el vector contiene números entre 1 y n no repetidos que componen la solución ($|v| = m$). Aunque el orden de estos elementos no es relevante se utilizará determinado ordenamiento sobre este mismo vector en algunas de las soluciones planteadas.

Cabe destacar que los datos proporcionados únicamente representan las distancias punto a punto, para todos los puntos. Sin embargo se desconoce la posición exacta de cada elemento. Es por esto por lo que no se ha podido implementar la técnica Greedy planteada inicialmente ya que se centraba en el concepto de *centroide* o *baricentro* de un conjunto y no podíamos calcularlo sin estimar primero la posición de los puntos.

Estos datos se han almacenado en una matriz simétrica de tamaño $n \times n$ que de aquí en adelante denotaremos por MAT .

3.1.2. Función objetivo

Para la función objetivo se ha dividido la implementación en dos funciones ya que algunos algoritmos utilizarán únicamente una de las dos y otros, ambas. La primera calcula la contribución del elemento i a la solución actual. La segunda calcula el *fitness* total utilizando la función anterior.

Algorithm 1: singleContribution

Data: solution : sol , i : int
Result: contribution : double
begin
 contribution \leftarrow 0
 foreach $j \in sol.v$ **do**
 contribution \leftarrow contribution + MAT[i][j]
 end
end

Algorithm 2: evaluateSolution

Data: solution : sol
Result: fitness : double
begin
 fitness \leftarrow 0
 foreach $i \in sol.v$ **do**
 fitness \leftarrow fitness + SingleContribution (sol, i)
 end
 fitness \leftarrow fitness / 2
end

3.2. Práctica 2

3.2.1. Representación de la soluciones

De cara a trabajar con técnicas basadas en poblaciones se ha implementado una segunda representación de las soluciones basada en *booleanos* en vez de enteros. Se almacena además un *booleano* adicional para saber si la solución esta actualmente evaluada, así como su valor *fitness*. Esto representará un cromosoma de nuestra población.

```
struct solution {  
    vector<bool> v;  
    double fitness;  
    bool evaluated;  
};
```

Se ha utilizado también una clase para almacenar una población. Esta encapsula además de los cromosomas, la posición actual del mejor cromosoma y su valor *fitness*. Esto será especialmente útil en los algoritmos genéticos generacionales y meméticos, que no mantendrán la población ordenada sino unicamente cuál es el mejor cromosoma.

```
class population {  
public:  
    vector<solution> v;  
    double max_fitness;  
    int best_sol;  
    int tam;  
  
    [...]  
};
```

Debido a que la implementación de las técnicas locales utiliza el esquema de representación de enteros se han implementado también sendos algoritmos de transformación de una representación a otra. La implementación de los mismo es trivial y por ello no se incluye en esta memoria.

Cabe destacar que aunque ambas representaciones se llamen de la misma forma, se usan en contextos distintos y no hay ambigüedad posible. En el único caso en el que no es así (los algoritmos meméticos), la representación que utilizada enteros se denominará **solution_int**.

3.2.2. Función objetivo

Se ha desarrollado otra función objetivo análoga a la implementada para la representación con enteros que utiliza de nuevo la función *SingleContribution*, reimplementando también ésta para la codificación con *booleanos*.

Algorithm 3: evaluatesolution

Data: $v : \text{vector} < \text{bool} >$, elem: int
Result: result : double
begin
 result \leftarrow 0
 foreach $i \in [0, v.size)$ **do**
 | result $\leftarrow v[i] * \text{MAT}[i][\text{elem}]$
 end
end

Algorithm 4: evaluatesolution

Data: sol : solution
Result: fitness : double
begin
 sol.fitness \leftarrow 0
 foreach $i \in [0, \text{sol.v.size})$ **do**
 if $\text{sol.v}[i]$ **then**
 sol.fitness \leftarrow SingleContribution (sol , i)
 end
 end
 // Counting twice all the possible distances
 sol.fitness \leftarrow sol.fitness / 2
 sol.evaluated \leftarrow true
end

3.2.3. Operadores

Para esta práctica se han implementado dos operadores distintos de cruce y dos de reemplazamiento. Los operadores de mutación, selección (por torneo binario) e inicialización aleatoria son compartidos por todos los algoritmos. Procedemos a estudiar cada operador por separado. En primer lugar, el operador de selección utilizado ha sido torneo binario. Para ello utilizamos la función $\text{random}(a,b)$, que devuelve un entero aleatorio en el intervalo $[a,b)$.

Algorithm 5: binaryTournament

Data: pop : population
Result: elem : int
begin
 r1 \leftarrow random(0, pop.tam)
 r2 \leftarrow random(0, pop.tam)
 if $\text{pop.v}[r1].\text{fitness} > \text{pop.v}[r2].\text{fitness}$ **then**
 elem \leftarrow r1
 else
 elem \leftarrow r2
 end
end

Para el operador de mutación simplemente se cambia uno de los valores elegidos por otro

que no este escogido ya, de forma aleatoria:

Algorithm 6: mutateSolution

Data: pop : population
Result: elem : int
begin
 r1 \leftarrow random(0, pop.tam)
 r2 \leftarrow random(0, pop.tam)
 do
 | r_on \leftarrow random(0, sol.v.size())
 while !sol.v[r_on]
 do
 | r_off \leftarrow random(0, sol.v.size())
 while !sol.v[r_off] OR r_on == r_off
 sol.v[r_on] \leftarrow false
 sol.v[r_off] \leftarrow true
 if sol.evaluated **then**
 oldContribution \leftarrow singleContribution(sol.v, r_on) - MAT[r_on][r_off]
 NewContribution \leftarrow singleContribution(sol.v, r_off)
 sol.fitness \leftarrow sol.fitness + newContribution - oldContribution
 TOTAL_EVALUATIONS \leftarrow TOTAL_EVALUATIONS + 1
 end
end

En este algoritmos hay un par de detalles adicionales que explicar. Por un lado en el último bloque *if* utilizamos una evaluación de la solución factorizada equivalente a la de la práctica 1. Esta es aplicable unicamente cuando la solución estaba correctamente evaluada antes de la mutación. Adicionalmente consideramos **TOTAL_EVALUATIONS** como el número de evaluaciones totales del algoritmo actual. Cuando evaluamos la solución, aumentamos en 1 el número de evaluaciones.

Debido a las características de la aproximación al problema esta mejora se verá reflejada unicamente en el tiempo, ya que a pesar de haber reducido la evaluación de $O(n^2)$ a $O(n)$, contamos la evaluación como una completa.

Pasamos a explicar los operadores de cruce. En primer lugar se ha implementado un cruce uniforme así como un operador de reparación. Por un lado el cruce uniforme mantiene en los hijos las elecciones (elegir o no elegir un elemento) comunes de los dos padres, y asigna elecciones aleatorias para los demás valores. Acto seguido se aplica el operador de reparación para que los

hijos sean soluciones válidas. Es decir, escojan exactamente m elementos.

Algorithm 7: uniformCross

Data: p1 : solution, p2 : solution
Result: child : solution
begin
 child \leftarrow p1
 child.evaluated \leftarrow false
 m \leftarrow 0
 foreach $i \in [0, p1.v.size())$ **do**
 if $p1.v[i]$ **then**
 m \leftarrow m + 1
 end
 if $p1.v[i]$ AND $p2.v[i]$ **then**
 child.v[i] \leftarrow true
 else if $!p1.v[i]$ AND $!p2.v[i]$ **then**
 child.v[i] \leftarrow false
 else
 child.v[i] \leftarrow random(0,2) == 0
 end
 end
 child \leftarrow repairSolution(child, m)
end

Algorithm 8: repairSolution

Data: child : solution, m : int
Result: child : solution
begin
 nTrues \leftarrow countTrues(child.v)
 while $nTrues \neq m$ **do**
 r \leftarrow random(0, sol.v.size())
 if $sol.v[r]$ **then**
 sol.v[r] \leftarrow false nTrues \leftarrow nTrues + 1
 end
 end
 while $nTrues \neq m$ **do**
 r \leftarrow random(0, sol.v.size())
 if $!sol.v[r]$ **then**
 sol.v[r] \leftarrow true nTrues \leftarrow nTrues - 1
 end
 end
end

El algoritmo de reparación utilizado ha sido este en lugar del que aparece en las transparencias por la enorme carga de trabajo que suponía el presentado en clase ($O(n^2)$).

En segundo lugar presentamos el operador de cruce posicional. Este las elecciones positivas

comunes entre los padres y asigna un reordenamiento del resto de elementos a los no asignados.

Algorithm 9: positionalCross

Data: p1 : solution, p2 : solution
Result: c1 : solution, c2 : solution
begin
 c1 \leftarrow p1
 c2 \leftarrow p2
 c1.evaluated \leftarrow false
 c2.evaluated \leftarrow false
 shuffled = vector<int>(size = c1.v.size(), value=false)
 foreach $i \in [0, p1.v.size())$ **do**
 if $p1.v[i] \text{ AND } p2.v[i]$ **then**
 c1.v[i] \leftarrow true
 c2.v[i] \leftarrow true
 else
 shuffled[i] \leftarrow true
 to_shuffle[i] \leftarrow p1.v[i]
 end
 end
 to_shuffle1 \leftarrow randomShuffle(to_shuffle)
 to_shuffle2 \leftarrow randomShuffle(to_shuffle)
 foreach $i \in [0, p1.v.size())$ **do**
 if shuffled[i] **then**
 c1.v[i] \leftarrow to_shuffle1[i]
 c2.v[i] \leftarrow to_shuffle2[i]
 end
 end
end

Finalmente detallamos los algoritmos de reemplazamiento. Para el generacional elitista basta con sustituir la población completa por la nueva y, en caso de que nuestra mejor solución empeore, sustituir una solución de la nueva generación por la mejor de la generación anterior.

Para el estacionario unicamente generaremos dos hijos por generación. El reemplazamiento se realiza introduciendo estos dos descendientes en la población, la ordenamos en función de su fitness y la truncamos para mantener el número de cromosomas invariante.

Algorithm 10: replace

Data: pop : population, child1 : solution, child2 : solution
Result: pop : population
begin
 pop.v.append(child1)
 pop.v.append(child2)
 pop.v \leftarrow sort(pop.v)
 pop.v \leftarrow pop.v.resize(pop.v.size() - 2)
end

4. Algoritmos

4.1. Práctica 1

Para esta práctica se han implementado un total de 4 algoritmos que a continuación describiremos en profundidad. Son los siguientes:

- Greedy
- Búsqueda local (*BL*)
- Búsqueda local determinista (*BLD*)
- Búsqueda local con greedy (*BLcongreedy*)

4.1.1. Greedy

Como ya se ha comentado, la concepción inicial de la práctica era utilizar la idea del *baricentro*. Para ello en cada iteración se calcularía el baricentro de los elementos de la solución y se escogería el punto más alejado a este entre los aún no escogidos. Intentando simular esta estrategia utilizaremos la suma de las distancias al resto de elementos de la solución para cada punto aún no he escogido.

En primer lugar se ha implementado una función que, dados dos conjuntos de puntos, *seleccionados* y *no_seleccionados*, devuelve el elemento de *no_seleccionados* cuya suma de distancias a los elementos de *seleccionados* es máxima. Para ello utilizamos la función *SingleContribution* explicado en el apartado anterior, que computa la suma de distancias de un punto a otro conjunto dado.

Algorithm 11: farthestToSel

Data: selected : *set* < *int* > , non_selected : *set* < *int* >
Result: farthest : *i*
begin
 fitness \leftarrow 0
 max_sum_dist \leftarrow 0
 foreach $i \in non_selected$ **do**
 current_sum_dist \leftarrow SingleContribution (selected , *i*)
 if *current_sum_dist* > *max_sum_dist* **then**
 max_sum_dist \leftarrow current_sum_dist
 farthest \leftarrow *i*
 end
 end
end

De cara al algoritmo greedy final necesitaremos inicializar el conjunto de elementos seleccionados con al menos un elemento. Este será el que esté más alejado de todos los demás. Para calcularlo utilizamos una abstracción de la función anterior, donde *selected* y *non_selected* serán ambos el conjunto de todos los puntos posibles: $\{0, 1, \dots, n\}$.

Algorithm 12: farthestToAll

Data: none
Result: farthest : *i*
begin
 all_elements \leftarrow $\{0, 1, \dots, n\}$
 farthest \leftarrow farthestToSel(all_elements, all_elements)
end

Finalmente presentamos el algoritmo greedy al completo, haciendo uso de las funciones anteriores.

Algorithm 13: greedy

Data: none
Result: selected : $set < int >$
begin
 non_selected $\leftarrow \{0, 1, \dots, n\}$
 selected $\leftarrow \{ \text{farthestToAll}() \}$
 while $|selected| < m$ **do**
 farthest $\leftarrow \text{farthestToSel}(\text{selected}, \text{non_selected})$
 non_selected $\leftarrow \text{non_selected} \cup \{\text{farthest}\}$
 selected $\leftarrow \text{selected} - \{\text{farthest}\}$
 end
end

4.1.2. Búsqueda local

Desgranemos la búsqueda local paso por paso. En primer lugar generamos una solución aleatoria que será el punto de partida. En cada iteración exploramos el vecindario hasta encontrar una solución mejor y sustituimos la actual por la encontrada. Repetimos este proceso hasta que la exploración del vecindario no encuentre una solución mejor.

Algorithm 14: localSearch

Data: none
Result: sol : solution
begin
 sol $\leftarrow \text{randomSolution}()$
 stop $\leftarrow \text{false}$
 while $\neg \text{stop}$ **do**
 stop, sol $\leftarrow \text{stepInNeighbourhood}(\text{sol})$
 end
end

La exploración del vecindario realizada en la función *stepInNeighbourhood* tiene dos detalles relevantes a explicar. Por un lado se ha explicado la factorización del movimiento en el vecindario. Esto es, para estudiar si una solución es mejor en vez de calcular la fitness de la nueva solución y compararla con la actual, estudiamos si el intercambio del elemento $i \in \text{sol}$ y el elemento j de los no seleccionados tiene una repercusión positiva en la fitness de la solución. Para ello hacemos uso de la función *SingleContribution* comparando las contribuciones de cada elemento. Si el intercambio merece la pena ($\text{SingleContribution}(i, \text{sol}) < \text{SingleContribution}(j, \text{sol})$) reajustamos la fitness sumándole la diferencia entre ambas.

Por otro lado, a la hora de escoger que elementos i, j comparar, seleccionamos un elemento j que aún no esté en la solución de forma aleatoria y comparamos con todos los posibles $i \in \text{sol}$. Una pequeña mejora consiste en ordenar los elementos de la solución en función a la contribución que realizan a esta para intentar intercambiar primero los que menos contribuyan. Veamos como está implementada esta ordenación. Por un lado definimos un operador de comparación

que trabaje con parejas $\langle int, double \rangle$. Esto nos permitirá ordenar el vector solución en orden de contribución creciente.

Algorithm 15: operator<

Data: $p1 : pair \langle int, double \rangle$, $p2 : pair \langle int, double \rangle$
Result: comp : bool
begin
 | comp $\leftarrow p1.second < p2.second$
end

A continuación reordenamos los elementos de la solución.

Algorithm 16: orderSolutionByContribution

Data: sol : solution
Result: sol : solution
begin
 pairs : vector $\langle pair \langle int, double \rangle \rangle$
 foreach $i \in sol.v$ **do**
 | pairs[i].first $\leftarrow i$
 | pairs[i].second $\leftarrow singleContribution(sol.v, i)$
 end
 pairs $\leftarrow sort(pairs, operator <)$
 foreach $i \in sol.v$ **do**
 | sol.v[i] $\leftarrow pairs[i].first$
 end
end

Para acabar presentamos la exploración del vecindario, donde $rand(a, b)$ devuelve un número entero aleatorio en $[a, b)$. Se ordena el vector solución utilizando *orderSolutionByContribution* y se toman $i \in sol.v$ en orden creciente y $j \notin sol.v$ para el intercambio. Este j se tomará de forma aleatoria y con el objetivo de explotar plenamente la ordenación utilizada generaremos múltiples j 's para cada i .

Según el guión de prácticas hemos de generar hasta $MAX = 50,000$ vecinos (parejas (i, j) en nuestro caso) antes de parar la búsqueda local. Tras varias pruebas he decidido que merece la pena centrarse en el 10 % más prometedor de la solución. Llamemos a este porcentaje *percentage_studied*.

Por lo tanto estudiaremos $max_i = percentage_studied \cdot |sol|$ elementos de la solución y para cada uno generaremos $max_random = MAX / max_i$ valores aleatorios distintos, obteniendo un total de $max_i \cdot max_random = max_i \cdot (MAX / max_i) = MAX$ elementos en total.

Algorithm 17: stepInNeighbourhood

Data: sol : solution

Result: stop : bool , sol : solution

begin

```
  sol  $\leftarrow$  orderSolutionByContribution(sol)
  max_i  $\leftarrow$  percentage_studied  $\cdot$  |sol|
  max_randoms  $\leftarrow$  MAX/max_i
  stop  $\leftarrow$  true
  tries  $\leftarrow$  0
  i  $\leftarrow$  0
  while i < max_i do
    element_out  $\leftarrow$  sol.v[ i ]
    oldContribution  $\leftarrow$  singleContribution(sol.v, element_out)
    j  $\leftarrow$  rand(0, m)
    k  $\leftarrow$  0
    while k < max_k do
      if j  $\notin$  sol.v then
        newContribution  $\leftarrow$  singleContribution(sol.v, j) - MAT[j][element_out]
        if newContribution > oldContribution then
          sol.v[ i ]  $\leftarrow$  j
          sol.fitness  $\leftarrow$  sol.fitness + newContribution - oldContribution
          pairs[ i ].first  $\leftarrow$  i
          sol  $\leftarrow$  false
          return
        end
      k  $\leftarrow$  k + 1
    end
    j  $\leftarrow$  rand(0, m)
  end
  i  $\leftarrow$  k + 1
end
```

4.1.3. Búsqueda local determinista

Este algoritmo esta basado en la búsqueda local recién explicada pero con una pequeña mejora. A la hora de explorar el vecindario también ordenaremos los elementos no seleccionados en función de los más prometedores. Para ello utilizamos la función *obtainBestOrdering*.

Algorithm 18: obtainBestOrdering

Data: sol : solution
Result: best_ordering : vector<int>
begin
 pairs : vector < pair < int, double >>
 foreach $i \in 0, \dots, n$ **do**
 if $i \notin \text{sol.v}$ **then**
 pairs[i].first $\leftarrow i$
 pairs[i].second $\leftarrow \text{singleContribution}(\text{sol.v}, i)$
 end
 end
 pairs $\leftarrow \text{sort}(\text{pairs}, \text{operator } <)$
 for i from |pairs| - 1 to 0 **do**
 best_ordering[i] $\leftarrow \text{pairs}[i].\text{first}$
 end
end

Para el algoritmo en si, repetiremos un razonamiento análogo al anterior. Fijado el número de elementos del vecindario a explorar, MAX , exploramos un porcentaje p_i de la solución y un porcentaje p_k del ordenamiento generado a partir de la función *obtainBestOrdering*.

Recorreremos la solución hasta $max_i = |sol| \cdot p_i$ y los posibles intercambios hasta $max_k = n \cdot p_k$, teniendo en cuenta que:

$$max_k \cdot max_i = (n \cdot p_k) \cdot (|sol| \cdot p_i) = MAX$$

Si damos un valor a p_i podemos calcular max_i y max_k en función del resto de datos: $max_k = MAX/max_i$. Finalmente tenemos que tener en cuenta la posibilidad de que max_k sea mayor que el tamaño de *best_ordering* es por esto que tomamos $max_k = \min(MAX/max_i, |best_ordering|)$. En ese caso hemos de actualizar max_i a $\min(MAX/max_k, |sol|)$ para asegurarnos de que hacemos la MAX exploraciones.

Este movimiento esta implementado en la función *stepInNeighbourhoodDet* que a su vez es llamado por el algoritmo final, *localSearchDet*.

Algorithm 19: stepInNeighbourhoodDet

Data: sol : solution
Result: stop : bool , sol : solution
begin
 sol \leftarrow orderSolutionByContribution(sol)
 best_ordering \leftarrow obtainBestOrdering(sol)
 percent_i \leftarrow 0,1 max_i \leftarrow percent_i · |sol|
 max_k \leftarrow min(MAX/max_i, |best_ordering|)
 if max_k == |best_ordering| **then**
 | max_i \leftarrow min(MAX/max_k, |sol|)
 end
 stop \leftarrow true
 i \leftarrow 0
 while i < max_i **do**
 element_out \leftarrow sol.v[i]
 oldContribution \leftarrow singleContribution(sol.v, element_out)
 k \leftarrow 0
 while k < max_k **do**
 j \leftarrow best_ordering[k] **if** j \notin sol.v **then**
 newContribution \leftarrow singleContribution(sol.v, j) - MAT[j][element_out]
 if newContribution > oldContribution **then**
 sol.v[i] \leftarrow j
 sol.fitness \leftarrow sol.fitness + newContribution - oldContribution
 pairs[i].first \leftarrow i
 sol \leftarrow false
 return
 end
 k \leftarrow k + 1
 end
 end
 i \leftarrow k + 1
 end
end

Algorithm 20: localSearchDet

Data: none
Result: sol : solution
begin
 sol \leftarrow randomSolution()
 stop \leftarrow false
 while !stop **do**
 | stop , sol \leftarrow stepInNeighbourhoodDet(sol)
 end
end

Cabe destacar que este algoritmo no es determinista por completo ya que la solución inicial tomada es puramente aleatoria. Este detalle es importante puesto que por ello merecerá la pena ejecutarlo múltiples veces en vez de una única vez.

4.1.4. Búsqueda local con greedy

El último algoritmo presentado es otra mejora a la búsqueda local. Consiste simplemente en tomar como solución inicial la obtenida por el greedy.

Algorithm 21: localSearchGreedy

```
Data: none
Result: sol : solution
begin
  sol  $\leftarrow$  greedy()
  stop  $\leftarrow$  false
  while !stop do
    | stop , sol  $\leftarrow$  stepInNeighbourhoodDet(sol)
  end
end
```

4.2. Práctica 2

Para esta práctica se han implementado un total de 4 algoritmos que a continuación describiremos en profundidad. Son los siguientes:

- Algoritmo Genético Generacional con cruce uniforme - **AGGu**
- Algoritmo Genético Generacional con cruce posicional - **AGGp**
- Algoritmo Genético Estacionario con cruce uniforme - **AGEu**
- Algoritmo Genético Estacionario con cruce posicional - **AGEp**
- Algoritmo Memético - **AM**

En la siguiente tabla se resume la elección de operador para cada algoritmo. Recordemos que los operadores de mutación y y selección por torneo binario son compartidos entre todos los algoritmos.

	Cruce Uniforme	Cruce Posicional	Reemplazo Generacional Elitista	Reemplazo Estacionario
AGGp		X	X	
AGGu	X		X	
AGEp		X		X
AGEu	X			X
AM		X	X	

Tabla 1: Selección de operador por algoritmo

4.2.1. Algoritmos Genéticos Generacionales - AGG

5. Procedimiento de desarrollo

Todos los algoritmos se han implementado en *C++* y se encuentran en la carpeta adjunta. El código está dividido en archivos independientes y autosuficientes que contienen cada uno un algoritmo de los explicados anteriormente. Adicionalmente hay dos archivos más para el tratamiento de

los datos.

Se han implementado también una serie de scripts en *bash*, así como un *makefile* que permite la automatización de todo el proceso. El *makefile* tiene esencialmente dos tipos de comandos: *examples* *< algoritmo >* y *measure* *< algoritmo >*, donde *< algoritmo >* ∈ *Greedy, LS, LSD, GS*. El primer comando compila y ejecuta *< algoritmo >* para tres ejemplos, uno de cada set de entrenamiento. El segundo comando ejecuta 200 veces *< algoritmo >* en cada caso del problema y hace la media de los datos proporcionados para cada uno de los casos. Los datos de salida se almacenan en *output/ < algoritmo > .dat*.

Finalmente el comando *measureAll* ejecuta *measure* sobre todos los algoritmos excepto *greedy*, ya que no tienen ningún componente aleatorio. Para tomar datos sobre el algoritmo *greedy* ejecutaremos *measureGreedy* una única vez.

Para los experimentos 1 y 2 se han utilizado los comandos descritos anteriormente, con 200 repeticiones por algoritmo.

Para el experimento 3 se han alterado ligeramente los fuentes y se ha ejecutado de nuevo el comando *measureAll*, con 10 repeticiones por algoritmo. En este caso se ha calculado el máximo de los *fitness* en vez de la media, manteniendo los cálculos para el tiempo y las iteraciones.

Para el experimento 4 se ha utilizado el script *evolution.sh* modificando ligeramente los fuentes para obtener los datos requeridos, así como LibreOffice para realizar las gráficas.

Todos los experimentos se han realizado en una misma máquina con las siguientes características: Sistema operativo Ubuntu 18.04.2, 7.7Gib de memoria y procesador IntelCore i7-7700@3.60GHzx8.

6. Experimentos realizados

En esta sección describiremos los experimentos realizados y estudiaremos los resultados obtenidos.

6.1. Experimentos 1: resultados iniciales

En primer lugar he tomado datos como se expone en la sección anterior. Adjunto a continuación las tablas de los tiempos y los resultados obtenidos para los cuatro algoritmos mencionados.

	Algoritmo Greedy	Búsqueda Local	BS Determinista	BS y Greedy	Óptimos
MDG-a_1	112135	105832	106473	112139	114259
MDG-a_2	112109	105962	106416	112118	114327
MDG-a_3	112541	105776	106267	112541	114123
MDG-a_4	112590	105884	106318	112590	114040
MDG-a_5	112204	106118	106598	112255	114064
MDG-a_6	112347	106099	106568	112359	114204
MDG-a_7	112583	105940	106446	112590	114338
MDG-a_8	112023	105829	106320	112033	114158
MDG-a_9	112411	106290	106520	112429	114132
MDG-a_10	112634	105981	106536	112634	114197
SOM-b_11	20420	19181	20619.6	20432.8	20743
SOM-b_12	35574	33798.3	35689.9	35587.3	35881
SOM-b_13	4542	3955.94	4541.65	4544.6	4658
SOM-b_14	16888	15500.5	16878.1	16888	16956
SOM-b_15	36065	33870.9	36259.9	36065	36317
SOM-b_16	62294	59575.7	62722.7	62297	62487
SOM-b_17	6938	6135.27	6991.79	6938	7141
SOM-b_18	25843	23954.5	25826.1	25843	26258
SOM-b_19	55406	52741.8	55894.9	55413.4	56572
SOM-b_20	96593	92657.6	96398.7	96594	97344
GKD-c_21	17831.8	16483	18051.3	17833.3	19485,1875
GKD-c_22	17973	16797.3	18188.1	17973	19701,53711
GKD-c_23	17973.3	16574.8	18036.6	17973.3	19547,20703
GKD-c_24	17860	16384.7	18052.7	17866.3	19596,46875
GKD-c_25	17822.9	16702.6	18013.9	17822.9	19602,625
GKD-c_26	17741.1	16505.8	17991.6	17741.1	19421,55078
GKD-c_27	18016.5	16567.3	18161.9	18016.5	19534,30664
GKD-c_28	17897.7	16522.3	18089.3	17897.7	19487,32031
GKD-c_29	17784.5	16374.5	17817.6	17787.1	19221,63477
GKD-c_30	17860.1	16578	18042.7	17899.2	19703,35156

Tabla 2: Experimento 1 - Costes

	Greedy	Búsqueda local	BS determinista	BS greedy
MDG-a_1	0.249346	1.29837	1.67138	0.259307
MDG-a_2	0.251498	1.25412	1.64122	0.299649
MDG-a_3	0.25458	1.32799	1.64147	0.281972
MDG-a_4	0.264134	1.30341	1.66133	0.310694
MDG-a_5	0.258874	1.30089	1.71872	0.285821
MDG-a_6	0.259026	1.33751	1.74401	0.334614
MDG-a_7	0.260951	1.34526	1.69168	0.297083
MDG-a_8	0.258524	1.35116	1.71162	0.314464
MDG-a_9	0.257905	1.43386	1.76812	0.259414
MDG-a_10	0.252341	1.3025	1.74672	0.262792
SOM-b_11	0.003922	0.0769007	0.094339	0.0115729
SOM-b_12	0.005933	0.168331	0.178364	0.0135729
SOM-b_13	0.001846	0.0198992	0.0233178	0.00484763
SOM-b_14	0.004533	0.0882583	0.11522	0.010587
SOM-b_15	0.008492	0.189072	0.360455	0.0206853
SOM-b_16	0.013224	0.326374	0.634729	0.0254535
SOM-b_17	0.003302	0.0304316	0.0500629	0.00627894
SOM-b_18	0.008476	0.126879	0.306938	0.0167809
SOM-b_19	0.016259	0.260259	0.765596	0.071728
SOM-b_20	0.025305	0.456821	1.14616	0.0639032
GKD-c_21	0.003234	0.0399083	0.0699487	0.00735801
GKD-c_22	0.003143	0.0509766	0.0709061	0.00732955
GKD-c_23	0.003172	0.0460402	0.0729913	0.01287
GKD-c_24	0.003158	0.0489642	0.0817394	0.0074404
GKD-c_25	0.003188	0.0501347	0.0702928	0.00716391
GKD-c_26	0.003173	0.0519859	0.0584565	0.00720639
GKD-c_27	0.004301	0.0562678	0.0815131	0.00846629
GKD-c_28	0.003306	0.0476838	0.0648686	0.00651156
GKD-c_29	0.003221	0.0512277	0.0611578	0.00678151
GKD-c_30	0.00325	0.0478213	0.0706898	0.00764579

Tabla 3: Experimento 1 - Tiempos (s)

	Greedy	Búsqueda Local	BL Determinista	BL con greedy
Desv	3,81	10,25	5,12	3,79
Tiempo (s)	0,09	0,52	0,71	0,11

Tabla 4: Experimento 1 - Comparativa entre algoritmos

6.1.1. Análisis

Comencemos observando la tabla 4 para obtener una visión general de los resultados. Por un lado, los tiempos de las búsquedas locales clásica y determinista no son para nada sorprendentes: Ambas son notablemente más lentas que el algoritmo *Greedy*, siendo la *BLD* ligeramente más lenta que la *BL*. Sin embargo la media de tiempos para la *BLconGreedy* es realmente sorprendente. Profundizaremos en este aspecto en el experimento 2.

Por otro lado el algoritmo *Greedy* obtiene un valor *Desv* menor que los de la búsquedas locales clásica y determinista. Sin embargo, si miramos la tabla 2 con más detenimiento nos

damos cuenta de que efectivamente sobre los casos *MDG* el algoritmo *Greedy* obtiene mejores costes, pero en los demás casos la *BLD* suele superarlo. Esta es justamente la motivación de cara a la *BLcongreedy*.

Estos resultados son un claro ejemplo de como un algoritmo puede ser más efectivo frente a un caso de estudio particular y no serlo en otro. Así mismo nos damos cuenta de que la media en este caso no es tan representativa como nos gustaría. Aunque para esta práctica no lo he tenido en cuenta, para las próximas calcularé también la desviación típica para estos valores.

En cuanto a la *BLconGreedy* era de esperar que tuviese valores como mínimo mejores que los del *Greedy*. Observamos que sin embargo estos valores no son ni mucho menos notablemente mejores. Surgen por lo tanto dos preguntas: Por qué el tiempo de ejecución de *BLconGreedy* es tan sumamente bajo y por qué su coste apenas mejora respecto al *Greedy*. Ambas preguntas serán contestadas en el segundo experimento. La hipótesis es relativamente evidente: parece que la *BLcongreedy* no explota el entorno tanto como nos gustaría.

6.2. Experimento 2: exploración del vecindario

Motivado por las anteriores cuestiones he estudiado las iteraciones que toma cada algoritmo de búsqueda local hasta converger. Esto nos permite estudiar por un lado si la *BLD* merece la pena y por otro comparar la convergencia de forma general. Estos han sido los resultados obtenidos.

	Búsqueda Local	BS Determinista	BS con greedy
MDG-a_1	333.34	458.93	1.05
MDG-a_2	341.42	460.72	2.25
MDG-a_3	333.32	445.39	0
MDG-a_4	334.15	450.24	0
MDG-a_5	341.59	466.07	3.9
MDG-a_6	350.235	484.405	1.5
MDG-a_7	342.575	452.6	2.25
MDG-a_8	337.055	477.755	2.3
MDG-a_9	357.475	479.48	3.85
MDG-a_10	341.795	472.395	0
SOM-b_11	77.785	371.73	1.15
SOM-b_12	102.11	466.15	2.3
SOM-b_13	44.015	189.585	1
SOM-b_14	97.2	378.75	0
SOM-b_15	115.06	543.42	0
SOM-b_16	143.41	674.185	1
SOM-b_17	56.64	252.86	0
SOM-b_18	119.47	511.075	0
SOM-b_19	145.545	720.03	1.5
SOM-b_20	179.53	785.815	1
GKD-c_21	38.005	255.305	1
GKD-c_22	48.95	281.135	0
GKD-c_23	42.24	268.165	0
GKD-c_24	37.6	257.63	1
GKD-c_25	50.375	281.54	0
GKD-c_26	41.32	258.45	0
GKD-c_27	38.74	306.75	0
GKD-c_28	42.035	259.42	0
GKD-c_29	41.83	281.97	1.3
GKD-c_30	42.225	278.765	2.05

Tabla 5: Experimento 2 - Estudio de convergencia (iteraciones)

6.2.1. Análisis

Observando los resultados quedan claramente resueltas las cuestiones planteadas inicialmente. La convergencia es terriblemente prematura en el caso de la *BLconGreedy*, y esto explica tanto los bajos valores de tiempos como la reducida mejora en coste respecto al *Greedy* inicial. Conjeturo que esta convergencia se debe a la cota en el número de vecinos generados impuesto (50,000), a la manera de explorar el vecindario y a la calidad de la solución inicial obtenida con el *Greedy*.

Por otra parte observamos que el número de iteraciones para la *BLD* es considerablemente mayor que para la *BL*, llegando hasta a quintuplicarse en ocasiones, como es el caso de algunos *GKD - c*. Esto no indica que los reajustes realizados realmente merecen la pena en cuanto a costes, si bien en tiempo puede que no sea el caso si ejecutamos esta búsqueda de forma reiterada.

En vista de estos últimos resultados otra alternativa interesante sería aplicar la *BLD* con

solución inicial la obtenida por el *Greedy*. Esta búsqueda completamente determinista (*BSD*) sería un algoritmo 100 % determinista que explotaría en profundidad el entorno de la solución inicial.

6.3. Experimento 3: búsqueda del óptimo

En el primer experimento podíamos observar como en algunos casos del problema obteníamos valores mejores que los óptimos conocidos, como es el caso de $SOMB - b_{16}$ en la tabla 2. Dicha observación propicia el siguiente experimento, en este caso buscando la mejor solución posible. Para ello se han utilizado las tres búsquedas ya explicadas pero eliminando la cota en la generación del vecindario. Ejecutamos cada búsqueda un total de 10 veces, tomando el máximo sobre los costes obtenidos y realizando la media para los tiempos y las iteraciones. Estos son los resultados obtenidos.

	Búsqueda Local	BS Determinista	BS y Greedy	Óptimos
MDG-a_1	113776	113308	113054	114259
MDG-a_2	113413	113288	113241	114327
MDG-a_3	113314	113171	113293	114123
MDG-a_4	113629	113300	113248	114040
MDG-a_5	113613	113112	113399	114064
MDG-a_6	113347	113368	113338	114204
MDG-a_7	113746	113457	113450	114338
MDG-a_8	113401	113343	113314	114158
MDG-a_9	113655	113383	113036	114132
MDG-a_10	113482	113488	113543	114197
SOM-b_11	20704	20585	20650	20743
SOM-b_12	35745	35646	35742	35881
SOM-b_13	4653	4608	4615	4658
SOM-b_14	17020	16924	16948	16956
SOM-b_15	36364	36319	36327	36317
SOM-b_16	62806	62767	62699	62487
SOM-b_17	7057	7028	6975	7141
SOM-b_18	25977	25901	25953	26258
SOM-b_19	56210	56056	55992	56572
SOM-b_20	97221	97197	97213	97344
GKD-c_21	18072.1	18040.1	18034.7	19485,1875
GKD-c_22	18193.7	18207.3	18211.3	19701,53711
GKD-c_23	18057.1	18034.4	18065.4	19547,20703
GKD-c_24	18060.5	18094.6	18101.7	19596,46875
GKD-c_25	18017.4	18021.5	18057.6	19602,625
GKD-c_26	18024.5	18021.8	17918.3	19421,55078
GKD-c_27	18163.7	18162.8	18158.6	19534,30664
GKD-c_28	18109.2	18109.2	18109.2	19487,32031
GKD-c_29	17837.2	17814.5	17831.3	19221,63477
GKD-c_30	18059.7	18046.9	18066.9	19703,35156

Tabla 6: Experimento 3 - Costes

	Búsqueda Local	BS Determinista	BS con greedy
MDG-a_1	172.293	40.2909	40.6578
MDG-a_2	160.427	41.9321	54.0231
MDG-a_3	166.142	47.3654	41.1937
MDG-a_4	171.914	39.4863	32.7488
MDG-a_5	174.249	40.8823	46.0528
MDG-a_6	158.605	43.6646	41.4238
MDG-a_7	171.656	44.7278	30.9779
MDG-a_8	177.631	42.4097	47.5606
MDG-a_9	162.381	45.3496	30.131
MDG-a_10	175.787	42.4186	52.1171
SOM-b_11	10.8909	0.080255	2.39299
SOM-b_12	15.4952	0.205982	2.52537
SOM-b_13	2.80544	0.0177933	0.398986
SOM-b_14	8.63016	0.112358	0.758402
SOM-b_15	19.0671	0.299473	4.09818
SOM-b_16	34.3534	0.616403	7.13911
SOM-b_17	4.20101	0.0535963	0.517853
SOM-b_18	14.6231	0.259467	1.38322
SOM-b_19	30.7497	0.930221	10.1462
SOM-b_20	57.6885	1.81487	12.5458
GKD-c_21	7.05474	0.0638733	1.89784
GKD-c_22	5.73836	0.059613	2.15262
GKD-c_23	6.41487	0.0687667	1.47689
GKD-c_24	8.16905	0.076535	3.02903
GKD-c_25	6.02595	0.095074	2.46421
GKD-c_26	5.69318	0.0487363	2.07736
GKD-c_27	7.73885	0.0706207	1.27569
GKD-c_28	5.64627	0.0579403	2.53345
GKD-c_29	5.48938	0.0627603	0.75972
GKD-c_30	6.84102	0.0698153	1.38801

Tabla 7: Experimento 3 - Tiempos(s)

	Búsqueda Local	BS Determinista	BS con greedy
MDG-a_1	1771.4	1542.67	207.4
MDG-a_2	1715.8	1548.33	260.4
MDG-a_3	1739.4	1649.67	173.4
MDG-a_4	1813.9	1621	150
MDG-a_5	1794.6	1568.33	217.4
MDG-a_6	1738.9	1598	222
MDG-a_7	1780.3	1656.33	154.8
MDG-a_8	1790.1	1505.33	219.2
MDG-a_9	1712.9	1667	155
MDG-a_10	1766.1	1559.33	230.8
SOM-b_11	423.6	316	67
SOM-b_12	511.2	457	44.6
SOM-b_13	198.2	179	15.4
SOM-b_14	418.3	359	13.4
SOM-b_15	600.8	494.667	68.2
SOM-b_16	784.5	707.333	91
SOM-b_17	277.8	246	12.6
SOM-b_18	566.1	476	27.4
SOM-b_19	819.7	759	155.6
SOM-b_20	1073.6	913	150.8
GKD-c_21	333.9	246	56.2
GKD-c_22	306.3	264.667	84.8
GKD-c_23	320.4	274	33.8
GKD-c_24	333.8	263.333	72.6
GKD-c_25	291.7	314	72.8
GKD-c_26	302.7	178	50.4
GKD-c_27	337.5	283	42.4
GKD-c_28	278.9	267	70.8
GKD-c_29	298	255	19.4
GKD-c_30	317.4	300.667	53.4

Tabla 8: Experimento 3 - Iteraciones

	Búsqueda Local	BL Determinista	BL con greedy
Desv	2,79	2,98	2,98
Tiempo (s)	65,15	14,45	15,93
Iteraciones	880,59	782,29	106,43

Tabla 9: Experimento 3 - Comparativa entre algoritmos

6.3.1. Análisis

Mirando a las tablas 4 y 9 vemos como los valores de *Desv* han bajado notablemente, especialmente para la *BL* y la *BLD*, mientras que los tiempos se han disparado. Aunque el *Desv* obtenido para la *BL* es menor que el de las otras dos búsquedas achaco esto al reducido número de iteraciones realizadas: únicamente 10 para cada algoritmo.

De nuevo nos fijamos en la tabla 7 para comprobar los resultados caso a caso. Si bien los mejores valores conocidos únicamente se sobrepasan para las entradas *SOM* – *b*₁₄, *SOM* – *b*₁₅

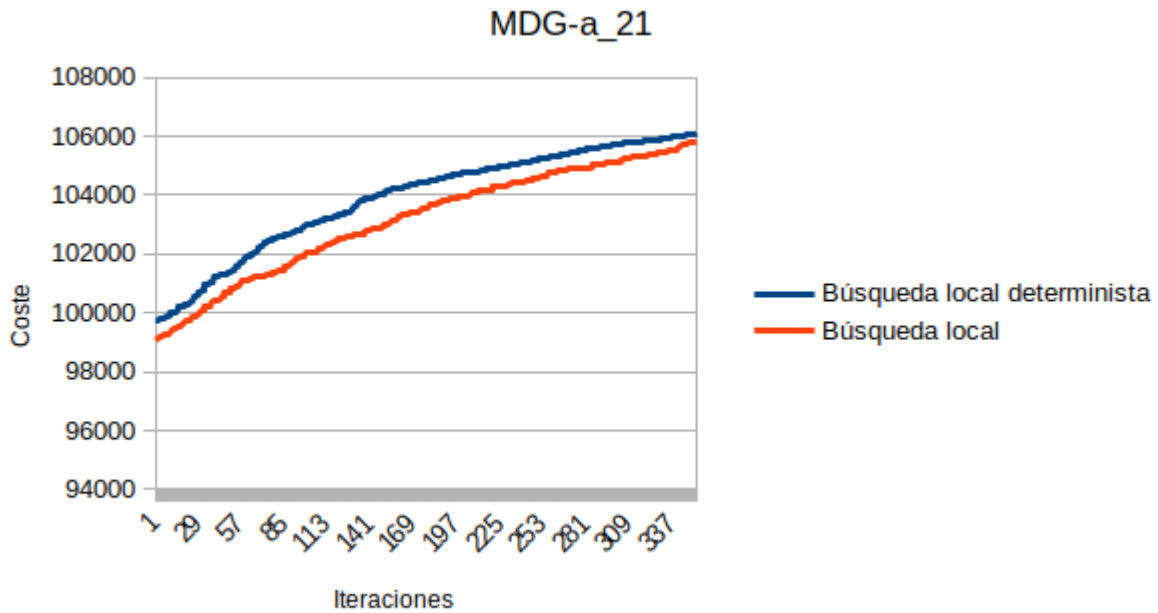
y $SOM - b_{16}$ los tres algoritmos se acercan notablemente a dichos valores para el resto de casos.

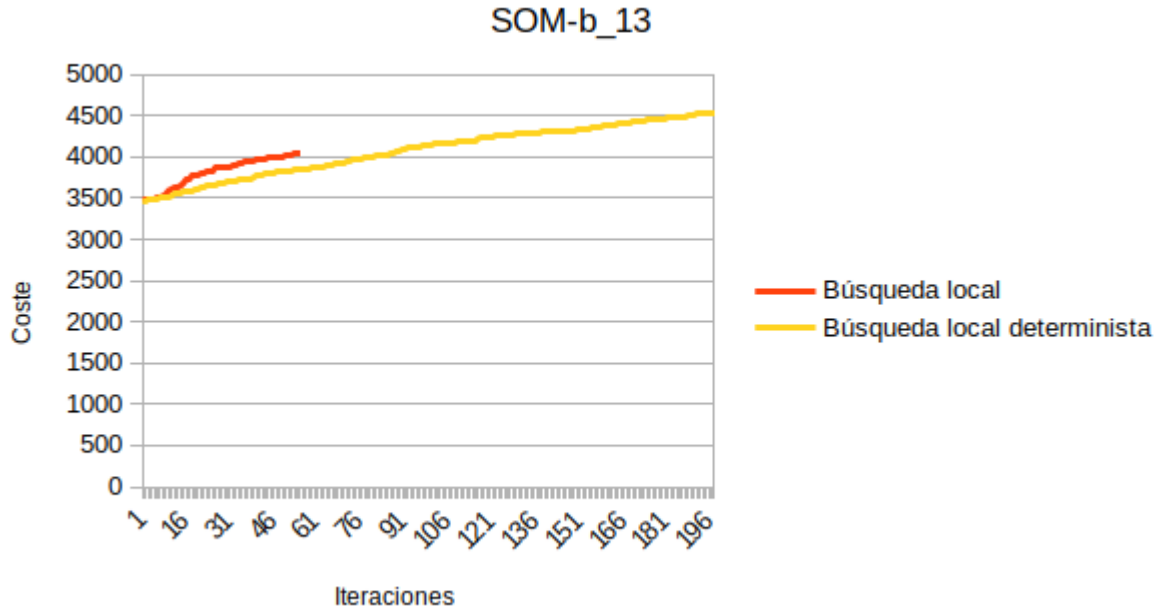
A pesar de los que los costes obtenidos en los distintos algoritmos son sumamente parecidos, no es ni mucho menos el caso para los tiempos y las iteraciones. Se comprueba sin duda la efectividad de la exploración del entorno implementada para la *BLD* observando los estos valores. Además, se comprueba la hipótesis respecto a la pobre ejecución de la *BLconGreedy* cuando limitamos la exploración. Esto refuerza la idea de la *BTD* mencionada en el experimento 1.

Finalmente observamos en la iteraciones obtenidas como la convergencia de la *BLD* es superior a la de la *BL*. Obviamente la de la *BLconGreedy* es muy superior puesto que comienza mucho más cerca del óptimo. Estos razonamientos propician un último experimento de cara a estudiar la convergencia de las soluciones. Si bien me habría gustado realizarlo sin cota máxima como en este último experimento, no me ha sido posible por cuestiones de tiempo. Por ende, considerar el algoritmo *BLconGreedy* en el siguiente experimento tampoco tiene sentido, ya que la convergencia es extremadamente prematura.

6.4. Experimento 4: estudio evolutivo de la exploración del entorno

Estudiamos la convergencia de la búsqueda local clásica y la determinista iteración a iteración. Para ello ejecutamos estos algoritmos sobre los conjuntos de datos $MDG - a_{21}$ y $SOM - b_{13}$, escogidos por tener comportamientos particularmente distintos en las tablas 2 y 5. Volvemos a utilizar la cota en la exploración del vecindario, y en cada iteración obtenemos el coste actual de la solución en estudio. Podemos ver los resultados obtenidos en las siguientes gráficas.





6.4.1. Análisis

Podemos ver como en los distintos casos la evolución es particularmente distinta. Por un lado, para $MDG - a_21$ la convergencia de ambos algoritmos es asintóticamente idéntica, manteniéndose la BLD por encima en parte debido a la solución inicial ligeramente mejor. Por otro, en $SOM - b_13$ la mejora de la BL respecto a la BLD es sustancial pero esta se estanca rápidamente debido a que su exploración del espacio es peor. Este es otro ejemplo de como los mismos algoritmos pueden comportarse de formas completamente distintas para entradas diferentes.