

Estudio de Aplicación de Metaheurísticas al problema Maximum Diversity Problem (MDP)

Cristian Medina

Manuel Pacheco

Abstract

El problema de máxima diversidad (Maximum Diversity Problem), consiste en elegir M elementos de un conjunto de N elementos tal que la suma de las distancias entre los elementos elegidos sea la máxima posible. Catalogado como un problema NP-Hard en 1993 por Kou, Glover y Dhiti, el problema está formalmente estipulado bajo la siguiente fórmula de función objetivo a maximizar y restricción de tamaño:

$$\sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n d_{ij} x_i x_j$$

$$\sum_{i=1}^n x_i < m$$

Donde n es la cardinalidad de elementos del conjunto, m la cantidad de elementos elegidos, d_{ij} es la distancia entre el elemento i y el elemento j , x_i es una función booleana que toma el valor de 1 si el elemento i fue elegido, 0 si no fue elegido. Estas definiciones son las utilizadas en menciones posteriores en caso de omitirse una definición en el momento.

Las aplicaciones de este problema se pueden encontrar en estudios genéticos, sistemas ecológicos, controles de inmigración, tratamientos médicos, entre otros. Ha sido un caso de estudio para la aplicación de heurísticas y metaheurísticas, particularmente para la búsqueda local. Fue catalogado como un problema NP-Hard en 1993 por Kou, Glover y Dhiti al reducir el problema de clique a MDP.

El presente artículo presenta un estudio sencillo de la aplicación de metaheurísticas para la resolución de este problema. Se realiza un estudio comparativo de las técnicas de Local Search (LS), Iterated Local Search (ILS), Tabu Search (TS), Genetic Algorithm (GA) y Scatter Search (SS) en las instancias del problema en los sets SOM, GKD y MDG de MDPLIB de opticom.es.

1. Trabajos Previos

El problema de máxima diversidad ha sido estudiado aplicando múltiples heurísticas y metaheurísticas. En

general todas las heurísticas estudiadas presentan buenos resultados, sin embargo, se destacan las de búsqueda local al poseer resultados de mejor calidad para la mayor parte de los casos de prueba.

Se destaca en particular el Basic VNS por Brimberg [1]. Este consiste en una estructura de datos eficiente que representa los conjuntos LocalSearch de datos actualizados, del cual genera aleatoriamente una solución parcial a la cual le aplica una búsqueda local intercambiando los elementos de su solución con los elementos no incluidos. En un segundo lugar, se encuentra el VNS implementado por Aringhieri y Cordone [2], el cual consiste en una construcción de una solución con un método greedy y un posterior procesamiento cambiando k elementos de la solución y aplicando una búsqueda tabú simple sobre esta.

Para casos de prueba de mayor tamaño, se destaca las búsquedas en Tabú. Un ejemplo de esta es la presentada por Palubeckis [5], una búsqueda Tabú iterativa que alterna entre búsqueda tabú y técnicas de perturbación. Cuando la búsqueda Tabú encuentra un resultado mejor al inicial, utiliza una búsqueda local a la nueva solución. Su método de perturbación es una selección de elementos aleatorios del conjunto para viajar por el espacio de soluciones. Para casos pequeños este método se desempeña bien, pero no es el mejor.

Cabe destacar también las estrategias GRASP desarrolladas por Silva et al [3], donde se construye una solución parcial inicial y se mejora de forma iterativa; y la propuesta por Duarte y Martí [4], que parten de la heurística propuesta por Glover de C2 y D2, aplicándole su propia metodología GRASP.

2. Representación de la solución

Para la representación de una solución del problema se utilizan dos alternativas. Para los algoritmos LS, ILS, TS y SS se optó por una representación compacta. Sea el conjunto de elementos de tamaño n y la solución de tamaño m , se opta por representar la solución como un vector de tamaño m donde cada componente contiene la etiqueta del elemento escogido. Para GA se utiliza una representación completa: un vector de tamaño n donde cada componente está permanentemente asociada a un

elemento del problema e indica si pertenece o no a la solución (i.e. un x_i como en la descripción del problema).

3. Solución Inicial

Dependiendo de la metaheurística a utilizar se usan métodos de construcción de las soluciones iniciales de forma diferente. La primera es la clásica solución aleatoria: se seleccionan los elementos que pertenecen a la solución al azar. La segunda sigue un principio de intuición que denominamos *Potencial* de un elemento definida de la siguiente forma:

$$P(i) = \sum_{j=1}^n d_{ij}$$

De manera informal, el *Potencial* de un elemento indica cuánto aporta a la función objetivo si se tomasen en cuenta todas las conexiones con todos los demás elementos. Por tanto, elegimos los primeros m nodos que tengan mayor potencial. Definimos a esta estrategia como solución inicial greedy.

En la mayoría de los problemas trabajados, las soluciones aleatorias rondan generalmente entre 50 % y 75 % del valor de las mejores soluciones encontradas en la librería (soluciones referencia), dependiendo del tamaño del problema, siendo las peores las de problemas más grandes. La solución greedy supera el 95 % y tiende a llegar tan alto como 98 % de la solución referencia.

En la mayoría de los problemas se intenta utilizar la solución greedy sobre la aleatoria. Para LS y ILS se utiliza greedy. Para las metaheurísticas poblacionales GA y SS, y la de trayectoria TS se inicia con soluciones aleatorias.

4. Local Search (LS)

El primer algoritmo implementado consiste en Búsqueda Local. Durante la búsqueda, el objetivo es mejorar una solución existente modificando aquellos elementos que lleven la solución a acercarse a un óptimo (al menos de forma local).

La implementación de LS esta basada en el uso de k -opt, con 4 características en las cuales hacer énfasis:

- Se busca mejorar los m componentes de la solución.
- Los vecinos de cada componente son definidos en base al tamaño n del problema.
- Cada componente es reemplazada por el mejor candidato encontrado

- La búsqueda por componente se detiene si ha pasado un numero de iteraciones sin conseguir una solución candidata que mejore la solución actual.

4.1. Algoritmo de Local Search

El algoritmo utilizado es equivalente al aquí mostrado, abstrayendo las particularidades de implementación y optimización del algoritmo. Esto aplica a todos los algoritmos mostrados en el presente documento.

```

1  $S \leftarrow$  Solucion del problema
2  $S_i \leftarrow$  elemento  $i$  de la solucion
3  $U \leftarrow$  elementos no escogidos
4  $P \leftarrow$  elementos del problema
5 begin
6    $S \leftarrow$  SolucionInicial()
7   foreach  $i \in |S|$  de derecha a izquierda do
8      $U' \leftarrow$  NH_SIZE elementos aleatorios de  $U$ 
9     foreach  $u \in U'$  do
10        $S' \leftarrow S$  con  $S_i$  reemplazado por  $u$ 
11       if  $valor(S') > valor(S)$  then
12          $S \leftarrow S'$ 
13       if pasan MAX_REPEATS iteraciones
14         sin cambiar S then
           break

```

Para NH_SIZE y MAX_REPEATS se entonaron los valores de $\frac{|P|-|S|}{5}$ y 30 respectivamente.

4.2. Resultados de Local Search

La aplicación de LS a una solución dada, en general logra mejorar la solución y acercarla hacia el óptimo (en general, local). Quizá uno de los resultados más importantes en una revisión individual de LS, es cómo se comporta con diferentes soluciones. En la figura 1, se hacen 15 pruebas sobre 5 problemas del set mediano iniciando con una solución aleatoria (r) y una solución greedy (g). El comportamiento observado es el esperado: local search mejora localmente una solución dada; con una solución greedy se obtienen mejores resultados pero sucesivas aplicaciones de LS a una solución arbitraria podrían igualmente obtenerlos.

5. Tabu Search

La versión del algoritmo Tabu Search implementado es sencillo. Consiste en, a partir de una solución inicial aleatoria, cambiar el 10 % de los nodos de la solución aleatoriamente por nodos no elegidos por la solución

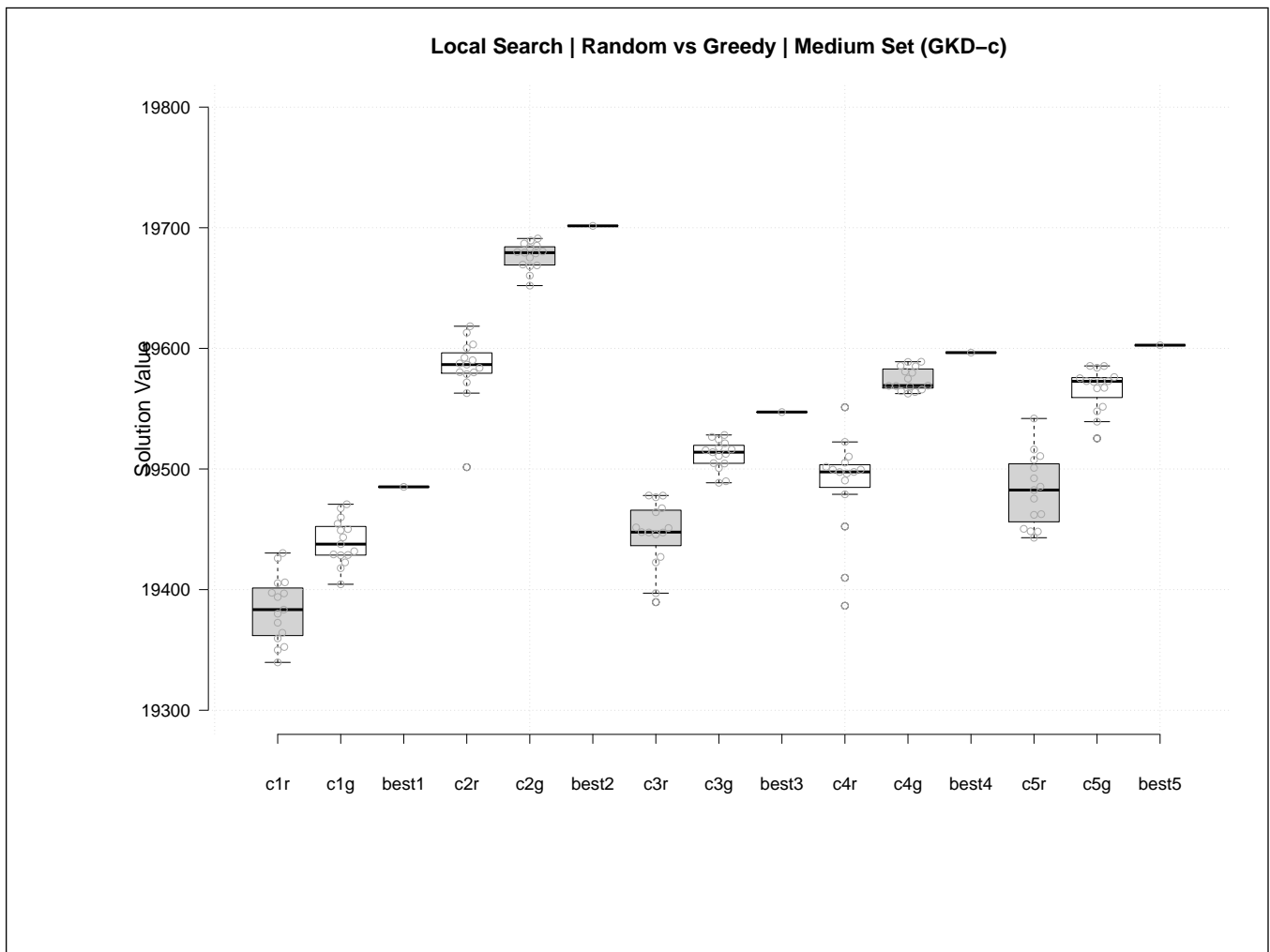


Figura 1: Comparación de soluciones de LS utilizando soluciones random y greedy en problemas de tamaño mediano.

que tampoco sean tabu, sin criterio de aspiración para los elementos tabu. Si estos cambios mejoran la solución, los intercambios de nodos realizados son marcados como tabu por 30 iteraciones, y mejor solución es actualizada [7].

5.1. Algoritmo Tabu

6. Genetic Algorithm (GA)

El algoritmo genético consiste en una simulación genética de las soluciones, donde se posee una población donde cada individuo representa una instancia de solución y se aplican simulaciones de selección, cruce y mutación genéticas a modo de imitación del proceso natural de los seres vivos. Se implementó un algoritmo genético generacional para la resolución de este problema: las nuevas poblaciones reemplazan a las anteriores, manteniendo el mismo tamaño en la población durante todo el algoritmo.

6.1. Representación del Cromosoma de GA

Dada las características del problema, la representación utilizada en las demás metaheurísticas era poco útil/eficiente para la implementación de un operador de cruce en GA. En esta metaheurística, se utiliza la representación completa, descrita en la sección *Representación de la solución*.

6.2. Población Inicial

Se utiliza una población inicial de tamaño fijo y cada elemento es construido de forma aleatoria.

6.3. Operador de Selección de GA

Para la selección de los individuos a ser utilizados en el cruce, se utilizó roulette-wheel sampling con elitismo simple: se seleccionan individuos al azar con tendencia a

```

1  $Bs \leftarrow$  Mejor Solución
2  $S \leftarrow$  Solucion inicial Aleatoria
3  $k \leftarrow \lceil S \rceil * 0.1$ 
4  $JailTime \leftarrow 30$  //Tiempo de combinaciones siendo Tabu
5  $TabuList[|Nodes|][|Nodes|] \leftarrow$  Matriz de Booleanos de Cambios inicializado todas las casillas en Verdadero
6  $Q \leftarrow \emptyset$  //Cola de pares combinaciones a liberar
7 begin
8    $Bs \leftarrow S$ 
9   for  $i = 1 \rightarrow MAX\_ITERATION$  do
10      $D \leftarrow$  k nodos aleatorios en S
11      $T \leftarrow$  k nodos aleatorios fuera de S
12     for  $j = 0 \rightarrow k$  do
13       if  $TabuList[D[j]][T[j]]$  then
14          $TabuList[D[j]][T[j]] \leftarrow Falso$ 
15          $Q.push((D[j], T[j]))$ 
16          $S \leftarrow (S - D[j]) \cup T[j]$ 
17       else
18          $T[k] \leftarrow$  nodo aleatorio fuera de S
19          $j \leftarrow j + 1$ 
20     if  $fitness(S) > fitness(Bs)$  then
21        $Bs \leftarrow S$ 
22     if  $i > JailTime$  then
23       for  $l = 0 \rightarrow k$  do
24          $TabuList[Q.top().first][Q.top().second] \leftarrow Verdadero$ 
25          $Q.pop()$ 

```

los individuos con mejor "fitness". El fitness es directamente proporcional al valor de la función objetivo. Con respecto al elitismo simple, no se permite elegir al mejor individuo de la población.

6.4. Operador de Cruce de GA

Dadas las características del problema El operador de cruce implementado es un operador personalizado, de 2 padres a 2 hijos, descrito informalmente de la siguiente forma: *en las componentes en que los padres coinciden, los hijos coinciden. En las componentes que solo 1 padre lo posee, se reparten alternativamente entre los 2 hijos.* Adicionalmente, se tiene la condición de que los hijos reemplazan a sus padres si poseen mejor fitness.

6.5. Operador de Mutación de GA

Utilizamos un operador de mutación bastante simple y débil: se intercambia un elemento presente en la solución por uno que no este presente en la solución. Sin embargo, la mutación se usa con una muy alta probabilidad: al final de cada generación, 1 de cada MUTATION.SIZE elementos (seleccionados al azar) son mutados. Esta alta probabilidad de mutación resultó en mejores resultados para GA en los problemas medianos.

6.6. Algoritmo de GA

```

1  $P \leftarrow$  Poblacion de inividuos
2  $C \leftarrow$  Individuos Elegidos
3  $S_i \leftarrow$  Solucion  $i$  de un conjunto de soluciones
4 begin
5    $P \leftarrow$  PoblacionInicial(POP_SIZE)
6   for  $i = 1 \rightarrow N\_GENERATIONS$  do
7      $C \leftarrow$  Seleccion(P)
8     foreach  $S_i, S_{i+1} \in C$  do
9        $S'_i, S'_{i+1} \leftarrow$  Cruce( $S_i, S_{i+1}$ )
10      if  $fitness(S'_i) > fitness(S_i)$  then
11         $replace(S'_i, S_i, P)$ 
12      if  $fitness(S'_{i+1}) > fitness(S_{i+1})$  then
13         $replace(S'_{i+1}, S_{i+1}, P)$ 
14    Mutacion(P, MUTATION_SIZE);

```

Para los valores de POP_SIZE, N_GENERATIONS y MAX_REPEATS se entonaron los valores de 100, 200 y 4 respectivamente.

7. Iterated Local Search

En la implementación de la metaheurística de búsqueda local iterativa, a partir de una solución inicial, comienza un ciclo de donde se perturba la mejor solución, se mejora esa solución parcial y se comparan las soluciones. La perturbación consiste en intercambiar aleatoriamente k nodos de la solución parcial por nodos no elegidos. El mejoramiento es realizar una búsqueda local a la solución obtenida por la perturbación. Luego se compara la solución parcial con la mejor solución obtenida, y se actualiza la segunda de ser mejor la solución parcial.

Si transcurren h ciclos sin que mejore la solución, se procede a aumentar la perturbación, aumentando en uno el k . Este ciclo ocurre hasta que se cumpla un número máximo de iteraciones, o el valor k de las perturbaciones supera el tamaño de la solución.

8. Scatter Search

Se realizó una implementación de Scatter Search con una población P de tamaño 100, y un conjunto de referencia de tamaño constante 10. Se realizan 5 ciclos del SS, que consiste en generar una población P , obtener el conjunto de referencia y comenzar un ciclo interno donde se combinan las soluciones del conjunto de referencia, se mejoran las soluciones, y se actualiza el conjunto de referencia, hasta que no se realicen cambios en una de las iteraciones, por lo que se guarda la mejor solución y se procede a la siguiente iteración [6].

8.1. Conjunto de Referencia de SS

Tomando una población inicial P de tamaño 100 con soluciones aleatorias y mejorando las soluciones con un Local Search, el conjunto de referencia consta, inicialmente, de las 5 mejores soluciones de esta población P , y 5 soluciones más diferentes para cada una de las primeras 5 mencionadas, ordenadas las soluciones de mejor a peor.

8.2. Combinaciones de SS

Las combinaciones son entre 2 soluciones, combinando las primeras 5 soluciones del conjunto con las otras 5 restantes. Las combinaciones consisten en tomar aleatoriamente elementos suficientes de entre las dos soluciones para generar una nueva, con un mejoramiento posterior usando Local Search.

8.3. Actualización del Conjunto de Referencia de SS

Si una solución generada en las combinaciones es mejor que alguna de las soluciones del conjunto de referencia, se introduce al conjunto, eliminando la peor solución del conjunto para mantener el tamaño, asegurando que se mantenga el orden de mejor a peor solución.

8.4. Algoritmo de SS

```

1  $S \leftarrow$  Mejor solución obtenida
2 begin
3   for  $i = 1 \rightarrow 5$  do
4      $P \leftarrow$  Poblacion Inicial Aleatoria
5     Improvement( $P$ )
6      $refSet \leftarrow$  5 mejores Soluciones de  $P$ 
7     foreach  $p \in P \wedge r \in refSet$  do
8        $refSet \leftarrow refSet \cup \text{Max}(\text{Diferencia}(r,p))$ 
9     for  $Cambia$  do
10       $Cambia \leftarrow$  falso
11       $C \leftarrow$  combinaciones a partir de  $refSet$ 
12      foreach  $c \in C$  do
13        Improvement( $c$ )
14        foreach  $r \in refSet$  do
15          if  $fitness(c) > fitness(r)$  then
16             $refSet \leftarrow refSet \cup c$ 
17             $refSet \leftarrow refSet -$ 
18              Peor( $refSet$ )
19             $Cambia \leftarrow$  verdadero
20      if  $fitness(\text{MejorSolucion}(refSet)) >$ 
21         $fitness(S)$  then
22         $S \leftarrow$  MejorSolucion( $refSet$ )
```

9. Resultados

Para el estudio del desempeño de los algoritmos, se ejecuto 15 veces cada caso de prueba y se promediaron los datos obtenidos. Se consideran los casos de prueba GDK-c que consisten en puntos generados aleatorios y sus respectivas distancias euclidianas entre si, con una cantidad de nodos igual a 500 y una solución de tamaño 50. También se consideran 5 casos de SOM-b, con una cantidad de nodos entre 100 y 200, soluciones de tamaño 10 a 40, que consisten en arcos generados aleatoriamente, extraídos de una distribución uniforme. Igualmente se usan los casos de MDG-a, que son arcos enteros entre 0 y 10 sacados aleatoriamente de una distribución uniforme, con problemas con 500 nodos y 50 de tamaño

de soluciones, y sus 3 de sus versiones más grandes de 2000 nodos y 200 de tamaño de solución

En general los resultados dados con ILS superan en calidad a los presentado solo con Búsqueda Local. Esto ocurre tanto con soluciones iniciales aleatorias como con soluciones iniciales con el procesamiento greedy antes descrito. Sin embargo su costo de tiempo es considerablemente mayor. En particular con los casos más grandes, MDG-a de 2000 nodos, ILS llega a tardar 10 minutos a diferencia d LS que tarda poco más de un segundo, con una diferencia de 2por las corridas con la solución inicial greedy obtienen mejores resultados que con soluciones iniciales aleatorias.

Referencias

- [1] Brimberg, J., N. Mladenovic, D. Urošević and E. Ngai. (2009). Variable neighborhood search for the heaviest k-subgraph. *Computers & Operations Research*, 36(11): 2885-2891.
- [2] R. Aringhieri and R. Cordone. Better and faster solutions for the maximum diversity problem. *Technical report, Università degli Studi di Milano, Polo Didattico e di Ricerca di Crema*, 2006.
- [3] G.C. Silva, M.R.Q. Andrade, L.S. Ochi, S.L. Martins, and A. Plastino. New heuristics for the maximum diversity problem. *Journal of Heuristics*, 13(4):315–336, 2007.
- [4] R. Aringhieri, R. Cordone, and Y. Melzani. Tabu search vs. grasp for the maximum diversity problem. *A Quarterly Journal of Operations Research*, 6(1):45–60, 2008.
- [5] G. Palubeckis. Iterated tabu search for the maximum diversity problem. *Applied Mathematics and Computation*, 189:371383, 2007.
- [6] R. Martí, M. Laguna. Tabu Search. *Departamento de Estadística e Investigación Operativa, Universitat de València*.
- [7] F. Glover, B. Melián. Scatter Search: Diseño Básico y Estrategias Avanzadas. *Inteligencia Artificial, Revista Iberoamericana de Inteligencia Artificial*. No.19, 2003, pp. 29-48.