



Trabajo de Fin de Grado

Desarrollo Dirigido por Retos *Challenge-driven development.*

Alejandro Marrero Díaz

La Laguna, 8 de junio de 2017

D. **Eduardo Manuel Segredo González**, con N.I.F. 78.564.242-Z profesor Titular de Universidad adscrito al Departamento de Nombre del Departamento de la Universidad de La Laguna, como tutor

D. **Carlos Segura González**, con N.I.F. 78.704.244-S profesor Titular de Universidad adscrito al Departamento de Nombre del Departamento de la Universidad de La Laguna, como cotutor

C E R T I F I C A (N)

Que la presente memoria titulada:

“Desarrollo Dirigido por Retos.”

ha sido realizada bajo su dirección por D. **Alejandro Marrero Díaz**, con N.I.F. 78.649.404-F.

Y para que así conste, en cumplimiento de la legislación vigente y a los efectos oportunos firman la presente en La Laguna a 8 de junio de 2017

Agradecimientos

A mi familia y amigos que
me han apoyado incondicionalmente estos 4 años.

Agradecer también a los directores de este proyecto,
Eduardo Segredo y Carlos Segura,
por la ayuda en el desarrollo de este proyecto
y por adentrarme en el mundo de la investigación.

Licencia



© Esta obra está bajo una licencia de Creative Commons
Reconocimiento-NoComercial-CompartirIgual 4.0
Internacional.

Resumen

Con este Trabajo de Fin de Grado se ha buscado adentrar al alumno en el mundo de la investigación, y concretamente, en el campo de las meta-heurísticas. Para ello, se han implementado diversas técnicas algorítmicas, incluyendo algunas técnicas pertenecientes a la familia de los algoritmos evolutivos, así como otras técnicas meta-heurísticas poblacionales de trayectoria.

Para evaluar el rendimiento de los algoritmos implementados, se ha participado en una competición de optimización global continua denominada Generalization-based Contest in Global Optimization (GenOpt)

En concreto, se han implementado los algoritmos Opposition-Based-Learning Competitive-Particle Swarm Optimization, Covariance Matrix Adaptation Evolutionary Strategy y Simulated Annealing los cuales se han aplicado a los problemas propuestos por la competición GenOpt. La elección de estos algoritmos se basa en la demostración de su buen desempeño en problemas de optimización global continua. Además de los tres algoritmos mencionados, se ha desarrollado el conjunto de métricas, especificadas en el manifiesto de la competición, necesarias para evaluar el rendimiento de los algoritmos desarrollados.

Palabras clave: Optimización global continua, Meta-heurísticas, Computación Evolutiva, Ajuste de parámetros.

Abstract

The main goal of this degree thesis is to introduce the student to the research field through the application of several meta-heuristic approaches to global continuous optimization problems. For doing that, we have developed several algorithmic techniques, including some techniques belonging to the family of evolutionary algorithms, as well as other population and trajectory-based meta-heuristics.

In order to assess the performance of the implemented schemes, we have participated in a competition on global continuous optimization referred to as Generalization-based Contest in Global Optimization (GENOPT). The main aim of this competition is diversify the number of approaches solving the proposed problems.

In particular, we have implemented the algorithms Opposition-based Learning Competitive Particle Swarm Optimization, Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy and Simulated Annealing, which have been applied to solve the problems proposed by the GENOPT. The aforementioned algorithms were chosen because they have shown to provide better performance in comparison to other alternatives when dealing with global continuous optimization problems. In addition to the above, we have also implemented a set of metrics proposed by the competition organization with the aim of measuring the performance of our algorithmic proposals.

Keywords: *Global continuous optimization,, Meta-heuristics, Evolutionary computation, parameter setting.*

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Descripción del Trabajo de Fin de Grado	1
1.2. Antecedentes y estado actual del tema	1
2. Conceptos previos	3
2.1. Optimización Global	3
2.2. Técnicas meta-heurísticas	3
2.2.1. Representación	5
3. Técnicas Algorítmicas Desarrolladas	6
3.1. Opposition-based Learning (OBL)	6
3.2. Búsqueda Global	7
3.3. OBL Competitive Particle Swarm Optimization (OBL-CPSO) .	9
3.3.1. Particle Swarm Optimization	9
3.3.2. OBL-CPSO	10
3.4. Covariance Matrix Adaptation Evolutionary Strategy (CMA-ES)	12
3.4.1. Inicialización de los parámetros	12
3.4.2. Muestreo	13
3.4.3. Actualizar Media	13
3.4.4. Paso para C	13
3.4.5. Paso para σ	13
3.4.6. Actualizar C	14
3.4.7. Actualizar σ	14
3.4.8. Pseudocódigo	14
3.5. Simulated Annealing (SA)	15
4. Evaluación experimental	17
4.1. Descripción de las funciones propuestas por el GenOpt	17
4.2. Estudio de la parametrización	17
4.3. Análisis de rendimiento	17
5. Conclusiones y líneas futuras	18
6. Summary and Conclusions	19

<i>Desarrollo Dirigido por Retos</i>	II
7. Presupuesto	20
7.0.1. Presupuesto	20
Bibliografía	21

Índice de figuras

2.1. Métodos de optimización.	4
---------------------------------------	---

Índice de tablas

7.1. Actividades	20
7.2. Coste total de las actividades	20
7.3. Equipamiento	21
7.4. Coste del equipamiento	21

Capítulo 1

Introducción

1.1. Descripción del Trabajo de Fin de Grado

En este Trabajo de Fin de Grado, se propone el diseño y análisis de diversas técnicas algorítmicas para la resolución de problemas definidos en el ámbito de un concurso/competición de optimización. En la actualidad, muchos de los problemas del mundo real se pueden formular como problemas de optimización con variables de decisión cuyos valores varían en un dominio continuo. Es por eso que podemos encontrar una gran cantidad de competiciones en esta materia que fomentan la cooperación y la investigación en el campo de la computación. Aunque son muchas las técnicas que pueden ser empleadas para resolver este tipo de problemas, se ha probado que la utilización de metaheurísticas y otras técnicas de computación evolutiva (EC, del inglés, Evolutionary Computation), como la familia de algoritmos evolutivos, presentan numerosas y exclusivas ventajas como: Robustez y fiabilidad. Capacidad de búsqueda global. Abstracción del dominio del problema a resolver.

Además de las ventajas anteriormente mencionadas, las técnicas de computación evolutiva nos proporcionan otras características como pueden ser la facilidad con la que pueden ser implementadas y la posibilidad de paralelizarlas de un modo relativamente sencillo. Por lo tanto, el principal objetivo del presente Trabajo de Fin de Grado es el diseño, desarrollo y análisis de la parametrización de diversos algoritmos evolutivos y otras técnicas metaheurísticas en el ámbito de una competición de optimización continua.

1.2. Antecedentes y estado actual del tema

Como se ha indicado en el apartado anterior, actualmente existen una gran cantidad de competiciones de optimización organizadas en diferentes congresos como son:

- Congress on Evolutionary Computation - CEC 2017.

- Genetic and Evolutionary Computation Conference - GECCO 2017.
- Global Trajectory Optimisation Competition - GTOC.
- International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization - EMO 2017.
- Generalization-based Contest in Global Optimization - GENOPT.

En concreto, este Trabajo de Fin de Grado se basará en la resolución de los problemas de optimización global continua descritos en GENOPT. En esta competición se propone la minimización de 18 funciones con 10 o 30 variables de decisión, las cuales se dividen en tres familias diferentes: funciones GKLS, funciones de benchmark clásicas transformadas, y funciones compuestas. La primera familia de funciones se obtiene mediante un generador GKLS que permite obtener tres clases de funciones con los valores mínimos locales y globales conocidos para realizar una optimización global multidimensional de tipo “box-constrained”. La segunda familia de funciones se basan en problemas de benchmark de optimización continua clásicos, de dificultad variable.

Por último, la última familia se obtiene realizando una composición de funciones pertenecientes a la segunda familia, generando seis tipos diferentes de problemas. Se puede obtener más información al respecto en el Manifiesto GENOPT. Por otra parte, como se comentó en el apartado de introducción, se estudiarán diversos algoritmos evolutivos y otro tipo de metaheurísticas para la resolución de los problemas planteados. En este caso, cabe destacar los algoritmos Particle Swarm Optimization (PSO), Differential Evolution (DE) y Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy (CMA-ES), entre otros. Otro posible objeto de estudio serán diversas técnicas de inicialización de algoritmos, principalmente, la familia de técnicas Opposition-Based Learning (OBL).

Capítulo 2

Conceptos previos

2.1. Optimización Global

La Optimización Global trata de optimizar una función o un conjunto de funciones dentro de un intervalo especificado y teniendo en cuenta diversos criterios y/o restricciones. Por lo general, el objetivo de la optimización global es la de minimizar ese conjunto de funciones nombrado aunque también se puede tratar el caso de la búsqueda del óptimo global. La optimización global se basa en encontrar aquel valor mínimo o máximo global dentro del espacio de búsqueda de la función f a optimizar. La elección de la técnica empleada para encontrar el óptimo global resulta de gran importancia dado que la función f puede tener muchos óptimos locales que pueden llevar al algoritmo a una **convergencia prematura** y evitar que el algoritmo escape de un óptimo local.

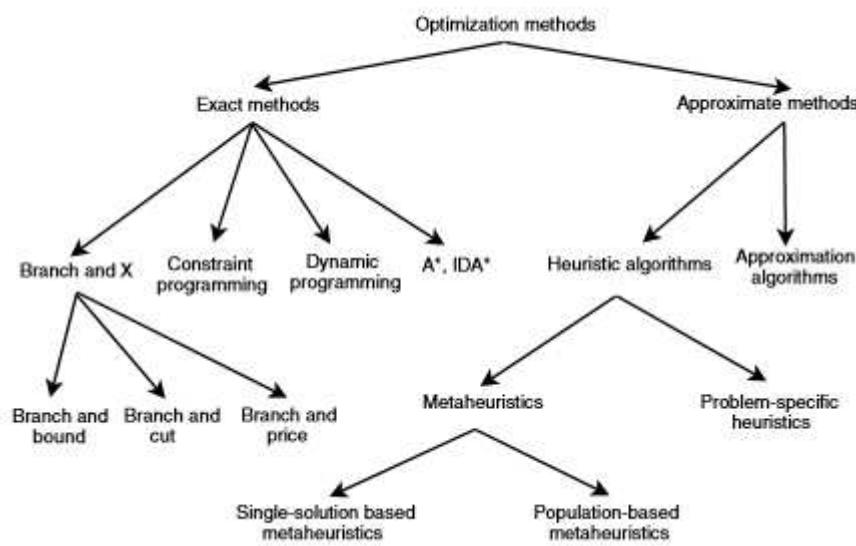
El objetivo de la optimización global, considerando un problema de minimización, es encontrar un vector $X^* \in \Omega$ tal que $f(X^*) \leq f(X)$ para todo $X \in \Omega$. [21]. En este caso particular, tratamos la optimización de tipo **box-constrained**, donde la región factible Ω está definida por un límite inferior (a_i) y superior (b_i) para cada una de las variables de la función, por ejemplo: $\Omega = \prod_{i=1}^D [a_i, b_i]$. [21]

2.2. Técnicas meta-heurísticas

Las meta-heurísticas son un sub-conjunto de métodos de optimización que se encuentran incluidas dentro del conjunto de métodos heurísticos que a su vez forman parte de los métodos aproximados.

A diferencia de los métodos de optimización exactos, las meta-heurísticas nos permiten obtener soluciones factibles a problemas complejos en un tiempo aceptable, aunque no nos garantizan obtener la solución óptima global.[23] En los últimos años estas técnicas algorítmicas han ganado una gran popularidad dado que han demostrado su efectividad y eficiencia en muchos campos y con

Figura 2.1: Métodos de optimización.



una gran cantidad de problemas distintos.

En cuanto a las distintas meta-heurísticas podemos encontrar hoy en día, podemos diferenciar las siguientes categorías[23]:

- Búsquedas Locales: Greedy Randomized Adaptive Search Procedure (GRASP) [4]
- Heurísticas Voraces: Simulated Annealing (SA) [6]
- Estrategías Evolutivas: Covariance Matrix Adaptation Evolutionary Strategy (CMA-ES)[9], Differential Evolution (DE) [26, 5, 24]
- Algoritmos Genéticos: Coevolutionary algorithms (CEA) [2, 10, 8]

Esta gran variedad de meta-heurísticas se debe principalmente al gran abanico de criterios que podemos definir a la hora de diseñar una meta-heurística. Generalmente, las meta-heurísticas, y en especial, los algoritmos evolutivos, buscan un balance entre ambas propiedades (intensificación/diversificación), aunque es cierto, que algunas, como la búsqueda local, se centran principalmente en intensificar.. Las técnicas de intensificación son aquellas que priorizan una solución prometedora explorándola antes que las soluciones menos prometedoras. Por el contrario, las técnicas de diversificación se aseguran que en las regiones menos prometedoras son visitadas para evitar los óptimos locales. En segundo lugar, debemos tener en cuenta los siguientes criterios:

- Métodos inspirados en la naturaleza: Es común inspirarse en el comportamiento de animales o bien de procesos físicos para diseñar un método

meta-heurístico que emule ese comportamiento. Por ejemplo: Ant Bee Colonies o Simulated Annealing.

- **Determinísticos o Estocásticos:** Podemos optar por tomar decisiones deterministas o emplear reglas aleatorias durante la búsqueda de nuevas soluciones.
- **Métodos basados en poblaciones o basados en una única solución:** Por un lado nos podemos basar en un conjunto de soluciones factibles que combinaremos entre ellas aplicando diversos operadores para obtener un nuevo conjunto de soluciones "*hijas*" potencialmente mejores. O bien, podemos optar por utilizar una única solución al problema que transformaremos en cada iteración del algoritmo.
- **Iterativos o voraces:** En este aspecto podemos contemplar comenzar con un conjunto de soluciones al problema e ir transformando dichas soluciones en cada iteración del algoritmo para obtener nuevas soluciones. Al contrario, en una estrategia voraz (Greedy) comenzamos sin una solución factible al problema y en cada iteración incluiremos una variable de decisión hasta obtener la solución completa.

2.2.1. Representación

En las técnicas algorítmicas en general nos podemos encontrar con diversas maneras de representar la solución al problema y en las meta-heurísticas éstas son las comunes[23]:

- **Cadena binaria:** Utilizada en problemas de decisiones
- **Vector de valores naturales:** Problemas de asignación
- **Vector de números reales:** Utilizada en problemas de optimización continua y/o optimización global.
- **Secuencia:** Empleada en problemas de rutas y de planificación de tareas.

Dadas las características del concurso seleccionado para este Trabajo de Fin de Grado, la representación empleada fue **Vector de valores reales** dado que cada elemento del vector denota un valor dentro del dominio de la función para cada una de las ***n variables*** que posee.

Capítulo 3

Técnicas Algorítmicas Desarrolladas

3.1. Opposition-based Learning (OBL)

Opposition-based Learning (OBL)[25, 19, 11, 16, 12] es un concepto en computación que ha demostrado gran efectividad a la hora de mejorar diversas técnicas de optimización. Cuando evaluamos una solución X candidata para un problema dado, simultáneamente calcularemos la solución opuesta \overline{X} , consiguiendo así una mayor exploración del espacio de búsqueda Ω en busca del óptimo global. [25]

Sea $x \in \Re$ un número real definido dentro de un cierto intervalo: $x \in [a, b]$. El número opuesto de x denotado como \overline{x} se define de la siguiente forma[25]:

$$\overline{x} = a + b - x \quad (3.1)$$

Análogamente, para el caso de optimizar una función n -dimensional la solución opuesta se calcularía de la siguiente forma:

Sea $P(x_1, x_2, \dots, x_n)$ un punto dentro de un sistema de coordenadas n -dimensional con $x_1, \dots, x_n \in \Re$ y además $x_i \in [a_i, b_i]$. [25] El opuesto del punto P se define como las coordenadas $\overline{x}_1, \dots, \overline{x}_n$ donde:

$$\overline{x}_i = a_i + b_i - x_i \quad i = 1, \dots, n \quad (3.2)$$

En nuestro desarrollo hemos empleado este concepto en varios procesos, como puede ser el proceso de inicialización de los individuos que formarán parte de la primera población o bien, tras cada iteración del algoritmo como medida de diversificación.

3.2. Búsqueda Global

En ciencias de la computación, una búsqueda global (Global-Search) es un método heurístico para resolver problemas complejos de optimización[22, 1, 18]. El funcionamiento básico de una búsqueda global se basa en que el algoritmo se mueve dentro del espacio de búsqueda recorriendo todas las soluciones factibles y aplicando cambios a cada una de ellas hasta encontrar una solución óptima.

Para nuestro trabajo, hemos diseñado una búsqueda global que **se aplicará como último paso en cada iteración de los algoritmos** que hemos desarrollado con el objetivo de obtener una mayor diversificación y escapar de los posibles óptimos locales. En primer lugar, el procedimiento calculará el individuo centroide de la población. El centroide de un conjunto n -dimensional de k elementos se define como:

$$C = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_k}{k} \quad (3.3)$$

Para nuestro caso particular, debemos tener en cuenta que cada uno de nuestros elementos x_i representan una solución factible a nuestro problema con d variables cada uno. Es por ello que, el individuo centroide se calculará de la siguiente manera:

Algoritmo 1 CalcularCentroide

Result: Centroide

```

for  $i \leftarrow 0$  to  $D$  do
  Suma = 0;
  for  $j \leftarrow 0$  to  $|S|$  do
    Suma = Suma +  $S[j][i]$ ;
  end
  Centroide[ $i$ ] =  $\frac{Suma}{|S|}$ ;
end

```

Seguidamente, pasaremos a explorar la población de individuos aplicando pequeñas modificaciones a cada uno de ellos para obtener nuevos individuos *hijos*. Si estos individuos mejoran a sus ancestros serán incluidos dentro del conjunto de soluciones S y continuaremos aplicando modificaciones a su ancestro hasta que no se produzca mejora en su descendencia. En otro caso, serán descartados. Finalmente, devolveremos una nueva población con los $|S|$ mejores individuos encontrados entre padres e hijos.

A continuación podemos ver el pseudocódigo de nuestra aproximación de búsqueda global empleada en nuestros desarrollos:

Algoritmo 2 Búsqueda Global

Result: $|S|$ mejores individuos encontradosNumIndividuos = $|S|$;

OrdenarPoblacion(S);

MarcarNoExplorados(S);

Centroide = CalcularCentroide();

NumeroMejora = 0;

NumeroExplorado = 0;

while $NumeroMejora > 0$ y $NumeroExplorado < |S|$ **do**

| k = 0;

| **while** $S[k] = explorado$ y $NumeroExplorado < |S|$ **do**| | k = rand(0, $|S|$);| **end**

| S[k] = explorado;

| NumeroExplorado = NumeroExplorado + 1;

| Mejora = true;

| **while** $Mejora$ **do**| | **while** $|a_1| + |a_2| + |a_3| \neq 1$ **do**

| | | GenerarRand(a1, a2, a3);

| | **end**| | **while** $r_1 < k$ **do**| | | $r_1 = \text{rand}(0, |S|)$;| | **end**| | NuevoInd = ModificarIndividuo(k, a1, a2, a3, Centroide, r_1);| | **if** $NuevoInd < S[k]$ **then**

| | | Mejora = true;

| | | $S = S \cap NuevoInd$;

| | | NumeroMejora = NumeroMejora + 1;

| | **end**| | **else**

| | | Mejora = false;

| | **end**| **end****end**

OrdenarPoblacion(S);

S = ObtenerMejores(0, NumIndividuos, S);

3.3. OBL Competitive Particle Swarm Optimization (OBL-CPSO)

3.3.1. Particle Swarm Optimization

Particle Swarm Optimization (PSO) [3, 13, 15, 17] es una estrategia de optimización que ha demostrado ser muy eficiente en problemas de optimización global continua. Se basa en simular el conjunto de soluciones candidatas a un problema dado como un enjambre de partículas que se mueven dentro de un espacio de búsqueda definido. Dado que las partículas se mueven, estas poseen una posición x y una velocidad \vec{v} en cada instante t de ejecución del algoritmo. La posición x representa los valores que toman las diferentes variables dentro de una solución y, la velocidad \vec{v} , determinará la dirección y la rapidez con la que la partícula se desplazará por el espacio de búsqueda, es decir, el factor de modificación para cada una de las variables de decisión. A parte de estas características, cada partícula tiene la capacidad de recordar su mejor posición alcanzada durante la ejecución del algoritmo, y para cada partícula p_i la denotaremos como pb_i [3]. Esto nos permite evaluar si el movimiento de una partícula mejora la solución actual o por el contrario es mejor permanecer en la posición actual.

Por otra parte, en el algoritmo PSO también se tiene en cuenta una partícula denominada *global best* en la que se almacena la mejor posición histórica alcanzada por una partícula dentro del enjambre. Estas dos posiciones pb_i y gb son usadas en cada iteración del algoritmo para atraer el movimiento de las partículas hacia esas posiciones, consiguiendo así que el algoritmo PSO converga rápidamente hacia las soluciones óptimas.

A continuación se muestra el esquema básico del algoritmo PSO [3]:

Algoritmo 3 Particle Swarm Optimization

Result: Óptimo global**while** *Condición de parada no satisfecha* **do** **foreach** p_i en S **do** Evaluar p_i ;

Actualizar mejor posición;

Actualizar mejor global;

end **foreach** p_i en S **do** **foreach** d_i en D **do** $v_{i,d} = v_{i,d} + C_1 * Rnd(0, 1) * [pb_{i,d} - x_{i,d}] + C_2 + Rnd(0, 1) * [gb_d - x_{i,d}]$; $x_{i,d} = x_{i,d} + v_{i,d}$; **end** **end****end**

3.3.2. OBL-CPSO

En esta ocasión, el algoritmo Opposition-based Learning Competitive-Particle Swarm Optimization (OBL-CPSO) [27] desarrollado incluye dos modificaciones sobre el esquema básico del algoritmo PSO como son Opposition-based Learning, detallado en el apartado 3.1, y un procedimiento de competición entre las partículas que conforman el enjambre.

El procedimiento de competición se basa en escoger tres partículas dentro del enjambre aleatoriamente, hacerlas competir entre ellas, mediante su valor de función objetivo, obteniendo una partícula ganadora otra perdedora y una partícula neutra para, posteriormente, eliminarlas del enjambre. Para un enjambre de tamaño N , en cada iteración del algoritmo se realizarán $N/3$ [27]. Tras cada competición, la partícula ganadora pasará directamente a la siguiente iteración del algoritmo y la partícula perdedora pasará también a la siguiente iteración tras aprender de la partícula ganadora, es decir, la partícula ganadora atrae a la partícula perdedora hacia su posición. La partícula neutra será la escogida para utilizarla en la estrategia de OBL y seguidamente pasar a la siguiente iteración, consiguiendo así explorar por completo el espacio de búsqueda [27].

La partícula perdedora y la partícula neutra van a modificar su posición y su velocidad siguiendo las siguientes ecuaciones:

$$V_{ld}^k(t+1) = R_{1d}^k(t) * V_{ld}^k(t) + R_{2d}^k(t) * (X_{wd}^k(t) - X_{ld}^k(t)) + \varphi * R_{3d}^k(t) * (\overline{X}_{ld}^k(t+1)) \quad (3.4)$$

$$X_{ld}^k(t+1) = X_{ld}^k(t) + V_{ld}^k(t+1) \quad (3.5)$$

$$X_{nd}^k(t+1) = ub_d + lb_d - X_{nd}^k(t) + R_{4d}^k(t) * X_{nd}^k(t) \quad (3.6)$$

Donde $X_{wd}^k(t)$, $X_{ld}^k(t)$ y $X_{nd}^k(t)$ son las posiciones d-ésimas de las partículas ganadora (winner), perdedora (looser) y neutral en la k-ésima ronda de competición dentro de la iteración t. V_{ld}^k es la velocidad de la partícula perdedora en la dimensión d-ésima en la k-ésima ronda de competición de la iteración t [27]. Y por último, R_{1d}^k , $R_{2d}^k(t)$, $R_{3d}^k(t)$ y $R_{4d}^k(t)$ son valores escogidos aleatoriamente dentro del intervalo $[0,1]$, φ es un parámetro fijado manualmente, $\overline{X}_{ld}^k(t)$ representa el valor medio de las posiciones de las partículas dentro del enjambre y, ub_d y lb_d son las cotas superiores e inferiores del espacio de búsqueda en la dimensión d-ésima [27].

El pseudocódigo del algoritmo OBL-CPSO se muestra en la siguiente figura:

Algoritmo 4 OBL Competitive-Particle Swarm Optimization

Result: Óptimo global

Inicializar;

while Condición de parada no satisfecha **do**

 Agitar(S);

foreach $k = 1 : N/3$ **do**

$r_1 = S(k)$;

$r_2 = S(k + N/3)$;

$r_3 = S(k + 2N/3)$;

$(w, n, l) = \text{competir}(r_1, r_2, r_3)$;

 Actualizar $X_{ld}^k(t)$ (Ec. 3.4 y Ec. 3.5);

 Actualizar $X_{nd}^k(t)$ (Ec. 3.6);

 Actualizar los valores de fitness para N y L;

end

 BusquedaGlobal();

end

3.4. Covariance Matrix Adaptation Evolutionary Strategy (CMA-ES)

Covariance Matrix Adaptation Evolutionary Strategy es un algoritmo evolutivo diseñado para problemas de optimización continua no lineales. La característica principal del algoritmo es que en cada iteración se generan, a través de una Distribución Normal Multivariante en \mathbb{R}^d , λ individuos nuevos, y a partir de estos individuos realizar una serie de cálculos intermedios para actualizar la matriz de covarianza asociada a la distribución.

El diseño del algoritmo CMA-ES no necesita un gran esfuerzo en la elección de los parámetros ya que es el algoritmo quién, internamente, se encarga de establecer los parámetros que utiliza, a excepción del tamaño de la población λ que debe ser definido por el usuario. Sin embargo, esta estrategia interna que define los parámetros sí forma parte del diseño del algoritmo y es uno de los pilares esenciales del rendimiento del algoritmo.

Las estrategias internas para definir los parámetros, estrategias de reinicio y los criterios de finalización hace que encontremos una gran cantidad de variantes del algoritmo CMA-ES puro. La estructura básica del algoritmo CMA-ES se puede dividir en las siguientes etapas:

3.4.1. Inicialización de los parámetros

Los parámetros comunes empleados en todas las aproximaciones del algoritmo CMA-ES son los siguientes:

- λ : Número de individuos de la población.
- C : La matriz de covarianza C tendrá dimensión C_λ^d , donde λ es el número de individuos empleados por el algoritmo y d es la dimensión de la función a optimizar.
- σ : Parámetro para controlar el tamaño de paso entre los demás parámetros.
- μ : En una selección elitista, representa los mejores individuos a tener en cuenta dentro de la población.
- c_c y c_1 : Ratio de aprendizaje para la actualización de la matriz de covarianza empleando una selección elitista de sólo un individuo.
- c_μ : Ratio de aprendizaje para la actualización de la matriz de covarianza empleando los μ mejores individuos.

- c_σ : Ratio de aprendizaje para el incremento de σ .
- d_σ : Parámetro de amortiguación para la actualización del paso de control.
- $m^g \in \mathbb{R}^d$: Valor medio de la distribución en la generación g .
- p_σ : Valor de paso para σ .
- p_c : Valor de paso para C.

3.4.2. Muestreo

La etapa de muestreo del algoritmo CMA-ES es la encargada de generar λ nuevos individuos a partir de una Distribución Normal Multivariante de media cero y covarianza C. Estos individuos y_i para $i = 1, \dots, \lambda$ son posteriormente multiplicados por σ y sumados con el valor medio de los individuos de la generación anterior. En la etapa inicial el valor medio es generado de manera aleatoria con valores dentro del dominio de la función a optimizar. Tras esta operación obtenemos los individuos x_i y finalizamos la etapa de muestreo.

$$x_i = m + \sigma y_i, \quad y_i \sim N_i(0, C), \quad \text{para } i = 1, \dots, \lambda \quad (3.7)$$

3.4.3. Actualizar Media

Tras obtener los nuevos individuos para la iteración t del algoritmo, es el momento de actualizar el valor medio de los individuos aplicando la siguiente fórmula:

$$m \leftarrow \sum_{i=1}^{\mu} w_{wi} x_{i:\lambda} = m + \sigma y_w \quad \text{donde} \quad y_w = \sum_{i=1}^{\mu} w_i y_{i:\lambda} \quad (3.8)$$

Donde y_w representa la suma de los μ mejores individuos generados multiplicados por los pesos w_i correspondientes.

3.4.4. Paso para C

La siguiente fórmula muestra el cálculo que lleva a cabo el algoritmo para obtener el nuevo valor de paso para la matriz de covarianza C.

$$p_c \leftarrow (1 - c_c)p_c + 1 \cdot \{\|p_\sigma\| < 1,5\sqrt{n}\} \sqrt{1 - (1 - c_c)^2} \sqrt{\mu_w} y_w \quad (3.9)$$

3.4.5. Paso para σ

El siguiente paso del algoritmo es calcular el valor de paso para el parámetro de control σ . Para ello, aplicamos la siguiente fórmula:

$$p_\sigma \leftarrow (1 - c_\sigma)p_\sigma \sqrt{1 - (1 - c_\sigma)^2} \sqrt{\mu_w} \cdot C^{-1/2} y_w \quad (3.10)$$

3.4.6. Actualizar C

Una vez calculados los tamaños de paso, es el momento de actualizar la matriz de covarianza para poder realizar un nuevo muestreo en la siguiente iteración del algoritmo. Para ello, empleamos la siguiente fórmula:

$$C \leftarrow (1 - c_1 - c_\mu) \cdot C + c_1 p_c p_c^T + c_\mu \sum_{i=1}^{\mu} w_i y_{i:\lambda} y_{i:\lambda}^T \quad (3.11)$$

3.4.7. Actualizar σ

Por último, sólo queda actualizar el valor de σ para la siguiente iteración aplicando la fórmula:

$$\sigma \leftarrow \sigma \times \exp\left(\frac{c_\sigma}{d_\sigma} \left(\frac{\|p_\sigma\|}{E \|N(0, I)\|} - 1\right)\right) \quad (3.12)$$

3.4.8. Pseudocódigo

En nuestra implementación hemos partido de la base del algoritmo CMA-ES detallada en los apartados anteriores y hemos decidido añadir una fase de reinicio. La fase de reiniciar puede ser necesaria en los casos en qué el paso de control σ haya aumentado bruscamente o bien no se hayan producido mejoras en las soluciones candidatas, el algoritmo se ha estancado en un óptimo local.

Durante la fase de reinicio recalculamos todos los parámetros de la misma manera que se realiza en la fase de inicialización de parámetros a excepción del tamaño de población que en este caso lo incrementaremos para poder escapar de ese óptimo local. En este caso, el nuevo valor λ se establecerá a 100.

Finalmente, podemos ver en la siguiente figura el pseudocódigo de nuestra aproximación al algoritmo CMA-ES:

Algoritmo 5 Covariance Matrix Adaptation Evolutionary Strategy

Data:

$$m \in R^n, \sigma \in R_+, \lambda$$

Result: Óptimo global

Inicialización:

$$C = I, p_c = 0, p_\sigma = 0$$

$$c_c \approx 4/n, c_\sigma \approx 4/n, c_1 \approx 2/n^2, c_\mu \approx \mu_w/n^2, c_1 + c_\mu \leq 1$$

$$d_\sigma \approx 1 + \sqrt{\frac{\mu_w}{n}}, w_i = 1 \dots \lambda \quad \text{tal que} \quad \mu_w = \frac{1}{\sum_{i=1}^{\mu} w_i^2} \approx 0,3\lambda$$

while Condición de para no satisfecha **do**

| Muestreo (Ec.3.7);

| Actualizar el valor medio (Ec. 3.8);

| Incremento de C (Ec. 3.9);

| Incremento de σ (Ec. 3.10);

| Actualizar C (Ec. 3.11);

| Actualizar σ (Ec. 3.12);

| BusquedaGlobal();

| **if** Reinicio necesario **then**

| | Reiniciar();

| **end****end**

3.5. Simulated Annealing (SA)

Simulated Annealing (SA) [20, 14, 7] es una meta-heurística que se basa en una búsqueda probabilística con una única solución. SA está inspirada por el proceso de recocido en la metalurgia [3]. El recocido es un proceso físico donde un sólido es enfriado lentamente hasta que su estructura se congela en una configuración de mínima energía. [3]

En SA, con una alta temperatura T , el sistema ignora los pequeños cambios en la energía y se aproxima a un equilibrio térmico rápidamente, es decir, se realiza una búsqueda global del mínimo dentro del espacio de búsqueda. En cambio, cuando la temperatura es baja, el sistema realiza una búsqueda local en el "vecindario" del mínimo encontrado en busca de una solución mejor. [3]

Inicialmente el algoritmo SA calcula una solución factible inicial aleatoriamente para comenzar el proceso de búsqueda. Además, se define T con un valor definido por el usuario, generalmente un valor muy elevado. Durante el proceso de búsqueda del óptimo global, la solución aleatoria generada inicialmente su-

fre ciertas variaciones obteniendo una nueva solución x' a partir de la siguiente fórmula:

$$x = x + \Delta x \quad (3.13)$$

Seguidamente, se evalúa la diferencia de energía (E) entre ambas soluciones como muestra la siguiente fórmula:

$$\Delta E(x) = E(x + \Delta x) - E(x) \quad (3.14)$$

La solución x' será directamente aceptada como nueva solución factible si $\Delta E(x) < 0$. En caso contrario, x' se aceptará con probabilidad:

$$P = e^{-\frac{\Delta E}{T}} \quad (3.15)$$

Por último, debemos decrementar el valor de la temperatura con un valor prefijado:

$$T = T - \Delta T \quad (3.16)$$

El siguiente pseudocódigo presenta el algoritmo SA desarrollado en este trabajo.

Algoritmo 6 Simulated Annealing

Result: Óptimo global

S = GenerarSolucionAleatoria();

T = InicializarTemperatura();

while *Condicion de parada no satisfecha* **do**

 S' = AplicarPerturbacionAleatoria(S); 3.13

 EvaluarDiferencia(S, S'); 3.14

 S = ActualizarSolucion(S, S'); 3.15

 T = ActualizarTemperatura(T); 3.16

 BusquedaGlobal();

end

Capítulo 4

Evaluación experimental

- 4.1. Descripción de las funciones propuestas por el GenOpt
- 4.2. Estudio de la parametrización
- 4.3. Análisis de rendimiento

Capítulo 5

Conclusiones y líneas futuras

Este capítulo es obligatorio. Toda memoria de Trabajo de Fin de Grado debe incluir unas conclusiones y unas líneas de trabajo futuro

Capítulo 6

Summary and Conclusions

This chapter is compulsory. The memory should include an extended summary and conclusions in english.

Capítulo 7

Presupuesto

En este capítulo se va a detallar el presupuesto para la realización de este Trabajo de Fin de Grado.

7.0.1. Presupuesto

En la siguiente tabla se detallan todas las actividades llevadas a cabo durante el presente Trabajo de Fin de Grado indicando la duración en horas de cada una de ellas y el coste en Euros. Se ha establecido un precio base de 20 Euros para cada hora de trabajo. El coste total del desarrollo de la investigación es de 5300 Euros.

Actividad	Duración(horas)	Coste
Investigación de las técnicas algorítmicas existentes	20	400
Selección de los algoritmos a desarrollar	5	100
Desarrollo del algoritmo OBL-CPSO	40	800
Estudio de los parámetros del algoritmo OBL-CPSO	20	400
Desarrollo del algoritmo CMA-ES	60	1200
Estudio de los parámetros del algoritmo CMA-ES	40	800
Desarrollo del algoritmo Simulated Annealing	10	200
Estudio de los parámetros de Simualted Annealing	10	200
Desarrollo de las métricas propuestas por GENOPT	10	200
Obtención de las gráficas con los resultados del estudio	20	400
Redacción de la memoria	30	600

Tabla 7.1: Actividades

Coste total	5300 Euros
-------------	------------

Tabla 7.2: Coste total de las actividades

Por otra parte, también se ha usado el siguiente equipamiento durante el desarrollo de este Trabajo de Fin de Grado

Equipo	Coste(Euros)
Acer Aspire V3-772g	800
Monitor LG	120
Escritorio Skarsta	219
Silla de oficina Jules	50

Tabla 7.3: Equipamiento

Coste total	1189 Euros
-------------	------------

Tabla 7.4: Coste del equipamiento

Finalmente, el coste total del Trabajo de Fin de Grado sumando el coste de las actividades llevadas a cabo y el equipamiento utilizado para dicha labor es de 6489 Euros.

Bibliografía

- [1] Sigrún Andradóttir. A global search method for discrete stochastic optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 6(2):513–530, 1996.
- [2] A. Atashpendar, B. Dorronsoro, G. Danoy, and P. Bouvry. A parallel cooperative coevolutionary smppo algorithm for multi-objective optimization. pages 713–720, 2016. cited By 0.
- [3] Ke-Lin Du and M.Ñ. S. Swamy. *Search and Optimization by Metaheuristics*. 2016.
- [4] J.A. Díaz, D.E. Luna, J.-F. Camacho-Vallejo, and M.-S. Casas-Ramírez. Grasp and hybrid grasp-tabu heuristics to solve a maximal covering location problem with customer preference ordering. *Expert Systems with Applications*, 82:67–76, 2017. cited By 0.
- [5] C.M. Fu, C. Jiang, G.S. Chen, and Q.M. Liu. An adaptive differential evolution algorithm with an aging leader and challengers mechanism. *Applied Soft Computing Journal*, 57:60–73, 2017. cited By 0.
- [6] M. Gerber and L. Bornn. Improving simulated annealing through derandomization. *Journal of Global Optimization*, 68(1):189–217, 2017. cited By 0.
- [7] M. Gerber and L. Bornn. Improving simulated annealing through derandomization. *Journal of Global Optimization*, 68(1):189–217, 2017. cited By 0.
- [8] E. Glorieux, B. Svensson, F. Danielsson, and B. Lennartson. Improved constructive cooperative coevolutionary differential evolution for large-scale optimisation. pages 1703–1710, 2016. cited By 0.
- [9] M. Hajebi, A. Hoorfar, and E. Bou-Daher. Inverse profiling of inhomogeneous buried cylinders with arbitrary cross sections using cma-es. pages 863–864, 2016. cited By 0.
- [10] K.H. Hajikolaie, G.H. Cheng, and G.G. Wang. Optimization on metamodeling-supported iterative decomposition. *Journal of Mechanical Design, Transactions of the ASME*, 138(2), 2016. cited By 0.

- [11] Hajira Jabeen, Zunera Jalil, and Abdul Rauf Baig. Opposition based initialization in particle swarm optimization (O-PSO). *Proceedings of the 11th annual conference companion on Genetic and evolutionary computation conference - GECCO '09*, page 2047, 2009.
- [12] Hajira Jabeen, Zunera Jalil, and Abdul Rauf Baig. Opposition based initialization in particle swarm optimization (O-PSO). *Proceedings of the 11th annual conference companion on Genetic and evolutionary computation conference - GECCO '09*, page 2047, 2009.
- [13] Voratas Kachitvichyanukul. GA/PSO/DE..Comparison of Three Evolutionary Algorithms: GA, PSO, and DE. *Industrial Engineering and Management Systems*, 11(3):215–223, 2012.
- [14] G. Karagiannis, B.A. Konomi, G. Lin, and F. Liang. Parallel and interacting stochastic approximation annealing algorithms for global optimisation. *Statistics and Computing*, 27(4):927–945, 2017. cited By 0.
- [15] K. Kawakami and Zhi Qi Meng. Improvement of Particle Swarm Optimization. *PIERS Online*, 5(2):261–264, 2009.
- [16] Mahamed G. H. Omran and Salah Al-Sharhan. Using opposition-based learning to improve the performance of particle swarm optimization. *2008 IEEE Swarm Intelligence Symposium*, (1):1–6, 2008.
- [17] Srinivas Pasupuleti and Roberto Battiti. The gregarious particle swarm optimizer (G-PSO). *Proceedings of the 8th annual conference on Genetic and evolutionary computation - GECCO '06*, 1(0):67, 2006.
- [18] W. L. Price. Global optimization by controlled random search. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 40(3):333–348, 1983.
- [19] Shahryar Rahnamayan, Hamid R. Tizhoosh, and Magdy M. Salama. Opposition-based differential evolution. *Studies in Computational Intelligence*, 143(1):155–171, 2008.
- [20] M.C. Robini, M. Ozon, C. Frindel, F. Yang, and Y. Zhu. Global diffusion tractography by simulated annealing. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, 64(3):649–660, 2017. cited By 0.
- [21] Eduardo Segredo, Ben Paechter, Carlos Segura, and Carlos I. González-Vila. On the comparison of initialisation strategies in differential evolution for large scale optimisation. *Optimization Letters*, pages 1–14, 2017.
- [22] Jun Sun, Wenbo Xu, and Bin Feng. A global search strategy of quantum-behaved particle swarm optimization. In *IEEE Conference on Cybernetics and Intelligent Systems, 2004.*, volume 1, pages 111–116 vol.1, Dec 2004.

- [23] El-Ghazali Talbi. *Metaheuristics*. Wiley, 1 edition, 2009.
- [24] M. Tian, X. Gao, and C. Dai. Differential evolution with improved individual-based parameter setting and selection strategy. *Applied Soft Computing Journal*, 56:286–297, 2017. cited By 0.
- [25] H R Tizhoosh. Opposition-Based Learning: A New Scheme for Machine Intelligence. *Computational Intelligence for Modelling, Control and Automation, 2005 and International Conference on Intelligent Agents, Web Technologies and Internet Commerce, International Conference on*, 1:695–701, 2005.
- [26] L.M. Zheng, S.X. Zhang, K.S. Tang, and S.Y. Zheng. Differential evolution powered by collective information. *Information Sciences*, 399:13–29, 2017. cited By 0.
- [27] Jianhong Zhou, Wei Fang, Xiaojun Wu, Jun Sun, and Shi Cheng. An Opposition-Based Learning Competitive Particle Swarm Optimizer. pages 515–521, 2016.