

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ Η/Υ ΚΑΙ
ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ



Μεταπτυχιακό Μάθημα
ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ

Άσκηση 3

Ομάδα

Σπύρου Ηρώ, 440
Τεριζή Χρυσούλα, 430

Ιανουάριος 2020

1 Εισαγωγή

Στην τρέχουσα εργασία μελετάμε τις συστάδες Lennard–Jones οι οποίες χρησιμοποιούνται συνήθως για να περιγράψουν την αλληλεπίδραση μεταξύ απλών μορίων ή ατόμων και έχουν χρησιμοποιηθεί ευρέως σε προηγούμενες μοριακές προσομοιώσεις τόσο για αλληλεπιδράσεις ρευστού–υγρού όσο και υγρού–άνθρακα. Η δυναμική ενέργεια v_{ij} ανάμεσα σε δύο άτομα i και j διάστασης 3, έστω $x_i = [x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}]^T$ και $x_j = [x_{j1}, x_{j2}, x_{j3}]^T$ μιας συστάδας δίνεται από τον ακόλουθο τύπο,

$$v_{ij} = \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6$$

όπου $\sigma = 1$ (equilibrium pair separation) είναι παράμετρος του δυναμικού και r_{ij} είναι η Ευκλείδεια απόσταση των ατόμων x_i και x_j και η οποία ισούται με,

$$r_{ij} = \|x_i - x_j\|_2$$

Στόχος της εργασίας είναι η εύρεση της βέλτιστης διάταξης των ατόμων στο χώρο αναζήτησης έτσι ώστε να βρεθεί εκείνη η δομή ατόμων που ελαχιστοποιεί τη δυναμική ενέργεια της συστάδας. Η δυναμική ενέργεια ολόκληρης της συστάδας N ατόμων δίνεται από τη συνάρτηση δυναμικού Lennard–Jones,

$$E_{LJ} = 4\varepsilon \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N v_{ij}$$

όπου $\varepsilon = 1$ (pair well depth) παράμετρος του δυναμικού. Η υπολογιστική πολυπλοκότητα του προβλήματος είναι NP–Hard όσο αυξάνεται το πλήθος των ατόμων στην συστάδα. Επομένως, η χρήση μεθόδων βελτιστοποίησης καθίστατε αναγκαία. Οι μέθοδοι βελτιστοποίησης οι οποίες μελετώνται είναι τρεις και αυτοί είναι οι εξής, γενετικοί αλγόριθμοι δυαδικής αναπαράστασης, γενετικοί αλγόριθμοι πραγματικής αναπαράστασης και η μέθοδος βελτιστοποίησης σμήνους σωματιδίων (Particle Swarm Optimization, PSO).

Η εργασία οργανώνεται σε 3 ενότητες. Αρχικά, στην Ενότητα 2 Μέθοδοι, όπου γίνεται μια σύντομη περιγραφή των τριών μεθόδων βελτιστοποίησης. Ακολουθεί η Ενότητα 3 Πειραματική αρχικοποίηση, όπου περιγράφεται ο τρόπος με τον οποίο έχουν αρχικοποιηθεί οι υπερ-παράμετροι των μεθόδων βελτιστοποίησης. Στην συνέχεια, βρίσκεται η Ενότητα 4 Αποτελέσματα στην οποία παρουσιάζονται και αναλύονται τα αποτελέσματα των πειραμάτων. Στο τέλος της αναφοράς παραθέτουμε τα εξής Παραρτήματα, Παράρτημα Α Στατιστικά, στο οποίο παραθέτουμε τα στατιστικά αποτελέσματα από κάθε μέθοδο βελτιστοποίησης σε πίνακες, Παράρτημα Β Box plots, στο οποίο απεικονίζονται τα box plots για κάθε μέθοδο βελτιστοποίησης, και τέλος, Παράρτημα C Εκτελέσιμα, στο οποίο περιγράφεται σύντομα η λειτουργία του κώδικα, τα εκτελέσιμα αρχεία καθώς επίσης και ο τρόπος εκτέλεσης του προγράμματος.

2 Μέθοδοι

Στην τρέχουσα ενότητα κάνουμε αναφορά για τον τρόπο λειτουργίας των τριών μεθόδων βελτιστοποίησης που μελετάμε, δηλαδή γενετικοί αλγόριθμοι δυαδικής αναπαράστασης, γενετικοί αλγόριθμοι πραγματικής αναπαράστασης και η μέθοδος βελτιστοποίησης σμήνους σωματιδίων.

2.1 Γενετικοί αλγόριθμοι

Η βασική ιδέα των γενετικών αλγορίθμων είναι η δημιουργία ενός πληθυσμού από άτομα α οι οποίοι μπορεί και προσαρμόζονται στις αλλαγές του περιβάλλοντος. Οι γενετικοί αλγόριθμοι ακολουθούν ένα κοινό σχήμα από διαδικασίες, οι οποίες είναι οι ακόλουθες:

1. Αρχικοποίηση πληθυσμού μεγέθους $N_{population}$
2. Επιλογή μελών $N_s = N_{population}$ του πληθυσμού που θα υποστούν τροποποίηση
3. Εφαρμογή διαδικασίας διασταύρωσης στα μέλη N_s που έχουν επιλεγεί και παραγωγή απογόνων

4. Εφαρμογή της διαδικασίας μετάλλαξης στους απογόνους N_s και στα μέλη που δεν επελέγησαν για κάποια τροποποίηση
5. Παραγωγή νέου πληθυσμού

Ακολουθώντας αυτό το γενικό σχήμα βημάτων μπορούν να δημιουργηθούν διάφορες παραλλαγές γενετικών αλγορίθμων αναπτύσσοντας διαφορετικές τεχνικές για την διαδικασία της αρχικοποίησης του πληθυσμού, της διαδικασίας της διασταύρωσης και της μετάλλαξης και της διαδικασίας παραγωγής του νέου πληθυσμού. Συγκεκριμένα, μελετάμε δυο μορφές αρχικοποίησης πληθυσμού, με δυαδική αναπαράσταση και με πραγματική αναπαράσταση. Ακόμη, μελετάμε τρεις διαφορετικούς τρόπους επιλογής μελών του πληθυσμού για παραγωγή απογόνων, την επιλογή ρουλέτας (roulette wheel) αναθέτοντας fitness στα μέλη του πληθυσμού συγκρίνοντας τα με τον χειρότερο του πληθυσμού, την επιλογή ρουλέτας αναθέτοντας fitness στα μέλη του πληθυσμού γραμμικά και τέλος την επιλογή τουρνουά (tournament selection).

Επιλογή ρουλέτας. Η βασική ιδέα της διαδικασίας της επιλογής είναι ότι επιλέγει μέλη από τον πληθυσμό τα οποία θα υποστούν τροποποίηση και θα παραχθούν έτσι νέοι απόγονοι. Σε κάθε μέλος του πληθυσμού ανατίθεται μια πιθανότητα επιλογής. Οι πιθανότητες επιλογής είναι ανάλογες με την ποιότητα του κάθε μέλους. Δηλαδή, σκοπός της διαδικασίας είναι να ανατέθει μεγάλη πιθανότητα επιλογής σε μέλη τα οποία έχουν μικρή συναρτησιακή τιμή και μικρή πιθανότητα επιλογής σε μέλη που έχουν μεγάλη συναρτησιακή τιμή. Υπάρχουν δυο τρόποι ανάθεσης πιθανότητας επιλογής, ο πρώτος είναι συγκρίνοντας με το χειρότερο μέλος του πληθυσμού και ο δεύτερος είναι αναθέτοντας γραμμικά.

Σύγκριση με το χειρότερο μέλος: Αρχικά υπολογίζουμε για κάθε μέλος του πληθυσμού την συναρτησιακή τιμή f_i , $i \in [1, N_{population}]$. Εντοπίζουμε το χειρότερο μέλος f_{worst} του πληθυσμού. Άρα, κάθε μέλος έχει τιμή fitness φ_i , $i \in [1, N_{population}]$ η οποία υπολογίζεται από την ακόλουθη συνάρτηση,

$$\varphi_i = f_{worst} - f_i$$

Γραμμικά: Αρχικά διατάσσει τα μέλη του πληθυσμού βάση συναρτησιακής τιμής, από το χειρότερο προς το καλύτερο. Επομένως, κάθε μέλος χαρακτηρίζεται από την θέση p_i (index) στην οποία βρίσκεται. Κάθε μέλος έχει τιμή fitness φ_i , $i \in [1, N_{population}]$ η οποία υπολογίζεται από την ακόλουθη συνάρτηση,

$$\varphi_i = 2 - s + 2(s - 1) \frac{p_i - 1}{N_{population} - 1}$$

όπου $s \in [1, 2]$ είναι παράμετρος επιλεκτικής πίεσης. Αν $s = 1$ τότε το fitness $\varphi_i = 1$ και είναι ίδιο για όλα τα μέλη. Αν $s = 2$ τότε το fitness είναι υψηλότερο για τα καλύτερα σημεία και χαμηλότερο για τα χειρότερα σημεία. Το fitness φ_i παίρνει τιμές στο διάστημα $\varphi_i \in [0, 2]$.

Επομένως, έχοντας αναθέσει τιμή fitness φ_i σε κάθε μέλος του πληθυσμού, η πιθανότητα επιλογής κάθε μέλους υπολογίζεται με τον ακόλουθο τύπο,

$$ps_i = \frac{\varphi_i}{\sum_{i=1}^{N_{population}} \varphi_i}$$

Έπειτα, με δειγματοληψία επιλέγονται τα σημεία που θα υποστούν τροποποίηση. Συγκεκριμένα, παράγεται ομοιόμορφα ένας τυχαίος αριθμός r από το διάστημα $r \in [0, 1]$.

Επιλογή τουρνουά. Αρχικά, επιλέγουμε $N_{tour} = \frac{N_{population}}{2}$ τυχαία μέλη από τον πληθυσμό μεγέθους $N_{population}$. Έπειτα, επιλέγουμε το καλύτερο μέλος μέσα από το σύνολο N_{tour} . Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται $N_s = N_{population}$ φορές.

Τέλος, υπάρχουν δυο τρόποι παραγωγής νέου πληθυσμού. Ο ένας είναι η πλήρης αντικατάσταση του πληθυσμού με τον νέο ο οποίος προέκυψε από την διαδικασία της μετάλλαξης και ο οποίος ευνοεί της αναζήτηση. Και ο δεύτερος τρόπος είναι η συγχώνευση και των δυο πληθυσμών, δηλαδή του αρχικού και αυτού που προέκυψε από την διαδικασία της μετάλλαξης, και έπειτα η επιλογή των $N_{population}$ καλύτερων μελών.

2.1.1 Δυαδική αναπαράσταση

Αρχικοποίηση πληθυσμού. Έστω ότι μια συστάδα αποτελείται από N άτομα, δηλαδή $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$. Κάθε άτομο x_i ορίζεται από τρεις πραγματικές συντεταγμένες, δηλαδή $x_i = [x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}]^T$, όπου $x_{ij} \in [-2.5, 2.5]$, $j \in [1, 3]$. Για την δυαδική αναπαράσταση αριθμών στο διάστημα $[-2.5, 2.5]$, απαιτείται η χρήση 13 *bits* για επίτευξη ακρίβειας 10^{-3} . Επομένως, μία συντεταγμένη x_{ij} αναπαρίσταται από $b = [b_1, b_2, \dots, b_{13}]$, όπου $b_i \in [0, 1]$. Τελικά, μία συστάδα θα έχει την ακόλουθη μορφή με δυαδική αναπαράσταση,

$$\{[x_{11}, x_{12}, x_{13}], [x_{21}, x_{22}, x_{23}], \dots, [x_{N1}, x_{N2}, x_{N3}]\},$$

όπου x_{ij} αναπαρίσταται από $b = [b_1, b_2, \dots, b_{13}]$.

Διασταύρωση. Έστω ότι από την διαδικασία επιλογής έχουν επιλεγεί N_s συστάδες ατόμων. Κάθε μία από αυτές τις συστάδες θα διασταυρωθεί με μία πιθανότητα $cp \in (0, 1]$ την οποία ορίζει ο χρήστης, εκείνες που επιλέγονται για διασταύρωση προστίθενται στο σύνολο S_c . Από το S_c παίρνουμε σε ζεύγη, είτε με την σειρά εμφάνισης, είτε τυχαία, τα μέλη του και τα διασταυρώνουμε. Από κάθε ζεύγος συστάδων φτιάχνονται δύο απόγονοι, οι οποίοι και αντικαθιστούν τις αρχικές συστάδες. Έστω για ένα ζεύγος (p_1, p_2) συστάδων με p_1 και p_2 να ισούται αντίστοιχα με,

$$\begin{aligned} p_1 &= \{[x_{11}^1, x_{12}^1, x_{13}^1], [x_{21}^1, x_{22}^1, x_{23}^1], \dots, [x_{N1}^1, x_{N2}^1, x_{N3}^1]\} \\ p_2 &= \{[x_{11}^2, x_{12}^2, x_{13}^2], [x_{21}^2, x_{22}^2, x_{23}^2], \dots, [x_{N1}^2, x_{N2}^2, x_{N3}^2]\}, \end{aligned}$$

όπου, όπως προαναφέρθηκε, κάθε x_{ij} αναπαρίσταται από $b = [b_1, b_2, \dots, b_{13}]$.

Στην δυαδική αναπαράσταση υπάρχουν δύο τρόποι να γίνει η διασταύρωση, με **k-Point Crossover** ή με **uniform Crossover**. Στην περίπτωση του k-Point Crossover επιλέγει ο χρήστης το πλήθος των k-Points, το οποίο καθορίζει σε πόσα σημεία μιας ακολουθίας *bits* θα γίνει η διασταύρωση. Στην περίπτωση του uniform Crossover κάθε *bit* της ακολουθίας είναι υποψήφιο με πιθανότητα 0.5 να είναι σημείο διασταύρωσης. Έστω ότι η αναπαράσταση των συστάδων αποτελείται από 10*bits* (για ευκολία αναπαράστασης),

$$\begin{aligned} p_1 &= \{0110001101\} \\ p_2 &= \{1001111001\} \end{aligned}$$

και έστω ότι έχουν επιλεγεί τρία σημεία διασταύρωσης, τα 2, 5 και 7. Τότε η διασταύρωση γίνεται ως εξής,

$$\begin{aligned} c_1 &= \{0101111001\} \\ c_2 &= \{1010001101\} \end{aligned}$$

Τα νέα διανύσματα c_1 και c_2 αντικαθιστούν αυτά των γονιών τους p_1 και p_2 στον πληθυσμό.

Μετάλλαξη. Έστω ότι από την διαδικασία της διασταύρωσης έχει παραχθεί ένα πληθυσμός C , ο οποίος χρησιμοποιείται ως είσοδος στην διαδικασία της μετάλλαξης. Η διαδικασία μετάλλαξης, σύμφωνα με την μεταβλητή $mp \in (0, 1)$ την τιμή της οποίας ορίζει ο χρήστης και καλείται ρυθμός μετάλλαξης. Έτσι, κάθε *bit* της ακολουθίας που αναπαριστά μία συστάδα ατόμων, μεταλλάσσεται σύμφωνα με τον ρυθμό μετάλλαξης. Τα *bit* που θα υποστούν μετάλλαξη αντιστρέφουν τις τιμές τους, δηλαδή εάν αρχικά η τιμή του ήταν 1 θα γίνει 0, και αντιστρόφως αν ήταν 0 θα γίνει 1.

2.1.2 Πραγματική αναπαράσταση

Αρχικοποίηση πληθυσμού. Έστω ότι μια συστάδα αποτελείται από N άτομα, δηλαδή $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$. Κάθε άτομο x_i ορίζεται από τρεις πραγματικές συντεταγμένες, δηλαδή $x_i = [x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}]^T$, όπου $x_{ij} \in [-2.5, 2.5]$, $j \in [1, 3]$. Επομένως, μια συστάδα θα έχει την ακόλουθη μορφή με πραγματική αναπαράσταση,

$$\{[x_{11}, x_{12}, x_{13}], [x_{21}, x_{22}, x_{23}], \dots, [x_{N1}, x_{N2}, x_{N3}]\}$$

Ένα παράδειγμα μιας συστάδας για $N = 4$ είναι,

$$\{[-0.51, 1.22, 0.47], [0.77, 0.96, 0.14], [0.9, -0.81, -2.38], [-0.01, -1.22, -0.77]\}$$

Διασταύρωση. Έστω ότι από την διαδικασία της επιλογής έχουν επιλεγεί N_s συστάδες. Φτιάχνουμε ζεύγη ανα δύο συστάδες από το σύνολο N_s είτε τυχαία είτε με βάση την σειρά επιλογής. Από κάθε ένα ζεύγος συστάδων παράγεται και ένας απόγονος. Έστω για ένα ζεύγος (p_1, p_2) συστάδων με p_1 και p_2 να ισούται αντίστοιχα με,

$$\begin{aligned} p_1 &= \{[p_{11}^1, p_{12}^1, p_{13}^1], [p_{21}^1, p_{22}^1, p_{23}^1], \dots, [x_{N1}^1, x_{N2}^1, x_{N3}^1]\} \\ p_2 &= \{[p_{11}^2, p_{12}^2, p_{13}^2], [p_{21}^2, p_{22}^2, p_{23}^2], \dots, [x_{N1}^2, x_{N2}^2, x_{N3}^2]\} \end{aligned}$$

Ο απόγονος o^{12} που θα προκύψει από αυτές τις δυο συστάδες (p_1, p_2) υπολογίζεται από τον ακόλουθο τύπο, ο οποίος αφορά μια συντεταγμένη ij , $i \in [1, N]$ και $j \in [1, 3]$ του απογόνου,

$$o_{ij}^{12} = r * p_{ij}^1 + (1 - r) * p_{ij}^2$$

όπου r είναι ένας τυχαίος ομοιόμορφος αριθμός από το διάστημα $r \in [-\delta, 1 + \delta]$, $\delta > 0$, ο οποίος βοηθάει στην αποφυγή της σταδιακής συρρίκνωσης της περιοχής εντός της οποίας παράγονται απόγονοι λόγω της συρρίκνωσης των τυχαίων συνιστωσών στο εσωτερικό του χώρου αναζήτησης.

Μετάλλαξη. Έστω ο πληθυσμός C , ο οποίος αποτελείται από τους απογόνους N_s από την διαδικασία της διασταύρωσης και τα μέλη που δεν επιλέχθηκαν από τον αρχικό πληθυσμό μεγέθους $N_{population}$ για να υποστούν κάποια τροποποίηση. Αν $c_i, i \in [1, N_{population}]$ είναι μια συστάδα του πληθυσμού C με N άτομα και με την ακόλουθη αναπαράσταση,

$$\{[c_{11}, c_{12}, c_{13}], [c_{21}, c_{22}, c_{23}], \dots, [c_{N1}, c_{N2}, c_{N3}]\}$$

τότε η διαδικασία της μετάλλαξης προσθέτει σε κάθε συνιστώσα του c_i μια τυχαία διαταραχή z , η οποία είναι διαφορετική για κάθε συνιστώσα. Δηλαδή, η νέα τιμή της κάθε συνιστώσας $c_{ij}, i \in [1, N]$ και $j \in [1, 3]$ προέρχεται από τον ακόλουθο τύπο,

$$c_{ij} = c_{ij} + z$$

όπου z προέρχεται από κανονική $Normal(0, \sigma^2)$, $\sigma > 0$ ή ομοιόμορφη $Uniform([- \alpha, \alpha])$, $\alpha > 0$ κατανομή αντίστοιχα.

2.2 Particle Swarm Optimization

Οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης νοημοσύνης σμηνών βασίζονται σε εξισώσεις κίνησης του σμήνους. Πρόκειται για στοχαστικές μέθοδους, οι οποίες αρχικοποιούν το σμήνος (πληθυσμό από συστάδες) μέσα σε έναν χώρο αναζήτησης και έπειτα με την χρήση μόνο των συναρτησιακών τιμών ανανεώνουν τις θέσεις τους μέσα στον χώρο. Επίσης, το κάθε μέλος του πληθυσμού (συστάδα) ανταλλάσει την πληροφορία του καλύτερου μέλους που έχει συναντήσει με τους γείτονες του. Το γενικό σχήμα της μεθόδου ακολουθεί τις εξής διαδικασίες:

1. Αρχικοποίηση πληθυσμού από συστάδες $s_i, i \in [1, N_{population}]$
2. Αρχικοποίηση γειτονιάς $N_i, i \in [1, N_{population}]$ για κάθε συστάδα
3. Αρχικοποίηση διανυσμάτων ταχύτητας $v_i, i \in [1, N_{population}]$ για κάθε συστάδα
4. Ενημέρωση διανυσμάτων ταχύτητας
5. Ενημέρωση θέσεων των συστάδων
6. Ενημέρωση καλύτερων θέσεων για κάθε συστάδα

Αρχικοποίηση πληθυσμού. Έστω ότι μια συστάδα αποτελείται από N άτομα, δηλαδή $\{s_1, s_2, \dots, s_N\}$. Κάθε άτομο s_i ορίζεται από τρεις πραγματικές συντεταγμένες, όπως ακριβώς συμβαίνει και στην περίπτωση του Γενετικού αλγορίθμου με πραγματική αναπαράσταση (Ενότητα 2.1.2). Επομένως, μια συστάδα έχει την ακόλουθη μορφή,

$$\{[s_{11}, s_{12}, s_{13}], [s_{21}, s_{22}, s_{23}], \dots, [s_{N1}, s_{N2}, s_{N3}]\}$$

όπου $s_{ij} \in [-2.5, 2.5]$, $i \in [1, N_{population}]$ και $j \in [1, 3]$.

Αρχικοποίηση γειτονίας. Κάθε μέλος του πληθυσμού (συστάδα) ανταλλάσει πληροφορία με τους γείτονες του. Αυτή η πληροφορία είναι η καλύτερη θέση (χαμηλότερη συναρτησιακή τιμή) που έχουν συναντήσει μέχρι εκείνη την στιγμή ένα συγκεκριμένο μέλος. Στην τρέχουσα εργασία μελετάμε δυο είδη ορισμού τοπολογίας γειτονίας, αυτά είναι η τοπολογία δακτύλιος ή αλλιώς Lbest και η καθολική τοπολογία Gbest.

Lbest. Έστω η συστάδα s_i με index θέσης ίσο με i . Έστω $p \in [1, \frac{N_{population}}{2}]$ η ακτίνα του δακτυλίου. Τότε τα indexes των γειτόνων της συστάδας s_i είναι $N_i = [i - p, i, i + p]$. Υπάρχει δηλαδή ανακύκλωση δεικτών.

Gbest. Έστω η συστάδα s_i με index θέσης ίσο με i . Η τοπολογία gbest συνδέει κάθε συστάδα με όλες τις υπόλοιπες συστάδες του πληθυσμού. Επομένως, τα indexes των γειτόνων της συστάδας s_i είναι $N_i = [1, N_{population}]$.

Αρχικοποίηση και ενημέρωση ταχύτητας. Κάθε μέλος του πληθυσμού έχει ένα διάνυσμα ταχύτητας $v_i, i \in [1, N_{population}]$, όπου κάθε συνιστώσα είναι και αυτή ένας πραγματικός αριθμός στο διάστημα $[-2.5, 2.5]$. Αρχικά, οι τιμές των ταχυτήτων αρχικοποιούνται ίσες με τις θέσεις των μελών του πληθυσμού. Δηλαδή, το διάνυσμα ταχύτητας την χρονική στιγμή v_i^t έχει την ακόλουθη μορφή,

$$\{[v_{11}^t, v_{12}^t, v_{13}^t], [v_{21}^t, v_{22}^t, v_{23}^t], \dots, [v_{N1}^t, v_{N2}^t, v_{N3}^t]\}$$

Την χρονική στιγμή $t + 1$, η ταχύτητα της συστάδας s_i σε κάθε συνιστώσα ενημερώνεται βάση της ακόλουθης συνάρτησης,

$$v_{ij}^{t+1} = X [v_{ij}^t + r_1 * c_1 * (p_{ij} - s_{ij}) + r_2 * c_2 * (p_{g,ij} - s_{ij})]$$

όπου $X = 0.729$ είναι συντελεστής περιορισμού έκρηξης του σμήνους, $r_1, r_2 \in [0, 1]$ τυχαίοι όροι, $c_1 = c_2 = 2.05$ γνωσιακή και κοινωνική παράμετρος αντίστοιχα, p_i είναι η καλύτερη θέση που έχει συναντήσει μέχρι στιγμής η συστάδα s_i και $p_{g,i}$ είναι η καλύτερη συστάδα ανάμεσα σε αυτές που έχει συναντήσει η συστάδα s_i αλλά και οι γείτονες του N_i .

Σε περίπτωση που κάποια συνιστώσα της ταχύτητας βγει εκτός ορίων $[-v_{max}, v_{max}]$ με $v_{max} = 0.1 * (2.5 - (-2.5)) = 0.5$, η συνιστώσα δεν αλλάζει και κρατάει την τιμή που είχε την χρονική στιγμή t .

Ενημέρωση θέσεων. Η κάθε συνιστώσα της θέσης s_i^{t+1} της συστάδας i την χρονική στιγμή $t + 1$ ενημερώνεται βάση του ακόλουθου τύπου,

$$s_{ij}^{t+1} = s_{ij}^t + v_{ij}^{t+1}$$

Σε περίπτωση που κάποια συνιστώσα βγει εκτός χώρου αναζήτησης $[-2.5, 2.5]$ τότε η συνιστώσα παίρνει την τιμή του συνόρου.

Ενημέρωση καλύτερων θέσεων. Στο τέλος κάθε χρονικής στιγμής είναι απαραίτητο να ενημερωθεί η καλύτερη θέση κάθε μέλους του σμήνους (συστάδας). Συγκεκριμένα, αν p_i^t είναι η καλύτερη θέση της συστάδας s_i^t την χρονική στιγμή t , τότε αν την χρονική στιγμή $t + 1$ η νέα θέση της συστάδας είναι s_i^{t+1} και αν ισχύει ότι $E_{LJ}(s_i^{t+1}) < E_{LJ}(s_i^t)$ τότε γίνεται ανανέωση της καλύτερης θέσης $p_i^{t+1} = s_i^{t+1}$ για την συστάδα i διαφορετικά παραμένει ως έχει $p_i^{t+1} = p_i^t$.

3 Πειραματική αρχικοποίηση

Στην τρέχουσα ενότητα περιγράφονται οι διάφορες εκδοχές της κάθε μεθόδου βελτιστοποίησης που μελετάμε. Αναφέρουμε για κάθε έναν από τους τρεις αλγορίθμους τις διαφορετικές αρχικοποιήσεις των υπερπαραμέτρων που μπορούμε να μελετήσουμε.

3.1 Γενετικοί αλγόριθμοι

Σημείωση: Για να είναι πιο ευανάγνωστος ο τρόπος με τον οποίο θα αναφερόμαστε σε κάθε εκδοχή έχουμε ορίσει κάποιες συντομεύσεις βάση των συμβόλων που έχουμε προσθέσει μέσα στις παρενθέσεις. Δηλαδή, Πραγματικούς αλγορίθμους με δυαδική αναπαράσταση όταν χρησιμοποιούμε την συντόμευση “ $TR - U - R - M$ ” σημαίνει ότι αναφερόμαστε στην εκδοχή με την μέθοδο επιλογής τουρνουά (TR), μέθοδο διασταύρωσης uniform (U), συνδυασμό μελών τυχαία (R) και παραγωγή νέου πληθυσμού με συγχώνευση (M). Στους γενετικούς αλγορίθμους με πραγματική αναπαράσταση όταν χρησιμοποιούμε την συντόμευση “ $TR - R - N$ ” σημαίνει ότι κάνουμε αναφορά στην εκδοχή με την μέθοδο επιλογής τουρνουά (TR), συνδυασμό μελών τυχαία (R) για την παραγωγή απογόνων και η διαταραχή που θα προκληθεί από την διαδικασία της μετάλλαξης ακολουθεί κανονική κατανομή (N).

3.1.1 Δυαδική αναπαράσταση

Για την μέθοδο του γενετικού αλγορίθμου με δυαδική αναπαράσταση πρέπει να προσδιορίσουμε 6 – 7 υπερπαραμέτρους. Συγκεκριμένα, εξετάζουμε:

- Μέθοδοι επιλογής μελών για διασταύρωση:
 1. Επιλογή ρουλέτας - Ανάθεση fitness βάση σύγκρισης με το χειρότερο μέλος του πληθυσμού (RW)
 2. Επιλογή ρουλέτας - Ανάθεση fitness γραμμικά (RL)
 3. Επιλογή τουρνουά (TR)
- Μέθοδοι διασταύρωσης:
 1. k-Point διασταύρωση (K)
 - (a) k-Points - Το πλήθος των σημείων διασταύρωσης. Δοκιμάζουμε τις τιμές 2, 5, και 10.
 2. uniform διασταύρωση (U)
- Ρυθμός διασταύρωσης cp : Δοκιμάζουμε τρεις τιμές στο διάστημα $cp \in (0, 1]$. Συγκεκριμένα $cp = 0.2$, $cp = 0.5$ και $cp = 0.7$.
- Μέθοδοι δημιουργίας ζευγών για παραγωγή απογόνων:
 1. Τυχαία (R)
 2. Βάση σειρά επιλογής (O)
- Ρυθμός μετάλλαξης mp : Δοκιμάζουμε τρεις τιμές στο διάστημα $mp \in (0, 1)$. Συγκεκριμένα $mp = 0.1$, $mp = 0.2$ και $mp = 0.5$.
- Παραγωγή νέου πληθυσμού:
 1. Συγχώνευση (M)
 2. Αντικατάσταση (RE)

Συνεπώς, για μέγεθος πληθυσμού (πλήθος συστάδων) $N_{population} = 10$ και πλήθος ατόμων ανά συστάδα $N = [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 15, 20]$ δοκιμάζουμε 15 διαφορετικές εκδοχές. Δεν δοκιμάστηκαν όλες οι εκδοχές για μεγάλες τιμές N και επομένως δεν παρουσιάζονται τα αποτελέσματα όλων, παρά μόνο των βέλτιστων για τις μεθόδους επιλογής μελών για διασταύρωση RW και TR .

3.1.2 Πραγματική αναπαράσταση

Για την μέθοδο γενετικού αλγορίθμου με πραγματική αναπαράσταση χρειάζεται να προσδιορίσουμε 5 υπερπαραμέτρους. Συγκεκριμένα, εξετάζουμε:

- Μέθοδοι επιλογής μελών για διασταύρωση:

1. Επιλογή ρουλέτας - Ανάθεση fitness βάση σύγκρισης με το χειρότερο μέλος του πληθυσμού (RW)
 2. Επιλογή ρουλέτας - Ανάθεση fitness γραμμικά (RL)
 3. Επιλογή τουρνουά (TR)
- Μέθοδοι δημιουργίας ζευγών για παραγωγή απογόνων:
 1. Τυχαία (R)
 2. Βάση σειρά επιλογής (O)
 - Υπερπαράμετρος διασταύρωσης delta: Δοκιμάζουμε μια τιμή και συγκεκριμένα $\delta = 0.5$. Άρα, το διάστημα για την παράμετρο r είναι $r \in [-0.5, 1.5]$.
 - Υπερπαράμετρος μετάλλαξης sigma ή alpha: Δοκιμάζουμε για μια τιμή σ και συγκεκριμένα $\sigma = 0.5$. Άρα, το διάστημα για την παράμετρο z όταν ακολουθεί κανονική κατανομή (N) είναι $z \in Normal(0, \sigma^2)$. Επίσης, δοκιμάζουμε για μια τιμή α και συγκεκριμένα $\alpha = 0.5$. Άρα, το διάστημα για την παράμετρο z όταν ακολουθεί ομοιόμορφη κατανομή (U) είναι $z \in Uniform([-0.5, 0.5])$.
 - Παραγωγή νέου πληθυσμού: Δοκιμάζουμε την τεχνική της συγχώνευσης του αρχικού πληθυσμού και αυτού που προκύπτει από την διαδικασία της μετάλλαξης και επιλέγουμε τις $N_{population}$ καλύτερες συστάδες. Δηλαδή, εκείνες με την χαμηλότερη συναρτησιακή τιμή. Με την συγκεκριμένη τεχνική ευνοούμε την αξιοποίηση της ευρεθείσας μέχρι στιγμής πληροφορίας.

Επομένως, για μέγεθος πληθυσμού (συνολικών συστάδων) $N_{population} = 10$ και για κάθε $N = [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 15, 20]$ όπου είναι το πλήθος ατόμων ανά συστάδα εξετάζουμε 12 διαφορετικές εκδοχές.

3.2 Particle Swarm Optimization

Για την μέθοδο βελτιστοποίησης νοημοσύνης σμηνών (PSO) χρειάζεται να αρχικοποιήσουμε μόνο μια υπερπαράμετρο, αυτή της τοπολογίας της γειτονίας κάθε συστάδας. Επιλέγουμε βάση εκφώνησης, την τοπολογία δακτυλίου (lbest) με ακτίνα $p = 1$ και την τοπολογία gbest. Επομένως, για μέγεθος πληθυσμού (συνολικών συστάδων) $N_{population} = 10$ και για κάθε $N = [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 15, 20]$ όπου είναι το πλήθος ατόμων ανά συστάδα εξετάζουμε δυο εκδοχές, η πρώτη με τοπολογία lbest και η δεύτερη με τοπολογία gbest.

4 Αποτελέσματα

Στην τρέχουσα ενότητα παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα που έχουν προκύψει από τα διάφορα πειράματα που έχουν δοκιμαστεί. Αρχικά μελετάμε τις διάφορες εκδοχές κάθε αλγορίθμου βελτιστοποίησης ξεχωριστά και παρουσιάζουμε ποια είναι η καλύτερη εκδοχή του βάσης ποιότητας λύσης ($e = 10^{-3}$) και βάση ταχύτητας εύρεσης και στην συνέχεια συγκρίνουμε τις καλύτερες μεθόδους συνολικά και από τους τρεις αλγορίθμους βελτιστοποίησης. Το συνολικό πλήθος συναρτησιακών υπολογισμών που είναι διαθέσιμο για κάθε εκδοχή του αλγορίθμου είναι ίσο με $T_{max} = N * 10^5$. Επομένως, χρησιμοποιώντας ως σύνολο πληθυσμού $N_{population} = 10$ αναλογεί να εξετάσουμε σε κάθε εκδοχή κάθε αλγορίθμου συνολικά $T = T_{max}/N_{population}$ επαναλήψεις. Συγκεκριμένα, μελετάμε την ποιότητα της λύσης έπειτα από την εκτέλεση των T επαναλήψεων. Λόγω της φύσης του προβλήματος το οποίο αποτελείται από πολλά τοπικά ελάχιστα, έχουμε εφαρμόσει την μέθοδο της επανεκκίνησης με το πέρας $T_{restart} = 10\% * T$ συνεχόμενων επαναλήψεων χωρίς ύπαρξη βελτίωσης.

4.1 Δυαδική αναπαράσταση

Αρχικά, μελετήθηκαν οι καλύτερες εκδοχές του αλγορίθμου για τις μεθόδους επιλογής Roulette Wheel και Tournament για διάφορα $N' \subset N$, όπου $N' = [4, 5, 6, 7, 8]$, κοιτάζοντας την ποιότητα της τελικής λύσης. Οι διαμορφώσεις περιλαμβάνουν συνδυασμούς με βάση το είδος της επιλογής

(RW, RL και TR), το είδος της διασταύρωσης (K, U), την τιμή της υπερπαραμέτρου που ορίζει το πλήθος των σημείων διασταύρωσης (k-Points) (χρησιμοποιείται όταν το είδος της επιλογής είναι K), τον ρυθμό διασταύρωσης (cp), το είδος δημιουργίας ζευγών για την διασταύρωση (R, O), τον ρυθμό μετάλλαξης (mp) και το είδος της παραγωγής νέου πληθυσμού (M, RE). Λόγω του ότι η προεπεξεργασία πραγματοποιήθηκε μόνο σε ένα υποσύνολο του συνόλου N , διότι δεν υπήρχε η δυνατότητα με την υπέρβαση του χρονικού περιορισμού να πραγματοποιηθούν οι δοκιμές για όλο το N , δεν παρουσιάζονται ακριβή αποτελέσματα και Wilcoxon test για αυτά. Τα αποτελέσματα αυτής της μελέτης αναδεικνύουν τους συνδυασμούς “ $RW - U - R - M$ ” και “ $TR - U - R - M$ ” με τιμές $cp = 0.5$ και $mp = 0.1$ ως βέλτιστους. Εν συνεχεία, μελετήθηκαν αυτοί οι αλγόριθμοι για τα διάφορα $N = [4, 5, \dots, 20]$ ως προς την ποιότητα της τελικής λύσης και τα στατιστικά τους αποτελέσματα παρουσιάζονται στους Πίνακες 1 και 2, από τους οποίους μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η μέση τιμή στην εκδοχή “ $TR - U - R - M$ ” είναι ελφρώς χαμηλότερη από ότι είναι για την εκδοχή “ $RW - U - R - M$ ”. Για πιο σαφή αποτελέσματα πραγματοποιούμε Wilcoxon test με έλεγχο σημαντικότητας 95% για τις δύο αυτές εκδοχές, τα αποτελέσματα του οποίου παρατίθενται στον Πίνακα 3. Για $N = [4, 5, 6, 7, 8, 9, 15]$ παρατηρούμε ότι το p_value υπερβαίνει το όριο σημαντικότητας του 0.05, το οποίο σημαίνει ότι δεν υπάρχει σημαντική διαφοροποίηση των δύο εκδοχών για τις τιμές αυτές, όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε και στην Εικόνα 1 ((a), (b), (c), (d), (e), (f), (h)). Όμως, για $N = [10, 20]$ τα p_values δεν υπερβαίνουν το όριο σημαντικότητας του 0.05, το οποίο σημαίνει υπάρχει σημαντική στατιστική διαφορά μεταξύ των δύο εκδοχών, όπως φαίνεται και στην Εικόνα 1 ((g), (i)).

Επιπλέον, παρατηρούμε ότι για $N_{population} = 10$ και καθώς αυξάνεται το πλήθος των ατόμων N ανά συστάδα η ποιότητα της λύσης αποκλίνει όλο και περισσότερο από την επιθυμητή ακρίβεια $e = 10^{-3}$ και για τις δυο εκδοχές. Αυτό οφείλεται στο μέγεθος του πληθυσμού που χρησιμοποιούμε, δηλαδή $N_{population} = 10$. Για $N_{population} = 100$, το οποίο εξετάσαμε στις αρχικές δοκιμές μας, η ποιότητα της λύσης ήταν αρκετά καλύτερη, όμως λόγω του περιορισμένου διαθέσιμου χρόνου επιλέξαμε να επικεντρωθούμε στα αποτελέσματα για μέγεθος πληθυσμού $N_{population} = 10$, τα οποία απαιτούσαν λιγότερο χρόνο για την διεξαγωγή των πειραμάτων.

Εκτός της ποιότητας λύσης που παράγουν οι διαφορετικές εκδοχές του αλγορίθμου, μελετάμε και τον χρόνο εκτέλεσης που απαιτούν. Με την έννοια “χρόνο εκτέλεσης” αναφερόμαστε στην επανάληψη στην οποία βρέθηκε η καλύτερη λύση μετά την ολοκλήρωση των T επαναλήψεων. Στην Εικόνα 2 απεικονίζονται οι γραφικές παραστάσεις των box plots για $N = [4, 5, \dots, 20]$ για τις εκδοχές που εξετάζουμε. Παρατηρώντας τα box plots για $N \leq 5$, δηλαδή Εικόνα 2 ((a), (b)), βλέπουμε ότι η εκδοχή “ $TR - U - R - M$ ” εντοπίζει γρηγορότερα την βέλτιστη λύση, ενώ για $N \geq 6$, δηλαδή Εικόνα 2 ((c)–(i)), βλέπουμε ότι σε κάποιες περιπτώσεις η εκδοχή “ $RW - U - R - M$ ” εντοπίζει ταχύτερα την βέλτιστη λύση και σε κάποιες άλλες δεν υπάρχει σημαντική διαφορά. Για την καλύτερη ερμηνεία των γραφημάτων διενεργείται Wilcoxon test με όριο σημαντικότητας 0.5. Τα αποτελέσματα αυτού παρουσιάζονται στον Πίνακα 3, από τον οποίο βλέπουμε ότι οι τιμές των p_values υπερβαίνουν τα όρια σημαντικότητας για κάθε τιμή του N . Από αυτό συμπεραίνουμε ότι δεν υπάρχει σημαντική στατιστική διαφορά μεταξύ των δύο εκδοχών του αλγορίθμου. Τέλος, δεν παρατηρήθηκε επανεκκίνηση του αλγορίθμου λόγω εύρεσης τοπικού ελαχίστου.

4.2 Πραγματική αναπαράσταση

Αρχικά, μελετάμε ποια είναι η καλύτερη εκδοχή του αλγορίθμου κοιτάζοντας την ποιότητα της τελικής λύσης για τα διάφορα $N = [4, 5, \dots, 20]$ και βάση του είδους επιλογής (RW, RL και TR), του είδους δημιουργίας απογόνων (R, O) και βάση του είδους της μετάλλαξης (N, U). Στην Εικόνα 3 απεικονίζονται οι γραφικές παραστάσεις των box plots για τις διάφορες τιμές της παραμέτρου N για κάθε έκδοχη που εξετάζουμε. Ρίχνοντας μια πρώτη ματιά στα αποτελέσματα μπορούμε να παρατηρήσουμε πως υπάρχουν κάποιες εκδοχές της μεθόδου στις οποίες η μέση τιμή είναι χαμηλότερη από κάποιες άλλες και πιο συγκεκριμένα όταν η διαταραχή στην διαδικασία της μετάλλαξης προέρχεται από την ομοιόμορφη κατανομή (U). Αυτό μπορούμε να το επιβεβαιώσουμε κοιτάζοντας τους σχετικούς Πίνακες 4, 5, 6, 7, 8 και 9 που περιέχουν τα στατιστικά αποτελέσματα και συγκεκριμένα το δεύτερο στοιχείο κάθε στήλης, το οποίο αντιστοιχεί στην χρήση ομοιόμορφης κατανομής (U) στην μετάλλαξη, ότι έχει χαμηλότερες τιμές σε σχέση με την πρώτη τιμή, η οποία αντιστοιχεί στην χρήση κανονικής κατανομής στην διαδικασία της μετάλλαξης. Επομένως, εφαρμόζουμε το Wilcoxon test με έλεγχο σημαντικότητας 95% για τις εξής 6 εκδοχές του αλγορίθμου, “ $RW - R - U$ ”, “ $RW - O - U$ ”, “ $RL - R - U$ ”,

“ $RL - O - U$ ”, “ $TR - R - U$ ” και “ $TR - O - U$ ”. Στους πίνακες 10, 11 παραθέτουμε τα αποτελέσματα των p_{values} για όλους τους συνδυασμούς αυτών των 6 εκδοχών. Παρατηρούμε ότι, οι τιμές p_{values} υπερβαίνουν την τιμή σημαντικότητας 0.05, επομένως, δεν υπάρχει κάποια σημαντική στατιστική διαφορά ανάμεσα σε αυτές τις 6 εκδοχές. Κοιτάζοντας ταυτόχρονα και την μέση τιμή από τους πίνακες με τα στατιστικά αποτελέσματα (Πίνακες 4, 5, 6, 7, 8 και 9) επιβεβαιώνεται ότι έχουν πολύ όμοιες τιμές. Κάνοντας μια πιο εκτεταμένη ανάλυση διαπιστώνουμε επίσης πως η σειρά κατάταξης επιφέρει λίγο πιο χαμηλές μέσες τιμές όταν η παραγωγή των απογόνων γίνεται με βάση την σειρά επιλογής/εμφάνισης (O). Ως προς τον τρόπο ανάθεσης fitness (διαδικασία επιλογής γονέων για παραγωγή απογόνων) δεν παρατηρήσαμε κάποια ιδιαίτερη διαφορά. Επομένως, καταλήγουμε στο συμπέρασμα πως οι εκδοχές που επιφέρουν καλύτερη ποιότητα στην τελική λύση είναι της μορφής “ $* - O - U$ ”.

Μια ακόμη παρατήρηση σχετικά με την ποιότητα της λύσης που προκύπτει είναι πως για πληθυσμό $N_{population} = 10$ και καθώς αυξάνεται το πλήθος των ατόμων N ανά συστάδα η ποιότητα της λύσης αποκλίνει αρκετά από το $e = 10^{-3}$ ανεξάρτητα από την εκδοχή που εξετάζουμε. Αυτό μπορούμε να το δικαιολογήσουμε εξαιτίας του μεγέθους του πληθυσμού που χρησιμοποιούμε, δηλαδή $N_{population} = 10$. Στις αρχικές δοκιμές μελετήσαμε και $N_{population} = 100$ όπου η ποιότητα της λύσης για τις μεγάλες τιμές του N ήταν πολύ καλύτερη σε σχέση με $N_{population} = 10$. Επιλέξαμε να επικεντρωθούμε όμως στα αποτελέσματα για το μικρότερο $N_{population} = 10$ λόγω του αρκετού χρόνου που απαιτούσαν για να ολοκληρωθούν τα πειράματα με το μεγαλύτερο μέγεθος πληθυσμού $N_{population} = 100$.

Συνεχίζοντας την μελέτη της καλύτερης εκδοχής του γενετικού αλγορίθμου με πραγματική αναπαράσταση επικεντρωνόμαστε τώρα στον χρόνο εύρεσης της καλύτερης λύσης. Με τον όρο χρόνο αναφερόμαστε στην επανάληψη όπου βρέθηκε η καλύτερη τελική λύση έπειτα από το πέρας των T επαναλήψεων. Στην Εικόνα 4 παρουσιάζονται οι γραφικές παραστάσεις box plots για τις διάφορες τιμές $N \in [4, 5, \dots, 20]$ για τις 6 καλύτερες εκδοχές που προέκυψαν μελετώντας την ποιότητα της λύσης αριθμικά. Με μια πρώτη ματιά παρατηρούμε πως για πλήθος ατόμων ανά συστάδα μικρότερο από δεκαπέντε, δηλαδή $N < 15$, οι επαναλήψεις δεν ξεπερνούν τις 50k. Σε αντίθεση με την περίπτωση για $N \geq 15$ όπου είναι απαραίτητες περισσότερες επαναλήψεις. Εφαρμόζοντας το Wilcoxon test με έλεγχο σημαντικότητας 95% ανάμεσα στις μεθόδους, προέκυψε πως όλες οι τιμές p_{values} ήταν μεγαλύτερες του ορίου 0.05, το οποίο μας επιβεβαιώνει το συμπέρασμα πως δεν υπάρχει κάποια σημαντική στατιστική διαφορά ανάμεσα στις 6 αυτές μεθόδους βάση του χρόνου εύρεσης της καλύτερης λύσης. Τέλος, σχετικά με την αναγκαιότητα επανεκκίνησης (restart) της μεθόδου λόγω εύρεσης κάποιου τοπικού ελαχίστου παρατηρήσαμε πως πραγματοποιούνται κατά μέσο όρο 7 επανεκκινήσεις.

4.3 Particle Swarm Optimization

Αρχικά, μελετάμε ποια είναι η καλύτερη εκδοχή του αλγορίθμου για τα διάφορα $N = [4, 5, \dots, 20]$ βάση της τοπολογίας γειτόνων και κοιτάζοντας την ποιότητα της τελικής λύσης. Συγκεκριμένα, στην Εικόνα 5 ((a)–(b)) παρατηρούμε ότι για μικρές τιμές ατόμων ανά συστάδα, δηλαδή για $N \in [4, 5]$, δεν είναι εμφανής η διαφοροποίηση των δυο τοπολογιών Lbest και Gbest. Όμως, ελέγχοντας την τιμή σημαντικότητας 95% που προκύπτει από το Wilcoxon test (Πίνακας 14), για $N = [4, 5]$ το p_{value} υπερβαίνει το όριο του 0.05 που σημαίνει πως δεν υπάρχει διαφοροποίηση των δυο τοπολογιών. Επίσης, το γεγονός ότι η μέση τιμή για την τοπολογία Lbest και Gbest και για $N = 4$ και $N = 5$ είναι $mean_4_lbest = 1.12e - 15 < 0.009 = mean_4_gbest$ και $mean_5_lbest = 4.15e - 07 < 0.11 = mean_5_gbest$ (Πίνακας 12, Πίνακας 13) αντίστοιχα, μας οδηγεί στο να εξάγουμε το συμπέρασμα πως οι τοπολογίες Lbest και Gbest είναι το ίδιο καλές. Συνεχίζοντας και με τις υπόλοιπες τιμές $N = [6, \dots, 20]$ (Εικόνα 5 (c)–(i)), παρατηρούμε ότι η τοπολογία Lbest εμφανίζει χαμηλότερη μέση τιμή σε σχέση με την τοπολογία Gbest και επομένως φέρει καλύτερα αποτελέσματα. Αυτό φυσικά μπορούμε να το διαπιστώσουμε και από τα στατιστικά στοιχεία τα οποία παραθέτουμε στους Πίνακες 12 και 13. Επίσης, κοιτάζοντας τα αποτελέσματα που μας δίνει το Wilcoxon test (Πίνακας 14), οι τιμές p_{value} για τα διάφορα N δεν υπερβαίνουν το όριο του 0.05 που σημαίνει ότι υπάρχει κάποια σημαντική στατιστική διαφοροποίηση των δυο τοπολογιών. Άρα, καταλήγουμε στο συμπέρασμα πως για την μέθοδο βελτιστοποίησης σμήνους σωματιδίων (PSO) και με τοπολογία Lbest οι τελικές λύσεις πλησιάζουν τις βέλτιστες λύσεις με καλύτερη ακρίβεια.

Μια ακόμη παρατήρηση σχετικά με την ποιότητα της λύσης που προκύπτει είναι πως για πληθυσμό $N_{population} = 10$ και καθώς αυξάνεται το πλήθος των ατόμων N ανά συστάδα η

ποιότητα της λύσης αποκλίνει αρκετά από το $e = 10^{-3}$. Συγκεκριμένα, για την τοπολογία Lbest και $N \leq 5$ η ποιότητα της τελικής λύσης ικανοποιεί την δοθείσα ακρίβεια $e = 10^{-3}$ έπειτα από το πέρας το επαναλήψεων T . Όμως, ανεξαρτήτως τοπολογίας και για $N \geq 6$ η ποιότητα της τελικής λύσης δεν πετυχαίνει την δοθείσα ακρίβεια. Κάποιες ενδεικτικές τιμές μέγιστης απόκλισης από την πραγματική λύση για N από 6 μέχρι 20 και για την τοπολογία Lbest είναι 3.56, 4.08, 6.51, 8.99, 14.09, 28.93, και 39.90 αντίστοιχα (Πίνακας 12). Αυτή η απόκλιση στην τελική λύση μπορεί να αιτιολογηθεί από το πλήθος $N_{population} = 10$, το οποίο μπορεί να θεωρηθεί μικρό σε σχέση με το N . Στις αρχικές δοκιμές εξετάσαμε και $N_{population} = 100$ για το οποίο οι ποιότητα της λύσης για τις μεγάλες τιμές του N ήταν πολύ καλύτερη σε σχέση με $N_{population} = 10$. Επιλέξαμε να επικεντρωθούμε όμως στα αποτελέσματα για το μικρότερο $N_{population} = 10$ λόγω του αρκετού χρόνου που απαιτούσαν για να ολοκληρωθούν τα πειράματα με το μεγαλύτερο μέγεθος πληθυσμού $N_{population} = 100$.

Συνεχίζοντας την μελέτη της καλύτερης εκδοχής του PSO αλγορίθμου επικεντρωνόμαστε τώρα στον χρόνο εύρεσης της καλύτερης λύσης. Με τον όρο χρόνο αναφερόμαστε στην επανάληψη όπου βρέθηκε η καλύτερη τελική λύση έπειτα από το πέρας των T επαναλήψεων. Συγκεκριμένα, για $N = 4$ και ανεξαρτήτως τοπολογίας, η καλύτερη λύση επιτυγχάνεται πριν την ολοκλήρωση των $T = 40k$ επαναλήψεων και κυμαίνεται σε τιμές μικρότερες των $3k$ επαναλήψεων για την τοπολογία Lbest και σε τιμές μικρότερες των $1k$ επαναλήψεων για την τοπολογία Gbest. Επίσης, από το Wilcoxon test (Πίνακας 14, Iterations) επιβεβαιώνεται ($3.11e - 05 < 0.05$) πως υπάρχει στατιστική διαφορά ανάμεσα ανάμεσα στις δυο τοπολογίες. Δηλαδή, η τοπολογία Gbest επιφέρει πιο γρήγορα την καλύτερη λύση για $N = 4$. Σε αντίθεση με τα υπόλοιπα $N > 4$, παρατηρούμε πως εξαντλείται όλο το ποσό T επαναλήψεων και τελικά καταλήγει η καλύτερη λύση να επιτυγχάνεται σε επαναλήψεις πολύ κοντά στην T επανάληψη. Αυτό το γεγονός μας οδηγεί στο συμπέρασμα πως η μέθοδος βελτιστοποίησης PSO βελτιώνει συνεχώς με το πέρας των επαναλήψεων την συνάρτησιακή της τιμή. Επίσης, από τα αποτελέσματα του Wilcoxon test (Πίνακας 14, Iterations) δεν παρατηρείται κάποια σημαντική στατιστική διαφορά ανάμεσα στις δυο τοπολογίες, δηλαδή δεν επιφέρει η τοπολογία Lbest ή Gbest πιο γρήγορα την καλύτερη λύση. Τέλος, δεν παρατηρήθηκε κάποια επανεκκίνηση του αλγορίθμου λόγο εύρεσης κάποιου τοπικού ελαχίστου είτε με χρήση τοπολογίας Lbest ή Gbest.

4.4 Σύγκριση καλύτερων εκδοχών

Σε αυτό το σημείο συγκρίνουμε τις καλύτερες εκδοχές από κάθε έναν αλγόριθμο βελτιστοποίησης για τις διάφορες τιμές N πλήθους ατόμων ανά συστάδα. Πιο αναλυτικά, οι καλύτερες εκδοχές που έχουμε καταλήξει για κάθε μέθοδο βελτιστοποίησης βάσει της ποιότητας της τελικής λύσης είναι οι εξής:

- Γενετικοί αλγόριθμοι με δυαδική αναπαράσταση: “ $TR - U - R - M$ ”
- Γενετικοί αλγόριθμοι με πραγματική αναπαράσταση: “ $* - O - U$ ”. Εφόσον διαπιστώσαμε πως δεν υπάρχει κάποια σημαντική στατιστική διαφορά ανάμεσα στον τρόπο επιλογής γονεών για παραγωγή απογόνων, επιλέγουμε την εκδοχή “ $RW - O - U$ ”.
- Particle Swarm Optimization: Τοπολογία Lbest

Αρχικά, μελετάμε ποιος από τους τρεις αυτούς αλγορίθμους βελτιστοποίησης φέρει καλύτερα αποτελέσματα ως προς την ποιότητα της τελικής λύσης. Στην Εικόνα 7 απεικονίζονται τα box plots για τις διάφορες τιμές N πλήθους ατόμων ανά συστάδα που μελετάμε. Παρατηρούμε προς η μέση τιμή του αλγορίθμου PSO με τοπολογία Lbest φέρει αρκετά πιο καλά αποτελέσματα σε σχέση με τους δυο γενετικούς αλγορίθμους. Ειδικά για την περίπτωση $N = 20$, ο PSO επιφέρει μια σχετικά καλή λύση με απόκλιση ενέργειας από την βέλτιστη γύρω στις 30 μονάδες, σε αντίθεση με τους γενετικούς αλγορίθμους που έχουν απόκλιση από την βέλτιστη λύση γύρω στις 50 μονάδες. Για να επιβεβαιώσουμε αυτή μας την παρατήρηση εφαρμόζουμε το Wilcoxon test με τιμή σημαντικότητας 95%, τα αποτελέσματα των οποίων υπάρχουν στους Πίνακες 16 και 17. Συγκεκριμένα, οι σύγκριση του PSO με τις μεθόδους “ $TR - U - R - M$ ” και “ $RW - O - U$ ” δίνει σαν αποτέλεσμα τιμές p_{values} αρκετά μικρότερες από την τιμή 0.05 για όλες τις τιμές $N = [4, 5, \dots, 20]$ που μελετάμε. Επομένως, υπάρχει σημαντική στατιστική διαφορά ανάμεσα στην PSO με τοπολογία Lbest με τους δυο γενετικούς αλγορίθμους. Έπειτα, συγκρίνοντας τους δυο γενετικούς αλγορίθμους, “ $TR - U - R - M$ ” και “ $RW - O - U$ ” και κοιτάζοντας αρχικά τις γραφικές παραστάσεις με τα box plots παρατηρούμε πως ίσως ο

γενετικός αλγόριθμος με δυαδική αναπαράσταση είναι καλύτερος από αυτόν με πραγματική αναπαράσταση. Για να επιβεβαιώσουμε αυτήν μας την σημείωση κοιτάζουμε στα αποτελέσματα του Wilcoxon test με τιμή σημαντικότητας 95% (Πίνακας 15). Η σημείωση μας επιβεβαιώνεται καθώς για $N \leq 10$, οι τιμές p_{values} είναι μικρότερες από το όριο 0.05 και επομένως υπάρχει σημαντική στατιστική διαφορά ανάμεσα στην δυαδική και πραγματική αναπαράσταση, ενώ για $N = 15$ και $N = 20$ οι δυο μορφές αναπαράστασης δεν διαφέρουν ως προς τα αποτελέσματα που φέρουν. Άρα, συνολικά μπορούμε να βγάλουμε το συμπέρασμα πως η κατάταξη των αλγορίθμων από τον καλύτερο προς τον χειρότερο είναι η εξής:

1. Particle Swarm Optimization με τοπολογία Lbest
2. Γενετικός αλγόριθμος με δυαδική αναπαράσταση εφαρμόζοντας tournament selection, ομοιόμορφη διασταύρωση, συνδυασμό συστάδων τυχαία για παραγωγή νέων συστάδων και συγχώνευση του παλιού και του νέου πληθυσμού.
3. Γενετικός αλγόριθμος με πραγματική αναπαράσταση εφαρμόζοντας οποιοδήποτε μέθοδο επιλογής (RW, RL, TR), συνδυασμό ζευγών συστάδων βάση σειρά επιλογής και ομοιόμορφη διαταραχή στην διαδικασία της μετάλλαξης.

Συνεχίζουμε την μελέτη των τριων καλύτερων αλγορίθμων βάση του χρόνου εύρεσης (id επανάληψης) της καλύτερης λύσης. Παρατηρώντας την Εικόνα 8 παρατηρούμε πως η μέθοδος βελτιστοποίησης “RW–O–U” χρειάζεται πιο λίγες επαναλήψεις για να εντοπίσει την καλύτερη λύσης της. Ακολουθεί η μέθοδος “TR–U–R–M” και τέλος η PSO. Κοιτάζοντας ταυτόχρονα και τα αποτελέσματα από το Wilcoxon test με τιμή σημαντικότητας 95%, Πίνακες 15, 16 και 17 για όλες τις τιμές $N \in [4, 5, \dots, 20]$, οι τιμές p_{values} δεν υπερβαίνουν το όριο 0.05. Επομένως, μπορούμε να βγάλουμε το συμπέρασμα πως υπάρχει σημαντική στατιστική διαφορά ανάμεσα στις τρεις μεθόδους ως προς τον χρόνο εύρεσης της καλύτερης τους λύσης. Άρα, παρόλο που η μέθοδος PSO με τοπολογία Lbest βρίσκει λύση πιο κοντά στην βέλτιστη λύση χρειάζεται όλους τους συναρτησιακούς υπολογισμούς που τις αναθέτουμε.

A Στατιστικά

Στο τρέχων Παράρτημα, παραθέτουμε συγκεντρωτικά όλα τα στατιστικά στοιχεία σε πίνακες που έχουμε υπολογίσει για τις διάφορες εκδοχές των μεθόδων.

A.1 Γενετικοί αλγόριθμοι με δυαδική αναπαράσταση

Table 1: Στατιστικά στοιχεία για την ποιότητα της λύσης και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων ανά συστάδα για την εκδοχή “ $RW - R - U - M$ ”.

N	Ελάχιστο	Μέγιστο	Μέση τιμή	Διακύμανση	Τυπική απόκλιση
4	0.0012	0.9238	0.0826	0.0529	0.23
5	0.0629	0.9925	0.3992	0.0642	0.2535
6	0.7483	1.9943	1.4652	0.1197	0.346
7	1.7621	4.715	3.3467	0.379	0.6157
8	3.6436	6.6222	5.0123	0.5942	0.7708
9	5.938	9.959	8.0681	0.6483	0.8052
10	9.5772	12.8354	11.2649	0.7323	0.8558
15	26.223	32.5436	30.1354	1.5173	1.2318
20	47.9533	52.3299	50.5346	1.6326	1.2777

Table 2: Στατιστικά στοιχεία για την ποιότητα της λύσης και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων ανά συστάδα για την εκδοχή “ $TR - R - U - M$ ”.

N	Ελάχιστο	Μέγιστο	Μέση τιμή	Διακύμανση	Τυπική απόκλιση
4	0.0011	0.2751	0.0345	0.0047	0.0683
5	0.0588	1.0053	0.3858	0.0989	0.3145
6	0.6624	2.0754	1.3814	0.1275	0.3571
7	2.0515	4.5449	3.1688	0.4752	0.6893
8	3.0101	6.5203	4.7276	0.7908	0.8893
9	6.3105	10.716	7.8602	0.7423	0.8616
10	8.3044	13.2493	10.7406	1.3147	1.1466
15	25.9623	31.9872	30.0066	1.519	1.2325
20	45.705	52.5347	49.7853	2.2528	1.5009

Table 3: Αποτελέσματα Wilcoxon test για διάφορες τιμές ατόμων N ανά συστάδα. Στις στήλες Solution_Quality και Iterations παρατίθενται οι τιμές p-value που προκύπτουν από τον έλεγχο ανάμεσα στους δυο τρόπους επιλογής, Roulette Wheel και Tournament με βάση την ποιότητα της λύσης και το πόσο γρήγορα προήλθε η καλύτερη λύση (id επανάληψης) αντίστοιχα.

N	Solution_Quality	Iterations
4	0.9426	0.9426
5	0.813	0.4908
6	0.3493	0.2712
7	0.4048	0.7189
8	0.1589	0.9426
9	0.3086	0.6884
10	0.0256	0.7499
15	0.6733	0.959
20	0.023	0.4653

A.2 Γενετικοί αλγόριθμοι με πραγματική αναπαράσταση

Table 4: Στατιστικά στοιχεία για την ποιότητα της λύσης και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων ανά συστάδα πρώτα για την εκδοχή “ $RW - R - N$ ” και έπειτα για “ $RW - R - U$ ”.

N	Ελάχιστο	Μέγιστο	Μέση τιμή	Διακύμανση	Τυπική απόκλιση
4	0.07, 0.02	0.37, 0.20	0.20, 0.12	0.00, 0.00	0.07, 0.04
5	0.69, 0.35	1.74, 1.07	1.10, 0.72	0.06, 0.03	0.25, 0.17
6	2.23, 1.35	3.27, 2.65	2.76, 1.96	0.07, 0.08	0.28, 0.28
7	3.41, 3.05	5.67, 4.39	4.81, 3.80	0.31, 0.10	0.56, 0.33
8	5.37, 2.56	7.29, 5.80	6.61, 5.14	0.23, 0.50	0.48, 0.70
9	9.46, 8.16	12.58, 10.96	11.30, 9.39	0.48, 0.46	0.69, 0.68
10	12.43, 10.66	15.52, 14.37	14.43, 12.40	0.74, 0.62	0.86, 0.79
15	30.04, 30.24	35.20, 31.77	33.45, 30.95	2.33, 0.27	1.52, 0.52
20	52.11, 47.07	55.74, 50.80	54.36, 49.66	0.94, 1.26	0.97, 1.12

Table 5: Στατιστικά στοιχεία για την ποιότητα της λύσης και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων ανά συστάδα πρώτα για την εκδοχή “ $RW - O - N$ ” και έπειτα για “ $RW - O - U$ ”.

N	Ελάχιστο	Μέγιστο	Μέση τιμή	Διακύμανση	Τυπική απόκλιση
4	0.10, 0.03	0.36, 0.16	0.22, 0.10	0.00, 0.00	0.06, 0.03
5	0.45, 0.36	1.42, 0.94	1.07, 0.73	0.05, 0.01	0.23, 0.12
6	1.80, 1.49	3.32, 2.55	2.80, 1.99	0.11, 0.06	0.34, 0.26
7	4.17, 3.05	5.54, 4.50	4.87, 3.79	0.13, 0.13	0.36, 0.36
8	5.12, 4.26	7.39, 5.93	6.59, 5.07	0.29, 0.18	0.54, 0.43
9	9.73, 8.24	12.45, 11.16	11.37, 9.59	0.49, 0.52	0.70, 0.72
10	12.86, 10.65	15.57, 13.61	14.45, 12.31	0.42, 0.43	0.65, 0.65
15	30.14, 29.44	34.94, 31.27	33.45, 30.50	2.18, 0.45	1.47, 0.67
20	51.24, 46.01	56.41, 51.73	54.15, 50.29	2.02, 1.87	1.42, 1.36

Table 6: Στατιστικά στοιχεία για την ποιότητα της λύσης και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων ανά συστάδα πρώτα για την εκδοχή “ $RL - R - N$ ” και έπειτα για “ $RL - R - U$ ”.

N	Ελάχιστο	Μέγιστο	Μέση τιμή	Διακύμανση	Τυπική απόκλιση
4	0.06, 0.05	0.40, 0.16	0.25, 0.11	0.00, 0.00	0.07, 0.02
5	0.49, 0.43	1.60, 1.07	1.09, 0.75	0.07, 0.02	0.26, 0.16
6	1.44, 1.26	3.26, 2.42	2.80, 2.00	0.17, 0.09	0.41, 0.30
7	3.97, 2.45	5.87, 4.32	5.03, 3.74	0.24, 0.16	0.49, 0.40
8	5.31, 4.61	7.46, 5.88	6.37, 5.32	0.26, 0.09	0.51, 0.31
9	9.63, 7.65	12.32, 10.75	11.33, 9.51	0.43, 0.45	0.66, 0.67
10	12.57, 10.34	15.54, 13.96	14.29, 12.18	0.78, 0.96	0.88, 0.98
15	32.94, 29.45	34.38, 31.38	33.76, 30.66	0.25, 0.37	0.50, 0.61
20	52.30, 48.32	55.48, 51.66	54.26, 50.18	0.84, 0.75	0.91, 0.87

Table 7: Στατιστικά στοιχεία για την ποιότητα της λύσης και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων ανά συστάδα πρώτα για την εκδοχή “ $RL - O - N$ ” και έπειτα για “ $RL - O - U$ ”.

N	Ελάχιστο	Μέγιστο	Μέση τιμή	Διακύμανση	Τυπική απόκλιση
4	0.11, 0.05	0.40, 0.18	0.22, 0.10	0.00, 0.00	0.06, 0.03
5	0.40, 0.29	1.35, 1.05	1.12, 0.71	0.04, 0.03	0.21, 0.19
6	2.02, 1.49	3.54, 2.62	2.80, 1.99	0.09, 0.07	0.31, 0.27
7	4.15, 3.11	5.58, 4.35	4.98, 3.75	0.14, 0.11	0.37, 0.34
8	5.14, 4.35	7.38, 5.68	6.48, 5.30	0.30, 0.13	0.54, 0.37
9	9.50, 8.42	12.41, 10.57	11.26, 9.39	0.53, 0.29	0.73, 0.54
10	13.14, 10.96	15.56, 13.62	14.63, 12.32	0.36, 0.45	0.60, 0.67
15	31.77, 28.03	35.17, 31.55	33.53, 30.36	1.24, 1.56	1.11, 1.24
20	51.86, 46.54	56.42, 50.97	54.79, 49.50	1.77, 2.18	1.33, 1.47

Table 8: Στατιστικά στοιχεία για την ποιότητα της λύσης και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων ανά συστάδα πρώτα για την εκδοχή “ $TR - R - N$ ” και έπειτα για “ $TR - R - U$ ”.

N	Ελάχιστο	Μέγιστο	Μέση τιμή	Διακύμανση	Τυπική απόκλιση
4	0.11, 0.03	0.49, 0.22	0.25, 0.12	0.00, 0.00	0.08, 0.04
5	0.61, 0.46	1.66, 0.97	1.10, 0.72	0.07, 0.02	0.27, 0.14
6	1.63, 0.51	3.64, 4.20	2.73, 2.02	0.15, 0.29	0.39, 0.53
7	3.87, 3.44	5.63, 4.78	5.04, 3.86	0.26, 0.10	0.51, 0.32
8	6.56, 4.78	7.45, 5.79	7.02, 5.33	0.07, 0.11	0.27, 0.34
9	9.77, 7.37	12.56, 11.10	11.38, 9.66	0.53, 0.70	0.73, 0.83
10	13.47, 10.67	15.63, 12.86	14.62, 12.01	0.47, 0.29	0.68, 0.54
15	32.42, 26.95	35.20, 31.88	33.75, 30.03	1.30, 4.81	1.14, 2.19
20	51.85, 47.01	55.42, 52.66	53.85, 50.10	1.55, 3.97	1.24, 1.99

Table 9: Στατιστικά στοιχεία για την ποιότητα της λύσης και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων ανά συστάδα πρώτα για την εκδοχή “ $TR - O - N$ ” και έπειτα για “ $TR - O - U$ ”.

N	Ελάχιστο	Μέγιστο	Μέση τιμή	Διακύμανση	Τυπική απόκλιση
4	0.11, 0.04	0.35, 0.20	0.25, 0.11	0.00, 0.00	0.06, 0.04
5	0.52, 0.28	1.57, 0.93	1.20, 0.71	0.05, 0.02	0.24, 0.16
6	1.98, 1.18	3.35, 2.61	2.76, 1.99	0.12, 0.10	0.34, 0.32
7	4.41, 3.16	5.85, 4.24	4.97, 3.70	0.15, 0.11	0.39, 0.33
8	5.67, 4.57	7.26, 6.13	6.46, 5.42	0.30, 0.15	0.55, 0.39
9	10.22, 6.65	12.28, 11.43	11.45, 9.49	0.19, 1.04	0.43, 1.02
10	13.16, 11.55	15.36, 13.83	14.43, 12.81	0.51, 0.47	0.72, 0.64
15	32.46, 30.70	34.98, 31.66	33.96, 31.27	1.17, 0.17	1.08, 0.41
20	51.93, 48.98	55.18, 50.83	53.42, 49.77	1.69, 0.37	1.30, 0.61

Table 10: Αποτελέσματα Wilcoxon test για διάφορες τιμές ατόμων N ανά συστάδα βάση την ποιότητα της τελικής λύσης.

	RW-R-U	RW-O-U	RL-R-U	RL-O-U	TR-R-U	TR-O-U
RW-R-U	—	0.05	0.08	0.01	0.53	0.20
RW-O-U	—		0.17	0.97	0.24	0.22
RL-R-U	—			0.28	0.68	0.73
RL-O-U	—				0.21	0.33
TR-R-U	—					0.87

(a) $N = 4$

	RW-R-U	RW-O-U	RL-R-U	RL-O-U	TR-R-U	TR-O-U
RW-R-U	—	0.87	0.67	0.82	0.65	0.70
RW-O-U	—		0.86	0.59	0.57	0.68
RL-R-U	—			0.37	0.19	0.49
RL-O-U	—				0.86	0.90
TR-R-U	—					0.94

(b) $N = 5$

	RW-R-U	RW-O-U	RL-R-U	RL-O-U	TR-R-U	TR-O-U
RW-R-U	—	0.65	0.47	0.40	0.42	0.76
RW-O-U	—		0.76	0.92	0.87	0.99
RL-R-U	—			0.55	0.68	0.87
RL-O-U	—				0.95	0.89
TR-R-U	—					0.84

(c) $N = 6$

	RW-R-U	RW-O-U	RL-R-U	RL-O-U	TR-R-U	TR-O-U
RW-R-U	—	0.86	0.47	0.64	0.63	1.0
RW-O-U	—		0.97	0.64	0.69	0.93
RL-R-U	—			0.95	0.69	1.0
RL-O-U	—				0.75	0.81
TR-R-U	—					0.27

(d) $N = 7$

	RW-R-U	RW-O-U	RL-R-U	RL-O-U	TR-R-U	TR-O-U
RW-R-U	—	0.43	0.72	0.21	0.32	0.12
RW-O-U	—		0.50	0.12	0.12	0.03
RL-R-U	—			0.37	0.88	0.67
RL-O-U	—				1.0	0.48
TR-R-U	—					0.48

(e) $N = 8$

	RW-R-U	RW-O-U	RL-R-U	RL-O-U	TR-R-U	TR-O-U
RW-R-U	—	0.22	0.17	0.81	0.19	0.46
RW-O-U	—		0.64	0.28	0.74	0.46
RL-R-U	—			0.38	0.28	0.92
RL-O-U	—				0.14	0.86
TR-R-U	—					0.39

(f) $N = 9$

	RW-R-U	RW-O-U	RL-R-U	RL-O-U	TR-R-U	TR-O-U
RW-R-U	—	0.79	0.31	0.75	0.11	0.43
RW-O-U	—		0.44	0.98	0.03	0.11
RL-R-U	—			0.56	0.02	0.48
RL-O-U	—				0.00	0.81
TR-R-U	—					0.00

(g) $N = 10$

Table 11: (Συνέχεια Table 10) Αποτελέσματα Wilcoxon test για διάφορες τιμές ατόμων N ανά συστάδα βάσει την ποιότητα της τελικής λύσης.

	RW-R-U	RW-O-U	RL-R-U	RL-O-U	TR-R-U	TR-O-U
RW-R-U	—	0.12	0.86	0.61	0.46	0.34
RW-O-U	—		0.86	0.61	0.75	0.02
RL-R-U	—			0.31	0.75	0.17
RL-O-U	—				0.75	0.17
TR-R-U	—					0.34

(a) $N = 15$

	RW-R-U	RW-O-U	RL-R-U	RL-O-U	TR-R-U	TR-O-U
RW-R-U	—	0.21	0.24	0.76	0.17	0.59
RW-O-U	—		0.50	0.24	0.85	0.37
RL-R-U	—			0.24	0.44	0.59
RL-O-U	—				0.17	0.59
TR-R-U	—					0.59

(b) $N = 20$

A.3 Particle Swarm Optimization

Table 12: Στατιστικά στοιχεία για την ποιότητα της λύσης και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων ανά συστάδα και με τοπολογία Lbest.

N	Ελάχιστο	Μέγιστο	Μέση τιμή	Διακύμανση	Τυπική απόκλιση
4	8.88e-16	5.32e-15	1.12e-15	6.80e-31	8.24e-16
5	4.15e-07	4.15e-07	4.15e-07	1.87e-30	1.37e-15
6	0.001	3.56	0.51	0.32	0.56
7	0.001	4.08	0.79	0.55	0.74
8	0.001	6.51	1.55	2.92	1.71
9	0.001	8.99	2.48	4.99	2.23
10	0.001	14.09	3.79	8.97	2.99
15	5.38	28.93	14.27	26.80	5.17
20	14.00	39.90	26.73	49.78	7.05

Table 13: Στατιστικά στοιχεία για την ποιότητα της λύσης και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων ανά συστάδα και με τοπολογία Gbest.

N	Ελάχιστο	Μέγιστο	Μέση τιμή	Διακύμανση	Τυπική απόκλιση
4	8.88e-16	0.31	0.009	0.002	0.05
5	4.15e-07	2.12	0.11	0.17	0.42
6	0.001	3.60	0.91	1.12	1.06
7	0.001	8.41	2.56	4.16	2.04
8	0.001	7.22	2.96	3.23	1.79
9	0.91	13.17	6.04	11.65	3.41
10	2.20	13.78	7.29	11.39	3.37
15	14.12	31.97	22.77	17.63	4.19
20	26.69	49.46	38.40	43.69	6.61

Table 14: Αποτελέσματα Wilcoxon test για διάφορες τιμές ατόμων N ανά συστάδα. Στις στήλες Solution_Quality και Iterations παρατίθενται οι τιμές p_value που προκύπτουν από τον έλεγχο ανάμεσα των δυο τοπολογιών, Lbest και Gbest βάση της ποιότητας της λύσης και βάση το πόσο γρήγορα προήλθε η καλύτερη λύση (id επανάληψης) αντίστοιχα.

N	Solution_Quality	Iterations
4	0.0879	3.1123e-05
5	0.0670	0.1681
6	0.0238	0.1305
7	0.0003	0.4108
8	0.0064	0.3247
9	0.0001	0.5715
10	0.0003	0.2317
15	8.4660e-06	0.0123
20	0.0007	0.0005

A.4 Σύγκριση καλύτερων μεθόδων (“ $TR - U - R - M$ ”, “ $RW - O - U$ ” και PSO με Lbest)

Table 15: Αποτελέσματα Wilcoxon test για διάφορες τιμές ατόμων N ανά συστάδα. Στις στήλες Solution_Quality και Iterations παρατίθενται οι τιμές p_value που προκύπτουν από τον έλεγχο ανάμεσα σε “ $TR - U - R - M$ ” και “ $RW - O - U$ ”.

N	Solution_Quality	Iterations
4	0.0005	5.7924e-05
5	0.0001	0.0009
6	2.8785e-06	1.4935e-05
7	0.0010	0.0003
8	0.0162	0.0027
9	1.7343e-06	0.0471
10	0.0001	0.0214
15	0.1762	0.3980
20	0.3317	0.0051

Table 16: Αποτελέσματα Wilcoxon test για διάφορες τιμές ατόμων N ανά συστάδα. Στις στήλες Solution_Quality και Iterations παρατίθενται οι τιμές p_value που προκύπτουν από τον έλεγχο ανάμεσα σε “ $TR - U - R - M$ ” και PSO.

N	Solution_Quality	Iterations
4	1.7343e-06	1.7343e-06
5	1.7343e-06	1.7343e-06
6	3.1123e-05	1.7343e-06
7	2.1266e-06	0.5716
8	4.2856e-06	0.0858
9	2.1266e-06	0.0002
10	2.8785e-06	3.1123e-05
15	1.7343e-06	1.7343e-06
20	5.9569e-05	5.9569e-05

Table 17: Αποτελέσματα Wilcoxon test για διάφορες τιμές ατόμων N ανά συστάδα. Στις στήλες Solution_Quality και Iterations παρατίθενται οι τιμές p_value που προκύπτουν από τον έλεγχο ανάμεσα σε “ $RW - O - U$ ” και PSO.

N	Solution_Quality	Iterations
4	1.7343e-06	2.8785e-06
5	1.7343e-06	1.7343e-06
6	2.8434e-05	1.7343e-06
7	1.9209e-06	0.0131
8	0.0004	0.0130
9	1.7343e-06	2.5967e-05
10	1.5705e-05	1.2290e-05
15	0.0179	0.0179
20	8.8574e-05	8.8574e-05

B Box plots

Στο τρέχων Παράρτημα, παραθέτουμε συγκεντρωτικά όλες τις γραφικές παραστάσεις (box plots) που έχουμε κατασκευάσει για τις διάφορες εκδοχές των μεθόδων.

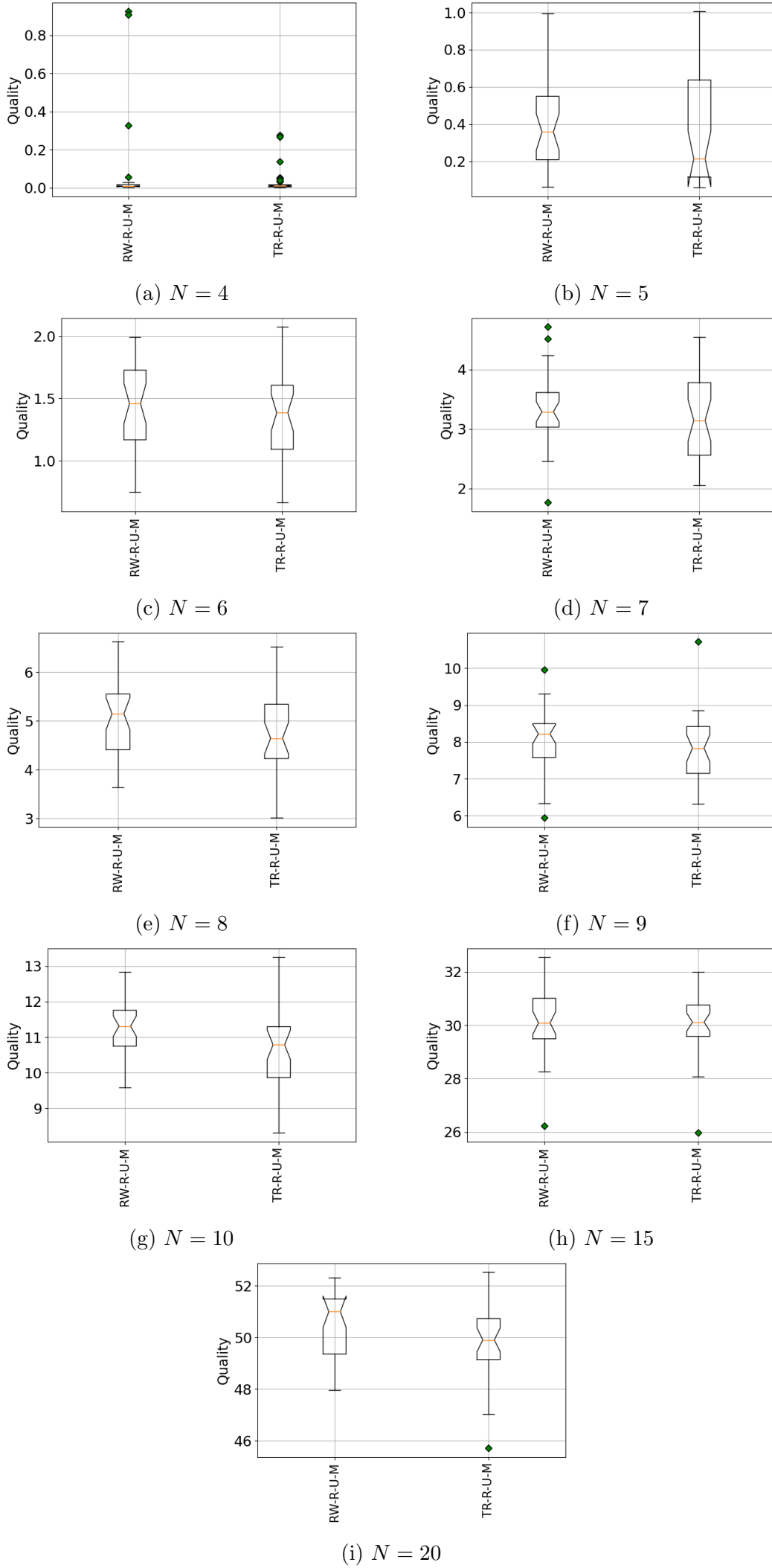


Figure 1: Box plots για την ποιότητα της λύσης του Γενετικού αλγορίθμου με δυαδική αναπαράσταση για τις μεθόδους επιλογής Roulette Wheel και Tournament και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων N ανά συστάδα, (a) $N=4$, (b) $N=5$, ..., (i) $N=20$.

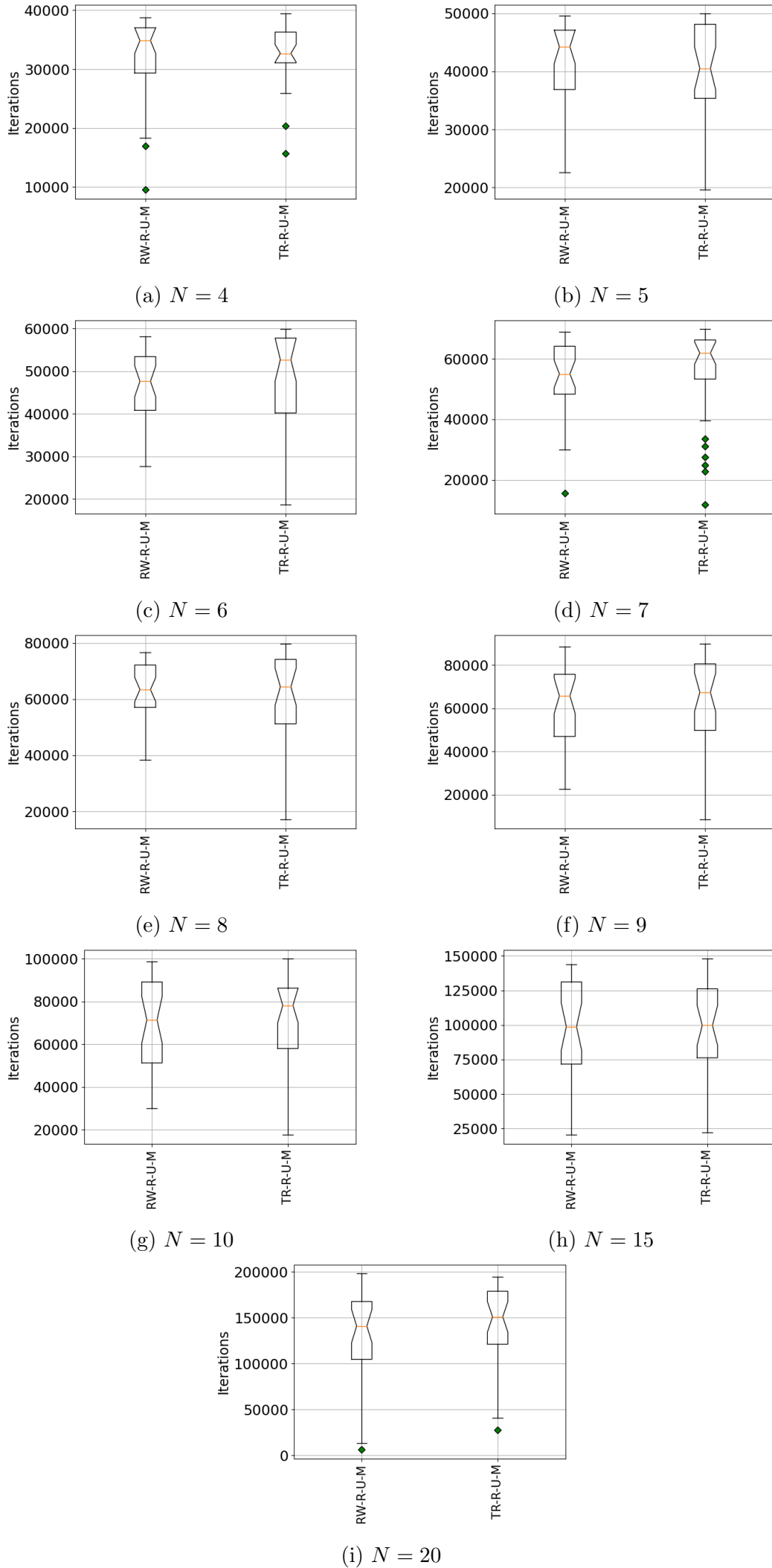
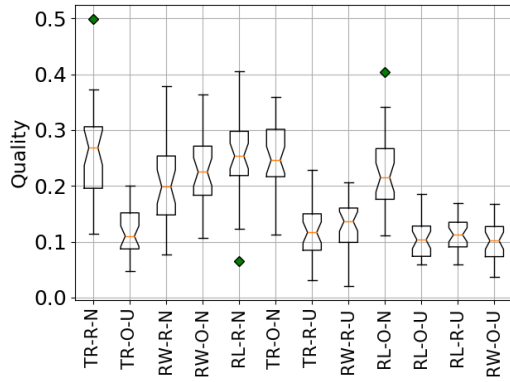
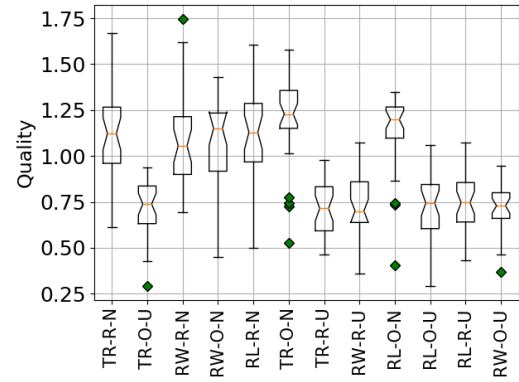


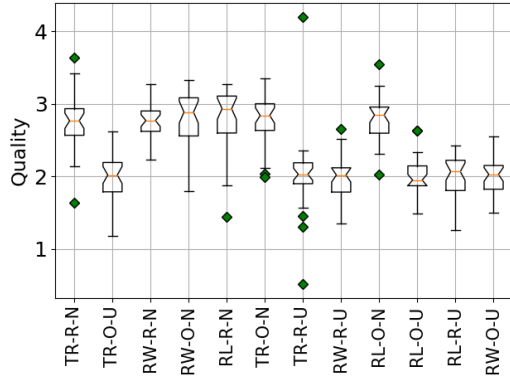
Figure 2: Box plots για τον χρόνο εύρεσης της καλύτερης λύσης (id επανάληψης) για τον Γενετικό αλγόριθμο με δυαδική αναπαράσταση για τις μεθόδους επιλογής Roulette Wheel και Tournament και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων N ανά συστάδα, (a) $N=4$, (b) $N=5, \dots$, (i) $N=20$



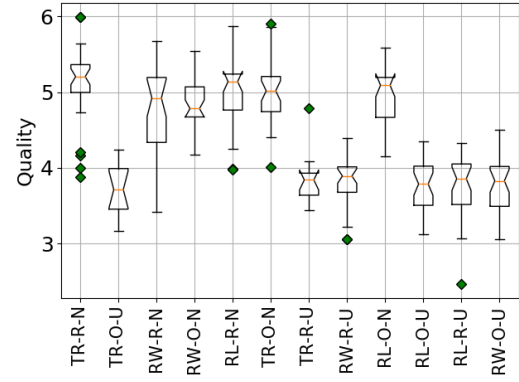
(a) $N = 4$



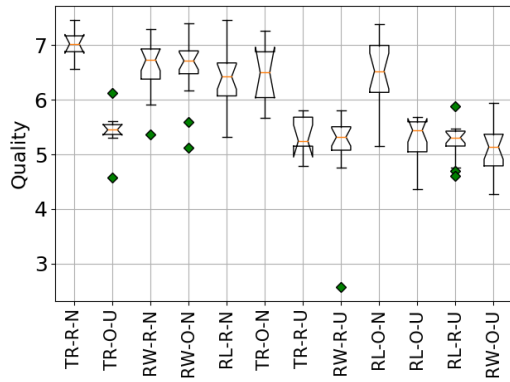
(b) $N = 5$



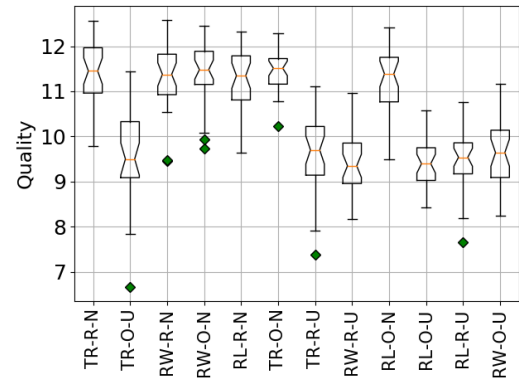
(c) $N = 6$



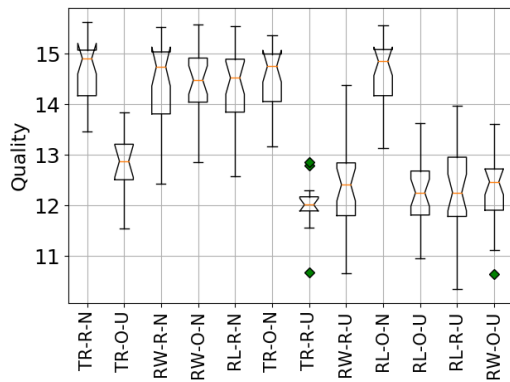
(d) $N = 7$



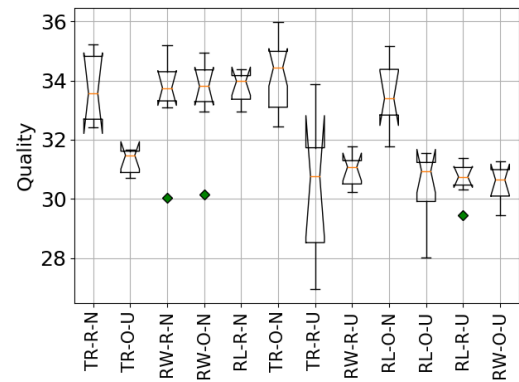
(e) $N = 8$



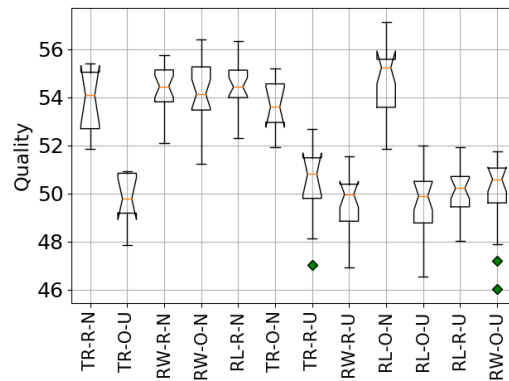
(f) $N = 9$



(g) $N = 10$



(h) $N = 15$



(i) $N = 20$

Figure 3: Box plots για την ποιότητα της λύσης για τις διάφορες εκδοχές του Γενετικού αλγόριθμου με πραγματική αναπαράσταση και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων N ανά συστάδα, (a) $N=4$, (b) $N=5$, ..., (i) $N=20$.

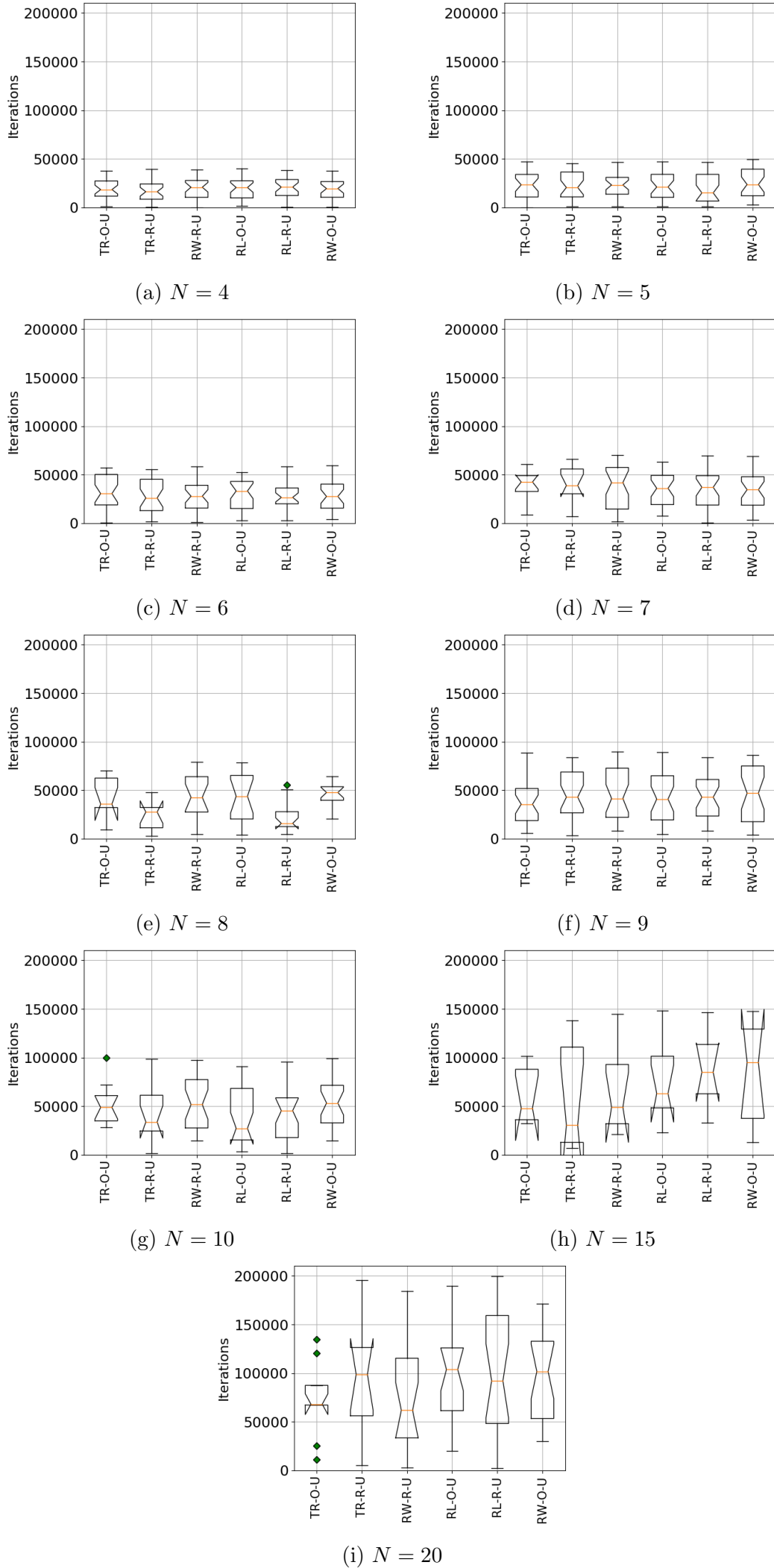
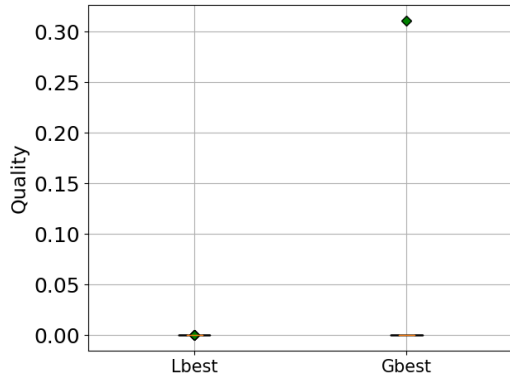
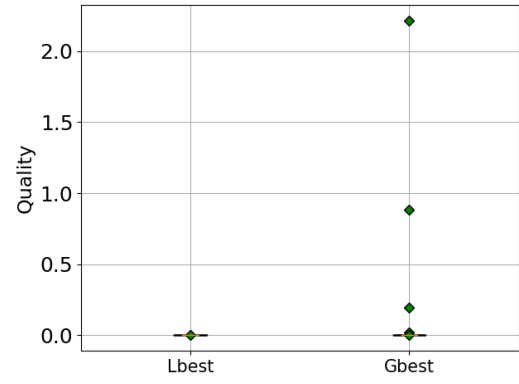


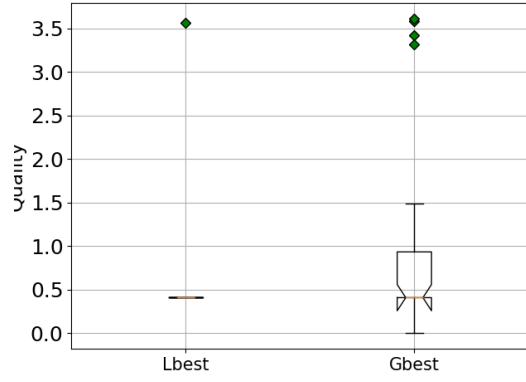
Figure 4: Box plots για τον χρόνο εύρεσης της καλύτερης λύσης (id επανάληψης) για τις καλύτερες 6 εκδοχές του Γενετικού αλγορίθμου με πραγματική αναπαράσταση οι οποίες προέκυψαν βάση της ποιότητας της λύσης και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων N ανά συστάδα, (a) $N=4$, (b) $N=5$, ..., (i) $N=20$



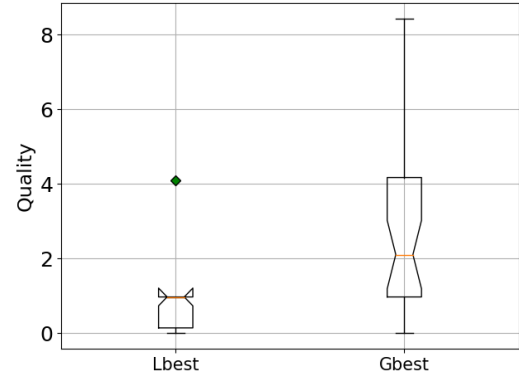
(a) $N = 4$



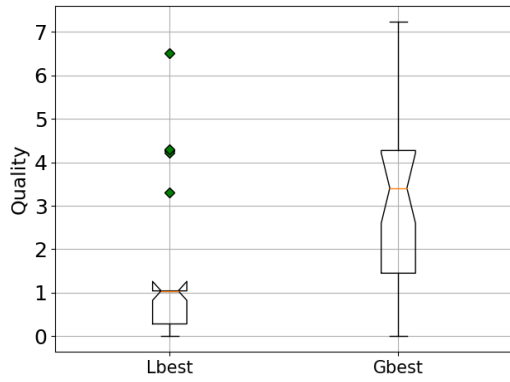
(b) $N = 5$



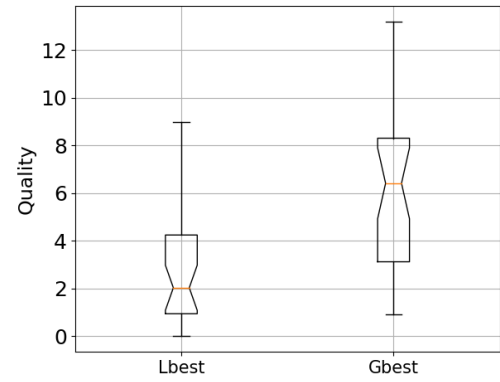
(c) $N = 6$



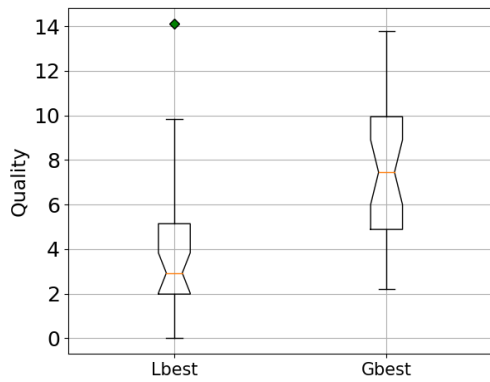
(d) $N = 7$



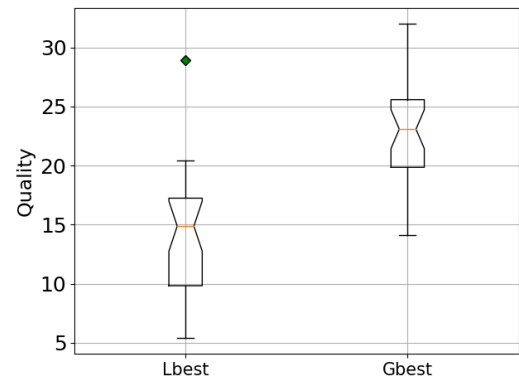
(e) $N = 8$



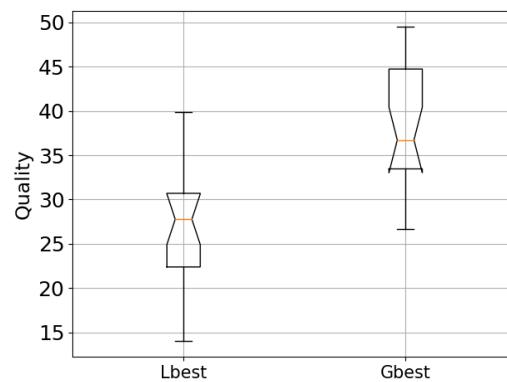
(f) $N = 9$



(g) $N = 10$

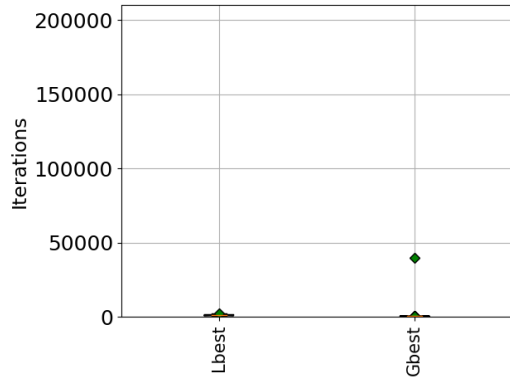


(h) $N = 15$

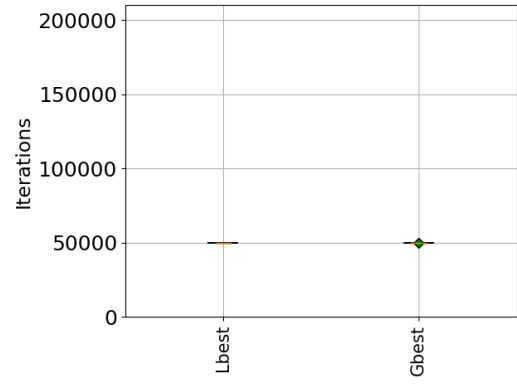


(i) $N = 20$

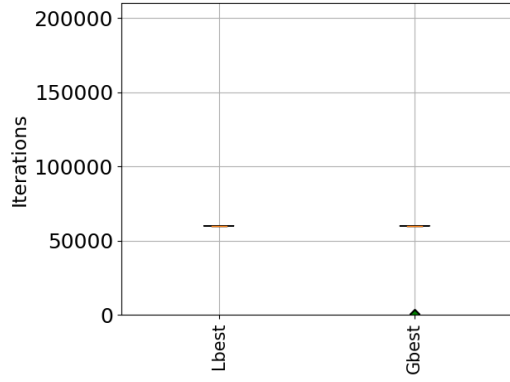
Figure 5: Box plots για την ποιότητα της λύσης για τοπολογίες Lbest και Gbest και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων N ανά συστάδα, (a) $N=4$, (b) $N=5$, ..., (i) $N=20$.



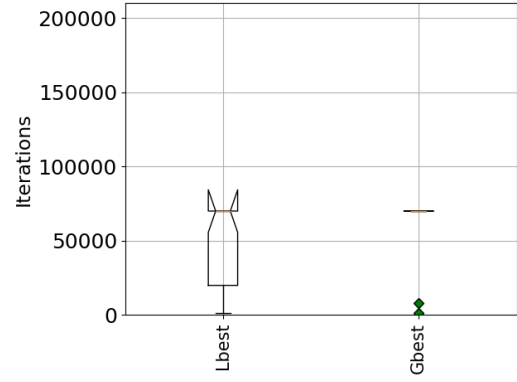
(a) $N = 4$



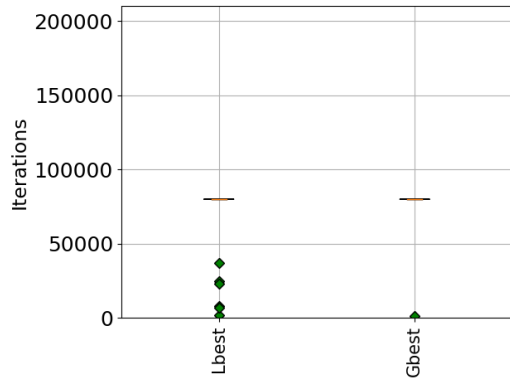
(b) $N = 5$



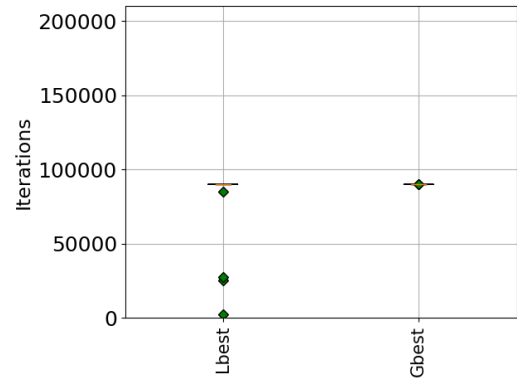
(c) $N = 6$



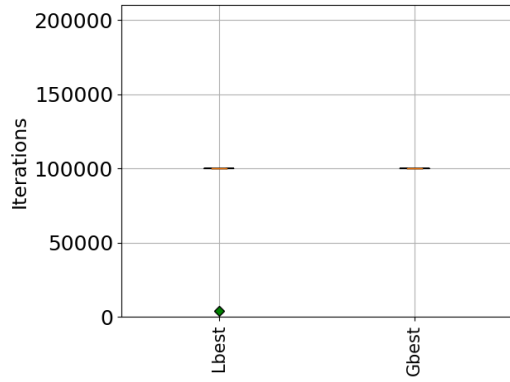
(d) $N = 7$



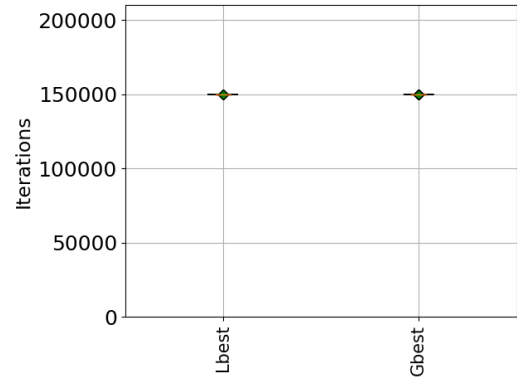
(e) $N = 8$



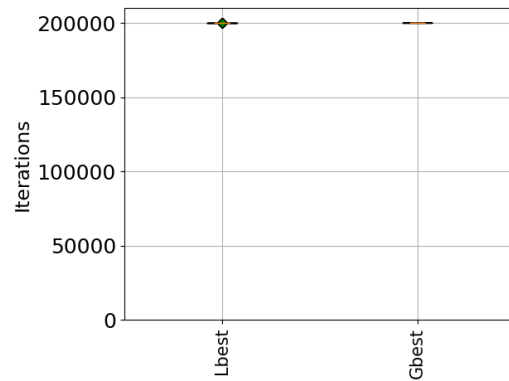
(f) $N = 9$



(g) $N = 10$

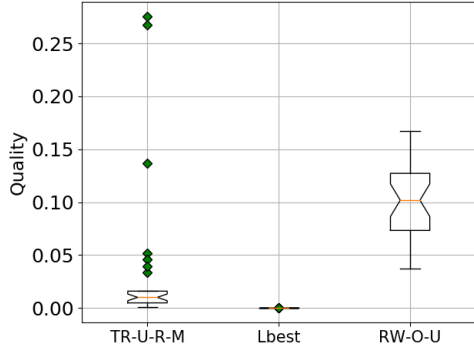


(h) $N = 15$

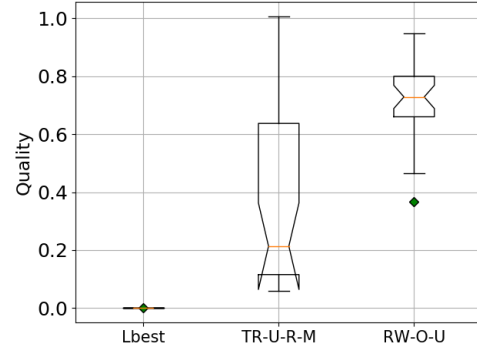


(i) $N = 20$

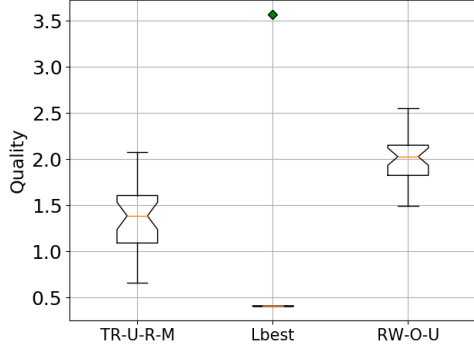
Figure 6: Box plots για τον χρόνο εύρεσης της καλύτερης λύσης (id επανάληψης) για τοπολογίες Lbest και Gbest και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων N ανά συστάδα, (a) $N=4$, (b) $N=5, \dots$, (i) $N=20$



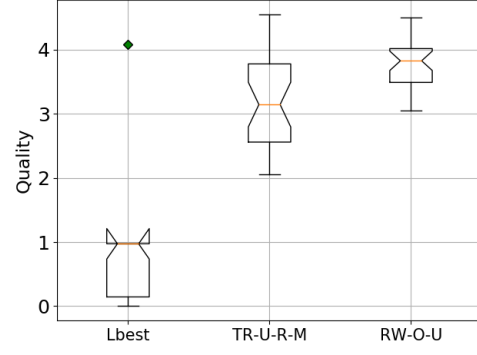
(a) $N = 4$



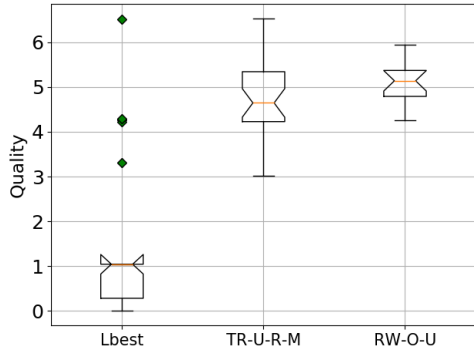
(b) $N = 5$



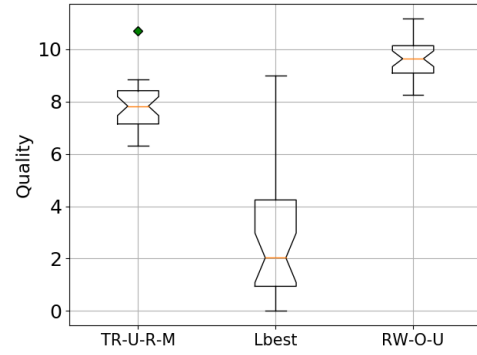
(c) $N = 6$



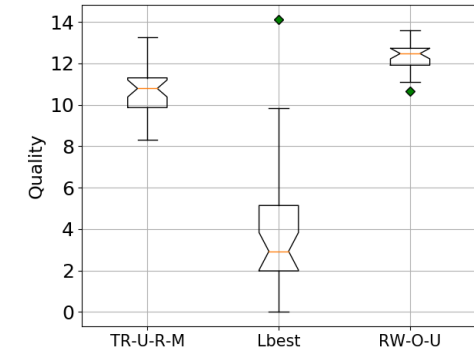
(d) $N = 7$



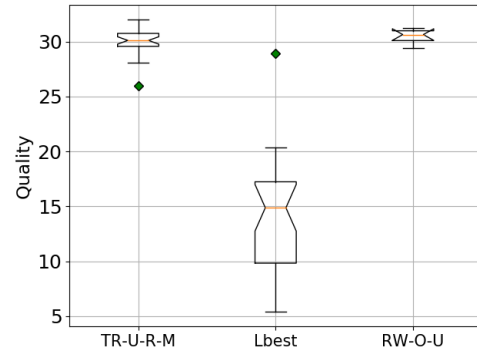
(e) $N = 8$



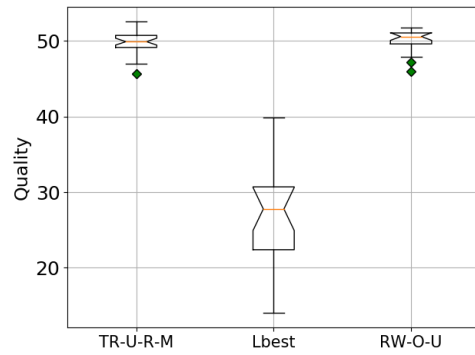
(f) $N = 9$



(g) $N = 10$



(h) $N = 15$



(i) $N = 20$

Figure 7: Box plots για την ποιότητα της λύσης για τις τρεις καλύτερες μεθόδους “ $TR - U - R - M$ ”, “ $RW - O - U$ ” και PSO με τοπολογία Lbest και για διάφορες τιμές πλήθους απόμων N ανά συστάδα, (a) $N=4$, (b) $N=5$, ..., (i) $N=20$

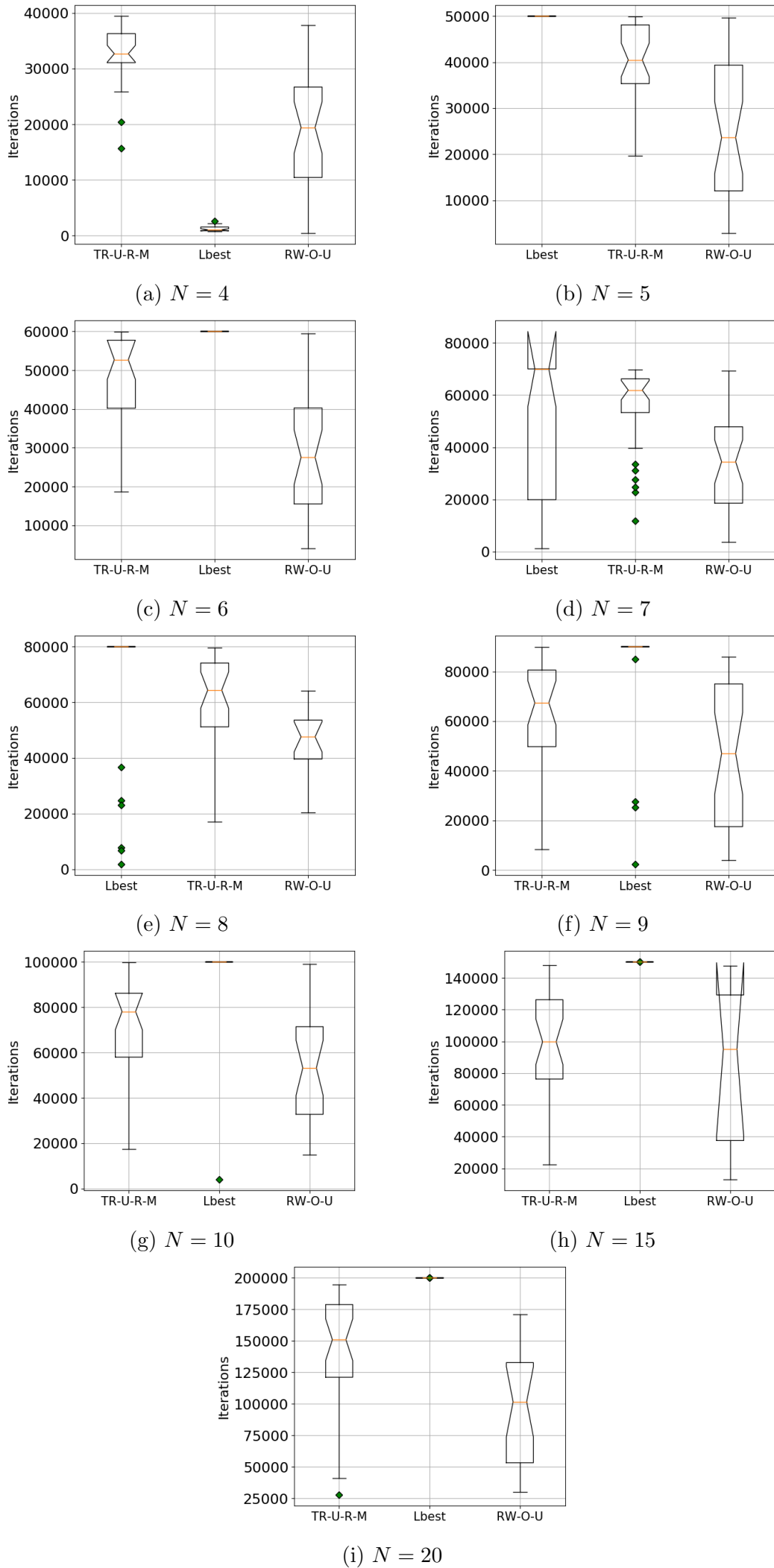


Figure 8: Box plots για τον χρόνο εύρεσης της καλύτερης λύσης (id επανάληψης) για τις τρεις καλύτερες μεθόδους “ $TR - U - R - M$ ”, “ $RW - O - U$ ” και PSO με τοπολογία Lbest και για διάφορες τιμές πλήθους ατόμων N ανά συστάδα, (a) $N=4$, (b) $N=5$, ..., (i) $N=20$

C Εκτελέσιμα

Στο τρέχων παράρτημα περιγράφεται η λειτουργία του κώδικα που αναπτύχθηκε για την τρέχουσα εργασία και ο τρόπος εκτέλεσης του εκτελέσιμου αρχείου. Ακολουθεί η σύντομη περιγραφή των 4 επισυναπτόμενων αρχείων:

1. **main.py**

Παράγει για κάθε συστάδα τις συντεταγμένες των ατόμων που την αποτελούν. Έπειτα αρχίζει η εκτέλεση των 30 πειραμάτων για την μέθοδο που έχει επιλεγεί από τον χρήστη.

2. **geneticBinary.py**

Αρχικά, γίνεται η αρχικοποίηση των απαραίτητων υπερπαραμέτρων και της καλύτερης συστάδας. Σε περίπτωση που θέλετε να δοκιμάσετε την μέθοδο με διαφορετικές υπερπαραμέτρους χρειάζεται να αλλάξετε τις μεταβλητές με τα ακόλουθα ονόματα, “*selectionMethod*”, “*crossoverMethod*” και “*pairMethod*”. Έπειτα ξεκινά η επαναληπτική διαδικασία του αλγορίθμου με βάση την περιγραφή που έχουμε κάνει στην Ενότητα 2.1.1. Επιπλέον, εντός της επαναληπτικής διαδικασίας, γίνεται υπολογισμός της ποιότητας του μεταλλαγμένου πληθυσμού και ενημέρωση του πληθυσμού. Τέλος, γίνεται ενημέρωση της καλύτερης συστάδας και έλεγχος για το αν απαιτείται επανεκκίνηση του πληθυσμού. Μετά το πέρας της επαναληπτικής διαδικασίας γίνεται αποθήκευση της βέλτιστης ενέργειας που έχει υπολογιστεί, της απόκλισης από την βέλτιστη λύση, το *id* της επανάληψης στο οποίο βρέθηκε η βέλτιστη συστάδα, το πλήθος των επανεκκινήσεων και οι συντεταγμένες της καλύτερης συστάδας στο αρχείο *results/binary/N/*.txt*. Όπου το όνομα του αρχείου εξαρτάται από τις διάφορες υπερπαραμέτρους. Σε περίπτωση που θέλετε να τρέξετε την μέθοδο για λιγότερες επαναλήψεις, θα πρέπει να τροποποιήσετε την μεταβλητή *Tmax*.

3. **geneticReal.py**

Αρχικά, γίνεται η αρχικοποίηση των απαραίτητων υπερπαραμέτρων και της καλύτερης συστάδας. Σε περίπτωση που θέλετε να δοκιμάσετε την μέθοδο με διαφορετικές υπερπαραμέτρους χρειάζεται να αλλάξετε τις μεταβλητές με τα ακόλουθα ονόματα, “*selectionMethod*”, “*crossoverMethod*” και “*mutationMethod*”. Στην συνέχεια ακολουθεί η εκτέλεση του βασικού βρόγχου βάση της περιγραφής που έχουμε κάνει στην Ενότητα 2.1.2. Με το πέρας των *T* επαναλήψεων αποθηκεύουμε για κάθε πείραμα την τελική καλύτερη ενέργεια που έχει υπολογίσει, την απόκλιση της λύσης από την βέλτιστη λύση, το *id* της επανάληψης στην οποία βρέθηκε η καλύτερη λύση, το πλήθος των συνολικών επανεκκινήσεων και τις συντεταγμένες της καλύτερης συστάδας στο αρχείο *results/real/N/*.txt*. Όπου το όνομα του αρχείου εξαρτάται από τις διάφορες υπερπαραμέτρους. Σε περίπτωση που θέλετε να τρέξετε την μέθοδο για λιγότερες επαναλήψεις, θα πρέπει να τροποποιήσετε την μεταβλητή *Tmax*.

4. **pso.py**

Αρχικά, γίνεται η αρχικοποίηση των απαραίτητων υπερπαραμέτρων. Η τοπολογία (*topology*) είναι προεπιλεγμένη στην επιλογή “*Lbest*”. Στην περίπτωση που θέλετε να τρέξετε την τοπολογία “*Gbest*” θα πρέπει να το βγάλετε από τα σχόλια. Έπειτα αρχικοποιούνται οι ταχύτητες, η γειτονία και οι καλύτερες θέσεις κάθε συστάδας. Στην συνέχεια ξεκινάει η εκτέλεση του βασικού βρόγχου του αλγορίθμου βάση της περιγραφής που έχουμε κάνει στην Ενότητα 2.2. Με το πέρας των *T* επαναλήψεων αποθηκεύουμε για κάθε πείραμα την τελική καλύτερη ενέργεια που έχει υπολογίσει, την απόκλιση της λύσης από την βέλτιστη λύση, το *id* της επανάληψης στην οποία βρέθηκε η καλύτερη λύση, το πλήθος των συνολικών επανεκκινήσεων και τις συντεταγμένες της καλύτερης συστάδας στο αρχείο *results/pso/N/lbest.txt* ή *gbest.txt* αναλόγως την τοπολογία. Σε περίπτωση που θέλετε να τρέξετε την μέθοδο για λιγότερες επαναλήψεις, θα πρέπει να τροποποιήσετε την μεταβλητή *Tmax*.

Οδηγίες ορθής εκτέλεσης κώδικα

Η υλοποίηση των μεθόδων έγινε σε γλώσσα **Python 3**. Η βιβλιοθήκη που έχει χρησιμοποιηθεί είναι η Numpy. Επίσης, τα modules που χρησιμοποιήθηκαν είναι τα ακόλουθα, decimal, random, sys, ast και os. Η γενική μορφή της εντολής εκτέλεσης του προγράμματος είναι η εξής:

python3 main.py method N

όπου $\text{method} \in \{\text{binary real}, \text{pso}\}$ και $N \in [4, 5, 6, 7, 8, 9, 19, 15, 20]$. Παρακάτω παρατίθεται ένα ενδεικτικό παράδειγμα εκτέλεσης του γενετικού αλγορίθμου με δυαδική αναπαράσταση και $N = 5$:

python3 main.py binary 5