Implementación y Optimización del método metaheurístico Hill Climbing para resolver el Traveling Salesman Problem (TSP)

Miguel López Cruz Carlos Román López Sierra José Luis R. Zárate Cortés

Primavera 2021

Índice

1.	Intr	oducción	2
2.	Fundamento Teórico		2
	2.1.	Optimización Combinatoria	2
		2.1.1. Definición matemática	3
		2.1.2. NP-completeness	3
		2.1.3. Time complexity	3
		2.1.4. Resolver problemas NP-complete	4
	2.2.	Algoritmos Meta-heurísticos	4
		2.2.1. Propiedades	4
		2.2.2. Clasificación	5
	2.3.	Consideraciones sobre métodos heurísticos en optimización combinatoria	5
3.	Bús	queda local en problemas de optimización	5
4.	Hill	Climbing	6
	4.1.	Definición del algoritmo	6
	4.2.	Variantes de Hill climbing	7
	4.3.	Problema de Optimización, Definición Matemática Formal	7
	4.4.	Aplicación del algoritmo Hill Climbing para resolver el Traveling Salesman Problem	7
	4.5.	Programación	8
5.	Imp	lementación	8
		Código	8
		Dataset	9
		Instancia	9
		Ejecución	9
		Paralelización	9
	J.J.	1 draienzacion	9
6.	Con	clusiones	11

7. Referencias 12

Resumen

Implementar el método de Hill climbing para resolver TSP y obtener una solución suficientemente cercana a la óptima global para un conjunto aproximado de 150 ciudades en un periodo de tiempo razonable utilizando eficiencia de código y aceleración de hardware.

1. Introducción

En optimización matemática y ciencias de la computación, los métodos heurísticos y metaheurísticos se desarrollaron para resolver problemas del tipo large scale (PL's o de optimización combinatoria) que son muy grandes y complicados como para resolverlos por medio de algoritmos exactos. Típicamente se ajustan a problemas específicos.

En nuestro caso, seleccionamos Hill Climbing, método de optimización que pertenece al grupo de búsqueda local. Encuentra la solución óptima en el caso de problemas convexos (como el algoritmo símplex que resuelve problemas de optimización convexa mediante hill climbing) y soluciones óptimas locales (no necesariamente son soluciones óptimas globales) entre todas las posibles soluciones del espacio de búsqueda. Por lo tanto, es importante remarcar que no existe garantía acerca de la calidad de la solución que se obtiene.

Existe un problema importante conocido como el Traveling Salesman Problem (TSP), el cual plantea la siguiente interrogante:

"Dado un conjunto de ciudades y la distancia que existe entre cualesquiera dos de ellas... ¿cuál es la ruta más corta posible que visita cada ciudad exactamente una vez y retorna a la ciudad origen?"

Responder a estar interrogante es equivalente a calcular todas las rutas posibles (permutaciones) y determinar la de menor distancia (algoritmo de fuerza bruta), lo cual implica un tiempo de ejecución que cae en un factor polinomial el orden O(n!) (el factorial del número de ciudades), lo cual es impráctico tan sólo para 20 ciudades.

El método Hill Climbing se puede aplicar para resolver el TSP y obtener una solución óptima para un conjunto pequeño de ciudades de forma muy rápida. Conforme se incrementa el tamaño del conjunto, este método requiere mayor tiempo para explorar el espacio de posibles soluciones de forma suficiente para encontrar una solución óptima global. Por lo que, nuestro objetivo es explorar diversas opciones que permiten una implementación más eficiente del método utilizando alguna de las siguientes estrategias:

- Modificaciones en la técnica, i.e. random restart
- Integrar eficiencia de código como cómputo en paralelo o multiprocessing
- Utilizar estrategias de solución como el uso de Kubernetes (minikube) es una forma de tener consistencia en la generación de resultados vía contenedores de Docker.

2. Fundamento Teórico

2.1. Optimización Combinatoria

Optimización Combinatoria es un subcampo de Optimización Matemática relacionado con Investigación de Operaciones, teoría de algoritmos y complejidad computacional con importantes aplicaciones en AI, ML, ingeniería de *software*, matemáticas aplicadas, etc.

Consiste un objeto óptimo dentro de un conjunto finito de objetos. En muchos problemas, ejecutar una búsqueda exhaustiva no es operable, por lo que opera en el dominio de aquellos

problemas de optimización en los cuales se tiene un conjunto discreto (contable) de soluciones factibles o es posible discretizarse o reducirse con el objetivo de encontrar la mejor solución. Ejemplos típicos son:

- Traveling Salesman Problem "TSP", problema del vendedor viajero
- Minimum Spanning Tree Problem, problema del mínimo árbol de expansión

Lo anterior encuentra diversas aplicaciones en la vida diaria como en la elaboración de rutas aéreas y de transporte de mercancías, diseño de redes de distribución de agua, etc.

Los problemas en optimización combinatoria pueden interpretarse como búsqueda de el mejor elemento en un conjunto discreto de elementos; por lo que, al menos en teoría, cualquier algoritmo de búsqueda o **meta-heurístico** puede aplicarse para resolver esta clase de problemas.

Debemos precisar que algunos problemas de optimización combinatoria, tal como el TSP, son NP-complete

2.1.1. Definición matemática

Sea I un conjunto de instancias y dada una instancia $x \in I$, f(x) es el conjunto finito de soluciones factibles. Dada una instancia x y una solución factible y de x, se tiene que m(x,y) denota la métrica de y, usualmente en \mathbf{R}^+

Sea g como la función objetivo a optimizar (minimizar o maximizar), el objetivo es encontrar para alguna instancia x una solución óptima, esto es, una solución factible y con

$$m(x,y) = g\{m(x,y') \mid y' \in f(x)\}.$$

2.1.2. NP-completeness

En teoría de la complejidad computacional, se tiene un problema NP-complete cuando:

- Se puede resolver utilizando un algoritmo de búsqueda por fuerza bruta y la solución puede validarse muy rápido.
- El problema puede utilizarse para simular otros problemas cuya solubilidad es similar.

NP-complete o non-deterministic polynomial-time complete, se refiere a non-deterministic Turing machines (matemáticamente formaliza la idea del algoritmo de búsqueda por fuerza bruta) y polynmial time se refiere a la cantidad de tiempo que requerida que se considera rápida" para que un algoritmo determinístico compruebe una solución específica o, para una non-deterministic Turing Machine desarrollar una búsqueda completa. complete se refiere a la capacidad de simular todo lo que esté en la misma clase de complejidad.

Si bien se puede verificar rápidamente una solución a un problema del tipo NP-complete, no se conoce forma alguna para encontrar una solución rápidamente. Esto es, el tiempo requerido para resolver el problema utilizando cualquier algoritmo conocido, incrementa rápidamente conforme incrementa el tamaño del problema. Como consecuencia, determinar si es o no posible resolver tales problemas de forma rápida, denominado $\bf P$ vs $\bf NP$ problem, es uno de los problemas fundamentales no resueltos en ciencias de la computación.

2.1.3. Time complexity

En ciencias de la computación, time complexity es la complejidad computacional que describe la cantidad de tiempo máquina que le toma ejecutar un algoritmo. Comunmente se estima contando

el número de operaciones elementales realizadas por el algoritmo, asumiendo que cada operación le toma un tiempo fijo, por lo que puede considerarse como un factor constante.

Existen varios tipos comunes de $time\ complexity$ tales como timpo constante, tiempo logarítmico, lineal, polinomial, exponencial, factorial, etc. En nuestro caso de interés, $superpolynomial\ time$, se dice que un algoritmo tiene un tiempo superpolinomial si T(n) es no acotado superiormente por algún polinomio. Por ejemplo, un algoritmo que ejecuta 2^n pasos para un input de tamaño n, requiere de un tiempo super-polinómico, específicamente tiempo exponencial.

2.1.4. Resolver problemas NP-complete

Los algoritmos conocidos actualmente para problemas *NP-complete*, requieren de un tiempo superpolynomial en relación al tamaño del *input*. Algunas técnicas utilizadas para resolver problemas computacionales y que usualmente incrementan sustancialmente la velocidad de los algoritmos son:

- Aproximación. Búsqueda de una solución que representa un factor de una solución óptima en lugar de buscar esta última
- Aleatorización. Uso de aleatorización para lograr tiempos de ejecución promedio más rápidos.
- Restricción. Restringir la estructura del input, hace que se logren algoritmos más rápidos y
 eficientes.
- Parametrización. Usualmente existen algoritmos que son más rápidos si se fijan algunos parámetros.
- Heurística. Los algoritmos heurísticos en la mayoría de los casos "trabajan bien", pero no
 existe prueba de que siempre sean rápidos o que generen un buen resultado.

2.2. Algoritmos Meta-heurísticos

En ciencias de la computación y optimización matemática, una **meta-heurística** es un procedimiento (heurística) de alto-nivel diseñado para encontrar, generar o seleccionar una heurística (algoritmo de búsqueda parcial) que provee una solución "suficientemente buena" para un problema de optimización, especialmente en los casos de información incompleta/imperfecta o capacidad computacional limitada. Realizan un muestreo de un subconjunto de soluciones de un conjunto que es muy grande para poder enumerarse o explorarse completamente, utilizando pocas suposiciones acerca del problema de optimización que se resuelve, por lo que son utilizados en una variedad de problemas.

En comparación con algoritmos de optimización y métodos iterativos, los algoritmos metaheurísticos no garantizan que se pueda encontrar una solución óptima global en cierta clase de problemas. En el caso de optimización combinatoria, al buscar en un conjunto grande de soluciones factibles, estos algoritmos usualmente encuentran buenas soluciones con una menor demanda computacional que los algoritmos de optimización, métodos iterativos o simples heurísticas.

2.2.1. Propiedades

Las siguientes son propiedades que caracterizan a la mayoría de los algoritmos meta-heurísticos:

- Son estrategias que guían el proceso de búsqueda
- El objetivo es explorar de forma eficiente el espacio de búsqueda para encontrar soluciones cercanas a la óptima.

- Las técnicas que constituyen los algoritmos meta-heurísticos van desde un procedimiento simple de búsqueda local hasta procesos complejos de aprendizaje.
- Son aproximaciones y usualmente no-determinista.

2.2.2. Clasificación

Existe una amplia variedad de meta-heurísticas y de sus propiedades, en función de lo que son clasificadas. Para nuestro caso de estudio particular, nos enfocaremos en **búsqueda local vs búsqueda global**.

Los algoritmos de búsqueda local simple pueden ser una mejora en la estrategia de búsqueda. Un algoritmo muy bien conocido de búsqueda local es *hill climbing method*, utilizado para encontrar óptimos locales pero el cual no garantiza encontrar soluciones óptimas globales.

Existe otra clasificación de nuestro interés que es parallel metaheurístics, técnica que utiliza parallel programming para correr múltiples búsquedas en paralelo; pueden variar de simples esquemas distribuidos hasta ejecuciones con búsqueda concurrente que interactúan para mejorar la solución.

Otras clasificaciones son single-solution vs populated-based; hybridization and memetic algortithms; nature inspired and metaphor-based metaheuristics; ancient inspired metaheuristics

2.3. Consideraciones sobre métodos heurísticos en optimización combinatoria

Los métodos heurísticos y meta-heurísticas (estrategias para mejorar o diseñar métodos heurísticos) encuentran una buena solución factible que al menos está razonablemente cerca de ser óptima, también pueden reportar que no se encontró tales soluciones. Sin embargo son métodos que no dan una garantía acerca de la calidad de la solución que se obtiene.

Los métodos heurísticos se desarrollaron principalmente para el manejo de problemas large scale sean PL's o de optimización combinatoria y típicamente se han ajustado a problemas específicos en lugar de una variedad de aplicaciones.

3. Búsqueda local en problemas de optimización

Los algoritmos de búsqueda local operan buscando desde un estado inicial a estados vecinos, sin realizar un seguimiento de las rutas ni del conjunto de estados que se han alcanzado. Eso significa que no son sistemáticos; es posible que nunca exploren una parte del espacio de búsqueda donde un la solución reside realmente. Sin embargo, tienen dos ventajas clave que son:

- 1. Utilizan muy poca memoria
- 2. A menudo pueden encontrar soluciones razonables en espacios de estados grandes o infinitos para los cuales los algoritmos sistemáticos no son adecuados.

Para comprender la búsqueda local, considere los estados de un problema presentado en un espacio de estados, como se muestra en la Figura 2 . Cada punto (estado) tiene una .elevación", definida por el valor de la función objetivo. Entonces el objetivo es encontrar el pico más alto, un máximo global.

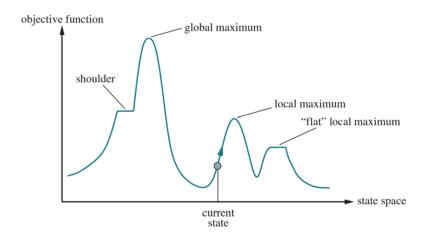


Figura 1: Espacio de estados para la función objetivo

4. Hill Climbing

4.1. Definición del algoritmo

El algoritmo de Hill Climbing realiza un seguimiento de un estado actual y en cada iteración se mueve al estado vecino con el valor más alto, es decir, se dirige en la dirección que proporciona el ascenso más empinado. Termina cuando alcanza un "Pico" donde ningún vecino tiene un valor más alto. Hill Climbing no mira hacia el futuro más allá de los vecinos inmediatos del estado actual. Esto se asemeja a tratar de encontrar la cima del Monte Everest en una espesa niebla mientras sufre de amnesia.

Por otro lado, otra forma de utilizar Hill Climbing consiste en utilizar el negativo de una función de coste heurística como función objetivo; que ascenderá localmente al estado con menor distancia heurística a la meta.

A este tipo de algoritmos a veces se les llama búsqueda local greedy porque toma un buen estado vecino sin pensar en los estados futuros a dónde moverse. Hill Climbing puede progresar rápidamente hacia una solución porque, por lo general, es bastante fácil mejorar un mal estado. Desafortunadamente, Hill Climbing tiene problemas en áreas donde espacio de posibles soluciones puede atascarse, estos son:

- Máximo Local: Es un pico que es más alto que los estados vecinos pero menor que el máximo global. Los algoritmos Hill Climbing que alcanzan las proximidades de un máximo local tomaran estados vecinos que lo lleven en esta dirección, pero luego de llegar a este punto les será imposible salir de él.
- Cordilleras y corredores: Este tipo de puntos en el espacio de soluciones resulta en una secuencia de máximos locales que es muy difícil de navegar para los algoritmos greedy, esto por el gran número de soluciones vecinas que te llevan a puntos no óptimos de la función objetivo.
- Mesetas: Esta se encuentra cuando el espacio de búsqueda es plano, o suficientemente plano de manera tal que el valor retornado por la función objetivo es indistinguible de los valores retornados por regiones cercanas debido a la precisión utilizada por la máquina para representar su valor. En estos casos el algoritmo puede que no sea capaz de determinar en qué dirección debe continuar y puede tomar un camino que nunca conlleve a una mejoría de la solución.

4.2. Variantes de Hill climbing

Se han inventado muchas variantes de este algoritmo. Por ejemplo Hill climbing estocástica elige al azar entre los movimientos cuesta arriba; la probabilidad de selección puede variar con la inclinación del movimiento cuesta arriba. Esto suele converger más lentamente que el steepest ascent, pero en algunos puntos de espacio de soluciones, encuentra mejores soluciones. First-choice hill climbing implementa el método estocástico generando sucesores aleatoriamente hasta que se genera uno que es mejor que el estado actual. Ésta es una buena estrategia cuando un estado tiene muchos posibles estados siguientes a donde moverse.

También existe el algoritmo random-restart Hill climbing está construido sobre la base de hill climbing. Esto se realiza, iterativamente, cada vez con una condición inicial aleatoria . Una primera mejor solución es guardada; si una nueva corrida del produce una mejor que el estado guardado, lo reemplaza. Random-restart es un método sorprendentemente efectivo en muchos casos. De esto se deriva que con frecuencia es mejor gastar tiempo de CPU explorando el espacio, que cuidadosamente optimizar desde una condición inicial.

4.3. Problema de Optimización, Definición Matemática Formal

El método de optimización $Hill\ Climbing\$ intenta maximizar o miminizar una función objetivo $f(\mathbf{x})$, donde \mathbf{x} es un vector de valores continuos o discretos. En cada iteración, este método modifica algún componente en \mathbf{x} y determina si tal modificación mejora el valor de $f(\mathbf{x})$, aceptando cualquier mejora y continua el proceso hasta no encontrar un cambio que que mejore el valor de $f(\mathbf{x})$, por lo que \mathbf{x} se conoce como óptimo local.

4.4. Aplicación del algoritmo *Hill Climbing* para resolver el *Traveling*Salesman Problem

Este problema se enuncia de la siguiente forma:

"Dado un conjunto de ciudades y la distancia que existe entre cada par de ellas... ¿cuál es la ruta más corta posible que visita cada ciudad exactamente una vez y retornar a la ciudad orígen?"

El TSP es un problema de optimización es un **NP-hard problem** en optimización combinatoria, importante para la teoría de ciencias de la computación e investigación de operaciones. Esta clase de problemas son al menos tan complejos como los problemas más complejos de la clase **NB**, los cuales (tal como mencionamos anteriormente) se refieren a problemas que son solubles en tiempo polinómico por una máquina de Turing no-determinista. De esta forma, es posible que el peor caso en tiempo de ejecución para cualquier algoritmo que resuelva el TSP, incrementa de forma superpolinomial (no más allá de exponencial) conforma incrementa el número de ciudades.

Tradicionalmente, las líneas de ataque a los problemas **NP-hard** son:

- Formular algoritmos exactos, los cuales son razonablemente rápidos para problemas de *small scale* (ocas ciuades).
- Formular algoritmos heurísticos, los cuales generan una solución aproximada en un tiempo razonable.
- Encontrar casos especiales ("subproblemas") para los cuale es posible encontrar heurísticas mejores o exactas.

En nuestro caso, realizaremos la implementación del método metaheurístico Hill Climbing.

4.5. Programación

Lo siguiente es revisar el pseudocódigo de programación que encierra las ideas elementales de la implementación de nuestro algoritmo:

5. Implementación

5.1. Código

Antes de implementar random-restart nuestro algoritmo encontraba una solución rápida terminando rutas de 100 ciudades en menos de 30 segundos, pero esto lo efectuaba con poca exactitud. De la teoría conocemos que es un método con el problema de quedar atascado es zonas puntuales de espacio de soluciones, cómo mínimos locales y mesetas. Hecho que en la depuración encontramos, que después de cierto número de iteraciones repetía la misma ruta. Otra situación encontrada en la revisión fue que arrojaba soluciones hasta un 40 % de mayores en la distancia recorrida por la ruta establecida cómo óptima por otros paquetes cómo OR-Tools, esto también derivado de los problemas inherentes al algoritmo. Habiéndonos dado cuenta de estas situaciones agregamos al método un random-restart, que le dio la capacidad de comenzar en un nuevo punto aleatorio para sacarlo del ciclo donde caía después de un cierto número de iteraciones y con este misma modificación acercarlo más a un valor menor con un mayor número de iteraciones en diferentes puntos del espacio solución.

Nuestro método se compone de cinco funciones incluyendo best_solution que efectúa el algoritmo Hill climbing. A continuación describimos las funciones que componen nuestro código:

- distance_matrix: Esta función calcula la matriz de distancias de los puntos que componen el dataset de las ciudades a visitar. Esta genera una matriz simétrica de tamaño nxn.
- random_solution: Genera soluciones aleatorias para el dataset propuesto. Esta función retorna una lista con el orden en el que se visitaran las ciudades.
- calculate_distance: Calcula la distancia euclidiana que se recorre dada una solución propuesta. La salida de esta función es un número real correspondiente a la distancia recorrida en dicha solución propuesta.

- neighbors: Hill climbing funciona en parte generando todas las soluciones vecinas a la solución actual. Una solución vecina es una solución que es solo ligeramente diferente de la solución actual, esto cuidando que cada ciudad se visite una sola vez. Crear soluciones ligeramente diferentes lo logramos intercambiando ciudades de lugar a través de ciclos for. Después con un conjunto de este tipo de soluciones, el algoritmo busca la que recorre la menor distancia, encontrado así el vecino más óptimo.
- best_solution: Primero, crea una solución aleatoria y calcula la longitud de su ruta. Después a partir de esta soluciones crea el conjunto de soluciones vecinas y con ello encuentra la mejor. A partir de ahí, siempre que el mejor vecino sea mejor que la solución actual se repite el mismo patrón con la solución actual cada vez que se actualiza con el mejor vecino. Para no quedar estancado en mínimos locales implementamos un random-restart, generando un nueva ruta aleatoria. Si esta nueva solución es mejor que la anterior, se remplaza. Esto se repite un número determinado de veces establecido en los parámetros de la función.

5.2. Dataset

El dataset elegido para resolver TSP se extrajo de la pagina National Traveling Salesman Problem de concord, el cual contiene un total de 4,663 ciudades canadienses cada una con su latitud y longitud.

5.3. Instancia

La instancia de AWS utilizada para el desarrollo de nuestras pruebas y experimentos tiene las siguientes características:

5.4. Ejecución

En los tiempos de ejecución (wall clock o elapsed time) desde el inicio de los statements hasta su finalización es exactamente los 2.58 segundos que coinciden con user en este caso.

Después ejecutando el comando %timeit evaluamos nuestro método, considerando promediar los tiempos de n=7 ejecuciones calculando su desviación estándar. Este proceso se ejecuto 11 veces, dando el siguiente resultado:

También observamos que el requerimiento de memoria de nuestro código fue de 11.8 MB, cómo se muestra a continuación

5.5. Paralelización

Numba nos permite, gracias a JIT, hacer compilación durante la ejecución. Entonces menos tiempo dedicado a la compilación inicial significa que el código se puede interpretar mucho más rápido. Esto además acompañado de la interpretación automática de los tipos de datos, esto nos permitiría una interpretación más rápida y eficaz del código.

Dada la naturaleza de Hill Climbing consideramos que al implementar una paralelización resultaría en un aceleramiento del proceso iterativo inherente al algoritmo. Ya que nuestro algoritmo busca encontrar la ruta más adecuada. Entonces con ayuda de *Numba* y su paralelización nos ayudaría a correr simultáneamente soluciones propuestas al algoritmo.

A continuación se muestran los resultados de la paralelización con y sin Numba en un ejercicio realizdo con un dataset de prueba que contiene 17 ciudades, ejecutando 100 reinicios del punto inicial y una tolerancia de 1e-7.

```
In [1]: %bash
           lscpu
          Architecture:
                                                    x86 64
                                                    32-<del>b</del>it, 64-bit
           CPU op-mode(s):
          Byte Order:
                                                    Little Endian
           Address sizes:
                                                     46 bits physical, 48 bits virtual
          CPU(s):
          On-line CPU(s) list:
                                                    0-7
           Thread(s) per core:
          Core(s) per socket:
Socket(s):
          NUMA node(s):
Vendor ID:
                                                    GenuineIntel
          CPU family:
                                                    85
          Model:
           Model name:
                                                    Intel(R) Xeon(R) Platinum 8175M CPU @ 2.50GHz
          Stepping:
CPU MHz:
                                                    3120.058
          BogoMIPS:
                                                    5000.00
          Hypervisor vendor:
                                                    KVM
           Virtualization type:
                                                     full
                                                    128 KiB
          L1d cache:
                                                    128 KiB
4 MiB
          Lli cache:
          L2 cache:
L3 cache:
                                                    33 MiB
          NUMA node0 CPU(s):
Vulnerability Itlb multihit:
Vulnerability L1tf:
                                                    KVM: Vulnerable
                                                    Mitigation; PTE Inversion
          Vulnerability Mds:
                                                    Vulnerable: Clear CPU buffers attempted, no microcode; SMT Host state unknown
           Vulnerability Meltdown:
                                                    Mitigation; PTI
          Vulnerability Spec store bypass:
Vulnerability Spectre v1:
                                                    Vulnerable
                                                    Mitigation: usercopy/swapgs barriers and
                                                                                                           user pointer sanitization
          Vulnerabilitý Spectre v2:
                                                    Mitigation; Full generic retpoline, STIBP disabled, RSB filling
          Vulnerability Srbds:
                                                    Not affected
          Vulnerability Tsx async abort:
                                                    Vulnerable: Clear CPU buffers attempted, no microcode; SMT Host state unknown
          Flags: fpu vme de pse tsc msr pae mce cx8 apic sep mtrr pge mca cmov pat pse36 clflush mmx fxsr s
se sse2 ss ht syscall nx pdpe1gb rdtscp lm constant tsc rep good nopl xtopology nonstop tsc cpuid aperfmperf tsc known freq
          pni pclmulqdq ssse3 fma cx16 pcid sse4 1 sse4 2 x2apic movbe popcnt tsc deadline timer aes xsave avx f16c rdrand hypervisor lahf lm abm 3dnowprefetch invpcid single pti fsgsbase tsc adjust bmil hle avx2 smep bmi2 erms invpcid rtm mpx avx512f avx51
          2dq rdseed adx smap clflushopt clwb avx512cd avx512bw avx512vl xsaveopt xsavec xgetbv1 xsaves ida arat pku ospke
```

Figura 2: Caracteristísticas de la instancia utilizada.

```
In [42]: %timeit -n 7 -r 11 hc.best_solution(tsp_cities, 0 , 1e-9, 300)
2.6 s ± 12.2 ms per loop (mean ± std. dev. of 11 runs, 7 loops each)
```

En prmer lugar correremos la función best_solution sin Numba:

```
In [5]: %timeit -n 3 -r 7 best_solution(dat2, 0, 1e-7, 100)
888 ms ± 19.2 ms per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 3 loops each)
```

Ahora mostramos correremos la función $best_solution con Numbaya con el código compilado$:

```
In [8]: %timeit -n 3 -r 7 nb_best_solution(dat2, 0, 1e-7, 100)
5.33 s ± 83.6 ms per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 3 loops each)
```

Comparando ambos resultados notamos que se multiplica el tiempo por un factor de 5 nuestro código con Numba.

A continuación de este ejercicio comparamos los resultados de la ruta óptima calculada por ambos algoritmos, corriendo tres ejemplo para cada caso, con los mismos parámetros establecidos previamente.

Rutas óptimas calculadas sin Numba:

```
In [11]: print(distancia)
    print(ruta)
    print(tiempo_ejec)

    3337.113634493085
    [0, 1, 5, 6, 12, 13, 11, 15, 9, 16, 14, 7, 2, 4, 10, 8, 3, 0]
    0.9038689136505127

In [20]: print(distancia)
    print(tiempo_ejec)

    3353.4536058912754
    [0, 3, 2, 4, 9, 16, 14, 7, 10, 8, 15, 11, 13, 12, 6, 5, 1, 0]

    5.282973051071167

In [22]: print(distancia)
    print(ruta)
    print(ruta)
    print(tiempo_ejec)

    3266.456452336076
    [0, 1, 5, 6, 12, 13, 11, 15, 8, 10, 9, 16, 14, 7, 2, 4, 3, 0]
    0.8811595439910889
```

Rutas óptimas calculadas con Numba:

```
In [14]: print(distancia)
    print(ruta)
    print(tiempo_ejec)
    3332.348304772912
    [0, 1, 5, 6, 12, 13, 11, 15, 10, 8, 9, 14, 16, 7, 2, 4, 3, 0]
    5.391537666320801

In [16]: print(distancia)
    print(tiempo_ejec)
    3341.316828737772
    [0, 3, 4, 2, 7, 9, 14, 16, 10, 8, 15, 11, 13, 12, 6, 5, 1, 0]
    5.332757234573364

In [18]: print(distancia)
    print(ruta)
    print(tiempo_ejec)
    3269.2653147263823
    [0, 1, 5, 6, 12, 13, 11, 15, 8, 10, 9, 14, 16, 7, 2, 4, 3, 0]
    5.47429616149902
```

Las mejoras que se hicieron a Numba aumentaron el tiempo de ejecución y la distancia mínima calculada se mantiene en el mismo rango de valores que sin Numba. Por tanto implementar nuestro algóritmo con Dask.

6. Conclusiones

Uno de los más aspectos importantes a mencionar del problema TSP que buscamos resolver con nuestra implementación del método de Hill Climbing, es que el espacio de posibles soluciones tiene un crecimiento factorial, esto es, para un conjunto de n ciudades se tiene un total de n! rutas posibles. Esto hace que no sea factible explorar todo el espacio de soluciones y sea necesario utilizar métodos que lo hagan de forma aleatoria pero suficientemente amplia, como lo hace Hill Climbing. Invariablemente, conforme crece el número de ciudades, es necesario que crezca también el espacio a explorar para que se garantice que la mejor ruta es suficientemente cercana al mínimo Global.

Por lo anterior, fue necesario realizar nuestro perfilamiento de código restringiendo el problema y la implementación del método a condiciones que nos diera una solución óptima (mejor ruta, más corta) con una exploración suficiente del espacio de soluciones (rutas posibles). Para ello consideramos un subconjunto de 17 ciudades de nuestro data set y se utilizaron 300 puntos iniciales (random-restart).

Durante el perfilamiento de nuestro método, nos permitió aplicar las funciones que nos ayudaron a conocer la anatomía de nuestro método durante el proceso de ejecución y ser capaces de identificar en qué partes de nuestro código se concentra el tiempo de ejecución y el incremento en el uso de memoria RAM.

Por lo anterior, particularmente los puntos primero y último, hemos establecido que nuestro principal enfoque sería reducir los tiempos de ejecución realizando reimplementaciones, con lo cual incrementaríamos la exploración del espacio de soluciones lo que nos permitiría obtener una ruta suficientemente cercana a la más corta.

Basado en estos datos del perfilamiento implementamos mejoras en las parte del código con las que se tenia mayor interacción. Pero aun usando Numba notamos que los tiempos son más pequeños en el ejemplo sin que con Numba, en este ejemplo aumentaron los tiempos de ejecución en más de 5x. A pesar de haber tomando dicha acción, ni los tiempos de ejecución y la solución dada por el algoritmo, cómo la ruta más corta, mostraron mejoras sustanciales con esta implementación. Dado estos resultados se tomó la decisión de modificar nuestro código para la práctica final, con el objetivo de utilizar frameworks cómo Dasky el modulo de python multiprocessing, para implementar el computo en paralelo que nos ayudará a tener mejores resultados. Además para acelerar la ejecución del algoritmo realizaremos la implementación de la paralelización en GPU en un contenedor con Kale.

7. Referencias

- 1. Hill Climbing
- 2. How to Implement the Hill Climbing Algorithm in Python (towards data science)
- 3. Erick Palacios Moreno (2021), Optimización, Nota 5.3
- 4. OR tools TSP
- 5. Russell, Stuart J.; Norvig, Peter (2003), Artificial Intelligence: A Modern Approach (2nd ed.), Upper Saddle River, New Jersey: Prentice Hall.