

Borja Calvo · Josu Ceberio · Usue Mori

BILAKETA HEURISTIKOAK

Teoria eta adibide praktikoak R lengoaian

Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU)
© 2015

Edukia

1	Oinarrizko kontzeptuak	1
1.1	Sarrera	1
1.1.1	Hastapen historikoa	1
1.2	Optimizazio-problemak	3
1.2.1	Problemen konplexutasuna	4
1.2.2	Problema klasikoak	8
1.3	Optimizazio-problemak ebazten	16
1.3.1	Helburu-funtzioa	19
1.3.2	Bilaketa-espazioa: soluzioen kodeketa	20
1.3.3	Bilaketa-espazioa: murrizketak	22
1.3.4	Algoritmoak	25
2	Soluzio bakarrean oinarritutako algoritmoak	29
2.1	Kontzeptu orokorrak	29
2.1.1	Soluzioen inguruneak	29
2.1.2	Optimo lokalak	36
2.2	Bilaketa lokala	39
2.2.1	Hasierako soluzioaren aukeraketa	43
2.2.2	Inguruneko soluzioaren aukeraketa	44
2.2.3	Bilaketa lokalaren elementuen eragina	46
2.3	Bilaketa lokalaren hedapenak	48
2.3.1	Hasieraketa anizkoitza	49
2.3.2	Inguruneko soluzioen hautaketa	57
2.3.3	Optimizazio problemen «itxura» aldaketa	69
2.3.4	<i>Smoothing</i> algoritmoak	71
3	Populazioetan Oinarritutako Algoritmoak	75
3.1	Algoritmo Ebolutiboak	76
3.1.1	Urrats orokorrak	77
3.1.2	Algoritmo Genetikoak	82
3.1.3	Estimation of Distribution Algorithms	90

3.2	Swarm Intelligence	95
3.2.1	<i>Ant Colony Optimization</i>	95
3.2.2	Particle Swarm Optimization	105
4	Algoritmoen konparaketa: Esperimentazioa	111
4.1	Problemaren instantzien aukeraketa	112
4.2	Konparaketaren baldintzak	113
4.3	Parametroen aukeraketa	114
4.4	Algoritmoak exekutatu eta emaitzak aztertu	118
4.5	Konparaketa grafikoa	121
4.6	Test estatistikoak	125
A	R: Oinarrizko kontzeptuak	133
A.1	R eta RStudio instalatzen	133
A.1.1	Paketeen instalazioa	134
A.1.2	Garapenerako ingurune integratuak	135
A.2	Oinarrizko datu-egiturak	136
A.2.1	Bektoreak	136
A.2.2	Zerrendak	138
A.2.3	Objektuen atributuak	139
A.3	Inguruneak	144
A.4	Funtzioak	145
A.5	Objektuak: Oinarrizko motak hedatzen	150
A.5.1	S4 Klaseen definizioa	150
A.5.2	Kontrol-egiturak eta begiztak	154
A.5.3	if agindua	154
A.5.4	switch agindua	155
A.5.5	for agindua	156
A.5.6	while agindua	156
A.5.7	Bestelako aginduak	157
A.6	Begiztak eta paralelizazioa	157
A.6.1	sapply funtzioa	158
A.6.2	lapply funtzioa	159
A.6.3	apply funtzioa	160
A.6.4	Noiz erabili for eta noiz ez	161
A.7	Ausazko zenbakiak	161
A.8	Grafikoak ggplot2 paketearekin	163
B	R Programazio Estilo-Gida	169
B.1	Izenak	170
B.2	Sintaxia	171
B.3	Tarteak	172
B.4	Dokumentazioa	173
B.5	Fitxategien egitura	173
B.6	Funtzioak	174

B.7 Beste arau batzuk	174
B.8 Beste gomendio batzuk.....	174
.....	177

Kapitulua 1

Oinarrizko kontzeptuak

Lehenengo kapitulu honetan optimizazioaren ikuspegi globala aurkeztuko dugu, oinarrizko kontzeptuak azalduz. Kapitulu bi zatitan dago banatuta; lehenengoan optimizazio-problema izango dira aztergai eta, bereziki, horien konplexutasuna, horixe baita metodo heuristikoak erabiltzeko motibaziorik garrantzitsuenak. Heuristikoak dira, bigarren zatia protagonista. Zehazki, heuristikoak diseinatzeko eta erabiltzeko kontuan eduki beharreko kontzeptuak aztertuko ditugu.

1.1 Sarrera

Optimizazioa oso kontzeptu hedatua da, askotan baitarabilgu –konturatu barik bada ere—. Problema baten aurrean *soluzio bat baino gehiago* daudenean, soluzio horien *kalitatea* neurtzeko eraren bat izanez gero, *soluziorik onena* bilatzea izango da optimizazioaren helburua. Definizio orokor horren barruan problema mota asko sartzen diren arren, liburu honetan, *optimizazio konbinatorioko* problemetan zentratuko gara batez ere. Optimizazio-problema aspalditik aztertutako izan diren arren, matematika aplikatuan duela ez askorik bereizi den ikerkuntza-arloa da optimizazioa.

1.1.1 Hastapen historikoa

Lehen Mundu Gerra amaitu zenean, garaileek Alemaniari oso baldintza gogorrak inposatu zizkieten Versailles-eko itunean; besteak beste, Alemaniak armada izatea zeharo debekatuta zeukan. Are gehiago, itun horrek jasotzen zituen baldintza ekonomikoen ondorioz 1920ko hamarkadan Alemaniako egoera nahiko larria izan zen; hala ere, krisi-momentu horretan, pertsona batek promes egin zuen herrialdea larrialdi horretatik aterako zuela... Pertsona hori

Hitler zen eta 1933an hauteskundeak irabaziz boterea lortu zuen; orduan, Bigarren Mundu Gerra ekarriko zuen gertakizun-sekuentzia bat hasi zen.

1934. urtean Hitler-ek Alemaniako berrarmatze-prozesua agindu zuen, eta 1935eko udaberrirako bere aireko armada –Luftwaffe– Britainia Handi-koaren parekoa zela aldarrikatzen hasi zen. Nazien hegazkin bonbaketarien mehatxua arazo larri bihurtu zen Britainiar Gobernuarentzat, eta, hortaz, aire-defentsa antolatzeari ekin zion. Aireko estatu-idazkariak «Imperial College of Science and Technology»ko errektoreari aireko defentsaren arazoa aztertuko zuen batzordea sortzeko eskatu zion; batzorde horren lanaren ondorioz, 1935eko udan, Robert Watson-Watt-ek radarra asmatu zuen. Tresna oso erabilgarria izan arren, etekin guztia ateratzeko, defentsa-sisteman – behatokiak, ehiza-hegazkinak, artilleria antiaereoak, ...– integratu beharra zegoen, eta arduradunak laster konturatu ziren ez zela lan erraza izango. Izan ere, defentsa operazioen antolakuntza, bere osotasunean, oso arazo konplexua zen. Hori dela eta, problema ikuspegi matematikotik ikertzen hasi ziren; eta hortik, gaur egun ezaguna den Ikerkuntza Operatiboa sortu zuten.

Bigarren Mundu Gerran zehar operazioen antolakuntza «matematikoa»k arrakasta handia izan zuen britainiar armadan, eta, hortik, Estatu Batuetako armadara hedatu zen. 1945ean, gerra amaitu zenerako, mila pertsonatik gora zeuden Ikerkuntza Operatiboan lanean britainiar armadan.

Gerra amaitu ostean, Europako herrialdeen egoera oso larria zen: herrialdeak suntsituta, baliabideak gerran xahututa ... Hurrengo urteetan, herrialdeak berreraikitzeke erronkari aurre egiteko, gerrak iraun bitartean operazio militarrek antolatzeko garatutako metodologia matematikoak bereziki egokiak zirela konturatu ziren agintariak. Adibide gisa, Dantzigek –gerran AEBko armadan ziharduena– 1947an Ikerkuntza Operatiboko algoritmorik ezagunena, Simplex algoritmoa, proposatu zuen.

Arlo berri honek ikertzaileen arreta erakarri zuen, eta gerraosteko garaian hedapen nabarmena izan zuen. Hasierako urteetan planteatzen ziren algoritmoek soluzio zehatzak lortzea zuten helburu baina teknika hauek problema mota konkretu batzuk ebazteko erabil zitezkeen bakarrik –problema linealak, adibidez–. 1970eko hamarkadan zientzialariek problemen konplexutasuna aztertzeari ekin zioten. Bestalde, konputagailu pertsonalak agertu ziren merkatuan. Problema batzuetan *konplexutasun* - *tamaina*-ren konbinazioaren ondorioz, soluzio zehatza lortzea ezinezkoa zen. Hori dela eta, merkatuan algoritmo heuristikoak agertzen hasi ziren, zeinek, soluzio onena ez bermatu arren, soluzio onak ematen zituzten denbora laburrean.

Metodo heuristikoak oso interesgarriak izan arren, desegokiak ziren problema berrietan berrerabiltzeko. Hori dela eta, 1975etik aurrera, bilaketa heuristiko edo metaheuristika deritzen hurbilketak hasi ziren garatzen zientzialariak. Hona hemen adibide eta data batzuk:

- 1975 - John Hollandek algoritmo genetikoak proposatu zituen
- 1977 - Fred Gloverrek *scatter search* algoritmoa proposatu zuen
- 1983 - Kirkpatrick eta lankideek *simulated annealing* edo suberaketa simulatua proposatu zuten

- 1986 - Fred Gloverrek tabu-bilaketa algoritmoa proposatu zuen
- 1986 - Gerardo Beniék eta Jing Wangek *swarm intelligence* kontzeptua proposatu zuten
- 1992 - Marco Dorigoek *Ant Colony Optimization* (ACO) algoritmoa proposatu zuen
- 1996 - Muhlenbeinek eta Paassek *Estimation of Distribution Algorithms* (EDAs) kontzeptua proposatu zuten

1.2 Optimizazio-problemak

Egunero erabakiak hartzen dira nonahi; enpresetan, zientzian, industrian, administrazioan... Geroz eta konpetitiboagoa den mundu honetan, erabakiak hartzeko prozesu hori arrazionalki hurbildu beharra daukagu.

Erabaki-hartzea hainbat pausotan bana daiteke. Lehendabizi, problema formalizatu behar da, gero matematikoki modelatu ahal izateko. Behin problema modelaturik, soluzio onak topatu behar ditugu problemarentzat – soluzio optimoa zein den erabaki, alegia–.

Problema erreal batean dihardugunean, hartutako erabaki optimoak praktikan jarri beharko genituzke, egiaztatzeko ea funtzionatzen dutenetz; arazoren bat egonez gero, atzera joz problemaren formulazioa berrikusteko.

Adibidea 1.1 *Demagun plastikozko piezak ekoizten dituen enpresa bateko logistika-sailean lan egiten dugula. Lantegian zenbait makina, lehengaiak eta ekoiztutako piezak biltzeko biltegi bat, eta abar daude. Igandero, asteko eskaera aztertuz, plangintza egin behar dugu; zer pieza ekoitzi lehenago, zer makinatan, noiz bidali bezeroi... Plangintza era eraginkorrean eginez gero, eskaera gehiago asetzeko gai izango gara, eta, hortaz, diru gehiago irabaziko du enpresak. Plangintza optimoa bilatzeko, lantegiak dituen ezaugarriak –biltegiaren tamaina, makinen berezitasunak, denborak,...– aztertu eta problema formalizatu egin behar dugu, zeren matematikoki nola hurbildu eta ebaz daitekeen erabakitzeko ezinbestekoa baita.*

Optimizazio-problemak formalizatzean bi elementuri atzeman beharko diegu. Lehenik eta behin, problemaren soluzio guztien multzoari, *soluzio bideragarrien espazio* edo *bilaketa-espazio* deiturikoari. Eta, bigarren, soluzio optimoa topatzeko optimotasuna definitzen duen *helburu-funtzioari*. Soluzio bideragarrien multzoa S sinboloa erabiliz adieraziko dugu, eta helburu funtzioa, berriz, f erabiliz:

$$f : S \rightarrow \mathbb{R}$$

Optimizazio-problema *optimo globala* –hau da, soluziorik onena– topatzean dautza. Optimotasuna helburu-funtzioaren arabera izan arren, beti bi aukera izango ditugu: funtzioa maximizatzea edo minimizatzea. Hemendik aurrera, azalpen guztiak bateratzeko asmoarekin, xedea helburu-funtzioa *minimizatzea* dela joko dugu¹.

Definizioa 1.1 Minimizatze-problema. *Izan bedi S soluzio bideragarrien multzoa eta $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ helburu-funtzioa. Minimizazio-problema optimo globala $s^* \in S$ topatzean datza non $\forall s \in S, f(s^*) \leq f(s)$*

Optimizazio-problema bat era eraginkorrean ebazteko, hiru ezaugarriok aztertu beharko ditugu:

- Problemaren tamaina
- Problemaren konplexutasuna
- Eskuragarri ditugun baliabideak (denbora, konputazio-baliabideak, etab.)

Problemak ebazteko behar den denborari erreparatuz –baliabide garrantzitsuena izan ohi dena–, problema mota oso ezberdinak aurkitu ditzakegu. Hala nola, kasu batzuetan denbora oso murriztuta egongo da, kontrol-problemetan gertatzen den legez². Beste muturrean diseinu-problema ditugu, non helburua ahalik eta soluziorik onena topatzea den denborari erreparatu gabe. Optimizazio-problema gehienak bi kasu horien erdibidean kokatzen dira, eta beraz, denbora-muga bat izango dugu ebazteko.

Problemaren konplexutasuna edozein izanda ere, beti tamaina batetik aurrera ezinezkoa izango da metodo zehatzen bidez ebaztea. Aurrerago ikusiko dugun bezala, kasu horietan metodo heuristikoetara jotzea beharrezkoa izango da.

1.2.1 Problemen konplexutasuna

Problema baten konplexutasuna da hura ebazteko existitzen den algoritmo eraginkorrenaren konplexutasuna da. Algoritmoak problema pausoz pauso ebazteko erabiltzen diren prozedurak dira. Problema mota bakoitzetik *instantzia* ezberdinak izan ditzakegu, eta instantzia horiek *tamaina* bat izango dute. Konplexutasunak problemaren tamaina handitzen den heinean ebazteko behar den denbora edota memoria nola handitzen den neurtzen du; hau da, behar diren baliabideen hazkundearen abiadura tamainarekiko.

¹ Gure helburu-funtzioa maximizatu nahi izanez gero, funtzio berri bat definituko dugu, $g = -f$.

² Problema hauei *real-time optimization* deritze ingelesez.

Adibidea 1.2 *Demagun hiri batzuen zerrenda daukagula zeinen koordenatu geografikoak ezagutzen ditugun. Hirien arteko distantzia kalkulatzeko problema konputazional bat da. Hiri zerrenda bakoitza problemaren instantzia bat izango da; adibidez, zerrendan Donostia, Bilbo eta Gasteiz baditugu, 3 tamainako instantzia bat izango dugu.*

Oso era orokorrean, algoritmoen konplexutasunak n tamainako problema bat ebazteko behar den pauso kopurua neurtzen du.³

Konplexutasunari buruz hitz egiten denean, kontrakorik esan ezean, *kasurik txarrena* aztertu ohi da; halere, kasurik onena eta batezbestekoa ere aztertzen dira, algoritmoen portaeraren irudi zehatzagoa lortzeko. Konplexutasuna neurtzean, pauso kopurua zehatza baino gehiago, kopuru horrek problemaren tamainarekiko nola «eskalatzen» duen interesatzen zaigu.

Adibidea 1.3 *Jo dezagun aurreko adibidean distantzia euklidearra erabil dezakegula hirien arteko distantziak kalkulatzeko. Problema ebazteko, edozein bi hirien arteko diferentzia kalkulatzeko bi biderketa, batuketa bat eta erro karratu bat beharko ditugu; hau da, bikote bakoitzeko lau eragiketa beharko ditugu. Gure problemaren tamaina n bada –zerrendan n hiri baditugu–, $\frac{n(n-1)}{2}$ distantzia kalkulatu beharko ditugu –kontuan hartuz i eta j hirien arteko distantzia behin bakarrik kalkulatu behar dugula eta hiri batetik hiri berdinerara dagoen distantzia ez dugula kalkulatu behar–. Beraz, guztira, $4\frac{n(n-1)}{2} = 2n(n-1)$ eragiketa beharko ditugu.*

Esan dugun legez, balio zehatza ez da garrantzitsuena. Esate baterako, ez du garrantzirik pauso kopurua $10n^2$ edo $0.5n^2$ izateak, kontua eragiketa kopuruaren progresioa tamainarekiko koadratikoa dela baizik; ideia hori O notazioaren bidez adierazi ohi da.

Definizioa 1.2 O notazioa. *Algoritmo batek $f(n) = O(g(n))$ konplexutasuna dauka, n_0 eta c konstante positiboak existitzen badira zeinentzat $\forall n > n_0, f(n) \leq c \cdot g(n)$ betetzen den.*

Beraz, aurreko adibiderako $g(n) = n^2$ izatea nahikoa da definizioa betetzeko; izan ere, $2n^2 > 2n(n-1)$ eta, ondorioz, $c = 2$ bada, ekuazioa beteko da, $n > 0$ bada betiere. Hori kontuan hartuz, beraz, distantzien matrizea kalkulatzeko algoritmoaren konplexutasuna $O(n^2)$ dela esango dugu.

Konplexutasun-maila ezberdinak defini daitezke; 1.1 taulak maila ohikoenak biltzen ditu. Oinarrizko operazio bakoitzak milisegundo behar duela jotzen badugu, taulan, n tamaina ezberdinetarako, konplexutasun desberdinetako problemen exekuzio denborak daude kalkulatu.

³ Denboran ez ezik, espazioan ere neur daiteke konplexutasuna; kasu horretan, pauso kopurua baino gehiago, behar dugun memoria aztertu beharko genuke. Edonola ere, optimizazio problematan denbora-konplexutasuna aztertu ohi da.

1.1 taula Konplexutasun-mailak gehi exekuzio-denbora tamainaren arabera. Adibide gisa, erreferentzia-operazioaren iraupena milisegundo bat da.

Maila	Notazioa	$n = 1$	$n = 5$	$n = 10$	$n = 20$
Lineala	$O(n)$	0.001 seg	0.005 seg	0.01 seg	0.020 seg
Koadratikoa	$O(n^2)$	0.001 seg	0.025 seg	0.100 seg	0.4 seg
Kubikoa	$O(n^3)$	0.001 seg	0.125 seg	1 seg	8 seg
Esponentziala	$O(2^n)$	0.002 seg	0.032 seg	1.024 seg	17.4 min
Faktoriala	$O(n!)$	0.001 seg	0.12 seg	1 ordu	7.7 milurteko
Hiper-esponentziala	$O(n^n)$	0.001 seg	3.12 seg	115 urte	*

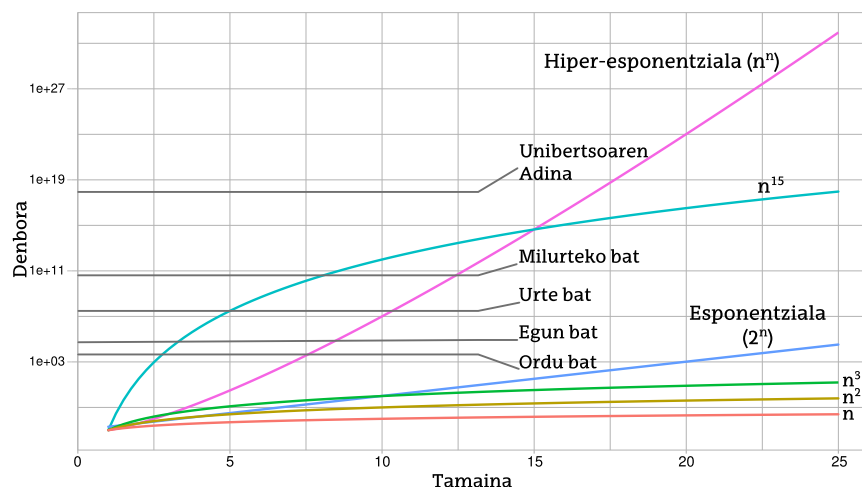
* $3.23 \cdot 10^8$ aldiz unibertsoaren adina

Aintzat hartzekoa da konplexutasun-analisiak $n \rightarrow \infty$ limitean dugun portaera adierazten duela. Izan ere, n finitua denean konplexutasun-mailek zentzua gal dezakete, hurrengo adibidean ikus daitekeen bezala.

Adibidea 1.4 Demagun problema bat ebazteko hiru algoritmo ditugula: P , polinomikoa, $O(n^{10})$; E , esponentziala, $O(5^n)$, eta H , hiper-esponentziala, $O(n^n)$. Dakigunez, $n \rightarrow \infty$ kostuaren arabera ordena $P < E < H$ da, baina zer gertatzen da n finitua denean? $n = 7$ bada, algoritmoen kostuak hauexek izango dira: $P = 7^{10}$; $E = 5^7$; $H = 7^7$. Hau da, kostuaren arabera ordenatzen baditugu, kostu txikiena duena E da, eta ez P -izatez, P kosturik handiena duena da. Hau $5 < n < 10$ betetzen da, $n < 5$ denean egoera zertxobait ezberdina baita. Demagun $n = 2$ dela eta, beraz, kostuak $P = 2^{10}$; $E = 5^2$; $H = 2^2$ direla. Kasu horretan E -ren ordeztu H , algoritmo hiper-esponentziala, da kosturik txikienekoa. Hau da, kostuaren arabera ordena konplexutasunarekiko alderantzizkoa da, $H < E < P$.

1.1 irudiak konplexutasun-ordena batzuen funtzioak erakusten ditu. Y ardatzak denbora segundotan adierazten du eta eskala logaritmikoa dago. Grafikoan ikus dezakegun bezala, funtzio linealak, koadratikoak eta kubikoak ordubeteko mugatik behera mantentzen dira, eta, haien hazkunde-abiadura ikusita, hor mantenduko dira problema-tamaina (n) handietarako ere. Halere, konplexutasun polinomikoaren kasuan, berretzailea handitzen den heinean, denboraren kurba geroz eta azkarrago hazten da, batez ere problemaren tamaina txikia denean. Adibide gisa, problemaren tamaina txikia denean n , 15 baino txikiagoa denean, zehazki, $O(n^{15})$ da konplexutasunik «garestiena» hiper-esponentzialaren gainetik. Dena dela, esan dugun moduan, konplexutasuna aztertzean abiadura da interesatzen zaiguna; hau da, grafikoan agertzen diren kurben deribatua edo malda. Grafikoan argi ikusten da, $n \rightarrow \infty$ denean, funtzio hiper-esponentzialaren hazkunde abiadura dela handiena, gero esponentzialarena eta polinomikoa.

Hasieran esan dugun legez, problema baten konplexutasuna problema hori ebazteko ezagutzen den algoritmorik eraginkorrenaren konplexutasuna da.



1.1 irudia Konplexutasun-ordena tipikoen hazkunde-abiadura n -rekiko.

Adibidez, bektore bat ordenatzeko ezagutzen den metodorik eraginkorrena –kasurik txarrean– $O(n \log n)$ ordenakoa da, eta, ondorioz, bektoreen ordenazioa $O(n \log n)$ mailakoa dela esaten da.

Problema konputazionalak bi klasetan banatzen dira, konplexutasunaren arabera: P, problema polinomikoak, eta NP, problema ez-polinomikoak.

- **P klasea** - Klase honetan dauden problementzat badago algoritmo determinista bat problemaren edozein instantzia denbora polinomikoan ebazten duena.
- **NP klasea** - Klase honetan dauden problementzat ez da existitzen algoritmo deterministikorik problema denbora polinomikoan ebazten duenik.⁴

NP klasean, NP-oso deritzon azpiklase bat definitzen da (*NP-complete*, ingelesez). Problema bat NP-oso dela esango dugu baldin eta *edozein* NP problema, denbora polinomikoan, problema hori bihurtu baldin badaiteke.

Sailkapen hau erabaki-problemei zuzendua egon arren, optimizazio-problementzat ere erabiltzen da; hau da, optimizazio-problema bat P izango da (era berean, NP) dagokion erabaki-problema P bada (edo NP). Era berean, NP-oso terminoa erabaki-problementzat erabiltzen denean; optimizazio-problemetan, aldiz, NP-zaila terminoa (*NP-hard*, ingelesez) erabiltzen da.

Intuizio gisa, problema bat NP-zaila dela esaten denean, hura ebazteko zailtasuna nabarmena dela adierazi nahi da. Jarraian, adibide gisa aipatuko ditugun problema guztiak, azpiklase honen parte dira.

⁴ Problema hauek polinomikoak diren algoritmo *estokastikoak* erabiliz ebatz daitezke; beste era batean esanda, soluzioak denbora polinomikoan ebalua daitezke.

1.2.2 Problema klasikoak

Errealitatean ebatzi behar izaten diren optimizazio-problema guztiak ezberdinak dira, kasu bakoitzak bere murrizketa edota baldintza bereziak baititu. Diferentziak diferentzia, problema askoren mamia bertsua da; hala nola, garraio-problemak, esleipen-problemak, antolakuntza-problemak, etab. Hori dela eta, optimizazioan, askotan, problema teorikoak aztertzea izaten da ohikoena, hain zuzen errealitatean topa ditzakegun problemen abstrakzioak edota sinplifikazioak. Atal honetan optimizazio-problema teoriko klasiko batzuk aztertuko ditugu.

1.2.2.1 Garraio-problemak

Merkantzien edota pertsonen garraioarekin zerikusia duten optimizazio-problema Ikerkuntza Operatiboan aztertu izan diren lehenetarikoak dira. Oinarritzko garraio-probleman, iturburu-puntuak eta helburu-puntuak ditugu; halaber, iturburu-puntu bakoitzetik helburu-puntu bakoitzera merkantzia garraiatzeko kostua ezaguna da, eta kostu-matrizean jasotzen da. Iturburu-puntu bakoitzaren eskaintza eta helburu-puntu bakoitzaren eskaera ezagunak dira. Problemaren helburua eskaera guztiak asetzeko kostu minimoko garraio-eskema topatzea da, iturburu-puntuak dituen mugak (eskaintzak) gainditu barik.

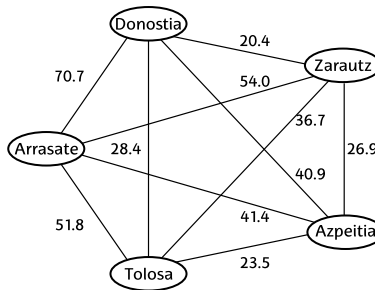
Problema sinple hau eredu linealen bidez modela daiteke, eta, hortaz, badaude algoritmo eraginkorrak ebazteko. Alabaina, badaude garraioari buruzko beste hainbat problema klasiko NP-zailak direnak. Ezagunena, *Traveling Salesman Problem* [16] da —hau da, Saltzaile Bidaiariaren Problema—.

Adibidea 1.5 Saltzaile Bidaiariaren Problema (Travelling Salesman Problem, TSP) *Demagun saltzaile bidaiariak garela eta egunero hainbat bezero bisitatu behar ditugula. Bezero bakoitza herri batean bizi da, eta, edozein bi herriren arteko distantzia ezaguna izanda, gure helburua da herri guztietatik behin eta bakarrik behin pasatzen den ibilbiderik motzena topatzea.*

Problema honen hastapenak Irlandan daude, Hamilton matematikariaren lanetan. Problema formalizatzeko grafo oso bat eraiki dezakegu non erpinak herriak diren eta edozein bi erpinen artean pisu konkretu bateko ertz bat definitzen den; ertzen pisua, lotzen dituen bi herrien arteko distantzia da (ikus 1.2 irudia). Horrela ikusita herri bakoitzetik bakarrik behin igaro nahi badugu, problemaren soluzioak ziklo hamiltoniarrak izango dira —hots, nodo guztiak behin eta bakarrik behin agertzen diren zikloak—. Ziklo hamiltoniar guztien artean pisu total minimoa duena bilatu nahi dugu.



(a) Mapa



(b) Dagokion grafoa

1.2 irudia TSParen adibide bat, bost herrirekin

Arrasate, Zarautz, Tolosa, Azpeitia, Donostia ibilbidea, irudian agertzen den problemarentzako soluzio posible bat da; eta haren ebaluazioa ondorengoia izango da:

- Arrasate - Zarautz: 54.0
- Zarautz - Tolosa: 36.7
- Tolosa - Azpeitia: 23.5
- Azpeitia - Donostia: 40.9
- Donostia - Arrasate: 70.7

Hortaz, ibilbidearen distantzia totala 225.8 da. Ikus dezagun adibidea R-n. Lehenik eta behin, metaheuR paketea kargatu, eta problemaren helburu-funtzioa sortuko dugu:

```
> library("metaheuR")
> cost.matrix <- matrix(c(0,      20.4, 40.9, 28.4, 70.7,
+                          20.4, 0,      26.9, 36.7, 54,
+                          40.9, 26.9, 0,      23.5, 41.4,
+                          28.4, 36.7, 23.5, 0,      51.8,
+                          70.7, 54,      41.4, 51.8, 0), nrow=5)
> city.names <- c("Donostia", "Zarautz", "Azpeitia",
+                 "Tolosa", "Arrasate")
> colnames(cost.matrix) <- city.names
> rownames(cost.matrix) <- city.names
> cost.matrix

##           Donostia Zarautz Azpeitia Tolosa Arrasate
## Donostia      0.0    20.4    40.9    28.4    70.7
## Zarautz      20.4      0.0    26.9    36.7    54.0
## Azpeitia     40.9    26.9      0.0    23.5    41.4
## Tolosa       28.4    36.7    23.5      0.0    51.8
## Arrasate     70.7    54.0    41.4    51.8      0.0

> tsp.example <- tspProblem(cmatrix=cost.matrix)
```

Orain, lehen aipatutako soluzioa sortu eta ebaluatuko dugu.

```
> solution <- permutation(c(5, 2, 4, 3, 1))
> tsp.example$evaluate(solution)

## [1] 225.8
```

Hona hemen pentsatzeko galdera batzuk:

- Distantzia totala 225.8km-koa da, baina ibilbide hau distantzia minimokoa al da?
- Proba egin ezazu, adibidez, Azpeitia eta Tolosa trukaturik. Soluzio berri hori hobe ala okerragoa da?
- Zenbat ibilbide daude bost herri hauek behin eta bakarrik behin bisitatzen dituztenak?

Ariketa 1.1 *Inplementa ezazu funtzio bat n tamainako TSP problema bat eta beraren ebaluazio-funtzioa emanda, soluzio guztiak ebaluatuz bide motzena topatzen duena.*

Ikus dezagun nola formaliza daitekeen TSP problema matematikoki:

Definizioa 1.3 TSP problema - *Izan bedi $H = h_1, \dots, h_n$ kokapen zerrenda eta $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ distantzia-matrizea, non c_{ij} h_i eta h_j kokapenen artean dagoen distantzia den. TSP problema ibilbide optimoa topatzean datza, hau da, kokapen guztietatik behin eta bakarrik behin igarotzen diren ibilbideetatik motzena.*

TSParen definizioan kostu-matrizea simetrikoa dela jotzen da. Hala ere, kasu errealean, posible da norabide batean istripu bat egotea edo bidea noranzko batean eta bestean ezberdinak izatea. Egoera horietan bideen kostuak simetrikoak direla jotzea ez da problema modelatzeko aukerarik logikoa. Hortaz, bi TSP problema mota defini daitezke: simetrikoa eta asimetrikoa.

TSPa oso erabilia da algoritmoak probatzean, eta TSPLIB liburutegian [32] hainbat instantzia eskuragarri daude, orain arte lortutako soluziorik onenen informazioarekin batera.

1.2.2.2 Esleipen-problemak

Matematikako eta, batez ere, Ikerkuntza Operatiboko oinarrizko problemak dira. Esleipen-problemetan aldaera konbinatorio asko aurkitu ditzakegun arren, funtsean denak ondorengo ideian oinarritzen dira:

Demagun n agente ditugula, m ataza burutzeko. Agente bakoitzak kostu konkretu bat du ataza bakoitza burutzeko, eta ataza bakoitza betetzeaz agente bakar bat arduratu behar da. Esleipen-problemaren helburua ataza bakoitzari agente bat esleitzean datza, ataza guztiak burutzeko kostu totala minimizatuz.

Problema honen kasu nabariena Esleipen Problema Lineala da *–Linear Assignment Problem*, ingelesez–, non agente eta ataza kopurua berdina den, eta esleipen kostu totala eta agente bakoitzaren kostuen batura totala ere berdina diren. 1955ean. Harold Kuhn-ek Algoritmo Hungariarra proposatu zuen, zeinak Esleipen Problema Lineala denbora polinomialean ($O(n^4)$) ebazten duena, n agente kopurua izanik. Badago, ordea, esleipen-problema mota bat, NP-zaila dena eta liburuan adibide gisa erabiliko duguna: Esleipen Problema Koadratikoa *–Quadratic Assignment Problem*, QAP, [8] ingelesez–.

Definizioa 1.4 QAP Problema *Izan bitez n lantegi, n kokapen posible, $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ lantegien arteko fluxuen matrizea, eta $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ kokapenen arteko distantzien matrizea. QAP problemaren helburua lantegi bakoitza kokapen batean finkatzean datza, kostu totala minimizatuz.*

1.2.2.3 Antolakuntza-problemak

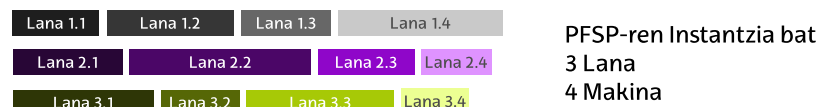
Prozesu, lan edota atazen antolakuntza eta zerbitzatzearekin zerikusia duten optimizazio-problemak dira. Antolakuntza-problemen helburua kudeatzailerak jasotzen dituen lan-eskariak modurik eraginkorrean zerbitzatzea da. Eraginkortasunaren neurria problemaren arabera da; hala ere, eskariak ahalik eta denbora/kostu txikienean asetzea da irizpide ohikoena.

Hasiera batean, antolakuntza-problema gehientsuenak industriarekin zerikusia zuten eremuetan proposatu ziren. Produktuaren ekoizpenerako makineria erabiltzen zen enpresetan, etekina maximizatzea zen helburua, makineriaren eta baliabideen erabilera, mantentze-kostuak, eta abar optimizatuz. Aldi berean, langileen ordutegien planifikazioan antzerako ezaugarriak zituzten problemak ere proposatu ziren.

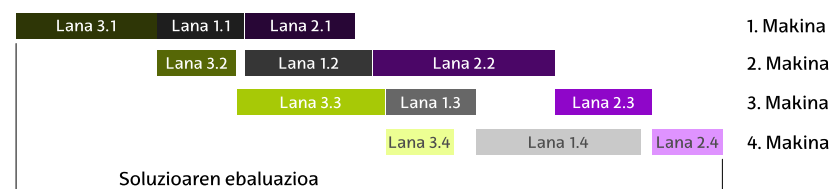
Gaur egun, ordea, problema horiek edozein arlotara daude hedatuta. Esate baterako, konputazioan, konputagailuen Prozesurako Unitate Zentralak (PUZ) *scheduler* eta *dispatcher* izeneko tresnak erabiltzen ditu, jasotzen dituen prozesuak erarik eraginkorrean zerbitzatzeko, denboraren eta memoriaren erabilera minimizatuz.

Adibide gisa, jarraian, antolakuntza-problemetan oso ezaguna den muntaketateko plangintza-problema *–Permutation Flowshop Scheduling Problem*, PFSP [17] ingelesez– aztertuko dugu:

Definizioa 1.5 PFSP problema. *Izan bitez n lan, m makina eta $P \in \mathbb{R}^{n \times m}$ prozesatze-denboren matrizea, non p_{ij} i lanak j makinan prozesatzeko behar duen denbora adierazten duen. Lan bakoitza burutzeko m prozesu aplikatu behar dira, bakoitza makina batean; hau da, j -garren operazioa, j -garren makinan egingo da. Behin i lana j makinan sartzen denean prozesatzeko, eten barik prozesatuko da, eta denbora konkretu bat emango du bertan, p_{ij} . i lana j makinatik irten denean, $j + 1$ makinara pasatuko da hurrengo prozesua burutzera, baldin eta makina hori libre badago. PFS-*



Problemarako soluzio bat: 3. lana, 1. lana, 2. lana



1.3 irudia PFSP problemaren adibide bat. Goiko partean problemaren definizioa dago, hau da, lan bakoitza burutzeko makina bakoitzean behar den denbora. Beheko partean, soluzio bat eta beraren interpretazioa erakusten dira. Helburua denbora totala minimizatzea bada, 3.1 lana hasten denetik 2.4 lana amaitzen den arte igarotzen den denbora da soluzioaren ebaluazioa

Paren gakoa da lanak prozesatzeko denbora totala minimizatzen duen n lanen sekuentzia optimoa aurkitzea.

1.3 irudian problemaren instantzia bat ikus daiteke. Adibide honetan 3 lan burutu behar dira, 4 makinatan. Irudiaren goiko partean lan bakoitzak makina bakoitzean igaro behar duen denbora adierazten da, lauki zuzenen bidez. Irudiaren beheko partean soluzio bat proposatzen da; soluzio horretan, lanak 3,1,2 ordenan prozesatuko dira. Horrek esan nahi du 3. lana 1. makinan sartuko dela. Behar duen denbora pasatzen denean, 2. makinan sartuko da, eta 1. makinan 1. lana sartuko da. Prozesu guztiaren eskema irudian ikus daiteke. Problemaren helburua denbora totala minimizatzea bada, soluzio horren helburu-funtzioaren balioa 3.1 lana hasten denetik 2.4 lana amaitzen den arte igarotzen den denbora izango da.

PFSP antolakuntza-problemen murriztapenik gabeko problema teorikoa da. Problema errealetan, lan kopurua ez da finitua, etengabekoa baizik; kasu horietan, makinaren okupazio maila altua izatea denbora murriztea bezain garrantzitsua izaten da. Zentzu horretan, antzeko problemen aukera oso zabala da [35].

1.2.2.4 Azpimultzo-problemak

Demagun objektu multzo bat dugula, eta multzo horretatik objektu batzuk aukeratu behar ditugula. Aukeraketa ez da ausaz egingo, baizik eta irizpide eta murriztapen batzuei jarraituz. Azpimultzo-problemetan, helburua auke-

raketak ematen dizkigun onurak maximizatzean datza, definitutako murriztapenak betez.

Azpimultzo-problemen hedapena oso zabala da, logistikako alorretan, gehienbat: kargarako garraiobideen betetzea, aurrekontuaren kontrola, finantzen kudeaketa, industriako materialen ebaketa, besteak beste.

Azpimultzo-problemen artean adibide erakusgarriena – eta bidenabar sinplifikagarriena – ingelesez *0-1 Knapsack problem* deritzon 0-1 Motxilaren problema [22] da. Jarraian zehazki azalduko dugu problema hori:

Definizioa 1.6 0-1 motxilaren problema. *Izan bitez n objektu, c motxilaren edukiera maximoa, eta $P \in \mathbb{R}^n$ eta $W \in \mathbb{R}^n$ objektuen balio- eta pisu-bektoreak hurrenez hurren. Problema honetan, n objektuen artetik aukeratzeko ditugun elementuen balio totala maximizatzea dugu helburu, motxilaren edukiera maximoa gainditu gabe betiere.*

1.2.2.5 Grafoei buruzko problemak

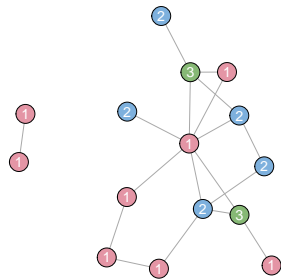
Grafoak matematikan eta informatikan funtsezko egiturak dira. Oro har grafoak objektuen arteko erlazioak adierazteko erabiltzen dira eta, beraz, haien erabilera edozein eremutan da aplikagarria. Hori dela eta, grafoei loturiko problemen multzoa oso zabala da. Esaterako, berriki ikusi ditugun TSP eta QAPak grafo-problema gisa formaliza ditzakegu. Garraiobide- eta esleipen-problemei gain, sareko informazio-trukaketa edota grafoen teoriako problema ugari (deskonposizio-problema, azpimultzo-problema, estaldura-problema, etc.) ebazteko erabili ohi dira.

Atal honetan, ingelesez *Graph Coloring* deritzon grafoen koloreztatze-problema izango dugu aztergai.

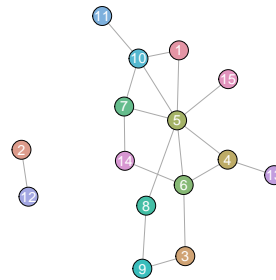
Definizioa 1.7 Grafoen koloreztatze-problema. *Izan bedi $G = (V, E)$ grafoa non V eta E bektoreak grafoaren erpin- eta ertz-multzoak diren, hurrenez hurren; $e_{ij} \in E$ existitzen bada, v_i eta v_j erpinen artean ertza dago. Erpin bakoitzari kolore bat esleitu behar diogu, kontuan hartuz $e_{ij} \in E$ existitzen bada v_i eta v_j nodoek ezin dutela kolore bera izan; hau da, ertz baten bidez lotutako erpinak kolore ezberdinekin koloreztatu behar dira. Problemaaren helburua kolore kopuru minimoa erabiltzen duen koloreztatzea topatzean datza.*

Ikus dezagun adibide pare bat, ausaz sortutako grafo bat erabiliz. Jarraian dagoen R kodean 15 erpin dituen ausazko grafo bat sortu ondoren, koloreztatze-problema bat sortuko dugu, metaheuristikak paketearen bidez erabiliz.

```
> library("igraph")
> set.seed(1623)
> n <- 15
> rnd.graph <- random.graph.game(n, p.or.m=0.2)
> gcol.problem <- graphColoringProblem(rnd.graph)
```



(a) Soluzio bideraezina



(b) Soluzio bideragarria

1.4 irudia Grafoen koloreztatze-problemaren bi adibide. Lehenengoa, (a), bideraezina da, elkar ondoan dauden nodo batzuek kolore berdina baitute. Bigarrena, (b), soluzio bideragarri tribiala da, nodo bakoitzak kolore ezberdin bat baitu.

Ausazko soluzio bat sortzen dugu, bakarrik 3 kolore erabiliz. Kontuan hartu behar da soluzioak `factor` motako bektore bat izan behar duela, non balio posibleen kopuruak nodo kopuruaren berdina izan behar duen (kasurik txarrean, grafo osoa denean, nodo bakoitzak kolore ezberdin bat izan beharko du). Ausazko soluzioa ea bideragarria denetz egiaztatuko dugu, problema definitzean `valid` sortutako funtzioa erabiliz.

```
> l <- paste("c", 1:n, sep="")
> rnd.sol <- factor(sample(l[1:3], size=n, replace=TRUE), levels=l)
> rnd.sol

## [1] c1 c1 c1 c3 c1 c2 c2 c1 c1 c3 c2 c1 c1 c2 c2
## Levels: c1 c2 c3 c4 c5 c6 c7 c8 c9 c10 c11 c12 c13 c14
c15

> gcol.problem$valid(rnd.sol)

## [1] FALSE

> gcol.problem$plot(rnd.sol, node.size=15, label.cex=1.5)

## Loading required package: colorspace
```

Soluzioa bideraezina da, 1.4 (a) irudian ikus daitekeen legez. Soluzio bideragarri bat sortzeko era sinple bat badago: nodo bakoitzari kolore ezberdin bat esleitu (ikusi 1.4 (b) irudia).

```
> trivial.sol <- factor(1, levels=l)
> trivial.sol

## [1] c1 c2 c3 c4 c5 c6 c7 c8 c9 c10 c11 c12 c13 c14 c15
```

```
## Levels: c1 c2 c3 c4 c5 c6 c7 c8 c9 c10 c11 c12 c13 c14
c15

> gcol.problem$valid(trivial.sol)

## [1] TRUE

> gcol.problem$plot(trivial.sol, node.size=15, label.cex=1.5)
```

1.2.2.6 Karaktere-kateko problemak

Optimizazio konbinatorioko karaktere-kateen arteko erlazioak aurkitzeaz arduratzen diren problemen multzoa da. Problema ezagunenetarikoa bat azpisekuentzia komun luzeenaren problema da *–Longest Common Subsequence Problem*, LCSP–da. Izenak berak adierazten duen bezala, ditugun karaktere-kateen edo sekuentzien artean komuna den azpisekuentzia luzeena bilatzen duen problema da.⁵

Adibidea 1.6 Demagun hiru DNA sekuentzia ditugula; CAC-GACGCGT, CGTTTCGCAG eta CTTGCGCGA. Hiru sekuentzietan dagoen azpisekuentzia komun luzeena CGCGCG da; hau da, caC-GaCGCGt, CGtttCGCaG eta CttGCGCGa dauzkagu. Beste edozein letra sartuz gero, azpisekuentzia ez da sarrerako hiru sekuentzietan agertuko.

LCSPa formalizatzeko lehendabizi azpisekuentzia kontzeptua definitu behar dugu.

Definizioa 1.8 Izan bedi Σ alfabetoan definitutako n tamainako sekuentzia $S = (s_1, \dots, s_n)$, hau da, $\forall i = 1, \dots, n, s_i \in \Sigma$. $S' = (s_{a_1}, \dots, s_{a_m})$ S -ren azpisekuentzia da, baldin eta soilik baldin $a_i \in \{1, \dots, n\}$ eta $\forall j = 2, \dots, m, a_{j-1} < a_j$.

Hau da, azpisekuentzia batean jatorrizko sekuentzian dauden elementuen azpimultzo bat izango dugu, *jatorrizko sekuentzian agertzen diren ordena berdinarekin*. Sekuentzia bat emanda, bere zenbait elementu ezabatuz lor ditzakegu azpisekuentziak.

⁵ Kontutan hartu azpisekuentzia eta karaktere azpi-kate kontzeptuak ezberdinak direla, bigarrenetan hautatutako elementuak jarraian egon behar baitira jatorrizko sekuentzian baina lehenengoan ez. Hau da, CTTTCGTCATA sekuentzia badugu, TCGTCA bai azpisekuentzia eta baita azpi-katea ere bada, baina GTA azpisekuentzia izan arren ez da azpi-katea

Bi sekuentzia besterik ez badugu $-m$ eta n tamainakoak—programazio dinamikoa erabiliz⁶ $O(mn)$ konplexutasunarekin ebatz daiteke LCSP-a; sekuentzia kopurua finkaturik gabe badago, ordea, problema NP-zaila da.

Definizioa 1.9 Longest Common Subsequence Problem (LCSP) *Izan bitez Σ alfabetoan definitutako tamaina ezberdineko k sekuentzia S_1, \dots, S_k . Izan bedi k sekuentzien azpisekuentzia diren sekuentzia multzoa \mathcal{C} . LCSPren helburua $C^* \in \mathcal{C}$ sekuentzia topatzea da, non $\forall C_i \in \mathcal{C} \ |C_i| > |C^*|$.*

LCSP bezalako problemak ohikoak izaten dira terminaleko komandoetan, adibidez, `diff` edo `grep` komandoetan.

Azken hamarkadetan, ordea, Bioinformatika arloak entzute handia lortu duela-eta, karaktere-kateko problema ugari proposatu dira. Horietako bat, sekuentzia-zati muntaketa-problema —*Fragment Assembly Problem*, FAP, ingelesez— da. DNA-ren sekuentziaziorako teknologia ez dago hain aurreratua, eta gaur egun oraindik ezinezkoa da genomen karaktere-kateak osorik irakurtzea. Hori dela eta, DNA zatitxoak irakurtzea ahalbidetzen duten bestelako teknikak erabiltzen dira.

Testuinguru horretan, sekuentzia-zati mutaketa-problemaren helburua, azpisekuentzietatik abiatuta, sekuentzia bakar bat osatzea da. LCSPn antzera, azpisekuentzia komunak modu eraginkorrean detektatzea ezinbestekoa da, prozesuaren bukaeran DNA-sekuentzia fidagarri bat lortzeko.

1.3 Optimizazio-problemak ebazten

Ikerkuntza Operatiboaren hasierako urteetan hainbat problemaren soluzio zehatzak topatzeko algoritmoak proposatu ziren. Adibiderik ezagunena 1947an proposatutako Simplex algoritmoa da.

Hurbilketa hori —algoritmo zehatzak erabiltzea, alegia— problema sinpleentzat egokia izan arren, problemaren konplexutasuna edota tamaina handitzen denean bideraezin bihurtu daiteke. Konplexutasunak algoritmoa aplikatzeko behar dugun denboraren hazkunde-abiadura adierazten du; ordena handiagoa edo txikiagoa izan daiteke, baina abiadura beti positiboa da;

hau da, zenbat eta problema handiagoa orduan eta denbora gehiago behar harko dugu problema ebazteko. Hori kontuan hartuz, denbora maximoa finkatzen badugu, beti problema-tamaina maximo bat izango dugu; problema handiagoa bada, finkatutako denboran ebazterik ez da egongo.

Demagun 1.1 irudiak problema baten soluzio zehatza lortzeko zenbait algoritmo behar duten denbora adierazten duela; era berean, demagun soluzioa lortzeko ordu bat besterik ez dugula. Grafikoan agerian dago algoritmo hiperesponentzialarekin $n > 7$ tamainako problemak, ordu batean, ebaztezinak

⁶ Problema hau sekuentziak lerrotatzean agertzen da; kasu horretan, nahiz eta algoritmo polinomikoa izan, sekuentziak milioika elementu izan dezakeenez, programazio dinamikoaz gain metodo heuristikoa erabiltzen dira; metodorik ezagunena ([2]) izenekoa da

```

1 input:  $n \times n$  tamainako  $C$  kostu-matrizea (herrien arteko distantziak)
2 input:  $i_1$ , ibilbideko lehendabiziko herria
3 output:  $I = (i_1, \dots, i_n)$  ibilbidea
4 Sartu  $H$  multzoan herri guztiak,  $i_1$  izan ezik
5  $k = 2$ 
6 while  $H \neq \emptyset$  do
7    $i_k = \arg \min_j \{c_{i_{k-1}, j} \mid j \in H\}$ 
8   Kendu  $i_k$   $H$  multzotik
9 done

```

Algoritmoa 1.1: TSPraکو soluzio onak eraikitzeکو metodo heuristikoa

direla; algoritmo esponentzialarekin, ostera, hogei tamainatako problemak ebazteko gai izango ginateke. Algoritmoak polinomikoak izateak ez du esan nahi algoritmoak edozein tamainatako problema ebatz ditzatekeenik. Hori argi eta garbi ikusten da $O(n^{15})$ kasuan, non ordu bateko mugarekin tamaina maximoa $n = 2$ den. Beste algoritmo polinomikoentzat ere denbora-kurbek, nahiz eta oso motel, gora egiten dute, eta, beraz, nonbait ordu bateko muga gurutzatuko dute.

Kasu horietan teknika klasikoak baliogabeak direnez, beste aukeraren bat bilatu beharko dugu; soluzio zehatza lortzerik ez badago, daukagun baliabideekin eta denborarekin *albeit soluziorik onena* topatzeko algoritmoak diseinatu behar ditugu. Xede hori lortzeko algoritmo *heuristikokoak* «intuizioan» oinarritutako metodoak erabiltzea da ohikoena. Algoritmo horien bidea optimo globala topatzea bermatuta ez egon arren, oro har soluzio onak topa ditzakegu.

Literaturan proposaturiko lehendabiziko metodoak problemaren intuizioan oinarritzen ziren. Ikus dezagun adibide bat, 1.2.2.1 atalean deskribaturiko TSP problema ebazteko.

Demagun badakigula abiapuntuko herria zein den, hau da, zein den ibilbideko lehendabiziko herria; soluzioa pausoz pauso eraikiko dugu, urrats bakoitzean aurreko urratsean aukeratu dugun herritik gertuen dagoen herria aukeratuz. Metodoaren sasikodea 1.1 algoritmoan ikus daiteke.

Ebatz dezagun, algoritmo hau erabiliz, 1.2 irudian dagoen TSParen instantzia, Arrasatetik abiatuz. Arrasatetik gertuen dagoen herria Azpeitia denez, horixe izango da gure ibilbideko bigarren herria. Ondoren, Azpeitik Tolosara joango gara, hura baita gertuen dagoena eta handik Donostiara. Bisitatu barik dauden herrietatik Zarautz da Donostiatik gertuen dagoena —eta, berez, bakarra—. Ibilbidea ixteko Zarautzetik Arrasatera itzuli beharko dugu. Laburbilduz, heuristiko sinple hau erabiliz ondoko soluzioa daukagu: Arrasate, Azpeitia, Tolosa, Donostia, Zarautz, Arrasate; soluzio horren helburu-funtzioa $41,4 + 23,5 + 28,4 + 20,4 + 54,0 = 167,7$ da. Ez

dugu inolaz bermaturik soluzio hori optimoa izatea, baina soluzio ona da, eta, batez ere, denbora koadratikoan lortu dugu.

Algoritmo hori `metaheuR` paketea inplementaturik dago, baina bi diferentzia ditu. Alde batetik, erabiltzaileak lehendabiziko hiri sartu beharrean, algoritmoak aukeratzen du, matrizean dagoen distantziarik txikienari erreparatuz. Bestetik, funtzioak ez du beti aukerarik onena aukeratzen: aukera batzuen artean bat ausaz aukeratzen du. Azken puntu horrek gero ikusiko dugun algoritmo batekin (GRASP) zerikusia du.

Hemen funtzio horren bertsio sinplifikatu bat inplementatuko dugu, adibide gisa. Funtzioak parametro bakar bat jasotzen du, `cmatrix`, kostu-matrizea dena; hasteko, aukeraezinak diren balioak adierazteko NA-k (*not available*) txertatuko ditugu matrizean. Kontuan hartuz diagonalean dauden balio guztiak ezin direla aukeratu (ez du zentzurik hiri batetik hiri berberara joateak), aukeraezin gisa finkatzen ditugu eta, gero, matrizean dagoen elementurik txikiena(k) aukeratuko d(it)ugu.

```
tsp.constructive <- function(cmatrix){
  diag(cmatrix) <- NA
  best.pair <- which(cmatrix == min(cmatrix, na.rm=TRUE),
                    arr.ind=TRUE)
```

Orain `best.pair` aldagaian matrizearen errenkada bakoitzean elementu baten koordinatuak izango ditugu: lehenengo zutabea bere errenkada eta bigarrenean bere zutabea. Aintzat hartzekoa da elementu bat baino gehiago izan ditzakegula (izan ere, matrizea simetrikoa bada, beti izango ditugu, gutxienez, bi elementu). Lehenengo elementua bakarrik hautatuko dugu, eta horrek markatuko ditu ibilbideko lehendabiziko bi hiriak. Algoritmoarekin jarraitzeko jakin behar dugu sartu dugun lehenengo hiritik (`best.pair[1]`) ezin garela berriz igaro. Hori dela eta, matrizean dagokion errenkada aukeraezin moduan markatu behar dugu. Era berean, hurrengo urratsetan ezin dugu aukeratu sartu ditugun hirietan amaitzen den elementurik; hots, hiri horiei dagozkien zutabeak ere bideraezin gisa finkatu beharko ditugu.

```
  solution <- c(best.pair[1], best.pair[2])
  cmatrix[best.pair[1], ] <- NA
  cmatrix[, best.pair] <- NA
```

Gure soluzioak, momentuz, bakarrik bi hiri ditu. Soluzio osoa eraikitzeko, urrats bakoitzean, azken pausoan sartutako hiritik aukeratu gabe dauden hirien artean gertuen dagoena aukeratu beharko dugu. Behin aukeraturik, matrizea eguneratu beharko dugu aukeraezin diren elementuei NA esleituz.

```
  for(i in 3:nrow(cmatrix)){
    next.city <- which.min(cmatrix[solution[i-1], ])
    solution <- append(solution, next.city)
    cmatrix[solution[i-1], ] <- NA
    cmatrix[,next.city] <- NA
  }
```


Une honetan `solution` bektoreak eraikitako soluzio bat gordetzen du. Dena dela, soluzioa hirien permutazio baten bidez kodetu nahi dugunez, funtzioaren amaieran ondoko kodea izango dugu.

```
names(solution) <- NULL
return(permutation(vector=solution))
}
```

Implementatutako funtzioa gure problemari aplikatzen badiogu, hona hemen emaitza:

```
> greedy.solution <- tsp.constructive(cost.matrix)
> tsp.example$evaluate(greedy.solution)

## [1] 167.7

> colnames(cost.matrix)[as.numeric(greedy.solution)]

## [1] "Zarautz" "Donostia" "Tolosa" "Azpeitia" "Arrasate"
```

Aurreko adibidearekin alderatuta, lortzen dugun soluzioa ezberdina da, baina beraren kostua, ordea, berdina. Izan ere, nahiz eta soluzioa ezberdina izan, definitzen duen zikloa berdina da, beste noranzkoan izanda ere. Beste era batean esanda, goiko kodean dugun soluzioa atzetik aurrera irakurtzen badugu, lehen bilatutako soluzio berbera dugu!

Metodo heuristikoak oso interesgarriak dira, baina zailak «birziklatzeko» –pentsa ezazu nola egoki daitekeen goiko algoritmoa grafoen koloreztatze-problema ebazteko, adibidez–. Eragozpen horri aurre egiteko, *bilaketa heuristikoak* edo *metaheuristikoak* proposatu ziren. Metodo horiek ere intuizioan oinarritzen dira, baina ez problemaren intuizioan, optimizazio-prozeduraren intuizioan baizik; hori dela eta, metodo hauek edozein problema ebazteko egoki daitezke. Hainbat metaheuristika existitzen dira, hala nola, bilaketa lokala, algoritmo genetikoak edo inurri-kolonia algoritmoak esaterako. Horiek guztiak hurrengo kapituluaren izango ditugu aztergai.

Optimizazio-problema baten aurrez aurre gaudenean, kontuan izan beharreko hainbat gauza daude: alde batetik, problemaren formalizazio berean agertzen diren elementuak –helburu-funtzioa eta soluzioen espazioa, alegia– eta, bestaldekik, problema ebazteko erabil daitezkeen algoritmoak. Hurrengo ataletan alderdi horiek guztiak banan-banan komentatuko ditugu.

1.3.1 Helburu-funtzioa

Aurreko atalean ikusi dugu optimizazio problema bat definitzeko bi elementu behar ditugula, horietako bat helburu funtzioa izanik. Helburu funtzioa soluzioen optimotasuna ebaluatzeko erabiliko dugu eta, hortaz, funtzio horrek optimo globala zein den zehaztuko du.

Optimizazio-problema bat formalizatu behar dugunean argi izan behar dugu soluzioak nola ebaluatuko diren. TSPan, adibidez, distantzia edo kostua nahi dugu minimizatu; hori dela eta, ibilbide bat emanda helburu funtzioak horren distantzia edo kostu totala neurtuko du. Adibide honetan darabilgun funtzioa tribiala da eta zuzenean aplikatu daiteke; hori ordea, ez da beti horrela izaten. Zenbait kasutan soluzioen ebaluazioa konplexua izan daiteke. Hona hemen adibide batzuk:

- **Helburu-funtzioa simulazio-prozesu bat denean.** Adibidez, ekuazio diferentzial sistema bat daukagunean eta euren parametroak optimizatu nahi ditugunean, parametro sorta bakoitza ebaluatzeak sistema ebaztea inplikatzeko du.
- **Optimizazio interaktiboan**([36]). Problema batzuetan ezin da formula matematiko bat sortu, eta soluzioak ebaluatzeak erabiltzailearen elkarrekintza behar da —erakargarritasuna, zaporea eta horrelakorik aztertu behar denean, besteak beste—.
- **Soluzioa ebaluatzeak algoritmo bat aplikatu behar denean.** Eredu grafiko probabilistikoetan (esate baterako, grafo bat eraikitzeak), aldagaiak ordenatuta badaude, algoritmo deterministak erabili daitezke. Kasu horietan optimizazio-problema aldagaien ordena optimoa topatzean datza; alabaina, ordenarekin bakarrik ezin dugu soluzioa ebaluatu, grafo osoa behar baitugu. Hortaz, soluzioak ebaluatu ahal izateko, algoritmo deterministaren bat aplikatu beharko dugu ordena ezagututa grafoa sortzeko.
- **Programazio genetikoan.** Programazio genetikoan soluzioak atazaren bat burutzeko programa-diseinuak dira. Hori dela eta, soluzioak ebaluatzeak horiek *exekutatu* egin behar dira, ea espero dena egiten duten egiaztatzeak.

1.3.2 Bilaketa-espazioa: soluzioen kodeketa

Problemak formalizatzeko soluzioak nola kodetuko ditugun erabakitzea ezinbestekoa da; izan ere, helburu-funtzioa ezin da zehaztu pauso hau burutu arte.

Kodeketa on bat diseinatzeko zenbait alderdi aztertu behar ditugu. Lehendabizikoa *osotasuna* da, hau da, edozein soluzio adierazteko gaitasuna. Edozein bi soluzio hartuta, batetik bestera joateko bidea badagoela ziurtatzea ere garrantzitsua da, *konektutasuna* izan ezean bilaketa-espazioko eremu batzuk helezinak gerta daitezkeelako.⁷ Amaitzeko, bilaketa-prozesuan soluzioak manipulatzeko hainbat funtzio edo operadore erabiliko ditugu; beraz, darabilgun soluzioen kodeketak *operadoreekiko eraginkorra* izan behar du.

⁷ Gaitasun hau bermatzeko soluzioen kodetzea ez ezik, soluzioak maneiatzeko darabiltzazun operadoreak eta murrizketak kudeatzeko estrategiak ere aintzat hartu behar ditugu.

Literaturan hainbat kodeketa *estandar* topa ditzakegu. Ikus ditzagun horietako batzuk, 1.2. atalean deskribatutako problemen soluzioak adierazteko erabil daitezkeenak.

TSP problemarako soluzioak herrien zikloak dira; hau da, herri bakoitza behin eta bakarrik behin agertzen diren zerrendak. Esklusibotasun hori dela eta, *permutazioak* TSParen soluzioak kodetzeko adierazpide oso egokiak dira. Soluzio guztiak kodetu daitezke permutazioen bidez, eta permutazio guztiek soluzio bideragarriak kodetzen dituzte.⁸ Adierazpide berdina beste hainbat problemetan erabil daiteke, hala nola *scheduling* problema batzuetan, beste *routing* problemetan, ordenazio-problemetan, ...

Azpimultzo problemetan (ikus. 1.2.2.4 atala), baldintza edo murrizketa batzuk betetzen dituen azpimultzo optimoa topatzea da helburua. Multzoekin dihardugunean *bektore bitarrak* aukera egokiak dira oso. Motxilaren problemetan, esate baterako, n elementu baldin baditugu edozein soluzio n tamainako bektore bitar baten bidez adieraz dezakegu, non i . posizioak i elementua motxilaran dagoenetz adieraziko duen. Edozein soluzio n tamainako bektore bitar baten bidez kodetu daiteke; alderantzizkoa, ostera, ez da beti beteko, bektore bitarrek motxilaren kapazitatea gainditzen duten soluzioak adierazi ahal baitituzte.

Bektore bitarren kontzeptua aldagai kategorikoetara hedatu daiteke; hau da, soluzioak *bektore kategoriko* baten bidez adieraz ditzakegu. Kodeketa hori esleipen-problema orokorrean –*Generalized Assignment Problem*, GAP [34], ingelesez– erabili ohi da.

Definizioa 1.10 GAP problema *Izan bitez n ataza, m agente, $C \in \mathbb{R}^{m \times n}$ kostu-matrizea eta $P \in \mathbb{R}^{m \times n}$ etekin-matrizea; c_{ij} eta p_{ij} elementuek j ataza i agenteari esleitzeari dagokion kostua eta lortutako etekina adierazten dituzte, hurrenez hurren. i agentearen lan-karga gorenekoa l_i bada eta ataza bakoitza agente bakar batek egin dezakeela kontuan hartuz, GAP problemaren helburua esleipen-kostu totala minimizatzen duen esleipena topatzean datza, agenteen lan-karga maximoa gainditu gabe, betiere.*

GAP problemarako soluzioak adierazteko n tamainako bektore kategorikoak erabil daitezke; posizio bakoitzean dauden balioak $\{1, \dots, m\}$ tartean egongo dira. Bektorearen i . posizioak i . ataza zer agenteak egingo duen adieraziko du eta; kodeketa horren bidez soluzio-kode erlazioa bijektiboa da; hau da, soluzio bakoitzeko kode bakarra dago, eta kode bakoitzak soluzio bakarra kodetzen du.

Bektoreetan oinarritutako kodeketarekikoak amaitzeko, ideia zenbaki errealek ere hedatu daitezke; hau da, zenbait problemetan soluzioak bektore errealeen bidez kodetu daitezke. Simulazio edo bestelako prozesuen parametroen

⁸ Berez arazotxo bat badago. Ibilbide bat emanda, norabide batean edo bestean egiteak ez du inongo eraginik helburu-funtzioan –problema simetrikoa bada betiere– eta, hortaz, ziklo bakoitzeko bi permutazio izango ditugu zeinentzat helburu-funtzioa berdina den.

optimizazioa soluzio-kodeketa horren bitartez egin daiteke, parametroak jarraituak badira betiere.

Orain arte ikusi ditugun adierazpideak *linealak* deritzenak dira, soluzioak bektore baten bidez kodetzen baitira. Adierazpide horiek maneiatzeko errazak izan arren, ez dira hainbat soluzio mota kodetzeko gai: adibidez programazio genetikoko soluzioak. Kasu horietan, oso hedatuta dauden adierazpideak erabiltzen dira: grafoak eta, bereziki, zuhaitzak. Kodetze mota ezberdinen konbinaketa ere asko erabiltzen den beste estrategia bat da; lehen aipaturiko parametro optimizazioan, esate baterako, parametro jarraituak eta diskretuak ditugunean balio errealak eta diskretuak dituzten bektoreak erabili gennitzake. Edonola ere, kodeketa bat diseinatzean atalaren hasieran aipaturiko ezaugarriak aintzat hartu beharko ditugu.

Adierazpideen eta soluzioen artean dagoen erlazioari erreparatuz, hiru aukera ditugu:

- **Kode bat soluzio bakoitzeko.** Aukerarik ohikoena da, soluzio bakoitzeko kode bat daukagu, eta kode bakoitzak soluzio bakarra adierazten du.
- **Kode anitz soluzio bakoitzeko.** Kasu honetan «erredundantzia» daukagu, eta horrek bilaketaren eraginkortasuna kaltetu dezake. Nahikoa ez eta, bilaketa-espazioa behar baino handiagoa da.
- **Soluzio anitz kode berdinarekin.** Kodeketa honekin bereizmen murriztua daukagu –soluzioen xehetasuna gal dezakegu, alegia–. Bestalde, bilaketa-espazioa txikiagoa da eta horrek bilaketari lagun diezaioke. Adierazpide mota honetan deskodeketa-prozesu bat egon ohi denez, zeharkodetzea deritzogu.

1.3.3 Bilaketa-espazioa: murrizketak

Askotan, bideragarritasunaren definizioak hainbat murrizketa dakartza, eta, hortaz, murrizketak nola kudeatu erabaki beharko dugu; hori lortzeko hainbat aukera ditugu:

- **Soluzioen kodeketaren edota operadoreen bidez bideragarritasuna mantendu** - Problema ebazteko soluzioen kodeketa diseinatu beharko dugu. Posible denean, kodeketa horrek murrizketak integratuko ditu; alegia, sor daitezkeen kode guztiek soluzio bideragarriak adieraziko dituzte. Soluzioen kodeketa ez ezik, soluzioak maneiatzeko darabiltzagun funtzio matematikoak ere bideragarritasuna mantentzeko erabil daitezke. Estrategia hau zenbait problematan –TSPn, besteak beste– murrizketak beteko direla ziurtatzeko bide zuzena da.
- **Soluzio bideraezinak baztertzea** - Estrategiarik sinpleena da; soluzio bat bideragarria izan ezean, baztertu egiten da bilaketa-prozesuan. Sinplea izan arren, eragin handia izan dezake bilaketa-prozesuan, espazioko zenbait eskualde «isolaturik» gera baitaitezke.

```

1  input: bideraezina den  $s$  soluzioa
2  input:  $s'$  soluzio bideragarria
3   $s' = s$ 
4  while  $s'$  bideraezina den do
5      Kendu motxilatik erabilgarritasuna zati pisua ratioa ( $\frac{u_i}{w_i}$ ) minimizatzen duen  $e_i$ 
        elementua
6       $s' = s \setminus e_i$ 
7  done

```

Algoritmoa 1.2: Motxilaren problemarako bideragarriak ez diren soluzioak konpontzeko prozedura bat

- **Soluzio bideraezinak zigortu** - Gerta daiteke soluzio bideragarrien espazioa etena izatea; hau da, soluzio bideragarri batetik bestera joateko soluzio bideraezinetatik pasatzea ezinbestekoa izatea. Gauzak horrela, soluzio bideraezinak baztertzeak edo konpontzeak ez du oso irtenbide egokia ematen. Soluzio bideraezinak erabil daitezke bilaketa-prozesuan, helburu-funtzioan zigortze-termino bat sartuz.

$$f'(s) = f(s) + \alpha c(s)$$

$f'(s)$ zigorra duen helburu-funtzio berria da, eta $f(s)$, berriz, helburu-funtzio «kanonikoa». c funtzioak soluzioaren kostua –hau da, bideragarritasun eza– neurtzen du. Kostua neurtzeko hainbat aukera daude; hala nola, betetzen ez diren murrizketa kopurua, konponketaren kostua, etab. α parametroa zigorra kontrolatzeko erabil daiteke; zigortze-maila txikiegia bada, bilaketak topatzen dituen soluzioak bideraezinak izan daitezke; handiegia bada, berriz, soluzio bideraezinak baztertzeak dituen arazoak errepika daitezke. Hori dela eta, parametro hau estatikoa izan beharrean, dinamikoki alda dezakegu.⁹

- **Soluzio bideraezinak konpondu** - Bilaketa-prozesuan soluzio bideraezin bat topatzean, posible bada betiere, soluzioa «konpondu» egin dezakegu. Estrategia hori erabilgarria izan dadin, erabiltzen diren konponketa-algoritmoek eraginkorrak izan behar dute, bilaketaren kostu konputazionalan albait eragin gutxien izan dezaten. Adibide gisa, motxilaren problemaren kapazitate-murrizketa dugu; hori dela eta, soluzio batek kapazitate-muga gainditzen badu, bideraezina izango da. Soluzioa konpontzeko banan-banan atera ditzakegu elementuak murrizketa bete arte.

⁹ Oro har, bilaketa hasierako iterazioetan zigortze-koefiziente txikiak erabiliko ditugu, eta gero handitu –gogoratu bilaketa amaitzen denean soluzio bideragarria nahi dugula–. Bilaketaren progresioari buruzko informazioa erabil daiteke zigortzea egokitzeko, «adaptive penalizing» deritzen estrategiak erabiliz.

Azken hurbilketa hori motxilaren problemaren erabil dezakegu. Adibide gisa, ikus dezagun knapsack problemarako soluzioak konpontzeko algoritmo bat. Lehenik eta behin, soluzioen bideragarritasuna aztertzeko funtzio bat inplementatuko dugu. Gogoratu soluzio bat bideragarria dela baldin eta motxilan sartutako elementuen pisua motxilaren muga baino txikigoa bada.

```
> valid <- function(solution, weight, limit) {
+   return(sum(weight[solution]) <= limit)
+ }
```

Orain, funtzio hori kontuan hartuz, soluzioak zuzentzeko funtzioa inplementa dezakegu. Funtzioak inplementatzen duen sasi-kodea 1.2 algoritmoan ikus daiteke. Oso algoritmoa sinplea da; soluzioa bideraezina den bitartean, pisu/balio ratio handiena duen elementua motxilatik aterako da.

```
> correct <- function(solution, weight, value, limit) {
+   wv.ratio <- weight / value
+   while(!valid(solution, weight, limit)) {
+     max.in <- max(wv.ratio[solution])
+     id <- which(wv.ratio == max.in & solution)[1]
+     solution[id] <- FALSE
+   }
+   return(solution)
+ }
```

Ikus dezagun adibide bat. Demagun $P = \{2, 6, 3, 6, 3\}$, $W = \{1, 3, 1, 10, 2\}$ eta $c.m = 5$ balio-bektorea, pisu-bektorea eta motxilaren edukiera maximoa direla hurrenez hurren. Motxilan elementu guztiak sartzen dituen soluzioa bideraezina da, pisu totala (8) muga baino handiagoa baita.

```
> p <- c(2, 6, 3, 6, 3)
> w <- c(1, 3, 1, 10, 2)
> c.m <- 5
> solution <- rep(TRUE, times=5)
> valid(solution=solution, weight=w, limit=c.m)

## [1] FALSE

> w / p

## [1] 0.5000000 0.5000000 0.3333333 1.6666667 0.6666667
```

Azken lerroan ikus daiteke ratorik handiena duena 4. elementua dela; beraren balioa handia da, baina baita pisua ere. Beraz, elementu hori motxilatik aterako dugun lehena izango da. Dena dela, aldaketa horrekin bakarrik ez dugu soluzio bideragarri bat lortuko. Hori ikusirik, ratorik handiena duen bigarren elementua kenduko dugu: 5. elementua. Orain, bi aldaketa horiek egin ostean lortu dugun soluzioa bideragarria da.

```
> solution

## [1] TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE
```

```

> valid(solution=solution, weight=w, limit=c.m)

## [1] FALSE

> corrected.solution <- correct(solution=solution, weight=w,
+                               value=p, limit=c.m)
>
> corrected.solution

## [1] TRUE TRUE TRUE FALSE FALSE

> valid(solution=corrected.solution, weight=w, limit=c.m)

## [1] TRUE

```

1.3.4 Algoritmoak

Ikerkuntza Operatiboaren lehenengo urteetan ikertzaileek problema mota partikularrentzat soluzio optimoa lortzeko algoritmoak garatzen ziharduten. Problema horiek «programazio matematiko» deritzon alorrean sartzen dira¹⁰ eta ebazteko hainbat algoritmo zehatz planteatu dira; hala nola, dagoeneko aipatu dugun Simplex algoritmoa, edo barne-puntu metodoa, adarkatze- eta bornatze-algoritmoak, eta abar.

Metodo horiek problema mota konkrituak ebazteko diseinaturik daude, eta hortaz, ezin dira edozein optimizazio-problema ebazteko erabili. Nahikoa ez eta, nahiz eta problemen konplexutasun maila handia ez izan, problemaren tamaina handiegia bada ere, algoritmoa hauek erabilezinak gerta daitezke.

Gauzak horrela, ez dago hainbat egoeratan problemaren optimo globala topatzerik. Kasu horretan, zer egin dezakegu? Eskuragarri ditugun baliabideekin soluzio onena topatzea ezinezkoa bada, ahalik eta soluziorik onena topatzen saiatuko gara; alegia, optimo globaletatik albait gertuen dagoen soluzio bat topatzen saiatuko gara.

Soluzio hurbilduak lortzeko bi aukera ditugu: metodo hurbilduak, zeinek hurbilketa maila bermatzen duten, eta metodo heuristikoak, ezer bermatzen ez dutenak.

Metodo heuristikoak intuizioan oinarritzen dira problema bat optimizatzerakoan. Intuizioa bi motatakoa izan daiteke:

- **Problemari buruzko intuizioa** - Posible denean, problemaren ezauzgarriak soluzioa topatzeko *ad hoc* metodo heuristikoak diseinatzeko erabiliko ditugu. Ohikoena algoritmo horiek «eraikitzaileak» izatea da, hau da, soluzioa pausoz pauso eraikitzen duten metodoak. Are gehiago, pauso bakoitzean aukera guztietatik onena hartzea da ohikoena; irizpide horri jarraitzen dioten algoritmoei «gutziatsu» edo «jale» *—greedy*, ingelesez—

¹⁰ Programazio lineala eta programazio osoa hauen adibideak dira.

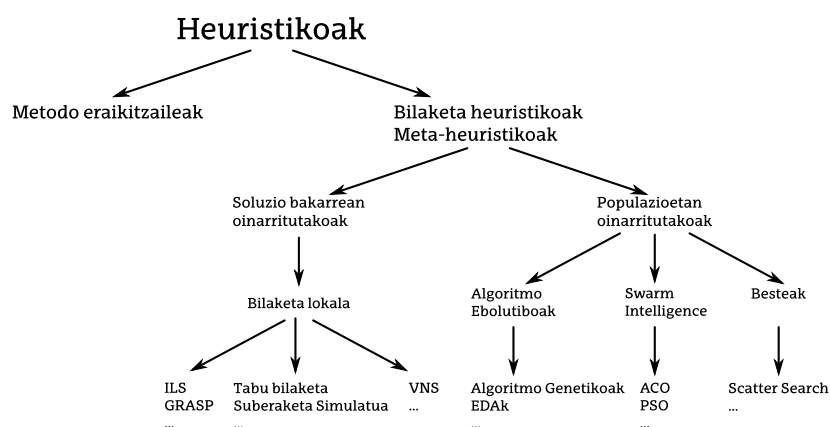
esango diegu. Atal honen hasieran TSP problemak ebazteko horrelako algoritmo bat ikusi dugu. Metodo heuristikoak problemaren mamiari ego-
kituta daude, eta horrek alde onak eta txarrak ditu. Oro har algoritmo
eraginkorrak izan ohi dira, baina bestelako problemetan berrerabiltzeko
desegokiak –edo aplikaezinak– izan daitezke.

- **Bilaketa-prozesuari buruzko intuizioa** - *Ad hoc* diseinaturiko metodoak zailak dira birziklatzeko problemari buruzko intuizioan oinarritzen dire-
lako; horren orde, intuizioa bilaketa-prozesuan bertan bilatzen badugu,
edozein problema ebazteko egoki daitezkeen metodoak diseina genitzake.
Algoritmo horiei, *bilaketa heuristikoak* edo *meta-heuristikoak* deritze eta
heuristikoak sortzeko txantilo moduan ikus daitezke. Beste era batean
esanda, problema bakoitza ebazteko egokitu behar diren eskemak dira.

Meta-heuristiko mota asko daude, bakoitza bere intuizioan oinarritutakoa.
Metodoak sailkatzeko era asko egon arren, sailkapen hedatuenak bi multzotan
banatzen ditu:

- **Soluzio bakarrean oinarritutako metaheuristikoak** - Metodo haue-
tan uneoro soluzio bakar bat mantentzen dugu, eta soluzio horretatik abia-
tuta beste batera mugitzen saiatuko gara; mugimenduak nola egiten diren
desberdintzen du algoritmoak. Bilaketa lokala da metodo hauen arteko
ezagunena; alabaina, metodo horrek arazo larri bat du: optimo lokaletan
trabaturik gelditzen da. Arazo hori saihesteko zenbait hedapen proposatu
dira; hala nola tabu-bilaketa [15], GRASP algoritmoa [13], suberaketa si-
mulatua [24, 38], etab.
- **Populazioetan oinarritutako meta-heuristikoak** - Algoritmo haue-
tan, soluzio bakar bat izan beharrean soluzio-«populazio» bat –multzo bat,
alegia– mantentzen dugu; iterazioz iterazio populazioari aldaketak egingo
zaizkio, eta hala horren «eboluzioa» ahalbidetzen, eta geroz eta soluzio
hobeagoak lortzen da. Atal honetan dauden algoritmo askok naturan bi-
latzen dute inspirazioa; era horretan, adibidez, algoritmo genetikoak [19]
ditugu, eboluzioan oinarritutakoak, edo inurri-kolonia algoritmoa [10], in-
urrien talde-portaeran oinarritzen dena.

1.5 irudian optimizaziorako heuristikoen eskema orokor bat ikus daiteke.
Meta-heuristiko asko daude, baina denak gauza berdina egiteko diseinatuta
daude: bilaketa-espazioa miatzeko. Miaketa-prozesuan bi estrategia erabil –
eta, batez ere, konbina– daitezke: *dibertsifikazioa* eta *areagotzea*. Dibertsifi-
katzeko espazioko eremu handiak aztertzen ditugu, baina xehetasun handi-
irik gabe; helburua bilaketa-espazioko eremu interesgarriari antzematea da
–espazioa esploratzea, alegia–. Areagotzeak, berriz, topatu ditugun eremu in-
teresarri horiek sakonki arakatzea dauka helburutzat; batzuetan esaten den
legez, eremu onak esplotatzea. Oro har, bilaketa lokal motako algoritmoetan



1.5 irudia Metodo heuristikoen eskema

areagotzeari garrantzi handiagoa ematen zaio; populazioetan oinarritutako algoritmoetan, berriz, dibertsifikazioa da helburu nagusia.¹¹

¹¹ Izan ere, azken kapituluan ikusiko dugun bezala, teknikak nahas daitezke, bilaketa lokalean oinarritutako areagotze-pausoak populazioetan oinarritutako metodoei gehituz.

Kapitulua 2

Soluzio bakarrean oinarritutako algoritmoak

Kapitulu honetan soluzio bakarrean oinarritzen diren algoritmoak aztertuko ditugu. Algoritmo mota hauen adibiderik esanguratsuenak, eta erabilienak, bilaketa lokalean oinarritutako algoritmoak dira. Horregatik, kapituluaren lehenengo atalean algoritmo haue funtzionamendua eta erlazionatuta dauden kontzeptu batzuk azalduko ditugu. Bilaketa lokalaren desabantailarik handienetako bat, optimizazio prozesua optimo lokalak diren soluzioetan tratatuta geratzea izan ohi da. Ondorioz, kapituluaren bigarren atalean, arazo hau saihesten ahalegintzen diren estrategiabatzuk aztertuko ditugu, esate baterako, suberaketa simulatua eta tabu bilaketa algoritmoak.

2.1 Kontzeptu orokorrak

Bilaketa lokalaren atzean dagoen intuizioa oso sinplea da: soluzio bat emanda, bere «inguruan» dauden soluzioen artean soluzio hobeak bilatzea. Ideia hau bilaketa prozesu bihurtzeko, uneoro problemarako soluzio (bakar) bat mantenduko dugu eta, pausu bakoitzean, uneko soluzio horren ingurunean dagoen beste soluzio batekin ordezkatuko dugu.

Hainbat algoritmo dira ideia honetan oinarritzen direnak, bakoitza bere berezitasunekin, noski. Diferentziak diferentzia, zenbait elementu komunak dira algoritmo guztietan; atal honetan kontzeptu hauek aztertzeari ekingo diogu.

2.1.1 Soluzioen inguruneak

Bilaketa lokalean dagoen kontzepturik garrantzitsuen ingurunearena da – *neighborhood*, ingelesez – eta, hortaz, problema bat ebazterakoan arreta han-

diz diseinatu beharreko osagaia da. Ingurune funtzioak edo operadoreak¹, soluzio bakoitzeko, bilaketa espazioaren azpimultzo bat definitzen du.

Definizioa 2.1 *Izan bitez \mathcal{S} bilaketa espazioa eta $N : \mathcal{S} \rightarrow 2^{\mathcal{S}}$ funtzioa zeinak, $s \in \mathcal{S}$ soluzioa emanda, $N(s) \subset \mathcal{S}$ bilaketa espazioaren azpimultzo bat itzultzen duen. Orduan, N funtzioa ingurune funtzioa dela diogu.*

Nahiz eta ingurune funtzioaren definizioa oso orokorra izan, errealitatean, soluzio baten ingurunean dauden soluzioen artean –bizilagunak, alegia– nolabaiteko «antzekotasuna» mantentzea interesatzen zaigu. Soluzio baten bizilagunak, orokorrean, ingurure operadore baten bidez lortzen dira, eta beraz, hurrengo adibidean ikusiko dugun legez, antzekotasuna ez dago halabeharrez bermatuta, kodeketaren menpekoa baita.

Laburbilduz, bilaketa lokal bat diseinatzean berebizikoa da «kodeketa - ingurune» bikotea modu egokian aukeratzea, ingurunean dauden soluzioak antzerakoak izan daitezen. Ezaugarri honi lokaltasuna –*locality* ingelesez– esaten zaio, eta emaitza onak lortzeko funtsezkoa da.

¹ Programazio testuinguruetan – sasikodetan, adibidez – soluzioak maneiatzeko erabiltzen diren funtzioei «operadore» deritze eta, hortaz, «funtzio» eta «operadore» terminoak baliokide gisa erabiliko ditugu.

Adibidea 2.1 Lokaltasuna *feature subset selection* problemetan

Datu meatzaritzan, sailkatzaile funtzioak eraikitzea edo ikastea oso ataza ohikoa da. Funtzio hauek, beraien izenak adierazten duen moduan, datu berriak sailkatzeko erabiltzen dira.

Oro har, datuetan agertzen diren aldagaiek iragarpenak egiteko gaitasun ezberdinak dituzte; are gehiago, aldagai batzuk eragin negatiboa izan dezakete sailkatzailearen funtzionamenduan. Hori dela eta, aldagaien azpi-multzo bat aukeratzea oso pausu ohikoa da; prozesu hau, ingelesez feature subset selection, FSS deitzen den optimizazio problema bat da. FSS problemarako soluzioak bektore bitarren bidez kodetu daitezke, bit bakoitzak dagokion aldagaia azpi-multzoan da goenetz adierazten duelarik.

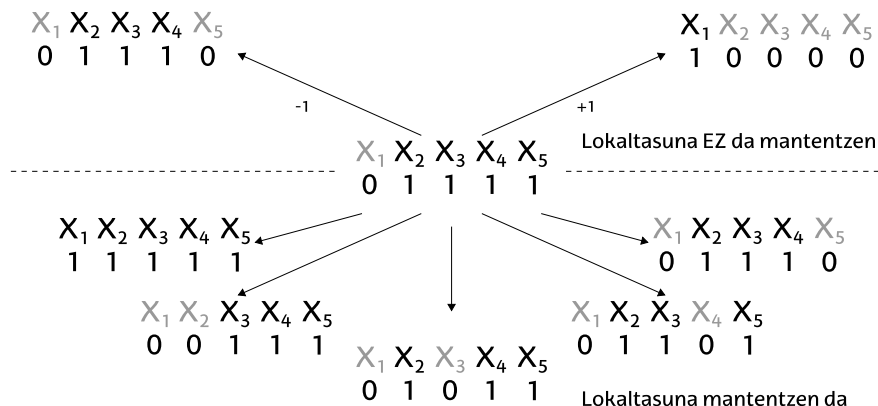
Bektore bitarrak zenbaki oso moduan interpreta daitezke eta, hortaz, inguruneko soluzioak lortzeko modu bat horiei balio txikiak gehitzea/kentzea da. Adibidez, (01001) soluzioak 9 zenbakia adierazten duela suposatuko dugu, eta hortaz, antzerako soluzioak lor ditzakegu 1 zenbakia (00001) gehituz – 10 zenbakia (01010) lortzen delarik – edo kenduz – 8 zenbakia (01000) dugularik –. Adibide honetan lortutako soluzioak nahiko antzerakoak dira; lehendabiziko kasuan azken aldagaia azken-aurrekoarekin ordezkatu dugu eta bigarren kasuan azken aldagaia kendu dugu. Edonola ere, beste kasu batzuetan lokaltasuna ez da mantentzen; (1000000) soluzioari 1 kentzen badiogu, (0111111) lortuko dugu, hau da, aukeratuta zegoen aldagai bakarra – lehendabizikoa – kendu eta beste gainontzeko guztiak sartuko ditugu. Beste era batean esanda, FSS problemarako ingurune definizio hau ez da oso egokia.

Azpi-multzo problematan ingurune operadore ohikoena flip aldaketan oinarritzen da; inguruneko soluzioak sortzeko uneko soluzioaren posizio bateko balioa aldatzen da, hau da, 0 bada 1ekin ordezkutzen da eta 1 bada, 0ekin. Operadore honekin FSS problemetan beti bermatzen da lokaltasuna, ingurunean dauden edozein bi soluzioak aldagai bakar bateko diferentzia izango baitute. 2.1 irudiak adibidea grafikoki erakusten du.

Soluzioak bektoreen bidez kodetzen direnean, inguruneak definitzeko «distantzia» kontzeptua erabili ohi da, esplizituki zein inplizituki. Era honetan, bi soluzio bata bestearen ingurunean daudela esango dugu baldin eta beraien arteko distantzia finkaturiko kopuru bat baino txikiagoa bada. Edozein bi soluzio, s eta s' arteko distantzia, $d(s, s')$ funtzioaz adierazten badugu, ingurunearen definizio orokorra ondorengo izango da:

$$N(s; k) = \{s' \in \mathcal{S} \mid d(s, s') \leq k\} \quad (2.1)$$

Bektore motaren arabera distantzia ezberdinak erabil ditzakegu. Jarraian adibide hedatuenak ikusiko ditugu.



2.1 irudia Bi ingurune ezberdinen adibidea. Goikoan bektore bitarrei 1 gehitzen/kentzen diogu inguruneke soluzioak lortzeko. Eskuman dagoen soluzioan ikus daitekeen bezala, lokaltasuna ez da mantentzen, soluzioak elkarrengandik oso ezberdinak direlako. Beheko ingurunea *flip* eragiketan oinarritzen da. Kasu honetan sortutako soluzio guztiak antzerakoak dira.

Bektore errealeak - Bektore errealekin dihardugunean euklidearra da gehien erabiltzen den distantzia

$$d_e(s, s') = \sqrt{\sum_{i=1}^n (s'_i - s_i)^2}$$

Ingurune tamainari erreparatuz, zenbaki errealekin dihardugunez, infinitu soluzio izango ditugu edozein soluzioren ingurunean. Euklidearra distantziarik eza-gunena izan arren, badira beste metrika batzuk ere bektore errealean arteko distantzia neurtzeko – Manhattant- edo Chevyshev-distantziak, besteak beste –.

Bektore kategorikoak eta bitarrak - Bektoreetan dauden aldagaiak kategorikoak direnean, bi bektoreen arteko distantzia neurtzeko metrikarik eza-gunena Hamming-ek proposatutakoa da: $d_h(s, s') = \sum_{i=1}^n I[s_i \neq s'_i]$, non I funtzioa adierazlea den, eta 1 balioa hartzen duen bere argumentua egia denean, eta 0 beste kasuan. Hortaz, Hamming-distantziak posizioz posizio desberdintasunak neurtzen ditu. Hamming-distantzia inguruneak definitzeko

erabiltzen denean, ohikoena 1 distantziara dauden soluzioetara mugatzea da, hau da:

$$N_h(s; 1) = \{s' \in \mathcal{S} \mid d_h(s, s') = 1\} \quad (2.2)$$

Algoritmoak diseinatzean oso garrantzitsua da ingurunearen tamaina aztertzea. Aurreko operadorea n tamainako bektore bitar bati aplikatzen badiogu, s soluzioaren bizilagun kopurua $|N(s)| = n$ izango da, posizio bakoitza aldatzeko aukera bakarra baitauekagu. Bektore kategorikoetan, posizio bakoitzean r_i balio hartzeko aukera dagoenean, ingurunearen tamaina $|N(s)| = \sum_{i=1}^n (r_i - 1)$ izango da.

Bestalde, ondoko ekuazioak, edozein distantziarako ingurune funtzio orokor bat adierazten du: distantzia maximoa bektorearen tamaina dela kontutan hartuz, betiere $-$:

$$N_h(s; k) = \{s' \in \mathcal{S} \mid d_h(s, s') \leq k\} \quad (2.3)$$

Ikus dezagun adibide bat, metaheuR paketea erabiliz. Motxilaren problema erabiliko dugu eta, horretarako, lehenengo, ausazko problema bat eta soluzio bat sortuko ditugu. Pisua eta balioa korrelaturik egoteko, elementu bakoitzaren pisua lortzeko, haren balioari ausazko kopuru bat gehituko diogu. Gero, motxilaren kapazitatea definitzeko ausaz aukeratutako $\frac{n}{2}$ elementuen pisuak batuko ditugu. Azkenik, elementu bakoitza aukeratzeko probabilitatea heren batean ezarriz, ausazko soluzio bat sortuko dugu.

```
> library(metaheuR)
> n <- 10
> rnd.value <- runif(n) * 100
> rnd.weight <- rnd.value + runif(n) * 50
> max.weight <- sum(sample(rnd.weight, size=n / 2, replace=FALSE))
> knp <- knapsackProblem(weight=rnd.weight, value=rnd.value,
+                          limit=max.weight)
> rnd.sol <- runif(n) < 1 / 3
```

Kontutan hartu behar da motxilaren probleman soluzio guztiak $-$ azpi-multzo guztiak, alegia $-$ ez direla bideragarriak. Eta beraz, ausazko soluzio bat sortzean, elementu edo objektu bat aukeratzeko probabilitatea handitzen badugu, soluzio bideraezinak lortzea probableagoa izango da. Edozein kasutan, sortutako soluzioa bideraezina izan daitekeenez, lehenengo pausua soluzioa zuzentzea izango da. Gero, «flip» operadorea erabiliko dugu inguruneke soluzioak sortzeko. Operadore honek Hamming-en bat distantziara dauden soluzioak esleituko dizkio inguruneari. Nahiz eta uneko soluzioa bideragarria izan, ingurunekeak bideraezinak izan daitezke, beraz, pausu bakoitzean inguruneke soluzioa bideragarria den ala ez aztertu beharko dugu.

```

> rnd.sol <- knp$correct(rnd.sol)
> which(rnd.sol)

## [1] 2 9

> flip.ngh <- flipNeighborhood(base=rnd.sol, random=FALSE)
> while(hasMoreNeighbors(flip.ngh)) {
+   ngh <- nextNeighbor(flip.ngh)
+   is.valid <- ifelse(test=knp$valid(ngh),
+                     yes="bideragarria",
+                     no="bideraezina")
+   message("Inguruneko soluzio ", is.valid, ": ",
+           paste(which(ngh), collapse=" "))
+ }

## Inguruneko soluzio bideragarria: 1,2,9
## Inguruneko soluzio bideragarria: 9
## Inguruneko soluzio bideragarria: 2,3,9
## Inguruneko soluzio bideragarria: 2,4,9
## Inguruneko soluzio bideragarria: 2,5,9
## Inguruneko soluzio bideragarria: 2,6,9
## Inguruneko soluzio bideragarria: 2,7,9
## Inguruneko soluzio bideragarria: 2,8,9
## Inguruneko soluzio bideragarria: 2
## Inguruneko soluzio bideragarria: 2,9,10

```

Goiko kodean ikus daitekeen bezala, `metaheuR` paketea inguruneak korritzeko bi funtzio aurki ditzakegu: `hasMoreNeighbors` eta `nextNeighbor`. Izenek adierazten duten bezala, lehenengo funtzioak ingurunean oraindik bisitatu gabeko soluzioren bat dagoen esaten digu eta, bigarrenak, bisitatu gabeko hurrengo soluzioa itzultzen du. Horrez gain, badago beste funtzio bat, `resetNeighborhood`, ingurune objektua berrabiarazteko. Informazio gehiago lor dezakezu R-ko terminalean `?resetNeighborhood` teklatuz.

Permutazioak - Permutazioen arteko distantziak neurtzeko metrikak existitu arren, ingurune operadore klasikoak ez dituzte zuzenean erabiltzen. Horren ordez, permutazioetan definitutako eragiketak erabili ohi dira, trukaketa eta txertaketa batik bat.

Trukaketan – *swap* ingelesez –, permutazioaren bi posizio hartzen dira eta beraien balioak trukutzen dira. Adibidez, 21345 permutazioaren 1. eta 3. posizioak trukatzen baditugu 31245 permutazioa lortuko dugu. Formalki, trukaketa funtzioa, $t_r(s; i, j)$, defini dezakegu non $s' = t_r(s; i, j)$ bada $s'(i) = s(j)$, $s'(j) = s(i)$ eta $\forall k \neq i, j$, $s'(k) = s(k)$ beteko den. Funtzio honetan oinarriturik, ondoko ingurunea defini dezakegu:

$$N_{2opt}(s) = \{t_r(s; i, j) \mid 1 \leq i, j \leq n, \forall i > j\} \quad (2.4)$$

Ingurune honi *2-opt* deritzo, bizilagun bakoitzea bi posizio bakarrik trukatzeko baitira. Era berean, operadorea hedatu daiteke trukaketa gehiago eginez. Azkenik, hedatzeaz gain, operadorea murriztu ere egin ahal da, trukaketak elkarren ondoan dauden posizioetara soilik mugatuz. *2-opt* ingurunearen trukaketa operadorea `ExchangeNeighborhood` klaseak inplementatzen du, eta ondoz-ondoko trukaketetara murriztutako bertsioa `SwapNeighborhood` klasearen bidez erabil daiteke.

Ingurunearen tamainari dagokionez, ondoz-ondoko posizioetan soilik trukaketak eginez $n - 1$ ingurune soluzio izango ditugu; edozein bi posizio trukatzeko baditugu, berriz, ingurunearen tamaina $n(n - 1)$ izango da. Hau, jarraian dagoen adibidean ikus daiteke.

```
> n <- 10
> rnd.sol <- randomPermutation(length=n)
>
> swp.nght <- swapNeighborhood(base=rnd.sol)
> exchange.count <- 0
> swap.count <- 0
> while(hasMoreNeighbors(swp.nght)) {
+   swap.count <- swap.count + 1
+   nextNeighbor(swp.nght)
+ }
>
> ex.nght <- exchangeNeighborhood(base=rnd.sol)
> exchange.count <- 0
> while(hasMoreNeighbors(ex.nght)) {
+   exchange.count <- exchange.count + 1
+   nextNeighbor(ex.nght)
+ }
>
> swap.count

## [1] 9

> exchange.count

## [1] 45
```

Txertaketan *insert* ingelesez $-$, elementu bat permutaziotik atera eta beste posizio batean sartzen dugu. Adibidez, 54123 permutaziotik abiatuta, bigarren elementua laugarren posizioan txertatzen badugu, emaitza 51243 izango da. Eragiketa $t_x(s; i, j)$ funtzioaren bidez adieraziko dugu $-i$ elementua j posizioan txertatu $-$, eta ingurunearen definizioa hauxe izango da:

$$N_{in}(s) = \{t_x(s; i, j) \mid 1 \leq i, j \leq n, \forall i \neq j\} \quad (2.5)$$

Trukaketan bakarrik bi posiziotako balioak aldatzen dira; txertaketan, berriz, bi indizeen artean dauden posizio guztietako balioak aldatzen dira.

Hori dela eta, ingurune operadore bakoitzaren erabilgarritasuna problemaren arabera izango da. Operadore hau ere `metaheuR` paketearen aurki deza-kegu, `InsertNeighborhood` klasean inplementaturik.

Bi ingurune operadore hauetaz gain, badiran literaturan beste zenbait operadore, inbertsio eragiketan oinarritutakoak esate baterako.

2.1.2 *Optimo lokalak*

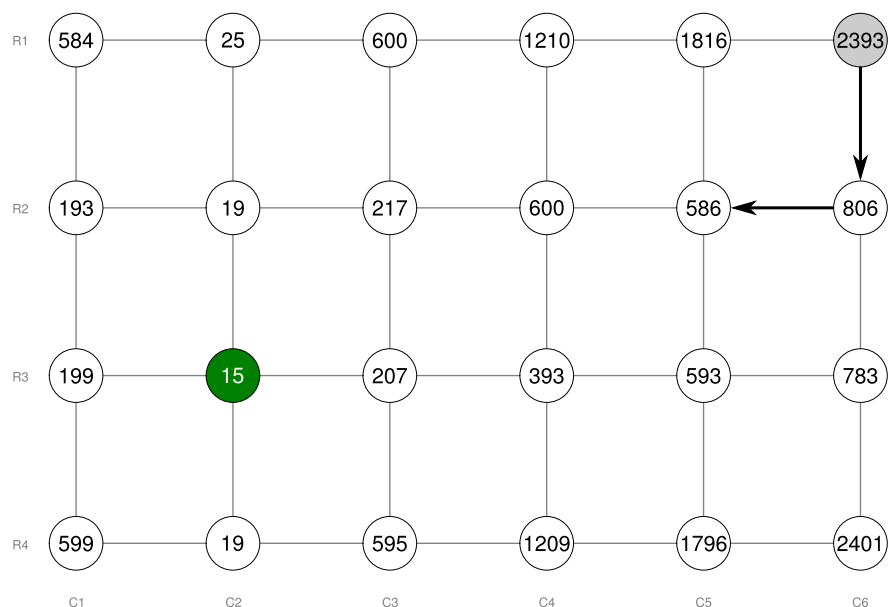
Bilaketa lokalean – oinarritzko bertsioan, behintzat – soluzio batetik beste batera mugitzeko, uneko soluzioaren ingurunean, helburu funtzioaren balioa hobetzen duen bizilagun bat egon behar da². Ingurunean soluzio guztien fitness-a txarragoa baldin bada, orduan soluzio hau *optimo lokala* dela esango dugu, eta bilaketa amaitu egingo da. Formalki, s^* *optimo lokala* da baldin eta ondoko baldintza betetzen baldin bada:

$$\forall s \in N(s^*) \quad f(s^*) \leq f(s)$$

Aurreko ekuazioa S osorako betetzen baldin bada, hau da, bilaketa espazio osorako, orduan, s^* *optimo globala* dela esango dugu.

Definizio hauek kontutan hartuz, bilaketa lokala *optimo lokal* batean amaitzen dela beti ondorioztatzen dugu. Hauxe da, hain zuzen, bilaketa lokalaren ezaugarriarik – eta, aldi berean, desabantailarik – nagusia. Aintzat hartzekoa da *optimo lokalak*, nahiz eta bere ingurunean soluziorik onenak izan, nahiko soluzio txarrak izan daitezkeela, 2.2 irudian erakusten den bezala. Irudi honetan kapituluaren zehar maiz erabiliko dugun grafiko mota bat ikus daiteke. Grafikoan, fikziozko problema baterako soluzio guztiak jasotzen dira, bakoitza borobil baten bidez adierazita; borobilen barruan soluzio bakoitzaren fitness-a dago idatzita. Ingurune funtzioa soluzioak lotzen dituzten marren bidez adierazten da; hala, bi soluzio lotuta badaude, bata bestearen ingurunean daudela diogu – bizilagunak direla, alegia.

² Helburu funtzioak soluzio jakin batean hartzen duen balioa, ingelesezko *fitness* hitzarekin izendatzea ohikoa da. Horregatik, kapituluaren zehar, bi adierazpideak erabiliko ditugu baliokide gisa.

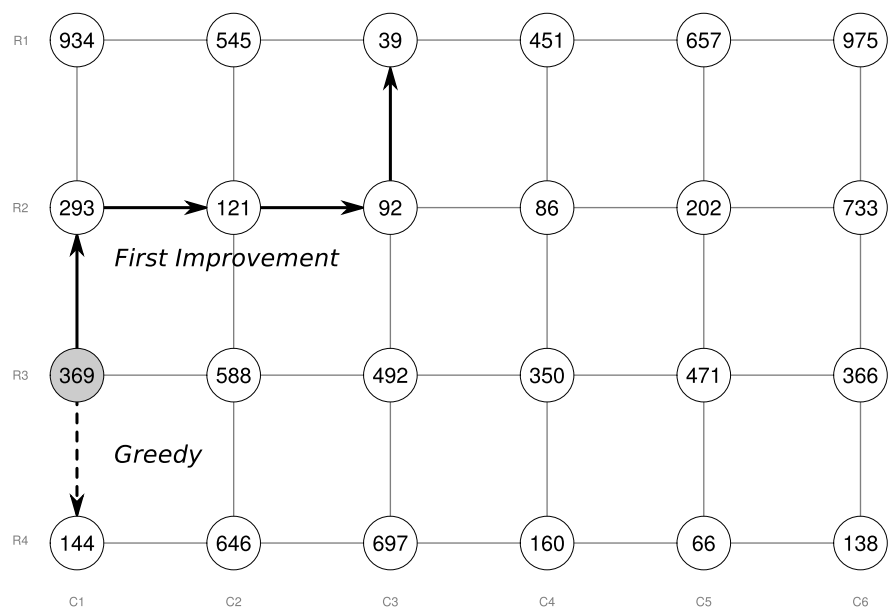


2.2 irudia Optimo lokalaren adibidea. Goiko eskumako soluziotik abiatzen bada bilaketa – (R1,C6), grisean nabarmendua dagoen soluziotik, alegia –, eta pausu bakoitzean aukerarik onena aukeratzen badugu, geziek markatzen duten bidea jarraitu eta, bi pausutan, (R2,C5) soluzioan trabatuta geldituko gara. Soluzio hau optimo lokala da, bere inguruneke soluzio guztiak txarragoak baitira. Optimo lokalaren ebaluazioa 586 da, oso txarra optimo globalarekin alderatzen badugu –(R3,C2) soluzioa–.

Adibidea 2.2 2.2 irudian agertzen diren geziek algoritmoak (R1,C6) soluziotik abiatuta egiten duen bidea erakusten dute. Pausu bakoitzean inguruneke soluziorik onena aukeratzen badugu, algoritmoa bi pausutan trabatuta geldituko da (R2,C5) soluzioan; soluzio honen fitness-a 586 da eta, bere ingurunean dauden soluzioen fitness-ak handiagoa direnez – 1816, 806, 593 eta 600 –, ez dago helburu funtzioaren balioa hobetzen duen soluziorik. (R2,C5) optimo lokal bat da eta, optimo globalaren – (R3,C2) – fitness-a 15 dela kontutan hartuz, nahiko soluzio txarra ere bai.

Optimo lokaletatik ateratzeko hainbat estrategia planteatu dira literaturan, bilaketa lokalaren puntu batean edo bestean aldaketak proposatuz. Hauexek izango dira, hain justu, 2.3. atalean aztergai izango ditugunak.

Ikusi dugunez, edozein soluziotik abiatuta, bilaketa lokala beti optimo lokal batean amaitzen da. Are gehiago, posible da bi soluzio ezberdinetatik hasita, bilaketa lokala soluzio berdinean amaitzea. Izan ere, optimo lokalek soluzioak «erakartzen» dituzte, zulo beltzak balira bezala. Ideia hau «erakarpen-arroa» – *basin of attraction*, ingelesez – deritzon kontzeptuan formalizatzen da.



2.3 irudia Inguruneke soluzioaren aukeraketaren efektua. Irudiak, soluzio berdinetik abiatuta – (R3,C2), grisean nabarmendua – bi estrategia ezberdin erabiliz egindako ibilbideak erakusten ditu. Lehenengo estrategia *first improvement* motakoa da, hau da, helburu funtzioa hobetzen duen lehenengo soluzioa aukeratzen dugu – inguruneke soluzioen ordena goikoa, eskumakoa, behekoa eta ezkerrekoa izanik –. Irizpide hau erabiliz egindako ibilbidea (R2,C1), (R2,C2), (R2,C3), (R1,C3) da, azken soluzio hau optimo lokala izanik. Bigarren estrategia gutuziatsua da – *greedy*-a, alegia –; aukeratzen dugun hurrengo soluzioa ingurunean dagoen onena izango da beti. Estrategia hau erabiliz pausu bakar batean (R4,C1) optimo lokalera ailegatzen gara.

Definizioa 2.2 erakarpen-arroa *Izan bitez N ingurune funtzioa, f helburu funtzioa, $A(s; f, N) : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}$ bilaketa lokaleko algoritmoa eta s^* optimo lokala (N ingurunerako eta f funtziorako). s^* optimo lokalaren erakarpen-arroa $\{s \in \mathcal{S} / A(s; N, f) = s^*\}$ soluzio multzoa da.*

Erakarpen-arroa, definizioan ikus daitekeen legez, helburu funtzioaren, ingurunearen eta algoritmoaren araberakoa da. Alde batetik, ingurunearen eta helburu funtzioaren eragina begi bistakoa da. Bestetik, algoritmoak, ingurunea nola aztertzen den eta, bereziki, zein soluzio aukeratzen den ezartzen du; ondorioz, egiten dugun ibilbidean eragin handia izan dezake, 2.3 irudian aukeraketa estrategiek duten eragina ilustratzen da.

```

1  input:  $f$  helburu funtzioa,  $s_0$  hasierako soluzioa,  $N$  ingurune funtzioa
2  output:  $s^*$  soluzio optimoa
3   $s^* = s_0$ 
4  do
5     $H = \{s' \in N(s^*) | f(s') < f(s^*)\}$ 
6    if  $|H| > 0$ 
7      Aukeratu  $H$ -n dagoen soluzio bat  $s'$ 
8       $s^* = s'$ 
9    fi
10 while ( $|H| > 0$ )

```

Algoritmoa 2.1: Oinarrizko bilaketa lokalaren sasikodea. Uneko soluzioaren ingurunean fitness-a hobetzen duen soluzio bat bilatzen dugu. Horrelakorik badago, uneko soluzioa ordezkatzeko dugu; ez badago, bilaketa amaitzen da.

2.2 Bilaketa lokala

Bilaketa lokalean oinarritutako edozein algoritmoren errendimendua, kodeketaren eta ingurunearen aukeraketaz gain, beste zenbait elementutan ere oinarritzen da. Lehenik eta behin, hasierako soluzioa nola aukeratzeko dugu erabakitzea garrantzitsua da, aurreko atalean ikusi dugun moduan horren arabera optimo lokal batean edo bestean amaituko baita bilaketa. Bigarren oinarrizko elementua ingurunearen soluzioaren aukeraketa egiteko aplikatzen den estrategia da. Uneko soluzioaren ingurunean hainbat soluzio izango ditugu, baina, zein aukeratu dugu hurrengo soluzioa izateko? Azkenik, gelditze irizpideak ere kontutan hartu beharreko faktoreak dira. Bilaketa lokala optimo lokal bat topatzen dugunean amaitzen da; dena dela, beste edozein algoritmotan bezala, denboran edota ebaluazio kopuruan oinarritutako gelditze irizpideak ere proposa ditzakegu³. 2.2 algoritmoan oinarrizko bilaketa lokalaren sasikodea ikus daiteke.

Sasikodean dagoen algoritmoa `metaheuR` paketeko `basicLocalSearch` funtzioak inplementatzen du. Funtzio honek zenbait parametro ditu, batzuk algoritmoarekin zerikusia dutenak eta beste batzuk problemari eta exekuzioari lotuta daudenak. Paketearen dauden metaheuristika guztiek antzerako egitura izango dutenez, pausuz pausu aztertuko ditugu parametro hauek. Gauzak honela, parametroak hiru motakoak dira:

- Problemari lotutako parametroak - Bilaketa gidatzeko helburu funtzio bat behar dugu. Funtzio hau `evaluate` parametroaren bidez pasatuko diogu algoritmoari. Algoritmoen inplementazioa orokorra denez, gerta daiteke problema batzuetarako bideraezinak diren soluzioak agertzea. Problema

³ Informazio gehiago R-ren laguntza duzu; `?basicLocalSearch` teklatu laguntza zabaltzeko.

mota hauekin lan egin ahal izateko, `metaheuR` paketeak soluzioen bideragarritasuna aztertu eta soluzio bideraezinak konpontzeko funtzioak parametro gisa sartzea ahalbidetzen du. Funtzio hauek problema bakoitzeko ezberdinak izango dira eta algoritmoari `valid` eta `correct` parametroen bidez pasatuko dizkiogu, hurrenez hurren.

- Exekuzio kontrola - Badaude exekuzioaren zenbait aspektu kontrola ditzakegunak. Lehenik eta behin, algoritmoari baliabide konputazionalak mugatu diezazkiokegu, denbora, soluzio berrien ebaluazio kopurua edota iterazio kopurua finkatuz. Hau `cResource` objektuen `cResource` parametroaren bidez kontrola dezakegu, bertan algoritmoak eskuragarri dituen baliabideak definituz. Horrez gain, `basicLocalSearch` funtzioak, algoritmoak gauzatzen duen bilaketaren progresioa bistaratzeko aukera ematen digu `verbose` parametroaren bidez. Era berean, progresioa taula batean gorde dezakegu, `do.log` parametroaren bidez.
- Bilaketaren parametroak - Bilaketa lokala aplikatzeko hiru gauza behar ditugu, hasierako soluzioa, ingurune definizio bat eta inguruneke soluzio bat aukeratzeko prozedura. Hiru elementu hauek `initial.solution`, `neighborhood` eta `selector` parametroen bidez ezarri beharko ditugu. Horez gain, soluzio bideraezinak daudenean, hiru aukera ditugu, bideraezin diren soluzioak onartu, deskartatu edo konpontzea. Zein aukera erabili `non.valid` parametroaren bidez adiraziko dugu.

Jarraian `basicLocalSearch` funtzioaren eta bere parametro guztien erabilera adibide baten bidez aztertuko dugu. Adibiderako grafoen koloreztetze-problema bat sortuko dugu `graphColoringProblem` funtzioa erabiliz eta ausazko grafo bat hautatuz. Honela, `gcp` objektuak problemaren ebaluazio funtzioa eta soluzio bideragarriekin tratatzeko funtzioak gordeko ditu.

```
> library(igraph)
> n <- 25
> rnd.graph <- random.graph.game(n=n, p.or.m=0.25)
> gcp <- graphColoringProblem (graph=rnd.graph)
```

Orain, algoritmoari emango dizkiogun baliabideak mugatuko ditugu. Gehienez, algoritmoak 10 segundu, helburu funtzioaren $100n^2$ ebaluazio edo algoritmoaren $100n$ iterazio erabili ahalko ditu.

```
> resources <- cResource(time=10, evaluations=100 * n^2,
+                          iterations=100 * n)
```

Azkenik, bilaketarekin loturiko parametroei dagokienez, hasierako soluzio gisa soluzio tribiala sortuko dugu, non nodo bakoitzak kolore bat duen. Horrez gain, Hamming distantzian oinarritutako ingurune objektua sortuko dugu. Objektu honek ingurunea aztertu eta harekin lan egiteko beharrezko funtzioak gordeko ditu.

```
> colors <- paste("C", 1:n, sep="")
> initial.solution <- factor (colors, levels=colors)
> h.ngb <- hammingNeighborhood(base=initial.solution)
```

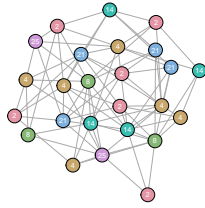
Dena prest daukagu bilaketa abiaratzeko ...

```
> args <- list()
> args$evaluate      <- gcp$evaluate
> args$valid         <- gcp$valid
> args$correct       <- gcp$correct
> args$initial.solution <- initial.solution
> args$neighborhood  <- h.ngh
> args$selector      <- firstImprovementSelector
> args$non.valid     <- "correct"
> args$resources     <- resources
>
> bls <- do.call(basicLocalSearch, args)

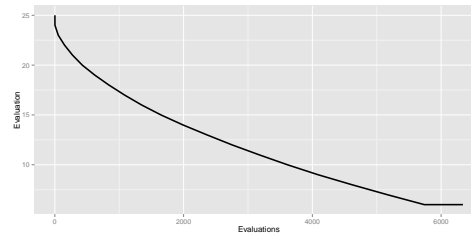
## Running iteration 1. Best solution: 25
## Running iteration 2. Best solution: 24
## Running iteration 3. Best solution: 23
## Running iteration 4. Best solution: 22
## Running iteration 5. Best solution: 21
## Running iteration 6. Best solution: 20
## Running iteration 7. Best solution: 19
## Running iteration 8. Best solution: 18
## Running iteration 9. Best solution: 17
## Running iteration 10. Best solution: 16
## Running iteration 11. Best solution: 15
## Running iteration 12. Best solution: 14
## Running iteration 13. Best solution: 13
## Running iteration 14. Best solution: 12
## Running iteration 15. Best solution: 11
## Running iteration 16. Best solution: 10
## Running iteration 17. Best solution: 9
## Running iteration 18. Best solution: 8
## Running iteration 19. Best solution: 7
## Running iteration 20. Best solution: 6

> bls

## RESULTS OF THE SEARCH
##
## Best solution's evaluation: 6
##
## Algorithm: Basic Local Search
##
## Resource consumption:
##
## Time: 3.04453158378601
##
## Evaluations: 6339
##
## Iterations: 19
##
## None of the resources completely consumed
##
##
## You can use functions 'getSolution', 'getParameters' and 'getProgress'
```



(a) Problemaaren soluzioa



(b) Bilaketaren progresioa

2.4 irudia Grafoen koloreztatze-problemarako bilaketa lokalak topatutako soluzioa eta egindako bilaketaren progresioa. Bigarren grafiko honetan, X ardatzak ebaluazio kopurua adierazten du eta Y ardatzak uneko soluzioaren ebaluazioa –soluzioak erabiltzen dituen kolore kopurua, alegia–.

to get the list of optimal solutions, the list of parameters of the search and the log of the process, respectively

```
> final.solution <- getSolution(bls)
> as.character(final.solution)
```

```
> plot.gpc.solution <- gpc$plot
> plot.gpc.solution(solution=final.solution, node.size=15,
+                   label.cex=0.8)
```

Bilaketa lokalak –eta, oro har, beste gainontzeko algoritmoek– objektu berezi bat itzultzen dute, `mHResult` klasekoa. Bertan dagoen informazioa funtzio sorta baten bitartez lor daiteke; este baterako, optima funtzioak lortutako soluzio optimoa(k) itzultzen du, zerrenda batean. Bilaketa lokalak soluzio bakarra itzultzen duenez, soluzio hori listaren 1. posizioan egongo da. Soluzioa grafikoki bistaratzeko `graphColoringProblem` funtzioak itzultzen duen `plot` funtzioa erabil daiteke. Gainera, bilaketaren progresioa ere bistara dezakegu, `plotProgress` funtzioa erabiliz. 2.4 irudiak problemaarako soluzioa eta bilaketaren progresioa jasotzen ditu.

```
> plotProgress(bls, size=1.1) + labs(y="Evaluation")
```

```
## Loading required package: ggplot2
```


Jarraian, bilaketa lokalean berebiziko garrantzia duten bi aspektu landuko ditugu: hasierako soluzioaren esleipena eta inguruneke soluzioaren aukeraketa.

2.2.1 *Hasierako soluzioaren aukeraketa*

Lehen aipatu bezala, bilaketa lokala soluzio batetik abiatuko da beti. Bilaketa nondik hasten den oso garrantzitsua da, horren arabera optimo lokal batean edo bestean amaituko baita bilaketa. Adibidez, hau argi ikusten da 2.2 irudian; (R1,C6) soluziotik hasten badugu bilaketa (C2,R5) soluzioan amaituko da. Gauza bera gertatzen da optimo lokaletik bertatik – (C2,R5) –, goian dagoen soluziotik – (C1,R5) – edo bere eskuinean dagoen soluziotik – (C2,R6) – hasten bada prozesua. Beste edozein soluzio aukeratzen badugu, berriz, optimo globalera helduko gara.

Hau ikusirik, bi dira bilaketa lokala hasieratzeko erabiltzen diren estrategia ohikoenak:

- **Ausazko soluzioak sortu** - Ausaz aukeratzen da bilaketa espazioan dagoen soluzio bat eta hortik hasten da bilaketa. Metodo honen abantaila bere sinpletasuna da, ausazko soluzioak sortzea, kasu orokorrean, erraza izaten baita. Problemak murrizketa asko dituen kasuetan ordea, premisa honek ez du balio, baliozko ausazko soluzioak sortzea asko zaildu baitaiteke. Hala ere, estrategia honek alde txarrak ere baditu; alde batetik, hasierako soluzioa txarra bada, bilaketa prozesua luzea izan daiteke eta, bestetik, algoritmoa aplikatzen dugun bakoitzean emaitza, oro har, ezberdina izango da.
- **Soluzio onak eraiki** - Lehenengo kapituluan ikusi genuen problema bakoitza ebazteko metodo heuristiko espezifikoa diseina daitezkeela. Oro har, metodo hauek pausuz pausu eraikitzen dituzte soluzioak, urrats bakoitzean aukera guztietatik onena aukeratuz – ingelesez metodo hauei *constructive greedy* deritze, hau da algoritmo eraikitzaile gutziatsuen edo jaleak –. Nahiko soluzio onak lortu arren, hauek ez dira zertan optimoak izan⁴ eta, beraz, lortutako soluzioak bilaketa lokala hasieratzeko erabil daitezke. Estrategia hauek ausazko soluzioetatik abiatzeak baino emaitza hobeak lortzen ditu normalean, bilaketak iterazio gutxiago behar izaten baititu; konputazionalki ordea, garestiagoa da.

⁴ Ez optimo globalak eta ezta lokalak ere.

2.2.2 Inguruneko soluzioaren aukeraketa

Behin inguruneko soluzioen multzoa definiturik dugula, hurrengo pausua soluzio horien artean bat aukeratzeko irizpidea ezartzea da. Lehen aipatu bezala, bi dira, nagusiki, erabiltzen diren estrategiak. Lehenengo estrategian inguruneko soluzioak banan banan analizatzen dira eta fitness-a hobetzen duen lehenengo soluzioa aukeratzen da. Hurbilketan honetan, inguruneko soluzioen «ordenazioa» oso garrantzitsua da, uneko soluzioa hobetzen duen lehenengo soluziora mugituko baikara. Bigarren estrategiak ingurune osoa arakatzan du eta fitness-a gehien hobetzen duen soluzioa aukeratzen du. Oro har, inguruneak txikiak direnean bigarren hurbilketa da interesgarriena baina, inguruneak handiak direnean, kostu konputazionala dela eta, bideraezina gerta daiteke estrategia hau.

Adibidea 2.3 *Demagun problema baterako soluzioak bektore bitarren bidez kodetzen ditugula. Uneko soluzioa $(0, 1, 1, 0, 1)$ da dagokion fitness-a 25 delarik. Ingurunea definitzeko (2.2) ekuazioan dagoen funtzioa erabiltzen badugu, inguruneko soluzioak hauek izango dira:*

- $s_1 = (1, 1, 1, 0, 1); f(s_1) = 30$
- $s_2 = (0, 0, 1, 0, 1); f(s_2) = 24$
- $s_3 = (0, 1, 0, 0, 1); f(s_3) = 5$
- $s_4 = (0, 1, 1, 1, 1); f(s_4) = 27$
- $s_5 = (0, 1, 1, 0, 0); f(s_5) = 29$

Inguruneko soluzioak lortzeko posizio bakoitzeko balioa banan-banan aldatu behar dugu. Lehenengo posiziotik abiatzen bagara, s_2 soluzioa izango da fitness-a hobetzen duen lehenengo soluzioa, bere ebaluazioa 24 baita. Azken posiziotik abiatzen bagara, berriz, s_3 soluzioarekin geldituko ginateke, ebaluazioa 5 baita. Kasu bakoitzean soluzio ezberdina aukeratu dugu lehenengo pausu honetan, hortaz, hurrengo urratsean izango dugun ingurunea ere ezberdina izango da. Hori dela eta, inguruneko soluzioen azterketa orden desberdinetan eginez, azken soluzioa ezberdina izan daiteke. Inguruneko soluziorik onena aukeratzen ordea, ordenak ez du garrantziarik eta beti soluzio berdina topatuko dugu, berdinketarik ez badago betiere.

Adibidean, soluzioen kodeketarekin zerikusia duen ordena erabiltzen da inguruneko soluzioak lortzeko. Horren ordez, esplorazioa ausaz ere egin daiteke.

Jarraian azaltzen den kodean ingurunearen azterketan ordenak duen eragina erakusten da. Lehenik eta behin, TSPLib repositorioan dagoen problema bat kargatuko dugu, metaheur paketeko `tsplibParser` funtzioa erabiliz. TSPLib repositorioan TSP problemaren zenbait adibide ezberdin topa ditza-kegu. Erabiliko dugun problemaren Babariako 29 hiri izango ditugu. Hasierako soluzio gisa identitate permutazioa hartuko dugu.

```

> url <- system.file("bays29.xml.zip", package = "metaheuR")
> cost.matrix <- tsplibParser(url)
> n <- dim(cost.matrix)[1]
> tsp.babaria <- tspProblem(cost.matrix)
> csol <- identityPermutation(n)
> csol

## An object of class "Permutation"
## Slot "permutation":
## [1] 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20
21 22 23
## [24] 24 25 26 27 28 29

> eval <- tsp.babaria$evaluate(csol)
> eval

## [1] 5752

```

Problema definitu ostean, hasierako soluzioaren ingurunea sortuko dugu. *2-opt* ingurunea aukeratu dugu, ausazko eta ez-ausazko esplorazioak hautatuz. Lehenengoan inguruneko soluzioak ausazko orden batean aztertuko dira eta bigarrenean, ordea, kodeketaren arabeko orden zehatz bat jarraituko da ingurunea arakatzeko.

```

> ex.nonrandom <- exchangeNeighborhood(base=csol, random=TRUE)
> ex.random <- exchangeNeighborhood(base=csol, random=FALSE)

```

Bilaketaren pausu bakoitzean inguruneko helburu funtzioa hobetzen duen lehenengo soluzioa aukeratzen badugu, hautatutako bi ordenazioak erabiliz emaitza ezberdinak lortuko ditugu. Ingurunea modu honetan arakatzeko, `firstImprovementSelector` funtzioa erabili dezakegu. Funtzio honek, uneko soluzioaren ingurunea arakatu du eta fitness-a hobetzen duen lehenengo soluzioa itzultzen du.

```

> firstImprovementSelector(neighborhood=ex.nonrandom,
+                           evaluate=tsp.babaria$evaluate,
+                           initial.solution=csol,
+                           initial.evaluation=eval)$evaluation

## [1] 5684

> firstImprovementSelector(neighborhood=ex.random,
+                           evaluate=tsp.babaria$evaluate,
+                           initial.solution=csol,
+                           initial.evaluation=eval)$evaluation

## [1] 5478

```

Inguruneko soluziorik onena aukeratzen badugu, hautatutako bi ordenazioak erabiliz emaitza bera lortuko dugu, kasu guztietan inguruneko soluzio guztiak aztertzen baitira. Ingurunea aztertzeko estrategia hau `greedySelector` funtzioak inplementatzen du.

```

> greedySelector(neighborhood=ex.nonrandom,
+               evaluate=tsp.babaria$evaluate,
+               initial.solution=csol,
+               initial.evaluation=eval)$evaluation

## [1] 5034

> greedySelector(neighborhood=ex.random,
+               evaluate=tsp.babaria$evaluate,
+               initial.solution=csol,
+               initial.evaluation=eval)$evaluation

## [1] 5034

```

Inguruneak handiak direnean ordenak oso eragin handia izan dezake eta, hortaz, heuristikoak erabil daitezke esplorazioa egiteko. Adibide gisa, Fred Glover-ek TSP problemarako proposatutako *ejection chains* ([30]) aipa daitezke. Gainera, metodo heuristikoez gain, tamaina handiko inguruneak era eraginkorrean zehazki aztertze algoritmoak ere badaude; hauetako adibide bat *dynasearch* ([9]) algoritmoa da.

2.2.3 Bilaketa lokalaren elementuen eragina

Ikusi dugun bezala, bilaketa lokal arrunt bat aplikatzeko hiru aspektu aztertu behar ditugu. Lehenengoa, hasierako soluzioaren aukeraketa, bigarrena, erabiliko dugun ingurunearen diseinua eta, azkena, inguruneako soluzioaren aukeraketa. Atal honetan aspektu hauen eragina aztertuko dugu adibide baten bidez.

Zehazki, aurreko atalean aurkeztutako Babariako hirien problema erabiliko dugu. Problema honetarako bi hasierako soluzio erabiliko ditugu, bat ausazkoa eta bestea algoritmo eraikitzaileak itzultzen duena.

```

> rnd.sol <- randomPermutation(n)
> greedy.sol <- tspGreedy(cmatrix=cost.matrix)
> tsp.babaria$evaluate(rnd.sol)

## [1] 6360

> tsp.babaria$evaluate(greedy.sol)

## [1] 2307

```

Ikusi daitekeenez, algoritmo eraikitzaileak (*tspGreedy*) ematen duen soluzioa ausazkoa baino askoz ere hobea da. Bi soluzio hauek hasierako soluzio gisa hartuz, bilaketa lokala aplikatu ahal dugu, *swap* ingurunea erabiliz. Gainera, pausu bakoitzean, inguruneako soluziorik onena aukera dezakegu (*greedy*) edo, bestela, uneko soluzioaren fitness-a hobetzen duen lehenengo soluzioa

hartu (*first improvement (fi)*). Honenbestez, lau bilaketa ezberdin exekutatuko ditugu.

```
> eval <- tsp.babaria$evaluate
> swp.ngh.rnd <- swapNeighborhood(base=rnd.sol)
> swp.ngh.greedy <- swapNeighborhood(base=greedy.sol)
>
> args <- list()
> args$evaluate <- eval
> args$initial.solution <- rnd.sol
> args$neighborhood <- swp.ngh.rnd
> args$selector <- greedySelector
> args$verbose <- FALSE
>
> swap.greedy.rnd.sol <- do.call(basicLocalSearch, args)
>
> args$selector <- firstImprovementSelector
> swap.fi.rnd.sol <- do.call(basicLocalSearch, args)
>
> args$initial.solution <- greedy.sol
> swap.fi.greedy.sol <- do.call(basicLocalSearch, args)
>
> args$selector <- greedySelector
> swap.greedy.greedy.sol <- do.call(basicLocalSearch, args)
```

Azter dezagun zer nolako hobekuntza lortu dugun bilaketa lokalarekin, ausazko soluziotik abiatzen garenean.

```
> init.sol.eval <- tsp.babaria$evaluate(rnd.sol)
> init.sol.eval - getEvaluation(swap.greedy.rnd.sol)

## [1] 1936

> init.sol.eval - getEvaluation(swap.fi.rnd.sol)

## [1] 1317
```

Ikusi daitekeenez bilaketa lokalaren bidez, topatutako soluzioa hasierakoa baino askoz ere hobea da. Are gehiago, bilaketa prozesuko pausu bakoitzean inguruneke soluziorik onena aukeratzen badugu, hobekuntza handiagoa da. Halere, kontutan hartu behar da ebaluazio kopurua ere handiagoa dela kasu honetan.

```
> rsc <- getResources(swap.greedy.rnd.sol)
> getConsumedEvaluations(rsc)

## [1] 337

> rsc <- getResources(swap.fi.rnd.sol)
> getConsumedEvaluations(rsc)

## [1] 276
```

Algoritmo eraikitzailearekin lortutako hasierako soluzioa, ausazko soluzioa baino hobea dela ikusi dugu. Hala ere, soluzio horri bilaketa lokala aplikatuz,

soluzio oraindik hobeak lortuko dugu, nahiz eta kasu honetan hobekuntza hain handia ez izan.

```
> init.sol.eval <- tsp.babaria$evaluate(greedy.sol)
> init.sol.eval - getEvaluation(swap.greedy.greedy.sol)

## [1] 56
```

Ingurunekeo soluzio guztietatik onena hartzeak emaitza hobeak ematen ditu –ausazko soluziotik abiatzen garenean, behintzat–, bilaketa espazioa sakonago aztertzen delako. Bilaketa sakonagoa egiteko beste era bat, *swap* ingurunearen ordeztasun *2-opt* ingurunea erabiltzean datza. Izan ere, lehen ikusi dugun bezala, *2-opt* ingurunea *swap* ingurunea baino askoz ere handiagoa da.

```
> ex.ngh.rnd <- exchangeNeighborhood (base=rnd.sol)
>
> args <- list()
> args$evaluate <- eval
> args$initial.solution <- rnd.sol
> args$neighborhood <- ex.ngh.rnd
> args$selector <- greedySelector
> args$verbose <- FALSE
>
> ex.greedy.rnd.sol <- do.call(basicLocalSearch, args)
>
> tsp.babaria$evaluate(rnd.sol) - getEvaluation(ex.greedy.rnd.sol)

## [1] 3951

> getConsumedEvaluations(getResources(ex.greedy.rnd.sol))

## [1] 11775
```

Ikus daitekeen bezala, hobekuntza handiagoa da baina, inguruneak handiagoak direnez, baita ebaluazio kopurua ere.

2.3 Bilaketa lokalaren hedapenak

Aurreko atalean ikusi dugun legez, bilaketa lokala soluzioak areagotzeko prozedura egokia izan arren, desabantaila handi bat du; optimo lokaletan tratatuta gelditzen da. Arazo hau saihesteko –soluzioen dibertsifikazioa sustertzeko, alegia – bilaketa lokalak dituen lau aspektu nagusietan aldaketak sar ditzakegu bilaketan zehar: hasierako soluzioan, ingurunearen definizioan, ingurunekeo soluzioen aukeraketan eta helburu funtzioaren definizioan. Hurrengo ataletan hauetako elementu bakoitzean aldaketak egiten dituzten algoritmo batzuk aurkeztuko ditugu.

```

1 input:  $f$  helburu funtzioa
2 input: random_solution, stop_criterion eta local_search funtzioak
3 output:  $s^*$  soluzioa optimoa
4  $s = \text{generate\_random\_solution}$ 
5 while !stop_criterion
6      $s' = \text{random\_solution}$ 
7      $s'' = \text{local\_search}(s')$ 
8     if ( $f(s'') < f(s)$ )  $s = s''$ 
9 done

```

Algoritmoa 2.2: Hasieraketa anizkoitza erabiltzen duen bilaketa lokalaren hedapenaren sasikode orokorra

2.3.1 *Hasieraketa anizkoitza*

Bilaketa lokala aplikatzean, soluzio bakoitzetik abiatuz optimo lokal batera heltzen gara; soluzio ezberdinetatik abiatzen bagara, optimo lokal ezberdinetara heldu gaitezke. Ideia hau da, hain zuzen ere, hasieraketa-anizkoitzeko bilaketa lokalak – *Multistart Local Search*, ingelesez – inplementatzen duen (2.2 sasikodean ikusi daiteke). Algoritmoan agertzen diren *generate_random_solution* eta *local_search* funtzioetan dago prozeduraren mamia, beraiek karakterizatuko baitute algoritmoaren performantzia. Lehenengoak, bilaketa espazioaren esplorazioa burutzen du. Bigarrena, aldiz, bere izenak adierazten duen bezala, soluzioen areagotzeaz arduratzen da.

Hasteko, ausazko soluzioak sortzeko hainbat aukera ditugu. Horietako bat, soluzioak uniformeki ausaz sortzea da, hots, iterazio bakoitzean probabilitate berdinarekin espazioko edozein soluzio aukeratuko dugu eta bilaketa lokala soluzio horretatik hasiko dugu. Uniformeki ausazko soluzioetatik abiatzea, gehienetan, aukera erraza da; alabaina, ez da oso estrategia adimentsua. Gainera, murrizketa askoko problemetan ausazko soluzio bideragarriak sortzea zaila izan daiteke. Bilaketa hasieratzeko soluzio «onak» eraikitzeako prozedura bat izanez gero, bi arazo hauek saihestu ditzakegu. Hain juxtu, hauxe da hurrengo atalean ikusiko ditugun ILS eta GRASP algoritmoak egiten dutena.

2.3.1.1 Bilaketa Lokala Iteratua (ILS)

Bilaketa lokala berrabiarazteko uniformeki ausazko soluzioak erabili beharrean, ILS – *Iterated Local Search*, ingelesez – algoritmoak uneko optimo lokala hartuko du oinarritzat. Ideia oso sinplea da; optimo lokal batean trabaturik gelditzen garenean, uneko soluzioa «perturbatu» eta bertatik bilaketarekin jarraituko dugu. Optimo lokal berri batera heltzen garenean,

```

1 input:  $f$  helburu funtzioa
2 input:  $accept$ ,  $perturb$ ,  $stop\_criterion$  eta  $local\_search$  funtzioak
3 input:  $s_0$  hasierako soluzioa
4 output:  $s^*$  soluzioa
5  $s = local\_search(s_0)$ 
6  $s^* = s$ 
7 while  $!stop\_criterion$ 
8      $s' = perturb(s)$ 
9      $s'' = local\_search(s')$ 
10    if ( $accept(s'')$ )  $s = s''$ 
11    if ( $f(s'') < f(s^*)$ )  $s^* = s''$ 
12 done

```

Algoritmoa 2.3: Bilaketa Lokala Iteratuaren (ILS) sasikodea

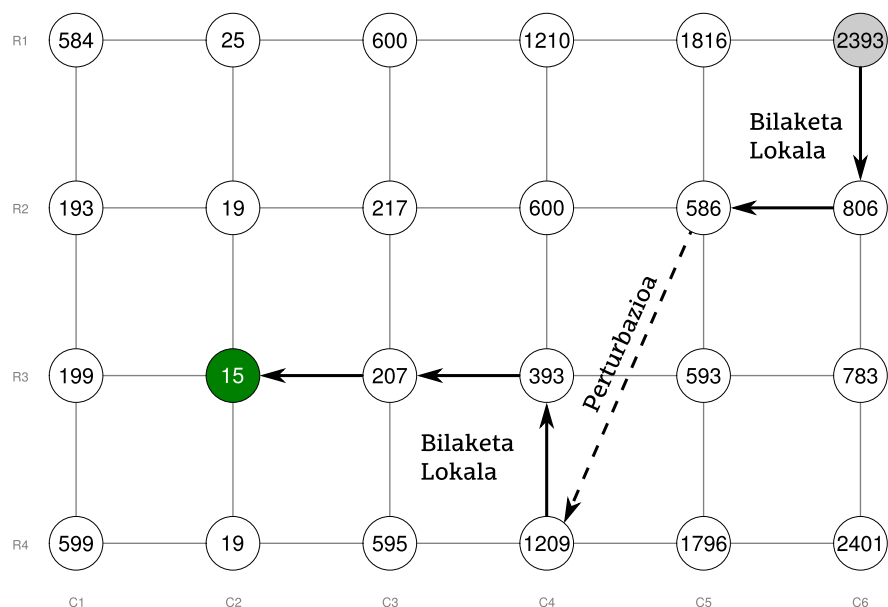
soluzio hau onartuko dugunetz erabaki behar dugu. 2.3 algoritmoan ILS-aren sasikode orokorra ikusi daiteke.

Algoritmo hau zehazteko bi prozedura berri definitu behar ditugu:

- **Perturbazioa** - Hasteko, optimo lokal batean trabaturik geratzean, hau nola perturbatuko den erabaki behar da. Soluzio baten inguruneko soluzio guztiak antzekoak direnez, optimo lokaletatik edo zehazki haien erakarpenerroetatik ateratzeko, aldaketa nabarmenak egin behar dira (5 irudian adibide bat proposatzen da). Uneko soluzioa (R2,C5) izanik, perturbazio txikiegia egingo bagenu – (R1,C5) soluziora mugitzea, adibidez –, berriro optimo lokal berdinean amaituko litzateke bilaketa. Perturbazioa nahiko handia bada, uneko optimo lokalaren erakarpenerrotik aterako gara eta, definizioz, beste optimo lokal batean trabaturik geldituko gara. Kontutan hartzekoa da ordea, perturbazio prozedurak itzultako soluzioa erabat ausazkoa bada –hau da, perturbazioa oso handia bada –, ILS algoritmoa ausazko hasieraketa anizkoitzeko algoritmoa bilakatuko dela. Beraz, perturbazio tamainaren aukeraketak eragina izango du algoritmoaren portaeran.

Perturbazioa definitzean inguruneko soluzioak definitzeko erabiltzen diren operazio mota berberak edo beste batzuk erabil daitezke. Esate baterako, permutazioetan oinarritzen den problema batean $2-opt$ ingurune operadorea erabiltzen badugu, $k-opt$ operadorea erabil daiteke soluzioak perturbatzeko. Perturbazioa trukaketan oinarritu beharrean, txertaketa ere erabil dezakegu, k elementu hartu eta ausazko posizioetan sartuz.

Perturbazioaren tamaina aurrez finkatu daiteke eta bilaketan zehar aldatu barik mantendu ala, bestalde, estrategia dinamikoak erabil daitezke, non perturbazioaren maila bilaketaren zehar aldatzen den.



2.5 irudia ILS algoritmoaren funtzionamendua. Goiko eskumako soluziotik abiatzen bada bilaketa – (R1,C6), grisean nabarmendua dagoen soluziotik, alegia –, (R2,C5) optimo lokalean trabatuta geldituko litzateke bilaketa lokala. Egoera desblokeatzeko soluzioa «perturbatzen» dugu, (R3,C4) soluziora mugituz; hortik abiatuta bilaketa lokala aplikatzen dugu berriro, kasu honetan optimo globalera heldu arte

Gainera, soluzioak perturbatzeko prozedura aurreratuetan, bilaketaren «historia» ere erabil daiteke, soluzioaren zein osagai perturbatu eta zein ez erabakitzeke. Estrategia hauek «memoria» kontzeptua erabiltzen dute eta memoria mota ezberdinak soluzioak areagotzeko eta dibertsifikatzeko balio dezakete.

- **Optimo lokalak onartzeko irizpideak** - Uneko optimo lokala perturbatu ondoren bilaketa lokala aplikatzen da, optimo (berri) bat sortuz. Hurrengo iterazioan, lortutako optimo berria edo berriro optimo zaharra perturbatuko dugun erabaki behar da. Bi muturreko hurbilketa planteatu daitezke: beti optimo berria onartu edo soilik unekoa baino hobe dena onartu. Lehendabiziko estrategiak dibertsifikazioa suspertzen du; bigarrena, berriz, soluzioak areagotzeko egokia da. Ohikoena tarteko zerbait erabiltzea da, optimo zaharraren eta berriaren ebaluazioen arteko diferentzia kontutan hartuz. Esate baterako, optimoak era probabilistikoan onartu daitezke, Boltzmann-en distribuzioa erabiliz, gero *simulated annealing* algoritmoan ikusiko dugun bezala.

metaheurR paketea, ILS-a iteratedLocalSearch funtzioan dago inplementatuta. Funtzio honen parametro gehienak basicLocalSearch fun-

tzioaren berberak dira, implementazioa funtzio horretan oinarritzen baita. Algoritmo honek ordea, hiru parametro berri izango ditugu:

- `perturb` - Parametro honen bidez soluzioak perturbatzeko erabiliko den funtzioa adieraziko diogu algoritmoari. `perturb` funtzioak parametro bakarra izango du, perturbatu behar den soluzioa, eta perturbazioa aplikatuz lortzen den soluzioa itzuliko du.
- `accept` - Parametro hau, soluzio berriak noiz onartzen ditugun definitzen duen funtzioa da. Gutxienez parametro bat izan beharko du, `delta`, soluzio berriaren eta zaharraren fitness balioen arteko diferentzia jasoko duena.
- `num.restarts` - Optimo lokalak perturbatuz, bilaketa zenbat alditan berrabiarazi behar dugun esaten duen zenbaki osoa da.

Ikus dezagun adibide bat, TSPLib-eko problema bat erabiliz. Problema honetan Burma-ko 14 hirien arteko distantziak izango ditugu. Problema ebazteko ausazko soluzio batetik abiatuko dugu bilaketa. Ingurune gisa *2-opt* erabiliko dugu (trukaketa orokorrak, ez bakarrik elkar-ondokoak) eta soluzioak perturbatzeko eragiketa bera erabiliko dugu baina behin baino gehiagotan aplikatuz; soluzio bati operazio hau ausaz aplikatzeko `shuffle` funtzioa erabil dezakegu.

```
> f <- paste("http://www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/",
+           "comopt/software/TSPLIB95",
+           "/XML-TSPLIB/instances/burma14.xml.zip", sep="")
> burma.mat <- tsplibParser(f)

## Processing file corresponding to instance burma14: 14-Staedte in
Burma (Zaw Win)

> n <- ncol(burma.mat)
> burma.tsp <- tspProblem(burma.mat)
>
> init.sol <- randomPermutation(n)
> ngh      <- exchangeNeighborhood(init.sol)
> sel      <- greedySelector
```

Segidan, optimo lokalak onartzeko irizpideak definituko ditugu. Kasu honetan, soluzioen arteko diferentzia 0 baina handiagoa izan beharko da, optimo lokal berria onartzeko. Hau da, optimo lokal berria aurrekoa baina hobeia izan behar da.

```
> th.accept <- thresholdAccept
> th <- 0
```

Perturbazio maila soluzioari aplikatuko dizkiogun trukaketa kopuruaren bidez kontrolatuko dugu. Beraz, trukaketa kopurua, gure perturbazio funtzioaren parametro bat izan beharko da⁵.

⁵ `iteratedLocalSearch` funtzioarekin (eta paketearen beste hainbat funtzioekin) arazorik ez izateko, pasatutako funtzioak ... argumentua izan behar du gutxienez, nahiz eta gero barruan ez erabili.

```

> set.seed(1)
> perturbShuffle <- function(solution, ratio, ...) {
+   return(shuffle(permutation=solution, ratio=ratio))
+ }

```

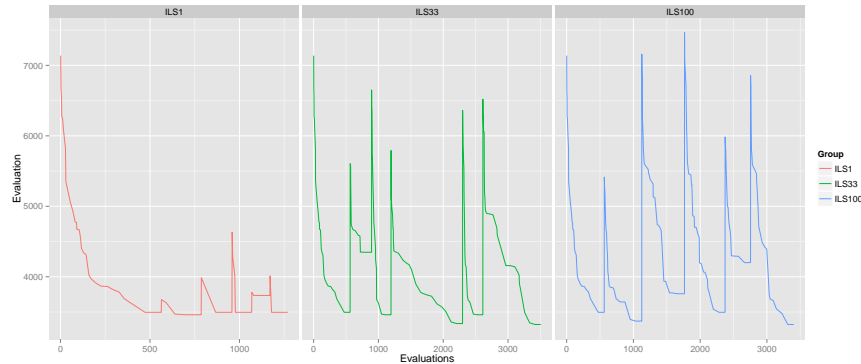
Honekin guztiarekin ILS algoritmoa exekutatu dezakegu perturbazio maila ezberdinekin:

```

> ratio <- 0.01
>
> args <- list()
> args$evaluate <- burma.tsp$evaluate
> args$initial.solution <- init.sol
> args$neighborhood <- ngh
> args$selector <- sel
> args$perturb <- perturbShuffle
> args$ratio <- ratio
> args$accept <- th.accept
> args$th <- th
> args$num.restarts <- r
> args$verbose <- FALSE
>
> ils.1 <- do.call(iteratedLocalSearch, args)
>
> args$ratio <- 0.25
> ils.25 <- do.call(iteratedLocalSearch, args)
>
> args$ratio <- 1
> ils.100 <- do.call(iteratedLocalSearch, args)
>
> plotProgress(result=list(ILS1=ils.1, ILS25=ils.25,
+                           ILS100=ils.100)) +
+   facet_grid(. ~ Group, scales="free_x") +
+   labs(y="Evaluation")

```

Hiru bilaketa hauen progresioak 2.5 irudian ikus daitezke. Hirurak soluzio berdinetik hasten dira eta, pausu bakoitzean inguruko soluziorik onena aukeratzeko dutenez, lehenengo jaitziera berdina da hiru grafikoetan. Lehenengo optimo lokala topatzen den momentuan, ordea, diferentziak hasten dira. Ezkerretik eskuinera, lehenengo grafikoan soluzioak posizioen %1 trukatzeko perturbatzen dira; guztira soluzioak 14 posizio dituztenez, trukaketa bakar bat egiten da. Erdiko grafikoan perturbazioa %25ekoa da, 3 trukaketa egiten dira, alegia. Azken grafikoan, berriz, 14 trukaketa egiten dira (posizioen %100). Perturbazio txiki bat erabiltzen dugunean, lortutako soluzioaren ebaluazioa optimo lokalaren antzerakoa da (agertzen diren jauziak ez dira oso altuak, alegia); geroz eta perturbazio handiagoa orduan eta diferentzia handiagoa soluzio berria eta optimoaren artean. Azken kasuan, perturbazioa oso handia da eta, beraz, optimo lokaletatik ateratzeko, soluzioak guztiz ausaz aukeratzeko dira, hasieraketa anizkoitzeko algoritmoan bezala.



2.6 irudia ILS algoritmoaren progresioa 14 hiriko TSP problema batean. Ezkerretik eskuinera, perturbazioaren ratioak 0.01, 0.25 eta 1 dira.

2.3.1.2 GRASP algoritmoa

Optimizazio problemak ebazteko ohikoa da metodo eraikitzaileak erabiltzea. Aurreko kapituluan ikusi genuen bezala, algoritmo hauek soluzioa pausuz pausu eraikitzen dute, urrats bakoitzean aukera guztietatik onena hautatuz. Era honetan, soluzio onak sortzen dira baina, hauek ez dute zertan optimoak izan, ez globalki eta ezta lokalki ere. Hori dela eta, behin soluzioa sortuta, bilaketa lokal bat erabil daiteke soluzioa areagotzeko. Alabaina, berdinketak egon ezean, metodo eraikitzaileek instantzia bakoitzeko soluzio bakarra eta beti berdina lortzen dute eta beraz hasieraketa bakarra ahalbidetzen dute.

Idea hau apur bat landuz, metodo eraikitzaileak soluzio bakarra sortu beharrean soluzio multzo bat sortzeko egoki ditzakegu. Eta ondoren, 2.2 algoritmoan agertzen den *random_solution* metodoak multzo horretatik ausazko soluzioak aterako ditu, bilaketa lokala hasieratzeko. Idea hau GRASP *Greedy Randomized Adaptive Search Procedure* algoritmoaren atzean dagoena da [13].

Ausazko soluzio onak eraikitzeko, pausu bakoitzean aukerarik onena aukeratu beharrean «hautagai zerrenda» bat izango dugu – *candidate list*, ingelesez –; algoritmoak zerrenda horretan dauden osagaiak ausaz aukeratuko ditu hasierako soluzioak eraikitzeko.

Adibidea 2.4 *Demagun motxilaren problema ebatzi nahi dugula. Oso sinplea den algoritmo eraikitzaile bat ondorengo da: lehenik eta behin, kalkulatu motxilan sartzen ditugun elementu bakoitzaren balioa/pisua ratioa eta gero, pausu bakoitzean, pisu-muga gaindiaz ez duten elementuetatik, ratorik handiena duena aukeratu.*

Algoritmo hau GRASP algoritmoaren ideia modu errezean egokitu daiteke. Algoritmoaren iterazio bakoitzean hasierako soluzio bat eraikiko dugu pausu bakoitzean, ratorik handiena duen elementua aukeratu beharrean ratio handiena duten α soluzioen artetik bat ausaz aukeratuz. Behin soluzioa eraikita, bilaketa lokala aplikatuko dugu lortutako soluzioa areagotzeko.

Edozein problemari GRASP algoritmoa aplikatzeko, adibidean planteatzen den hasierako soluzio onak sortzeko estrategiaren antzerako prozedura bat diseinatu eta inplementatu beharko dugu. Funtzio honen parametro gehienak problema bakoitzarentzat ezberdinak izango dira baina, gainera, hautagaien zerrendaren luzeera α proportzio baten bidez adierazi beharko dugu.

Adibide gisa, metaheurR paketearen motxilaren problema GRASP algoritmoaren bitartez ebatzi ahal izateko, `graspKnapsack` funtzioa izango dugu. Funtzio honetan, hasteko, zenbait datu atera eta aldagai batzuk hasieratzen dira. Besteak beste, elementurik gabeko soluzio «hutsa» sortuko dugu.

```
graspKnapsack <- function(weight, value, limit, cl.size=0.25) {  
  size <- length(weight)  
  ratio <- value / weight  
  solution <- rep(FALSE, size)  
  finished <- FALSE
```

Soluzioa sortzeko, elementuak banan banan sartuko ditugu motxilan, eta honetarako, begizta bat izango dugu, motxila beteta ez dagoen bitartean errepikatuko dena. Begiztaren lehenengo pausuan, motxilan oraindik sartu gabeko elementuei atzematen diegu eta, uneko iterazioan, gure hautagai zerrendak izango duen tamaina kalkulatzeko dugu (gogoratu hautagai zerrendaren tamaina urrats bakoitzean ditugun aukera kopuruaren proportzio bat bezala definitu dugula).

```
  while (!finished) {  
    non.selected <- which(!solution)  
    cl.n <- max(1, round(length(non.selected) * cl.size))
```

Orain, ratioak ordenatu ondoren, lehenengo elementuak hartzen ditugu hautagai zerrenda gisa, eta horietatik bat ausaz aukeratzen dugu.

```
    cl <- sort(ratio[non.selected], decreasing=TRUE)[1:cl.n]  
    selected <- sample(cl, 1)
```

Bukatzeko, aukeratutako elementua soluzioan sartu eta aurrera jarraitzen da motxila betetzen ez den bitartean. Motxila bete egiten bada, sartutako azkeneko elementua atera eta begizta bukatu egingo da.

```

    aux <- solution
    aux[ratio == selected] <- TRUE
    if (sum(weight[aux]) < limit) {
        solution <- aux
    } else {
        finished <- TRUE
    }
}
return(solution)
}

```

Sortu dugun funtzioa, GRASP algoritmoa, guztiz ausazkoa den hasieraketa anizkoitzarekin alderatzeko erabil dezakegu, `cl.size` parametroarekin jolas-tuz. Lehenik eta behin, ausazko motxilaren problema bat sortuko dugu. Kasu honetan 50 elementu izango ditugu eta hauen balioa bi multzotan banatuko dugu. Elementu erdien balioak 0 eta 10 arteko ausazko zenbakiak izango dira; beste erdien balioak, 0 eta 25 tartetik ausaz hautatuko ditugu. Kasu guztietan pisua balioarekiko proportzionala izango da, faktorea ausazko zenbaki bat izanik. Limite gisa, ausaz aukeratutako 10 elementuen pisuaren batura erabiliko dugu.

```

> n <- 50
> values <- c(runif(n / 2) * 10, runif(n / 2) * 25)
> weights <- values * rnorm(n, 1, 0.05)
> limit <- sum(sample(weights, n / 5))

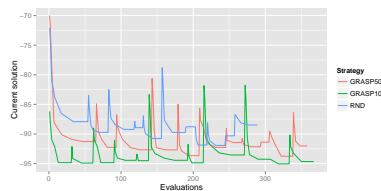
```

GRASP eta hasieraketa anizkoitzeko bilaketa lokala erabiltzeko, `multistartLocalSearch` funtzioa erabil dezakegu. Orain arte ikusitakoen antzerakoa da funtzio hau, baina argumentu moduan hasierako soluzioa pasatu beharrean, soluzioak sortzeko funtzio bat pasatu behar diogu. Funtzioak parametro asko dituenetz, sarrerako balioak antolatzeke beste era bat erabiliko dugu kodea irakurterezagoa izateko. Zerrenda batean sartuko ditugu, izenak erabiliz eta gero `R-ren do.call` funtzioa erabiliko dugu.

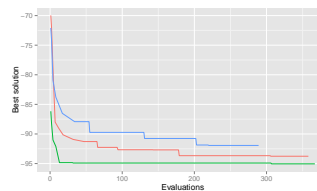
```

> knp.problem <- knapsackProblem(weights, values, limit)
>
> args$evaluate <- knp.problem$evaluate
> args$valid <- knp.problem$valid
> args$correct <- knp.problem$correct
> args$non.valid <- "discard"
> args$verbose <- FALSE
>
> args$neighborhood <- flipNeighborhood(base=rep(FALSE, n))
> args$selector <- firstImprovementSelector
>
> args$generateSolution <- graspKnapsack
> args$num.restarts <- 10

```



(a) Uneko soluzioa



(b) Soluziorik onena

2.7 irudia Hasieraketa anizkoitza estrategia ezberdinen konparaketa, motxilaren problema batean. Ezkerreko grafikoan uneko soluzioaren progresioa ikus daiteke. Eskumakoan, berriz, uneko soluziorik onenaren progresioa erakusten da.

```
> args$weight      <- weights
> args$value       <- values
> args$limit       <- limit
```

Behin parametro guztiak ezarrita, `cl.size` parametroari 3 balio ezberdin esleituko dizkiogu, 1, 0.5 eta 0.1. Lehenengo kasuan hautagai zerrendan aukera guztiak egongo direnez, soluzioak guztiz ausaz sortuko ditu, hots, ausazko hasieraketa anizkoitza erabiliko du bilaketa lokalak. Beste kasuetan, berriz, aukera guztietatik %50 eta %10 erabiliko ditu, hurrenez hurren.

```
> rnd.ls <- do.call(multistartLocalSearch, args)
>
> args$cl.size <- 0.50
> GRASP.50 <- do.call(multistartLocalSearch, args)
>
> args$cl.size <- 0.1
> GRASP.10 <- do.call(multistartLocalSearch, args)
```

2.7 irudian bilaketaren progresioak ikus daitezke. Ezkerreko grafikoan uneko soluzioaren eboluzioa jasotzen da. Ikusi dezakegunez, berabiaratze bakoitzetan, bilaketa soluzio txarragoetatik hasten da (gorago daudenak). GRASP algoritmoan, berriz, hasierako soluzioak hobeak dira, eta baita lortzen den emaitza ere. Hori argi ikusten da eskuineko grafikoan, non uneko soluziorik onenaren eboluzioa jasotzen den.

2.3.2 Inguruneko soluzioen hautaketa

Definizioz, optimo lokalen inguruko soluzio guztiak optimo lokala bera baino okerragoak dira; hortaz, bilaketak soluzio hauetara eramaten gaituenean, ez dugu soluzio hoberik aukeratzetik eta optimizazioa trabatuta gelditzen da. Egoera hauetan, bilaketa prozesuari amaiera ez emateko, inguruneko soluzioen hautaketa estrategia alda genezake, soluzio hoberik egon ezean, hel-

buru funtzioa hobetzen ez duten soluzioak ere onartuz. Estrategia honi esker, okerragoak diren soluzio batzuetatik pasatuz, bilaketa espazioaren eskualde berrietara ailega gintezke.

Soluzio «txarragoak» aukeratzeko bi estrategia daude. Lehendabizikoan, fitness-a hobetzen ez duen soluzio bat aukeratzean, sortutako «galera» kontutan hartzen da (era probabilistikoan zein deterministan egin daiteke). Algoritmorik ezagunena *suberaketa estokastikoa* –*simulated annealing* [24, 38] ingelesez– izenekoa da, zeinek probabilitate-banaketa parametrikoko bat erabiltzen duen aukeraketa egiteko. Algoritmo honetan inspiratutako beste hainbat algoritmo proposatu dira literaturan, *demon algorithm* [29] eta *threshold accepting* [12, 28] algoritmoak, besteak beste.

Soluzio txarrak aukeratzeko bigarren estrategia mota Gloverrek 1986an proposaturiko *tabu bilaketa* [15] –*tabu search* ingelesez– algoritmoak erabiltzen duena da. Kasu honetan, fitness balioa hobetzen ez duten soluzioak aukeratzeko dira, baina bakarrik ingurune osoan helburua hobetzen duen soluziorik ez badago. Estrategia honen arriskua dagoeneko bisitatu ditugun soluzioak berriro bisitatzea da. Hala, zikloak saihesteko, tabu bilaketak azken aldian bisitatutako soluzioak «memoria» batean gordetzen ditu.

Jarraian, bi algoritmo hauek (suberaketa simulatua eta tabu bilaketa), sakonki aztertuko ditugu.

2.3.2.1 Suberaketa Simulatua

Metalezko tresnen edo piezen sorrera prozesuan, metalek hainbat propietate gal ditzakete, euren kristal-egituraren eragindako aldaketak direla eta. Propietate horiek berreskuratzeko metalurgian «suberaketa» prozesua erabiltzen da; metal pieza behar adina berotzen da, gero astiro-astiro hozten uzteko. Tenperatura igotzean metalaren atomoen energia handitzen da eta, hortaz, beraien artean sortzen diren indar molekularrak apurtzeko gai dira; mugitzeko askatasun handiagoa dute, alegia.

Metala oso azkar hozten bada –tenplatzean egiten den bezala, adibidez– molekulak zeuden tokian «izoztuta» gelditzen dira. Honek metala gogortzen du, baina hauskorragoa bihurtzen du, aldi berean. Suberatzean, berriz, metala poliki-poliki hozten da eta, ondorioz, molekulak astiro galtzen dute beraien energia –hots, abiadura–. Hozketa-abiadura motelari esker, molekulak euren kristal-egituraren «kokapen optimora» joaten dira, hau da, energia minimoko kristal-egitura sortzen da.

1983an Kirkpatrick-ek [24] eta bi urte geroago Cerny-k [38], suberaketaren prozesuan inspiratuta, optimizazio algoritmoak proposatu zituzten; Kirkpatrick-ek bere algoritmoari *simulated annealing*, suberaketa simulatua, izena eman zion eta haxe da gaur egun hedatuen dagoena.

Algoritmoaren funtzionamendua sinplea da oso. s soluzio batetik txarragoa den s' soluzio batera mugitzeko, «energia» behar dugu; behar den energia bi soluzioen ebaluazioen arteko diferentzia izango da, hau da, $\Delta E = f(s') - f(s)$.

```

1  input: random_neighbor operadorea
2  input: update_temperature, equilibrium, stop_condition operadoreak
3  output:  $s^*$  topatutako soluziorik onena
4   $s^* = s$ 
5   $T = T_0$ 
6  while !stop_condition
7      while !equilibrium
8           $s' = \text{random\_neighbor}(s)$ 
9           $\Delta E = f(s') - f(s)$ 
10         if  $\Delta E < 0$ 
11              $s = s'$ 
12             if ( $f(s) < f(s^*)$ )  $s^* = s$ 
13         fi
14         else
15              $e^{-\frac{\Delta E}{T}}$  probabilitatearekin  $s = s'$ 
16         done
17      $T = \text{update\_temperature}(T)$ 
18 done

```

Algoritmoa 2.4: Suberaketa Simulatuaren sasikodea

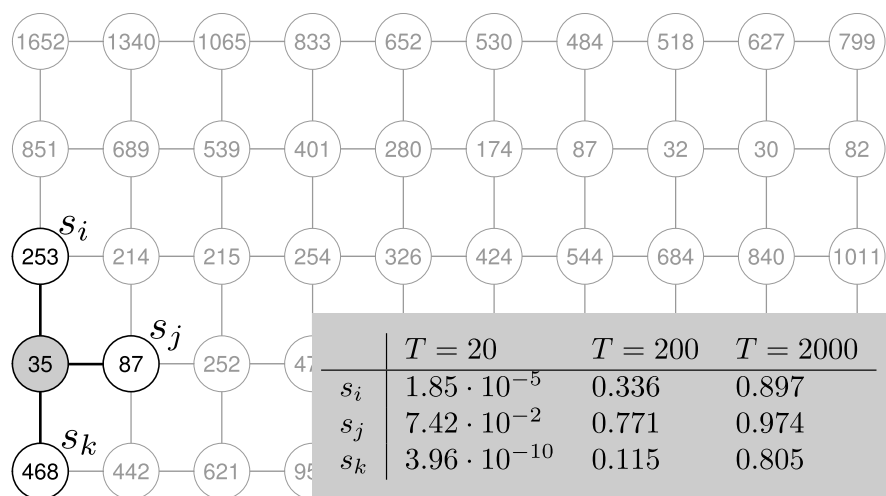
Energia-muga hau gainditzeko, sistemak energia behar du eta sistemaren energia «tenperatura»k neurtuko du. Beste era batean esanda, uneoro, sistemak T tenperatura izango du eta, zenbat eta tenperatura altuagoa, orduan eta errazagoa izango da energia-mugak gainditzea. Zehazki, soluzio batetik bestera mugitzeko behar den energia-muga gainditzen denetz erabakitzeko Boltzmann probabilitate-banaketan oinarritutako funtzio bat erabiltzen da:

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

Ekuaziotik ondorioztatu daitekeenez, uneko soluzioa baino fitness okerragoa duen soluzio bat onartzeko probabilitatea, tenperaturarekiko proportzionala da, eta energia diferentziarekiko alderantziz proportzionala.

Aintzat hartzekoa da $\Delta E < 0$ denean funtzioaren balioa 1 baino handiagoa dela. Izatez, ekuazioa bakarrik energia diferentzia positiboa denean erabiltzen da, negatiboa bada, s' soluzioa hobea baita eta, ondorioz, beti onartzen da.

Suberaketaren gakoa hozte-abiaduran datza, hau da, tenperaturaren eguneraketan. Izan ere, hasieran T balio handiak erabiliko ditugu, ia edozein soluzio onartu ahal izateko, eta gero, astiro-astiro, T txikiagotuko dugu, gelditzeko baldintza bete arte. 2.4 algoritmoan suberaketa simulatuaren sasikodea ikus daiteke.



2.8 irudia Soluzioak onartzeko probabilitateen adibideak. Uneko soluzioa grisez nabarmendua dagoena izanik, hiru soluzio ditugu ingurunean, s_i , s_j eta s_k . Taulak hiru tenperatura ezberdinekin soluzio bakoitza onartzeko probabilitateak jasotzen ditu. Ikus daitekeenez, tenperatura baxua denean, edozein soluzio aukeratzeko probabilitatea oso baxua da; tenperatura oso altua denean, berriz, edozein soluzio hartuta litekeena oso probablea da.

Suberaketa simulatuan oinarritutako algoritmoak diseinatzean lau aspektu hartu behar dira kontutan:

- **Hasierako tenperatura** - Altuegia bada, hasierako iterazioetan *random walk*, hau da, ausazko ibilbide bat jarraituko dugu; baxuegia bada, berriz, bilaketa oinarritzko bilaketa lokala bihurtuko da. 2.8 irudian adibide bat ikus daiteke. $T = 20$ denean, nahiz eta fitness-en arteko diferentzia txikia izan, soluzioa onartzeko probabilitatea txikia da; $T = 2000$ denean ebaluazioen arteko diferentzia handia izan arren, oso probablea da soluzioak onartzea. $T = 200$ denean, berriz, optimo lokaletik atera gaitezke, probabilitate handiarekin, s_j aukeratuz baina tarteko tenperatura honekin oso soluzio txarrak onartzea zaila izango da.

Tenperatura hasieratzeko bi estrategia erabili ohi dira. Lehendabizikoa hasierako tenperatura oso altua aukeratzeko da. Dibertsifikazio ikuspegitik interesgarria izan arren, estrategia honekin bilaketak asko luzatu daitezke eta konputazionalki garestia izan daiteke. Bigarren estrategiaren funtsa bilaketa espazioaren itxura aztertzean datza, ingurunean dauden soluzioen arteko diferentziak nolakoak diren jakiteko. Informazio hau onarpen ratio edo probabilitate ezagun bat lortzeko behar dugun tenperatura finkatzeko erabili daiteke [20, 1], goi eta behe mugekin egin degun antzera.

Adibidea 2.5 Demagun 10 tamainako TSP-aren instantzia bat ebatzi nahi dugula. Kostu matrizeko baliorik handiena – hau da, bi hirien arteko distantziarik handiena – 7.28 da. Problemarako soluzio guztietan 10 hiri izango ditugu eta, hortaz, soluzio guztien ebaluazioa matrizean dauden 10 elementuren batura izango da. Hori dela eta, $f_g = 7.28 \cdot 10 = 72.8$ problema honen fitness-aren goi-muga bat da^a. Era berean, matrizeko distantziarik txikiena 2.5 izanik, behe-muga kalkula dezakegu: $f_b = 2.5 \cdot 10$.

Demagun, edozein soluzio aukeratzeko hasierako probabilitatea 0.75 dela. Orduan, bi muga hauek, f_g eta f_b , hasierako tenperatura kalkulatzeko erabil ditzakegu, edozein bi soluzioen arteko fitness-en diferentzia $f_g - f_b$ baino txikiagoa izango dela baitakigu:

$$P = 0.75 = e^{-\frac{f_g - f_b}{T_0}} = e^{-\frac{72.8 - 25}{T_0}}$$

$$T_0 = -\frac{72.8 - 25}{\ln(0.75)} = 184.93$$

Hasierako tenperatura 185 balioan finkatzen badugu, badakigu hasierako iterazioetan edozein soluzio aukeratzeko probabilitatea %75 edo handiagoa izango dela.

^a Kontutan hartuz aipatutako baturan matrizeko elementuak ezin direla errepikatu, goi-muga birfindu daiteke matrizeko 10 elementurik handienak batuz

Algoritmoaren erabilera erakusteko 2.2.2 ataleko adibidea erabiliko dugu (Bavariako hiriena).

Processing file corresponding to instance bays29: 29 cities in Bavaria, street distances (Groetschel, Juenger, Reinelt)

Goiko adibidean egin dugun bezala, fitness balio maximo eta minimo posibleak kalkulatu ditugu eta beraien arteko diferentzia hasierako tenperatura definitzeko erabiliko dugu. Horretarako, kostu matrizearen goiko triangeluanzenbaki minimoak eta maximoak bilatu beharko ditugu. Gainera, adibidean ez bezala, kasu honetan, hozketa prozesua gehiegi ez luzatzeko hasierako tenperatura kalkulatzeko diferentzia maximoaren probabilitatea 0.5-en finkatuko dugu.

```
> n <- ncol(cost.matrix)
> distances <- cost.matrix[upper.tri(cost.matrix)]
> ebal.max <- sum(sort(distances, decreasing=TRUE)[1:n])
> ebal.min <- sum(sort(distances, decreasing=FALSE)[1:n])
> probability <- 0.5
>
> init.t <- -1 * (ebal.max - ebal.min) / log(probability)
> init.t
```

- **Oreka lortzeko iterazio kopurua** - Temperatura eguneratzen den bakoitzean, balio honekin zenbait iterazio egiten diren – hau da, inguruneke soluzio batzuk aztertu behar diren – «oreka» lortu arte. Behin oreka lorturik, temperatura berriro eguneratzen da. Lehenengo pausua, beraz, oreka lortzeko behar dugun iterazio kopurua ezartzea da. Ohikoena inguruneke tamainaren arabera iterazio kopuru bat finkatzea da. Horretarako, ρ parametroa erabiliko dugu (0 eta 1 tartean hartuko dituen balioak), temperatura bakoitzeko $\rho|N(s)|$ soluzio ebaluatuko ditugularik. Aurreko atalean azaldu dugun bezala, $|N(s)|$ -k uneko soluzioaren bizilagun kopurua adierazten du.

Beste estrategia batzuek, temperatura bakoitzeko iterazio kopuru desberdina ezartzea proposatzen dute. Adibide gisa, temperatura soluzio berri bat onartzen dugun bakoitzean alda dezakegu; Soluzioen onarpena haien fitness balioaren arabera probabilitate balio baten menpekoea denez, batzuetan ebaluatzen dugun lehendabiziko soluzioa onartuko dugu eta, bestetan, hainbat soluzio probatu beharko ditugu, bat onartu arte. Kasu honetan, beraz, iterazio kopurua aldakorra da.

- **Temperatura jaitsieraren abiadura** - Hau da, ziurrenik, algoritmoaren elementurik garrantzitsuenak. Hainbat formula erabil daitezke temperatura eguneratzeko. Hona hemen batzuk:
 - *Lineala*: $T_i = T_0 - i\beta$, non T_i i . iterazioko temperatura den. Eguneraketa mota honetan temperatura beti positiboa izan behar dela kontrolatu behar dugu, ekuazioak temperatura negatiboak itzuli baititzake.
 - *Geometrikoa*: $T_i = \alpha T_{i-1}$. $\alpha \in (0, 1)$ abiadura kontrolatzen duen parametroa da eta, ohikoena, 0.5 eta 0.99 tarteko balio bat aukeratzea da.
 - *Logaritmikoa*: $T_i = \frac{T_0}{\log(i)}$. Abiadura hau oso motela da eta, nahiz eta praktikan oso erabilgarria ez izan, interes teorikoa du suberaketa simulatu algoritmoaren konbergentzia demostratuta baitago ekuazio honekin.

Funtzio guzti hauek monotonoak dira, hau da, iterazio bakoitzean temperatura beti jaisten da. Edonola ere, problema batzuetan funtzio ez-monotonoek hobeto funtziona dezakete⁶.

- **Algoritmoa gelditzeko irizpidea** - Aurreko puntuan ikusi dugun legez, iterazioak aurrera egin ahala temperatura zero baliora hurbiltzen da baina, kasu gehienetan, ez da inoiz heltzen. Honek esan nahi du beti optimo lokaletatik ateratzeko aukera izango dugula, probabilitate oso txikiarekin bada ere. Hori dela eta, algoritmoa gelditzeko baldintzaren bat definitu beharko dugu. Irizpide hedatuena temperatura minimo bat finkatzea da;

⁶ Temperatura igotzen denean dibertsifikazioan gailentzen da; temperatura jaistean, berriz, areagotze prozesua indartzen da. Hau kontutan hartuz, funtzio ez-monotonoak dibertsifikazio/areagotze prozesuen arteko oreka kontrolatzeko erabil daitezke

bestela, denbora edota helburu funtzioaren ebaluazio kopuru maximo bat ere finka ditzakegu.

Suberaketa simulatuaren erabilera erakusteko Bavierako TSP adibidearekin jarraituko dugu. Algoritmoa `simulatedAnnealing` funtzioak inplematzen du. Funtzio honek, ohiko argumentuez gain, beste zenbait parametro berezi ditu:

- `cooling.scheme` - Temperaturaren eguneraketa funtzioa. Funtzioak uneko temperatura jasoko du argumentu gisa eta hurrengo temperatura itzuliko du.
- `initial.temperature` - Hasierako temperatura.
- `final.temperature` - Amaierako temperatura. Hau algoritmoa gelditzeko irizpidea definitzeko erabiltzen da.
- `eq.criterion` - Oreka baldintza zeren arabera den adierazten duen *string* motako parametro bat da. Bi balio posible har ditzake, 'evaluations' eta 'acceptances'. Lehenengoa erabiltzen bada, oreka baldintza ebaluazio kopuru jakin batera iristean beteko da. Bigarren kasuan, oster, uneko soluzioaren fitness-a hobetzen ez duten soluzio kopuru finko bat onartzen denean beteko da.
- `eq.value` - `eq.criterion` parametroa zehaztuko duen ebaluazio edo onarpen kopurua.

Hasierako temperatura kalkulatu dugu, baina ez amaierakoa. Aukera posible bat, ausaz soluzioak sortu eta beraien fitnessen arteko diferentzien behe-muga kalkulatzeko da.

Estrategia hau gauzatzeko 500 ausazko soluzio sortuko eta ebaluatuko ditugu. Gero, edozein bi soluzioen arteko diferentzia balio absolutuan konputatuko dugu. Azkenik, 0 ez diren diferentzien artean txikiena hartuko dugu behe-muga gisa.

```
> rep <- 500
> rnd.eval <- sapply (1:rep,
+                   FUN=function(x) {
+                       rnd.perm <- randomPermutation(n)
+                       return(tsp.babaria$evaluate(rnd.perm))
+                   })
>
> aux <- lapply(2:rep,
+             FUN=function(i) {
+                 return(cbind(i-1 , i:rep))
+             })
> pairs <- do.call(rbind, aux)
>
> diffs <- apply(pairs, MARGIN=1,
+             FUN=function(p) {
+                 return(abs(rnd.eval[p[1]] - rnd.eval[p[2]]))
+             })
> min.delta <- min(subset(diffs, diffs != 0))
> min.delta
```

```
## [1] 1
```

Fitness balioen diferentzia horri probabilitate txiki bat esleituz, tenperatura minimoa kalkula dezakegu.

```
> probability <- 0.1
> final.t <- -min.delta / log(probability)
> final.t
```

```
## [1] 0.4342945
```

Gauza berdina egin dezakegu tenperatura maximoa kalkulatzeko, lehen kalkulaturako goi-mugarekin alderatu ahal izateko.

```
> init.t
```

```
## [1] 14760.21
```

```
> max.delta <- max(diffs)
> probability <- 0.5
> init.t <- -max.delta / log(probability)
> init.t
```

```
## [1] 3794.288
```

Ikus daitekeen bezala, simulazio bitartez kalkulaturako diferentzietan oinarritzen bagara, hasierako tenperatura askoz ere txikiagoa da, teorikoki kalkulaturako goi-muga laginketan lortu ditugun diferentziak baino handiagoa delako.

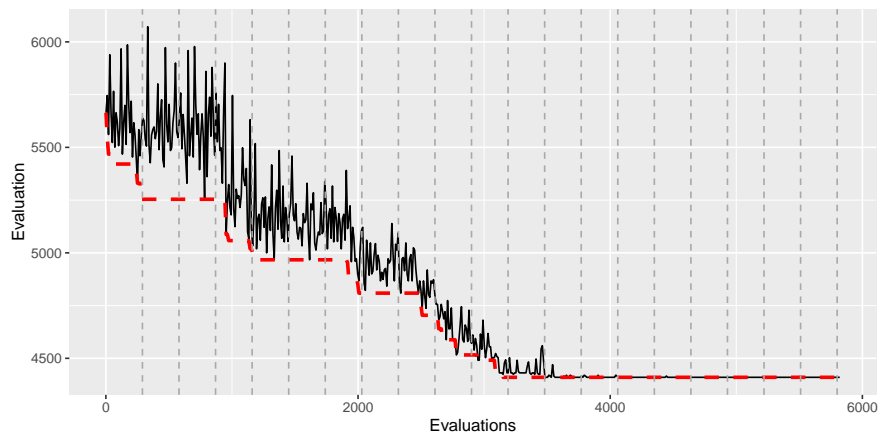
Informazio guztiarekin funtzioaren argumentuak pausuz pausu munta ditzakegu. Ingurunea definitzeko, ondoz-ondoko trukaketak erabiliko ditugu eta bilaketa ausazko soluzio batetik abiatuko dugu.

```
> set.seed(90)
>
> args$evaluate <- tsp.babaria$evaluate
> args$initial.solution <- randomPermutation(n)
> args$neighborhood <- swapNeighborhood(args$initial.solution)
```

Hozketa funtzioa sortzeko `geometricCooling` funtzioa erabiliko dugu –hozketa geometrikoa inplementatzen duena–. Funtzio honi hasierako eta amaierako tenperaturak eman behar dizkiogu. Horrez gain, hasierako tenperaturatik amaierakora zenbat eguneraketa behar diren ere adierazi beharko diogu.

```
> steps <- 20
> args$cooling.scheme <- geometricCooling(init.t,
+                                         final.t, steps)
> args$initial.temperature <- init.t
> args$final.temperature <- final.t
```

Eguneraketa funtzioari tenperatura bat emanik, hurrengo tenperatura emango digu.



2.9 irudia Simulated annealing algoritmoaren progresioa TSP problema batean. Marra jarraikiak uneko soluzioaren progresioa adierazten du eta etenak, berriz, arkitutako soluziorik onena. Marra bertikalek tenperaturaren aldaketak erakusten dituzte.

```
> init.t
> next.t <- args$cooling.scheme(init.t)
> next.t
> next.t <- args$cooling.scheme(next.t)
> next.t
```

Oreka egoera, soluzio berrien ebaluazio kopuru baten arabera kontsideratuko dugu. Zehazki, 10 bider ingurunearen tamaina (hiri kopurua) izango da.

```
> args$log.frequency <- 10
> args$eq.criterion <- "evaluations"
> args$verbose <- FALSE
```

Amaitzeko, algoritmoa exekutatzen dugu.

```
## Loading required package: ggplot2
```

Bilaketaren eboluzioa 2.9 irudian dago jasota. Irudiak, uneko soluzioaren eta soluziorik onenaren progresioak erakusten ditu (beltzez eta gorriz, hurrenez hurren). Grafikoan marra bertikal bat agertzen denean, tenperatura aldaketa bat egon dela esan nahi du. Uneko soluzioaren eboluzioan ikus daiteke ebaluazioa, hasieran, oso aldakorra dela. Hau tenperaturaren eraginaren ondorioz da, tenperatura altuak soluzio txarrak aukeratzeko probabilitatea handitzen baitu. Hozketa prozesuaren zehar, tenperatura jaisten den heinean, soluzio txarrak onartzeko probabilitatea txikitu egiten da eta, ondorioz, soluzioen arteko aldakortasuna murriztu egiten da. Amaieran, tenperatura oso txikia denean, ia ezinezkoa da soluzio okerragoak onartzea eta, hortaz, uneko soluzioa ez da ia aldatzen.

Grafikan ere ikus daiteke algoritmoak oso azkar konbergitzen duela. Bilatu duen soluzioa optimo globala bada, honek esan nahi du algoritmoak oso ondo funtzionatu duela. Aldiz, tenperatura azkarregi jeitsi badugu, posible da algoritmoak optimo globalaren ingurua ez den leku batean intensifikatu izana bilaketa. Hori ez gertatzeko, eta algoritmoak gehiago dibertsifikatzeko, azken tenperatura handiagoa jarri daiteke.

Ikusitako algoritmoetan soluzioen onarpena probabilitistikoa da; alabaina, suberaketa simulatuaren kontzeptua era deterministan ere inplementa daiteke. Honen adibidea da Deabru Algoritmoa [29] – *Demon Algorithm*, ingelesez – . Hasiera batean Creutz-ek simulazio molekularrak egiteko proposatu zuen algoritmo hau, baina optimizazio problemak ebazteko ere egoki daiteke.

Algoritmoan soluzioak onartuko diren erabakitzeak, tenperatura erabili beharrean «deabru» bat erabiltzen da; deabru honek uneoro E_D energia kopurua dauka. Soluzio bakoitza aztertzerakoan, suberaketa simulatua legez, ΔE kalkulatu da eta, une horretan $\Delta E > E_D$ bada, soluzioa onartzen da. Gainera, suberaketa simulatua bezala, $\Delta E < 0$ denean ere soluzioa onartu egiten da.

Algoritmoaren gakoa deabruaren energia eguneratzean datza; soluzio bat onartzen den bakoitzean, deabruaren energia $E_D + \Delta E$ izatera pasatzen da, hau da, «sistemaren» energia aldaketa deabruak jasotzen du. Onartutako soluzioa hobea denean, deabruak energia irabazten du eta, okerragoa denean, berriz, energia galtzen du – nahiko energia baldin badu betiere –. Algoritmo honen abantaila sinpletasuna da, Boltzmann distribuzioa ebaluatzeko beharrik ez baitago.

2.3.2.2 Tabu bilaketa

Tabu bilaketa – *tabu search*, ingelesez – izango da, ziurrenik, bilaketa lokalaren aldaerarik hedatuena. Duen eraginkortasuna eta sinpletasuna dela eta, optimizazio konbinatorioan asko erabiltzen da eta, zenbait problematan, emaitza onenak ematen dituen metaheuristikoa da.

1977an proposatu zen lehenengo aldiz eta optimo lokaletan trabaturik ez geratzeko, bilaketa soluzio okerragoetara bideratzea baimentzen du. Estrategia hau hutsean erabiliz gero, prozesua amaigabeko ziklo batean sartzeko arriskua dago, egindako bidea behin eta berriro errepikatzeko aukera baitago. Beraz, arazo hau saihesteko, tabu bilaketak, bisitatutako soluzioen historikoa gordetzen du.

Oinarrizko tabu bilaketa, bilaketa lokal gutziatsuan oinarritzen da, baina «tabu zerrenda» deituriko bisitatutako soluzioen multzoa gordeko da uneoro. Urrats bakoitzean tabu ez diren – bideragarriak diren, alegia – inguruneke soluzioetatik onena aukeratzeko dugu, helburu funtzioa hobetzen duen ala ez kontutan hartu barik. Tabu ez diren soluzioak bakarrik hartzen ditugunez aintzat, ez da ziklorik sortuko.

```

1  input: intensify eta diversify operadoreak
2  input: intensify_condition, diversify_condition eta stop_condition baldintzak
3  input:  $\mathcal{N}$  ingurune operadorea eta  $s_0$  hasierako soluzioa
4  output:  $s^*$  topatutako soluziorik onena
5   $s^* = s_0$ 
6   $s = s_0$ 
7  Hasieratu tabu zerrenda, epe erdiko memoria eta epe luzeko memoria
8  while !stop_condition
9      Topatu  $\mathcal{N}(s)$ -n dagoen soluzio onargarrikerik onena  $s'$ 
10      $s = s'$ 
11     Eguneratu tabu lista
12     if intensify_condition
13         intensify
14     fi
15     if diversify_condition
16         diversify
17     fi
18 done

```

Algoritmoa 2.5: Tabu bilaketaren sasikodea

Alabaina, bisitatutako soluzio guztiak gordetzen dituen zerrenda mantentzea ez da bideragarria; hori dela eta, tabu zerrendan bisitatutako azkeneko soluzioak bakarrik gordeko ditugu. Algoritmoaren iterazio bakoitzean, aukeratutako soluzioa tabu zerrendan sartuko da, eta zerrendatik soluzio bat aterako da – tabu zerrendak FIFO pilak dira, hau da, sartzen lehendabizikoa den elementua ateratzen ere lehendabizikoa izango da–. Bisitatutako azken soluzioak bakarrik gordetzen direnez tabu zerrendari epe laburreko memoria ere deitzen zaio.

Bigarren estrategia mota honekin, tabu zerrendaren tamaina k bada k tamainako zikloak ekiditeko gai izango gara. Edonola ere, eraginkortasuna dela eta, soluzio osoak maneiatzeak kostu handia ekar dezake. Hori dela eta, aukera egokiagoak ere aurki ditzakegu literaturan, soluzioen atributu batzuk soilik gordetzea, adibidez. Atributuak soluzioen zatiak, ezaugarriak, edo soluzioen arteko desberdintasunak izan ohi dira. Hauek, ebazten ari garen problemaren menpekoak dira eta, hortaz, aukera ugari proposatu daitezke, kasu bakoitzerako tabu lista eredu desberdin bat inplementatuz. Ikus dezagun adibide bat.

Adibidea 2.6 *Demagun permutazioetan oinarritutako problema batean tabu bilaketa bat inplementatu nahi dugula. Bilaketa lokalak 2-opt ingurunea erabiltzen badu, soluzio batetik bestera mugitzeko i eta j posizioak trukatuko ditugu. Era honetan, tabu zerrendan trukatzeko ditugun bi posizioak gorde ditzakegu, alderantzizko trukaketa tabu bihurtuz. Esate baterako, uneko soluzioa 13245 bada eta 31245 soluziora mugitzen bagara, hurrengo urratsetan lehenengo eta bigarren posizioak trukatzea debekatua izango dugu. Problemaren arabera, beste irizpide batzuk erabil genitzake. Adibide gisa, lehenengo posizioan 1a eta bigarrenean 3a egotea debekatu genezake.*

Soluzioen atributuak erabiltzen ditugunean memoria gutxiago behar dugu eta, hortaz, tabu zerrenda handiagoak erabil ditzakegu; edonola ere, kontuan eduki behar da estrategia honekin tabu zerrenda baino txikiagoak diren zikloak ager daitezkeela. Horrez gain, diseinatutako atributuak oso zehatzak izan behar dira, bisitatu gabeko soluzio onak baztertu ez ditzagun. Ildo honetan *aspiration criteria* deritzen irizpideak erabili ohi dira bilaketa prozesuan tabu diren soluzioak onartzeko. Esate baterako, uneko soluziotik, tabu den mugimendu bat erabiliz orain arte topatutako soluziorik onena topatzen badugu, soluzio horretara bai pasatuko gara.

Tabu zerrendaren tamainak, tabu bilaketaren portaera definitzen du; txikia baldin bada, espazioko eremu txikietan zentratuko da; handia bada, berriz, algoritmoak eremu zabalagoetara bideratuko du bilaketa, soluzio asko tabu izango baitira. Ohikoenak, lista tamaina aldakor bat erabiltzea da, algoritmoaren portaera kasu bakoitzeko beharretara egokitu ahal izateko.

Tabu zerrendaz gain, bestelako aukera konplexuagoak ere proposatu dira. Epe motzeko memoria erabiltzeaz gain, bilaketa prozesuan zehar jasotako informazioa ere oso baliotsua izan daiteke algoritmoa gidatzeko. Informazio hau epe erdiko edota epe luzeko memorian gorde daiteke. Lehendabiziko kasuan soluzio onenen informazioa bakarrik gordeko dugu, bilaketa areagotzeko asmoarekin. Bigarren kasuan, berriz, bilaketa osoan zehar soluzioen osagaien frekuentziak gordeko ditugu; frekuentzia hauek bisitatu ez ditugun eremuei atzemateko erabil daitezke – hau da, bilaketa dibertsifikatzeko –.

Adibidea 2.7 *TSP-rako soluzioak eraikitzeke, hiri bakoitzetik zein hirira mugituko garen erabaki behar dugu. Algoritmo eraikitzaile tipikoan, erabaki hori kostu matrizea begiratzuz hartzen da, uneko hiritik bisitatu gabeko hirietatik gertuen dagoena aukeratuz. Era berean, epe erdiko eta epe luzeko memoriak matrize karratu batean inplementa ditzakegu. Matrize hauetan, bisitatutako zenbat soluzioetan i hiritik j hirira joaten garen gordeko dugu. Epe erdiko memorian azken k soluzio onenen informazioa bakarrik gordeko dugu, areagotze prozesuan gehien erabili direnak finkatzeko eta bilaketa falta diren loturetan zentratzeko. Epe luzeko memorian, berriz, bisitatu ditugun soluzio guztien informazioa gordeko dugu. Era honetan, bilaketa esploratu gabeko eremuetara eramane nahi badugu, gutxiengoen erabilitako loturak erabiliz soluzioak sor ditzakegu, bilaketa prozesua bertatik abiatzeko.*

2.3.3 Optimizazio problemen «itxura» aldaketa

Bilaketa lokalean uneko soluziotik honen inguruan dagoen soluzio batera mugitzen gara beti, hau da, soluzio bakoitzetik soluzio kopuru mugatu batera mugi gaitzke soilik. Hori dela eta, bilaketa espazioa grafo baten bidez adieraz daiteke, non erpinak soluzioak diren eta ertzek mugimendu posibleak adierazten dituzten; 2.2 irudiak horrelako grafo bat adierazten du.

Bilaketa espazioaren definizioari soluzioen ebaluazioa gehitzen badiogu, optimizazio problemaren «itxura» – *landscape*-a, ingelesez – daukagu. Problemaren itxuraren eragina berebizikoa da algoritmoen performantzia eta, beraz, algoritmoak diseinatzerakoan kontuan hartu beharreko elementua da. Zentzu horretan, kontuan hartu behar da problema motaren arabera ez ezik, *landscape*-a instantzia konkretuaren arabera aldatzen dela. Optimizazio problemen "itxuraren" ideia intuikorra, gailurrez, mendikatez eta bailarez osatutako paisaia baten ilustrazioa da, non gailurrek optimo lokalak errepresentatzen dituzten eta gailurrik altuena optimo globala den. Gailur baten erakarpene-arroa, mendi osoa da, oinarritik gailurrera. Intuitiboki, zenbat eta gailur gehiago, orduan eta zailagoa izango da instantzia baten optimo globalera heltzea bilaketa lokalean oinarritutako algoritmo batekin.

Soluzio bakarrean oinarritzen diren algoritmoekin amaitzeko, bilaketa prozesuan zehar, *landscape*-a eraldatzen dituzten algoritmoak aztertuko ditugu. Zehazki, bi algoritmo ikusiko ditugu. Lehenengoak, VNS-ak, ingurune definizio ezberdinak erabiltzen ditu optimo lokaletatik ateratzeko. Bigarrenak, berriz, helburu funtzio berriak sortzen ditu optimo lokalen kopurua murrizteko.

```

1  input:  $\mathcal{N} = \{\mathcal{N}_1, \dots, \mathcal{N}_k\}$  ingurune funtzioak
2  input:  $s$  hasierako soluzioa
3   $i = 1$ 
4   $s^* = s$ 
5  while  $i \leq k$  do
6    Bilatu  $s', \mathcal{N}_i(s^*)$  inguruneke soluziorik onena
7    if  $f(s') < f(s^*)$ 
8       $s^* = s'$ 
9       $i = 1$ 
10   else
11      $i = i + 1$ 
12   fi
13 done

```

Algoritmoa 2.6: VND algoritmoaren sasikodea

2.3.3.1 Variable Neighborhood Search algoritmoa

Bilaketa lokalean optimo lokal batean trabaturik gelditzen gara, definizioz bere ingurunean helburu funtzioa hobetzen duen soluziorik ez dagoelako. Baina, zer gertatuko litzateke ingurunearen definizioa aldatuko bagenu?. Adibide gisa, demagun optimizazio problema batean soluzioak permutazioen bidez kodetzen ditugula. Bilaketa lokala aplikatzeko *2-opt* operadorea erabiliko dugu – hau da, *swap* eragiketari oinarritutako ingurunea –. Izan bedi 1432 soluzioa, ingurune eta problema honetarako optimo lokala dena. Definizioz, soluzio honen edozein bi posizio trukatzuz lortutako soluzioak okerragoak izango dira. Alabaina, txertaketan oinarritzen den ingurunea erabiliz *2-opt* ingurunean ez dauden soluzioak lor ditzakegu – lehenengo elementua azken elementuaren ostean txertatuz lortzen den 4321 soluzioa, esate baterako –. Beraz, gerta daiteke *2-opt* ingururako optimo lokala den gure soluzioa txertaketak definitzen duen ingurunerako optimoa ez izatea.

Idea hau *Variable Neighborhood Descent* (VND) algoritmoan erabiltzen da bilaketa lokala optimo lokaletan trabaturik geratzea ekiditeko. 2.6 algoritmoan VND-aren sasikodea ikus daiteke.

Algoritmoan ikusten den bezala, VND-an ingurune funtzio bakarra izan beharrean hauen multzo bat dago. Lehenengo ingurunea erabiliz, uneko soluzioaren ingurunea arakatu eta soluzio onena aukeratuko dugu. Inguruneke soluzio guztiak okerragoak direnean – topatutako soluzioa uneko ingurunerako optimo lokala bada, alegia – hurrengo ingurune definiziora pasatuko gara; honela, ingurune funtzio guztiak erabili arte. Gainera, iterazio bakoitzean, inguruneke soluzio berri batera pasatzen garenean, berriro ere hasierako ingurune definiziora itzuliko gara.

```

1  input: local_search bilaketa algoritmoa
2  input:  $\mathcal{N} = \{\mathcal{N}_1, \dots, \mathcal{N}_k\}$  ingurune funtzioak
3  input:  $s$  hasierako soluzioa
4   $i = 1$ 
5   $s^* = s$ 
6  while  $i \leq k$  do
7      Aukeratu ausaz soluzio bat  $s' \in \mathcal{N}_i(s^*)$ 
8       $s'' = \text{local\_search}(s^*, \mathcal{N}_i)$ 
9      if  $f(s'') < f(s^*)$ 
10          $s^* = s''$ 
11          $i = 1$ 
12     else
13          $i = i + 1$ 
14     fi
15 done

```

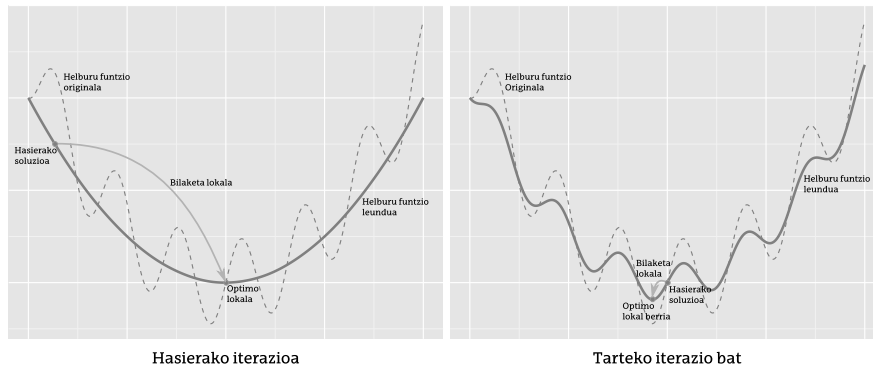
Algoritmoa 2.7: VNS algoritmoaren sasikodea

Bilaketa amaitzeko baldintza kontutan hartuz, algoritmo honek itzultzen duen soluzioa *ingurune definizio guztietarako optimo lokala* izango da.

Variable Neighborhood Search algoritmoa VND-aren hedapen bat da, non iterazio bakoitzean, uneko ingurune definizioa erabiliz, bilaketa lokala amaiera arte eramaten den. Hau da, fitness-a hobetzen duen soluzio bat topatu arren, uneko ingurune definizioa mantentzen dugu optimo lokal batera heldu arte. Behin optimo lokal batera heldutakoan, hurrengo ingurune definizioa erabiltzera pasatuko gara, VND-an legez, lortutako soluzioa ingurune guztietarako optimo lokala izan arte. 2.7 algoritmoak VNS-aren sasikodea erakusten du.

2.3.4 *Smoothing* algoritmoak

Optimizatu behar dugun funtzioak optimo lokal asko dituenean, bilaketa lokalak ez dira oso metodo egokiak, globala ez den optimo batean trabaturik gelditzeko probabilitatea oso altua delako. Leuntze-metodoekin – *smoothing methods*, ingelesez – iterazio bakoitzean jatorrizko helburu funtzioa eraldatu – leundu – egiten da, optimo lokal kopurua gutxitzeko asmoz; eta helburu funtzio berria erabiliz, bilaketa lokala aplikatzen da. Bilaketa trabaturik geratzen denean – optimo lokal batean –, helburu funtzioa berriro aldatzen da, aurreko iterazioan baino gutxiago leunduz. Helburu funtzio berri honekin eta aurreko iterazioan lortutako optimoarekin, bilaketa lokala aplikatzen da, optimo berri bat lortuz.



2.10 irudia *Smoothing* algoritmoaren funtzionamendua. Iterazio bakoitzean hasierako helburu funtzioa maila bateraino leuntzen da eta bilaketa lokala aplikatzen da.

Oinarrizko *Smoothing* algoritmoaren sasikodea

```

1  input: smoothing ( $f, \alpha$ ) helburu funtzioa eraldatzeko funtzioa
2  input: local_search ( $s, f$ ) bilaketa lokala
3  input: update ( $\alpha$ ) faktorea eguneratzeko funtzioa
4  input:  $s$  hasierako soluzioa;  $\alpha_0$  hasierako faktorea;  $f$  helburu funtzioa
5   $s^* = s$ ;  $\alpha = \alpha_0$ 
6  while  $\alpha > 1$  do
7     $f' = \text{smoothing}(f; \alpha)$ 
8     $s^* = \text{local\_search}(s^*, f')$ 
9     $\alpha = \text{update}(\alpha)$ 
10 done

```

Algoritmoa 2.8: *Smoothing* algoritmoaren sasikodea

Iterazioz iterazio leuntze-maila geroz eta txikiagoa bihurtuz, azken iterazioan problemaren jatorrizko helburu funtzioa erabiliko dugu, problemarako soluzioa topatzeko.

Helburu funtzioa nola leundu problemaren arabera erabakia da. Edonola ere, kasu guztietan, algoritmoa inplementatu ahal izateko leuntze-parametro bat definitu beharko dugu. Parametro hau handia denean, helburu funtzioa asko leunduko dugu; parametroa 1 denean, berriz, helburu funtzioa ez da bat ere aldatuko. Hau aintzat hartuz, 2.8 algoritmoan metodoaren sasikodea definituta dago. Ikus dezagun adibide bat.

Adibidea 2.8 *TSP-an helburu funtzioa kalkulatzeko distantzien matrizea erabiltzen dugu. Matrize horretan edozein bi hirien arteko distantzia dago jasota. Helburu funtzioa leuntzeko, matrizea hau eralda daiteke, distantzia guztiak batez-besteiko distantziara hurbilduz, adibidez. Demagun ondoko matrizea definitzen dugula:*

$$d_{ij}(\alpha) = \begin{cases} \bar{d} + (d_{ij} - \bar{d})^\alpha & \text{baldin eta } d_{ij} \geq \bar{d} \\ \bar{d} - (\bar{d} - d_{ij})^\alpha & \text{baldin eta } d_{ij} < \bar{d} \end{cases} \quad (2.6)$$

non \bar{d} distantzien batez-bestekoa eta d_{ij} jatorrizko matrizearen elementuak diren. Distantzia matrizea normalizatuta badago – distantzia guztiak 1 edo txikiagoak badira^a – α parametroa oso handia denean distantzia guztiak batez-besteikoari hurbilduko zaizkio, $0 \leq (d_{ij} - \bar{d}), (\bar{d} - d_{ij}) < 1$ baita. Muturreko kasu horretan, soluzioa tribiala da, soluzio guztiak berdinak baitira.

Iterazioz iterazio α parametroa gutxituko dugu, 1 baliora heldu arte. Goiko ekuazioan ikus daitekeen bezala, $\alpha = 1$ denean distantzia matrizea jatorrizkoa da.

^a Kontutan hartu behar da, matrizea normalizatuta ere, soluzio optimoa, hau da, balio minimoa duena, ez dela aldatzen.

Kapitulua 3

Populazioetan Oinarritutako Algoritmoak

Aurreko kapituluan soluzio bakarrean oinarritzen diren zenbait algoritmo ikusi ditugu. Algoritmo hauek oso portaera ezberdina izan arren, badute ezaugarri komun bat: bilaketa prozesuan zehar, une oro, soluzio bakar bat dute, eta operadore desberdinak erabiliz, soluzio batetik bestera mugitzen dira. Hori dela eta, algoritmo hauek oso egokiak dira bilaketa espazioaren eskualde zehatzak modu exhaustiboan arakatzeko—bilaketa areagotzeko, alegia—. Optimizazio prozedura honek baditu ordea bere eragozpenak, izan ere, ez du bilaketa espazioko eskualde bananduak bisitatzen. Horregatik kasu gehienetan bilaketaren dibertsifikazioa bultzatzea beharrezkoa izaten da. Horren adibide dira, bilaketa lokalean oinarritzen diren algoritmo batzuk dibertsifikatzeko erabiltzen dituzten zenbait estrategia. Adibidez, tabu bilaketaren epe-luzeko memoria.

Kapitulu honetan, soluzio bakarrean oinarritutako algoritmoak alde batera utzi eta, soluzio multzoak erabiltzeari ekingo diogu, hori baita, hain justu, populazioetan oinarritzen diren algoritmoen filosofia. Algoritmo hauek, pausu bakoitzean soluzio bakar bat izan beharrean, soluzio multzo baten gainean egiten dute lan. Testuinguru batzuetan soluzio multzo honi *soluzio-populazioa* deritzo eta, hortik, algoritmo hauen izena. Populazioetan oinarritutako algoritmoetan, bilaketa prozesuan zehar, soluzio multzo hori aldatuz joango da helburu funtzioaren gidaritzapean, gelditze irizpide bat bete arte.

Oro har, populazioan oinarritutako algoritmoak bi multzotan banatu ditzakegu: algoritmo ebolutiboak eta *swarm intelligence*-an oinarritutakoak. Lehenengo kategoriako algoritmoek, teknika desberdinak erabiliz, populazioa eboluzionatzen dute, honek geroz eta soluzio hobeak izan ditzan. Adibiderik ezagunenak algoritmo genetikoak dira. Bigarren motako algoritmoak, berriz, zenbait animaliek duten portaera kolektiboan oinarritzen dira. Hauen adibiderik ezagunena inurri kolonien algoritmoak dira. Algoritmo mota honek, inurriek, janaria eta inurritegiaren arteko distantziarik motzena topatzeko darabilten mekanismoa imitatzen dute.

Kapitulua bi zatitan banaturik dago, bakoitza populazioan oinarritutako algoritmo mota bati eskeinita. Lehenengo zatian, algoritmo ebolutiboan es-

kema orokorra ikusi ondoren, algoritmo genetikoak [19] eta EDak (*Estimation of Distribution Algorithms*) [25, 27] aurkeztuko dira. Bigarren zatian, *swarm intelligence* [6] arloan proposaturiko *Ant Colony Optimization* eta *Particle Swarm Optimization* algoritmoak aztertuko dira.

3.1 Algoritmo Ebolutiboak

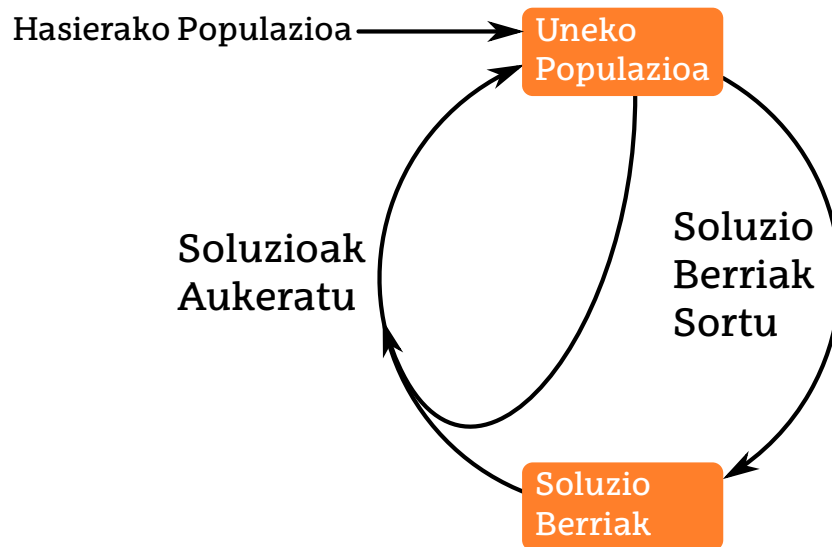
1859. urtean Charles R. Darwinek *On the Origin of the Species by Means of Natural Selection, or the Preservation of Favoured Races in the Struggle for Life* liburua argitaratu zuen. Tituluak berak adierazten duen bezala, liburu honetan Darwinek hautespen naturalaren teoria aurkeztu zuen.

Eboluzioaren teoriak dioenez, belaunalditik belaunaldira zenbait mekanismoren bidez –mutazioak, esate baterako– aldaketak ematen dira espezieetan. Aldaketa hauetako batzuei esker indibiduoak hobeto egokitzen dira haien ingurunera eta, ondorioz, bizirik mantentzeko eta, batez ere, ugaltzeko probabilitateak handitzen dira. Era berean, noski, aldaketa batzuk kaltegarriak izan daitezke, bizitzeko aukerak murriztuz. Kontutan hartuz aipatutako aldaketak heredatu egiten direla, ezaugarri onak generazioz generazio mantentzen dira; kaltegarriak direnek, ordera, galtzeko joera izaten dute. Prozesu honen bidez, espezieak haien ingurunera geroz eta hobeto egokitzeko gai dira.

Hirurogeigarren hamarkadan, ikertzaileek Darwinen lana inspiraziotzat hartu zuten optimizazio metahuristikokoak diseinatzeko, eta geroztik, konputazio ebolutiboa konputazio zientzien arlo bereizia bilakatu da. Atal honetan bi algoritmo mota aztertuko ditugu, algoritmo genetiko klasikoak [19] eta EDak (*Estimation of Distribution Algorithms*) [25, 27].

Diferentziak diferentzia, algoritmo ebolutibo guztiek 3.1 irudiko eskema orokorra jarraitzen dute. Eskema orokor honetan, bi elementu dira giltzarriak: soluzio berrien sorkuntza eta soluzioen hautespena. Algoritmoaren abiapuntua hasierako populazioa izango da; populazio horretatik hasiz, algoritmoa begizta nagusian sartzeko, non bi pausu txandakatzen diren. Lehenik, uneko populazioko soluzioetatik abiatuz, soluzio multzo berri bat sortuko da. Ondoren, soluzio berri hauek eta uneko populazioko soluzioak kontutan hartuz, naturan bezala, hurrengo belaunaldiara pasatzeko soluzio onak aukeratu ditugu, eta populazio berri bat sortuko dugu. Optimizazioa bukatutzat emango da, konbegentzia edo iterazio kopuruari loturiko irizpide konkretu batzuk betetzen direnean.

Hurrengo atalean, algoritmo orokor honen urratsak sakonago aztertuko ditugu. Hasteko, algoritmo ebolutibo guztietan komunak diren pausuak azalduko ditugu eta aurrerago, bi algoritmo ezberdinen xehetasunetan jarriko dugu arreta.



3.1 irudia Algoritmo ebolutiboaren eskema orokorra

3.1.1 Urrats orokorrak

Esan bezala, atal honetan algoritmo ebolutibo guztiek komunean dituzten urratsak azalduko dira banan banan, `metaheuR` paketeko funtzioen adibideekin lagundurik.

3.1.1.1 Populazioaren hasieraketa

Nahiz eta askotan garrantzi gutxi eman, hasierako populazioa da algoritmoaren abia-puntua eta, hortaz, bere sorkuntza oso pausu garrantzitsua da, eragin handia izaten baitu lortutako azken emaitzean.

Algoritmoen xedea soluzio onak topatzea denez, pentsa dezakegu hasierako populazio on bat soluzio onez osatuta egon behar dela; alabaina, soluzioen dibertsitatea hauen kalitatea bezain garrantzitsua da. Populazioa antzekoak diren soluzioez osatuta badago, orduan, honen eboluzioa oso zaila izango da eta algoritmoak azkarregi konbergitu dezake optimoa ez den soluzio batera.

Hortaz, hasierako populazioa sortzean bi aspektu izan behar ditugu kontutan: kalitatea eta dibertsitatea. Kasu gehienetan ausazko hasieraketa erabiltzen da lehen populazioa sortzeko, hau da, ausazko soluzioak sortzen dira populazioa osatu arte. Estrategia hau erabiliz dibertsitate handiko populazioa sortuko dugu, baina kalitatea ez da handia izango.

Ausazko laginketak lortutako dibertsitatea baino handiagoa bermatu nahi bada, "sasiausazkoak" deritzen prozedurak existitzen dira. Metodo hauek,

populazioko soluzioen dibertsitatea maximizatzeko erabiltzen dira. Horren adibide da dibertsifikazio sekuentziala. Algoritmo honek, soluzioak banan banan sartzen ditu populaziora, baldin eta soluzioa populazioko guztien distantzia minimo batera badago. Adibide moduan, demagun 25 tamainako bektore bitarren 10 soluzioko populazio bat sortu nahi dugula. Dibertsitatea bermatzeko populazioko soluzioen arteko Hamming distantzia minimoa 10 izan behar duela inposatuko dugu.

Jarraian dagoen kodeak horrelako populazioak sortzen ditu. Lehenik, Hamming distantzia neurtzeko eta ausazko bektore bitarrak sortzeko funtzioak definituko ditugu:

```
> hammDistance <- function (v1, v2) {
+   d <- sum(v1 != v2)
+   return(d)
+ }
>
> createRndBinary <- function(n) {
+   return (runif(n) > 0.5)
+ }
```

Gero, soluzioak ausaz sortzen ditugu eta, distantzia minimoko baldintza bete ezean, deusestatu egiten ditugu; prozedura errepikatu egingo da nahi ditugun soluzio kopurua lortu arte.

```
> sol.size <- 25
> pop.size <- 10
> min.distance <- 10
> population <- list(createRndBinary(sol.size))
> while (length(population) < pop.size) {
+   new.sol <- createRndBinary(sol.size)
+   distances <- lapply(population,
+                       FUN=function(x) {
+                         return(hammDistance (x, new.sol))
+                       })
+   if (min(unlist(distances)) <= min.distance) {
+     population[[length(population) + 1]] <- new.sol
+   }
+ }
```

Zenbait kasutan, prozedura hau ez da batere eraginkorra, zenbait kasutan soluzio asko aztertu behar izaten baitira populazioa osatu arte. Eragozpen horri aurre egiteko dibertsifikazio paraleloa proposatu zen. Teknika honek bilaketa espazioa zatitu egiten du eskualde bakoitzetik ausazko soluzio bat erauziz. Kontuan hartu behar da, azken teknika hau ezin dela beti aplikatu. Bilaketa espazioa bitarra denean, ez dago eragozpen nabarmenik, bilaketa espazioa permutazioz osaturikoa denean ordea, eskualdeak bilatzea ez da triviale. Soluzioen kalitateari dagokionez, askotan dibertsifikaizio teknikek kalitate oneko soluzioak sortzea galarazi egiten dute. Horretarako, hasieraketa heuristikokoak erabiltzea izaten da ohikoena. Era sinple bat, GRASP algoritmoetan ausazko soluzioak sortzeko erabiltzen diren prozedurak erabiltzea da.

Ondoko lerroetan Bavierako hirien TSP problemarako adibide bat ikus dezakegu. Lehenik, problema kargatuko dugu.

```
> url <- system.file("bays29.xml.zip", package="metaheuristic")
> cost.matrix <- tsplibParser(url)
```

Orain, tspGreedy funtzioan oinarrituta, ausazko soluzio onak sortzeko funtzio bat definitzen dugu.

```
> createRndSolution <- function(cl.size=5) {
+   tspGreedy(cmatrix=cost.matrix, cl.size=cl.size)
+ }
```

Aurreko kapituluetan azaldu bezala, tspGreedy funtzioak TSP-rako algoritmo eraikitzaile bat inplementatzen du; pausu bakoitzean, uneko hiritik zein hirira mugituko garen erabakitzen da, gertuen dauden cl.size hiritetatik -5, gure kasuan- bat ausaz aukeratuz. Honetan oinarrituz, populazioa sortzeko funtzio hau erabiliko dugu.

```
> pop.size <- 25
> population <- lapply(1:pop.size,
+   FUN=function(x) {
+       return(createRndSolution())
+   })
```

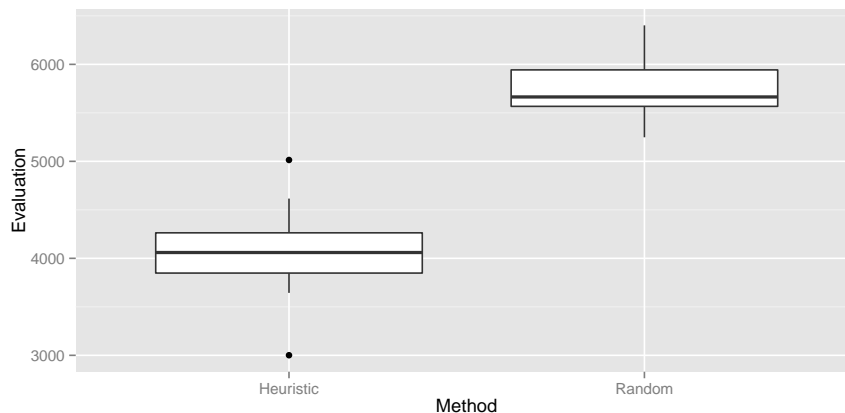
Hautagaien zerrendaren tamainari (cl.size) problemaren tamainaren balioa ezartzen badiogu, pausu bakoitzean, aukera guztietatik bat ausaz hartuko dugu, hots, guztiz ausazkoak diren soluzioak sortuko ditugu. Azken aukera honekin, populazioaren kalitatea goiko kodearekin lortutakoa baino okerragoa izango da:

```
> rnd.population <- lapply(1:pop.size,
+   FUN=function(x) {
+       cls <- ncol(cost.matrix)
+       sol <- createRndSolution(cl.size=cls)
+       return(sol)
+   })
> tsp <- tspProblem(cost.matrix)
> eval.heur <- unlist(lapply(population, FUN=tsp$evaluate))
> eval.rnd <- unlist(lapply(rnd.population, FUN=tsp$evaluate))
```

Bi populazioen ebaluazioak *boxplot* baten bidez aldera ditzakegu:

```
> df <- rbind(data.frame(Method="Heuristic", Evaluation=eval.heur),
+   data.frame(Method="Random", Evaluation=eval.rnd))
> ggplot(df, aes(x=Method, y=Evaluation)) + geom_boxplot()
```

3.2 irudiak lortutako emaitzak erakusten ditu. Helburua minimizazioa dela kontutan hartuz, argi eta garbi ikus daiteke heuristikoa erabiliz sortutako soluzioak hobeak direla.



3.2 irudia Ausazko hasieraketa eta hasieraketa heuristikoaren arteko konparaketa. Y ardatzak metodo bakoitzarekin sortutako soluzioen *fitness*-a adierazten du.

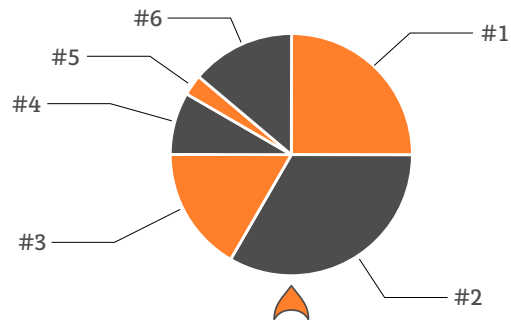
Soluzioak sortzeko metodoak ez ezik, populazioaren tamainak ere badu eragin handia azken emaitzan, eta hau ere, egokitu beharreko parametro garrantzitsua da. Algoritmoak darabiltzan populazioak txikiegiak badira, dibertsitatea mantentzea oso zaila izango da eta, hortaz, belaunaldi gutxitan algoritmoak konbergitu egingo du, ziurrenik optimoa ez den soluzio batera. Bestalde, populazioak handiegiak badira, konbergentzia abiadura motelagoa izango da, eta ondorioz, kostu konputazionala ere handiagoa bilakatuko da (3.5 irudian portaera honen adibide bat ilustratzen da). Honenbestez, ez dago irizpide finkorik populazioen tamaina ezartzeko eta problema bakoitzerako balio egoki bat bilatu beharko da. Edonola ere, irizpide orokor gisa esan dezakegu populazioak azkar konbergitzen badu –hots, soluzioen arteko distantzia azkar txikitzen bada–, soluzio hobeak lortzeko modua populazioaren tamaina handitzea izan daitekeela.

3.1.1.2 Hautespena

Algoritmo ebolutiboetan soluzioen hautespena izango da seguraski urratsik garrantzitsua, honek kontrolatzen baitu populazioaren eboluzioa. Orokorrean, populazioan dauden soluziorik onenak hautatzea da gehien erabiltzen den hautespen irizpidea: hautespen «elitista» Alabaina, soluzio onak aukeratzea garrantzitsua bada ere, dibertsitatea mantentzearen, tarteka soluzio ez hain onak sartzea ere komenigarria izaten da. Teknika hau zuzenean aplikatu daitekeen arren, badaude aukeraketa metodo egokiago batzuk soluzio txarrak estrategia probabilistikoak erabiliz aukeratzen dituztenak.

Erruleta-hautespena, (*Roulette Wheel selection*, ingelesez) deritzon estrategian soluzioak erruleta batean kokatzen dira; soluzio bakoitzari, bere

Indibiduo	Ebaluaia
#1	899
#2	1204
#3	598
#4	313
#5	95
#6	500



3.3 irudia Erruleta-hautespena. Indibiduo bakoitzaren erruletaren zatia bere ebaluazioarekiko proportzionala da. Erruleta jaurtitzen den bakoitzean indibiduo bat aukeratzen da, bere *fitness*arekiko proportzionala den probabilitatearekin. Adibidean, 2. indibidua da hautatu dena.

ebaluazioarekiko proportzionala den, erruletaren zati bat esleituko zaio. Hau honela, 3.3 irudian ikus daitekeen bezala, erruleta jaurtitzen den bakoitzean indibiduo bat hautatzen da. Hautatua izateko probabilitatea erruleta zatiaren tamaina eta, hortaz, indibiduen ebaluazioarekiko proportzionala da. Indibiduo bat baino gehiago aukeratu behar baldin badugu, behar adina erruleta jaurtiketa egin ditzakegu.

Azkenik, esan beharra dago, *fitness*aren magnitudea problema eta, batez ere, instantzien araberakoa dela. Hori dela eta, erruleta banatzeko probabilitateak zuzenean helburu funtzioaren balioak erabiliz kalkulatzeko badira, oso distribuzio erradikalak izan ditzakegu. Arazo hau ekiditeko, helburu funtzioaren balioa zuzenean erabili beharrean soluzioen ranking-a erabil daiteke.

Beste hautespen probabilistiko mota bat lehiaketa-hautespena da. Estrategia honekin soluzioen aukeraketa bi pausutan egiten da. Lehenengo urratsean indibiduo guztietatik azpi-multzo bat aukeratzen da, guztiz ausaz (ebaluazioa kontutan hartu barik). Ondoren, azpi-multzo honetatik soluziorik onena hautatzen dugu. Azpi-multzoen eraketa guztiz ausaz egiten denez, hauetako batzuk, oso soluzio txarrez osatuta egon daitezke. Kasu hauetan, nahiz eta onena aukeratu, populazio berrirako gordeko dugun soluzioa ez da ona izango eta, honenbestez, soluzio on eta txarren aukeraketa baimentzen du hautespen metodo honek.

3.1.1.3 Gelditze Irizpideak

Lehen apiatu bezala, algoritmo ebolutiboen begizta nagusia amaigabea da eta, beraz, gelditzeko irizpideren bat ezarri behar dugu, bilaketa gelditzeko. Hurbilketarik sinpleena irizpide estatikoak erabiltzea da, hala nola, bilaketarako denbora maximoa ezartzea, ebaluazioak mugatzea, etab.

Irizpide estatikoez gain, eboluzioaren prozesuari erreparatzen dioten irizpide dinamikokoak ere erabili daitezke. Belaunaldiz belaunaldi populazioan dauden soluzioak geroz eta hobeak dira eta, aldi berean, populazioaren dibertsitatea murrizten da, soluzio batera konbergitzeko joerarekin. Hau honela izanik, populazioaren dibertsitatea gelditze irizpideak eraikitzeke ere erabili ohi da.

Dibertsitatea soluzioei zein beraien *fitness*-ari erreparatuz neur daiteke. Esate baterako, soluzioen arteko distantzia neurtzerik badago, indibiduen arteko batz besteko distantzia minimo bat ezar dezakegu gelditze irizpide gisa.

3.1.2 Algoritmo Genetikoak

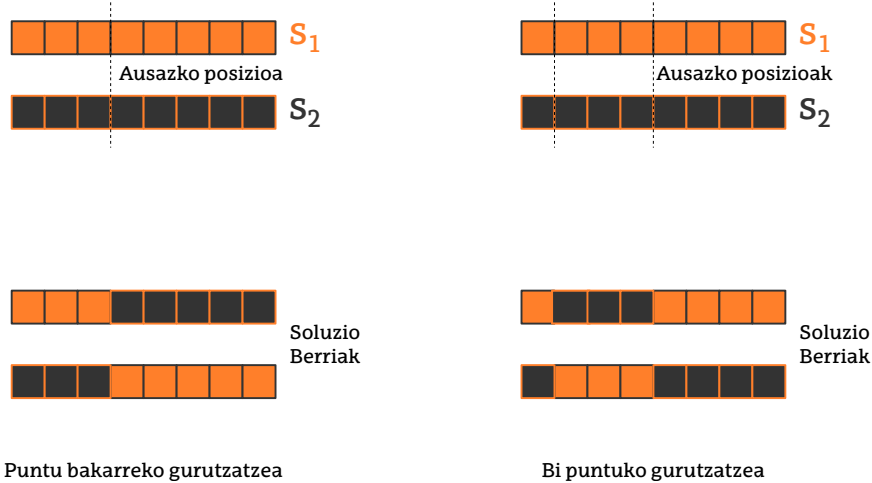
Algoritmo genetikoak [19] algoritmo ebolutiboen adibide ezagunenak eta erreferentziatuak dira. Naturan gertatzen den espezieen eboluzioa imitatuz, algoritmo genetikoaren osagai desberdinak, naturako fenomeno horren arira definitzen dira:

- Espezie bateko indibiduoak = Problemaren soluzioak
- Indibiduen egokitasuna *-fitness*-a, alegia = Soluzioaren ebaluazioa
- Espeziearen populazioa = Soluzio multzoa/populazioa
- Ugalketa = Soluzio berrien sorkuntza

Algoritmo genetikoetan soluzio berriak sortzeko estrategiak diseinatzean naturako indibiduen ugalketa prozesuan oinarrituko gara. Ugalketa prozesuaren xedea zenbait indibiduo emanda –bi, normalean–, indibiduo berriak sortzea da. Ohikoena prozesu hau bi pausutan banatzea da: soluzioak gurutzatzea eta mutatzeta. Lehenaren helburua *guruso*-soluzioek dituzten ezaugarriak (geneak) soluzio berriei pasatzea da, espezieen gurutzaketan jasotzen den bezala. Bigarrenarena, berriz, sortutako soluzio berriei, *semei*, ezaugarri berriak eranstea da. Jarraian soluzio berriak sortzeko bi operadore hauek aztertuko ditugu.

3.1.2.1 Gurutzaketa

Bi soluzio –edo gehiago– gurutzatzen ditugunean euren propietateak sortutako soluzio berriei transmititzea da helburua. Optimizazio arloan, soluzioen arteko gurutzaketak *gurutzaketa-operadore*-en *-crossover*, ingelesez– bidez



3.4 irudia Gurutzatze-operadoreak bektoreen bidezko kodeketarekin erabiltzeko

egiten dira. Operadore hauek soluzioen kodeketarekin dihardute eta, beraz, gurutzaketa operadore zehatz bat hautatzean soluzioak nola adieratzen ditugun aintzat hartu beharko dugu.

Badaude kodeketa klasikoekin erabil daitezkeen zenbait oinarritzko gurutzaketa operadore. Ezagunena puntu bakarreko gurutzaketa – *one-point crossover*, ingelesez – deritzona da. Demagun soluzioak bektoreen bidez kodetzen ditugula. Bi soluzio/guraso, s_1 eta s_2 izanik, operadore honek bi soluzio berri/semi sortzen ditu (3.4 irudian operadore hauen adibide bat ilustratzen da). Horretarako, lehenik eta behin, ausazko posizio bat, i , aukeratu behar da. Hau egin ahala, lehenengo soluzio berria s_1 soluziotik lehenengo i elementuak eta s_2 soluziotik gainontzekoak ($i+1$ -tik aurrerakoak) kopiatuz sortuko dugu. Era berean, bigarren soluzio berria s_2 -tik lehenengo i elementuak eta s_1 -etik $i+1$ posiziotik aurrerako elementuak kopiatuz sortuko dugu. 3.4 irudiaren ezkerrean, puntu bakarreko gurutzaketa (*one-point crossover*) operazioaren aplikazioaren adibide bat ikus daiteke. Horrezgain, eskuinaldean operadore hau nola orokortu daitekeen erakusten da, puntu bakar bat erabili beharrean bi, hiru, etab. puntu erabiliz.

Azken operadore orokorrago honi, *k-point crossover* deritzo eta metaheur liburutegiko `kPointCrossover` funtzioan dago inplementaturik. Ikus ditza-gun bere erabileraren adibide batzuk:

```
> A.sol <- rep("A", 10)
> B.sol <- rep("B", 10)
> A.sol

## [1] "A" "A" "A" "A" "A" "A" "A" "A" "A" "A"

> B.sol
```

```
## [1] "B" "B" "B" "B" "B" "B" "B" "B" "B" "B"

> kPointCrossover(A.sol, B.sol, 1)

## [[1]]
## [1] "A" "A" "A" "A" "A" "A" "A" "A" "B" "B"
##
## [[2]]
## [1] "B" "B" "B" "B" "B" "B" "B" "B" "A" "A"

> kPointCrossover(A.sol, B.sol, 5)

## [[1]]
## [1] "A" "A" "A" "B" "A" "A" "A" "B" "A" "B"
##
## [[2]]
## [1] "B" "B" "B" "A" "B" "B" "B" "A" "B" "A"

> kPointCrossover(A.sol, B.sol, 20)

## Warning in kPointCrossover(A.sol, B.sol, 20): The length of the
vectors is 10 so at most there can be 9 cut points. The parameter will
be updated to this limit

## [[1]]
## [1] "A" "B" "A" "B" "A" "B" "A" "B" "A" "B"
##
## [[2]]
## [1] "B" "A" "B" "A" "B" "A" "B" "A" "B" "A"
```

Azken adibidean ikus daitekeen bezala, n tamainako bektore bat izanik, gehienez $n - 1$ puntuko gurutzaketa aplikatu dezakegu; edonola ere, balio handiago bat aukeratzen badugu funtzioak abisu bat emango du eta puntu kopuruaren parametroa bere balio maximoan ezarriko du. Balio maximoa aukeratuz gero, jatorrizko *guraso* soluzioen elementuak tartekatuta agertuko dira soluzio berrietan; operadore honi *uniform crossover* deritzo.

Erabiliko dugun puntu kopuruak eragin handia izan dezake algoritmoaren performantzian eta, hortaz, egokitu beharreko algoritmoaren parametroa da.

k-point crossover operadorea nahiko orokorra da, ia edozen bektoreari aplikatu ahal baitzaio. Hala eta guztiz ere, kodeketa batzuetan beste operadore espezifikoagoak erabiltzea egokiagoa izan daiteke [18]. Esate baterako, soluzioak bektore errealean bidez kodetuta badaude, bi soluzio era ezberdin askotan konbina daitezke; adibidez, bataz bestekoa kalkulatz. Ikus dezagun operadore hau nola implementa daitekeen R-n:

```
> meanCrossover <- function(sol1, sol2) {
+   new.solution <- (sol1 + sol2) / 2
+   return(new.solution)
+ }
>
> s1 <- runif(10)
> s2 <- runif(10)
> s1
```

```
## [1] 0.97872844 0.49811371 0.01331584 0.25994613
0.77589308 0.01637905
## [7] 0.09574478 0.14216354 0.21112624 0.81125644

> s2

## [1] 0.03654720 0.89163741 0.48323641 0.46666453
0.98422408 0.60134555
## [7] 0.03834435 0.14149569 0.80638553 0.26668568

> meanCrossover(s1, s2)

## [1] 0.50763782 0.69487556 0.24827612 0.36330533
0.88005858 0.30886230
## [7] 0.06704457 0.14182962 0.50875588 0.53897106
```

Soluzioak permutazioen bidez kodetzen direnean, bete beharreko murrizketak direla eta, *k-point crossover* operadorea ezin da erabili kodeketa mota honekin. Demagun, bi permutazio ditugula, $s_1 = 12345678$ eta $s_2 = 87654321$, eta gurutzaketa puntu bat, $i = 3$. Lehenengo soluzio berria lortzeko s_1 soluziotik lehendabiziko hiru posizioak kopiautuko ditugu, hau da, 123, eta besteak s_2 -tik, hots, 54321. Hortaz, lortutako soluzioa $s' = 12354321$ da, zoritxarrez, hau ez da permutazio bat. Hori dela eta, permutazioak gurutzatzeko operadore bereziak behar ditugu.

Permutazioen murrizketak kontuan hartzen dituzten aukera asko izan arren [37], hemen puntu bakarreko gurutzatze operadorearen baliokidea ikusiko dugu. Puntu bateko gurutzaketan bezala, hasteko, puntu bat aukeratuko dugu ausaz, i . Ondoren, lehenengo soluzio berria sortzeko, *guraso* soluzio baten lehenengo i posizioetako balioak zuzenean kopiautuko ditugu; gainontzeko balioak zuzenean beste *guraso* soluziotik kopiaitu beharrean, ordena bakarrik hartuko dugu kontutan. Hau da, aurreko adibidera itzuliz, soluzio berri bat sortzeko s_1 -etik lehenengo 3 elementuak zuzenean kopiautuko ditugu, 123, eta falta direnak, 45678, s_2 -an agertzen diren ordenean kopiautuko ditugu, hots, 87654. Eraitza, beraz, $s' = 12387654$ izango da eta, kasu honetan bai, permutazio bat. Era berean, bigarren soluzio berri bat sor daiteke s_2 -tik lehenengo hiru posizioak kopiautuz (876) eta gainontzekoak s_1 -n agertzen diren ordenean kopiautuz (12345); beste semea, beraz, 87612345 izango da. Operadore honi *Order crossover* deritzo eta metaheur liburutegian `orderCrossover` funtzioan¹. dago inplementaturik.

```
> sol1 <- randomPermutation(10)
> sol2 <- identityPermutation(10)
> as.numeric(sol1)

## [1] 3 7 8 2 1 4 10 5 9 6
```

¹ Funtzio honetan inplementatuta dagoena *2-point crossover* operadorea da. Hau da, bi puntu erabiltzen dira eta, soluzioak eraikitze, bi puntuen artean dagoen soluzio zatia soluzio batetik zuzenean kopiaitu ondoren, gainontzeko elementuak beste *guraso* soluzioan agertzen diren ordenean ezartzen dira.

```

> as.numeric(sol2)

## [1] 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

> new.solutions <- orderCrossover(sol1, sol2)
> as.numeric(new.solutions[[1]])

## [1] 1 3 4 2 5 6 7 8 9 10

> as.numeric(new.solutions[[2]])

## [1] 3 7 8 4 2 1 10 5 9 6

```

3.1.2.2 Mutazioa

Esan bezala, populazioa eboluzionatu ahal izateko soluzioak desberdinak izatea berebizikoa da. Hori dela eta, behin gurutzaketa-operadorearen bidez soluzio berriak lortzen ditugunean, ausazko aldaketak eragin ohi dira mutazio operadorearen bidez.

Mutazioaren kontzeptua ILS algoritmoko perturbazioaren antzerakoa da eta kasu haretan bezala, operadore ezberdinak erabil daitezke mutazioa burutzeko. Hala nola, algoritmoa diseinatzean erabaki behar dugu zenbateko aldaketak eragingo ditugun soluzioetan. Esate baterako, permutazio bat mutatzeko ausazko trukaketak erabil ditzakegu baina zenbat posizio trukatuko ditugun aldeztu aurretik erabaki beharko dugu. Parametro honi mutazioaren magnitudea deritzogu.

Mutazio operadorea era probabilistikoa aplikatzen da normalean; hau da, ez zaie soluzio guztiei aplikatzen. Hortaz, mutazio operadoreari lotutako bigarren parametro bat ere izango ditugu: mutazio probabilitatea.

Mutazio operadorea aukeratzean –eta baita diseinatzean ere– hainbat gauza hartu behar dira kontuan. Hasteko, soluzioen bideragarritasuna mantentzea garrantzitsua da, hau da, mutazio operadorea bideragarria den soluzio bati aplikatuz gero, emaitzak soluzio bideragarria izan behar du. Bestalde, algoritmoak soluzio bideragarrien espazio osoa arakatzeko gaitasuna izan behar du, eta beraz, mutazio operadoreak edozein soluzio sortzeko gaitasuna izan behar da. Hau da, edozein soluzio hartuta, mutazio operadorearen hainbat aplikazioen bidez beste edozein soluzio sortzea posible izan behar du. Amaitzeko, lokaltasuna ere mantendu behar da –hau da, mutazioak eragindako aldaketa, txikia izan behar da–, gurasoengandik heredatutako ezaugarriak galdu ez daitezken.

Honenbestez, algoritmo genetikoaren eskema orokorra 3.1 sasikodean ikusi daiteke eta `metaheuR` paketeko `basicGeneticAlgorithm` funtzioan dago inplementaturik. Ikus dezagun funtzio honen erabilpenaren adibide bat *graph coloring* problemaren instantzia bat ebazteko. Lehenik, ausazko grafo bat sortuko dugu problemaren instantzia sortzeko.

Algoritmo Genetikoak

```

1  input: evaluate, select_reproduction, select_replacement, cross,
    mutate eta !stop_criterion operadoreak
2  input: init_pop hasierako populazioa
3  input: mut_prob mutazio probabilitatea
4  output: best_sol
5  pop=init_pop
6  while stop_criterion do
7    evaluate(pop)
8    ind_rep = select_reproduction(pop)
9    new_ind = reproduce(ind_rep)
10   for each n in new_ind do
11     mut_prob probabilitatearekin egin mutate(n)
12   done
13   evaluate(new_ind)
14   if new_ind multzoan best_ind baino hobea den soluziorik badago
15     Eguneratu best_sol
16   fi
17   pop=select_replacement(pop,new_ind)
18 done

```

Algoritmoa 3.1: Algoritmo genetikoaren sasikodea

```

> library(igraph)
> n <- 50
> rnd.graph <- aging.ba.game(n=n, pa.exp=2, aging.exp=0, m=3,
+                           directed=FALSE)
> gcp <- graphColoringProblem(graph=rnd.graph)

```

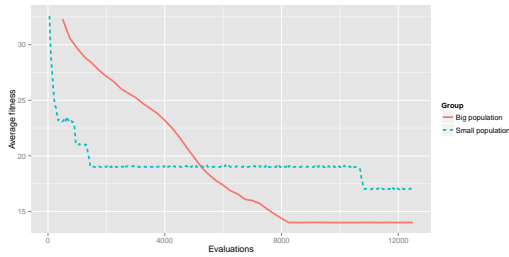
Jarraian algoritmoaren zenbait elementu definituko ditugu. Hasierako populazioa sortu ahal izateko, lehenik, bere tamaina erabaki behar dugu. Parametro honen garrantzia kontuan hartuta, bi balio ezberdinekin probatuko dugu, emaitzak alderatzeko: n eta $10n$. Behin hasierako populazioaren tamaina definituta, bertako soluzioak ausaz sortuko ditugu eta, bideragarriak ez badira, zuzenduko egingo ditugu gcp objektuaren `correct` funtzioa erabiliz.

```

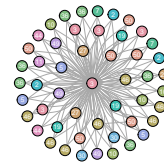
> n.pop.small <- n
> n.pop.big <- 10 * n
> levels <- paste("C", 1:n, sep="")
> createRndSolution <- function(x) {
+   sol <- factor(paste("C", sample(1:n, size=n, replace=TRUE),
+               sep=""), levels=levels)
+   return(gcp$correct(sol))
+ }
> pop.small <- lapply(1:n.pop.small, FUN=createRndSolution)
> pop.big <- lapply(1:n.pop.big, FUN=createRndSolution)

```

Hasierako populazioaz gain, ondoko parametro hauek ezarri behar ditugu:



(a) Algoritmo genetikoaren progresioa



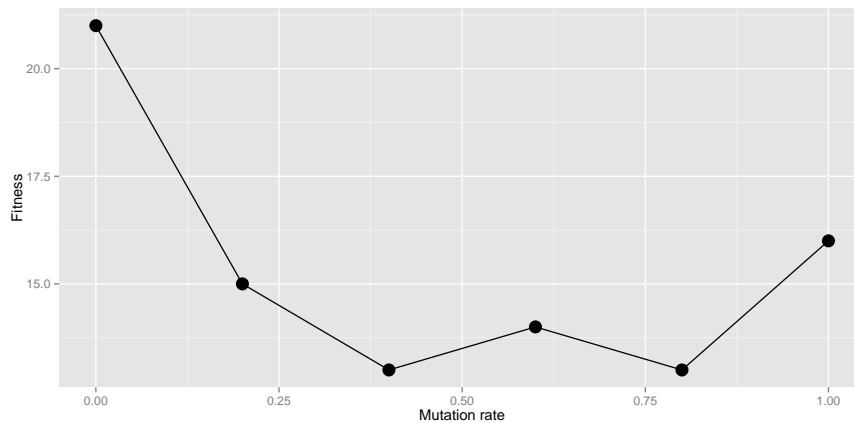
(b) Lortutako soluzioa

3.5 irudia Definitutako algoritmo genetikoaren progresioa *graph coloring* problemaren instantzia batean batean, bi populazio tamaina ezberdin erabiliz. Ezkerrean, tamaina handi-ko populazioarekin lortutako soluzioa ikus daiteke.

- Hautespen operadoreak - Hurrengo belaunaldira zuzenean pasatuko diren soluzioak aukeratzeko hautespen elitista erabiliko dugu, populazio erdia aukeratuz; zein soluzio gurutzatuko diren aukeratzeko, berriz, lehiaketa hautespena erabiliko dugu.
- Mutazioa - Soluzioak mutatzeko `factorMutation` funtzioa erabiliko dugu. Funtzio honek zenbait posizio ausaz aukeratzen ditu eta bertako balioak ausaz aldatzen ditu. Funtzioak parametro bat du, `ratio`, aldatuko diren posizioen ratioa adierazten duena. Gure kasuan 0.1 balioa erabiliko dugu, alegia, posizioen %10-a aldatuko da mutazioa aplikatzen denean. Soluzioak zein probabilitatearekin mutatuko ditugun finkatu behar da `mutation.rate` parametroaren bidez. Gure kasuan, probabilitatea bat zati populazioaren tamaina izango da.
- Gurutzaketa - Soluzioak gurutzatzeko *k-point crossover* operadorea erabiliko dugu, $k = 2$ finkatuz.
- Beste parametro batzuk - Algoritmo genetikoaren parametroaz gain, beste bi parametro finkatuko ditugu, `non.valid = 'discard'`, bideraezina diren soluzioak baztertu behar direla adierazteko, eta `resources`, gelditze irizpidea finkatzeko. Kasu honetan $5n^2$ ebaluazio burutuko dira.

Jarraian parametro hauek erabiliz algoritmo genetikoa exekutatze kodea ikus dezakegu.

```
> args <- list()
> args$evaluate <- gcp$evaluate
> args$initial.population <- pop.small
> args$selectSubpopulation <- elitistSelection
> args$selection.ratio <- 0.5
> args$selectCross <- tournamentSelection
> args$mutate <- factorMutation
> args$ratio <- 0.1
> args$mutation.rate <- 1 / length(args$initial.population)
> args$cross <- kPointCrossover
```



3.6 irudia Mutazio probabilitatearen eragina algoritmo genetikoaren azken emaitzan. Irudian ikus daitekeen bezala, soluziorik onena ematen duen mutazio probabilitatearen balioa 0.5 inguruan dago (zehazki, 0.6).

```
> args$k <- 2
> args$non.valid <- "discard"
> args$resources <- cResource(evaluations=5 * n^2)
>
> bga.small <- do.call(basicGeneticAlgorithm, args)
>
> args$initial.population <- pop.big
> args$mutation.rate <- 1 / length(args$initial.population)
>
> bga.big <- do.call(basicGeneticAlgorithm, args)
>
> plotProgress(list("Big population"=bga.big,
+                   "Small population"=bga.small), size=1.1) +
+   labs(y="Average fitness") + aes(linetype=Group)
```

3.5 irudian bi populazio tamaina ezberdin erabiliz lortutako progresioa ikus daiteke. Populazioa txikia denean algoritmoak oso azkar konbergitzen du 19 koloreko soluzio batera. Populazioko soluzio gehienak oso antzerakoak direnean soluzio berriak sortzeko bide bakarra mutazioa da, baina prozesu hori oso motela denez, grafikan ikus daiteke soluzioen batz besteko *fitness*a ez dela aldatzen.

Populazioaren tamaina handitzen dugun heinean konbergentzia motelagoa da, baina lortutako soluzioa aldiz, hobeagoa da.

Populazioaren tamaina ez ezik, beste hainbat parametrok ere eragin handia izan dezakete algoritmoaren emaitzan; esate baterako, mutazioaren probabilitateak. Adibide gisa, populazio tamaina txikia erabiliz mutazio probabilitate ezberdinak probatuko ditugu, eta, bakoitzarekin lortutako emaitzak alderatuko ditugu.

```

> args$initial.population <- pop.small
> args$verbose <- FALSE
> args$resources <- cResource(evaluations=n^2)
>
> testMutProb <- function (rate) {
+   args$mutation.rate <- rate
+   res <- do.call(basicGeneticAlgorithm, args)
+   return(getEvaluation(res))
+ }
>
> ratios <- seq(0,1,0.2)
> evaluations <- sapply(ratios , FUN = testMutProb)
>
> df <- data.frame("Mutation_rate"=ratios, "Fitness"=evaluations)
> ggplot(df, aes(x=Mutation_rate, y=Fitness)) +
+   geom_line() +
+   geom_point(size=5) +
+   labs(x="Mutation rate")

```

3.6 irudian lortutako emaitzak ikus daitezke. Grafikoak agerian uzten du mutazio probabilitate txikiegiak zein handiegiak ezartzea kaltegarria dela bilaketa prozesuarenzat, 0.5 ingurukoa izanik probabilitate eraginkorrena. Probabilitate txikiak ditugunean, populazioaren dibertsitate baxua da, eta beraz kobergentzia goiztiarra ematen da. Aldiz, mutazio probabilitate handiak ditugunean, bilaketak ia ausazkoak dirudi, eta algoritmoak ez du ia konbergitzen.

3.1.3 Estimation of Distribution Algorithms

Aurreko atalean ikusi dugun bezala, algoritmo genetikoetan indibiduo berriak naturan inspiratutako gurutzaketa eta mutazio operadoreak aplikatuz lortzen dira. Prozesu honen bitartez, populazioan dauden ezaugarriak mantentzea espero da.

Zenbait ikertzailek ideia hau hartu eta ikuspuntu matematikotik birformulatu zuten. Honela, gurutzaketa eta mutazioa erabili beharrean, eredu probabilistikoak erabiltzea proposatu zuten, populazioaren *esentzia* jasotzeko helburuarekin. Hauxe da, EDA – *Estimation of Distribution Algorithms* – algoritmoen ideia nagusia.

Algoritmo genetikoaren eta EDAen artean dagoen diferentzia bakarra indibiduo berriak sortzeko erabiltzen den estrategia da. Gurutzaketa eta mutazioa erabili beharrean, eredu probabilistiko bat doitzen da uneko populazioaren gainean. Ondoren, indibiduo berriak ereduaren behar adina aldiz laginduz lortuko ditugu.

EDA algoritmoen esentzia, beraz, eredu probabilistikoa da. Ildo honetan, ereduak soluzio adierazpide bakoitzari probabilitate bat esleituko dionez,

soluzioen kodeketa eredua diseinatzerako orduan puntu kritikoa bihurtuko da.

Konplexutasun ezberdineko eredu probabilistikoak darabiltzaten EDak proposatu dira literaturan, UMDA – *Univariate Marginal Distribution Algorithm* – izanik hurbilketa sinple eta hedatuena. Kasu honetan soluzioaren osagaiak – bektore bat bada, bere posizioak – independenteak direla suposatuko da eta, osagai bakoitzari dagokion bazter-probabilitatea estimatuko da. Gero, indibiduoak sortzean soluzioaren osagaiak banan-banan laginduko ditugu probabilitate hauek jarraituz.

Bazter-probabilitateak maneiatzeko `metaheuR` paketeko `UnivariateMarginals` objektua erabil dezakegu. Bere erabilera ikusteko, populazio txiki bat sortuko dugu eta bazter-probabilitateak kalkulatu ditugu.

```
> population <- lapply(1:5,
+                       FUN=function(x) {
+                           res <- factor(sample(1:3, 10, replace=TRUE),
+                                           levels=1:3)
+                           return(res)
+                       })
```

Orain, `univariateMarginals` funtzioa erabiliz bazter-probabilitateak kalkulatu ditugu:

```
> model <- univariateMarginals(data=population)
> do.call(rbind, population)

##      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10]
## [1,]    1    2    2    3    1    3    3    2    2    1
## [2,]    1    1    3    2    3    2    3    3    2    3
## [3,]    3    1    2    1    1    2    1    2    3    2
## [4,]    2    2    2    1    3    3    3    1    3    2
## [5,]    3    2    3    2    2    3    1    2    3    3

> model@prob.table

##      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10]
## 1  0.4  0.4  0.0  0.4  0.4  0.0  0.4  0.2  0.0  0.2
## 2  0.2  0.6  0.6  0.4  0.2  0.4  0.0  0.6  0.4  0.4
## 3  0.4  0.0  0.4  0.2  0.4  0.6  0.6  0.2  0.6  0.4
```

Sortutako soluzioek 10 elementu dituzte (10 posizioko bektore kategorikoak dira) eta populazioak 5 soluzio ditu. Lehenengo elementu edo posizioari er-reparatzen badiogu, 5 soluzioetatik lehenengo biak 1 balioa dute, laugarrenak 2 balioa eta beste biak 3 balioa. Hortaz, elementu horretarako, 1 eta 3 balioen probabilitatea 0.4 izango da $-\frac{2}{5}$, alegia– eta 2 balioaren probabilitatea 0.2 izango da, bazter-probabilitateen taulan ikus daitekeen bezala.

Estimatutako eredu probabilistikoa soluzio berriak sortzeko erabil daiteke, posizioz-posizioko laginketa burutuz. Prozesu hau `simulate` funtzioaren bidez egiten da.

```

> simulate(model, nsim=2)

## [[1]]
## [1] 3 1 2 2 1 3 3 2 2 3
## Levels: 1 2 3
##
## [[2]]
## [1] 2 2 2 2 3 3 3 3 3 1
## Levels: 1 2 3

```

UMDA algoritmoa metaheuR paketeko basicEda funtzioaren bidez exekutatu dezakegu eta, segidan, aurreko ataleko *graph coloring* problema ebazteko erabiliko dugu. Horretarako, bakarrik hautespen operadoreak eta ereduak estimatzeko funtzioak zehaztu behar ditugu –algoritmo genetikoekin komunak diren parametroez gain–.

```

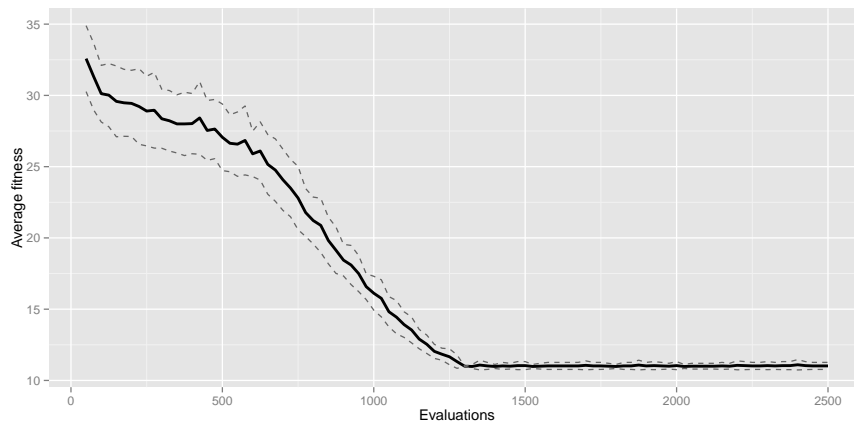
> args <- list()
> args$evaluate <- gcp$evaluate
> args$initial.population <- pop.small
> args$selectSubpopulation <- elitistSelection
> args$selection.ratio <- 0.5
> args$learn <- univariateMarginals
> args$non.valid <- "discard"
> args$resources <- cResource(evaluations = n^2)
>
> umda <- do.call(basicEda, args)
>
> plotProgress(umda, size=1.1) +
+   geom_line(aes(y=Current_sol + Current_sd), col="gray40",
+             linetype=2) +
+   geom_line(aes(y=Current_sol - Current_sd), col="gray40",
+             linetype=2) +
+   labs(y="Average fitness")

```

Bilaketaren progresioa 3.7 irudian erakusten da. Marra etenek populazioan dauden soluzioen *fitness*aren desbiderapena erakusten dute eta marra jarraikiak, ordea, populazioko soluzioen fitness-aren batez-bestekoa. Populazioak eboluzionatu ahala, populazioaren dibertsitatea murrizten dela ikus dezakegu desbiderapenaren murrizketan erreparatuz. Amaieran, bilaketak 11 kolore darabiltzan soluzio batera konbergitzen du.

Bazter-probabilitateak kalkulatzeko estrategia ia edozein bektore erabil daiteke; alabaina, balio errealak baditugu, bazter-probabilitateak zein probabilitate banaketarekin modelatuko ditugun erabaki beharko dugu aurrez. Bektore jarraikietatik aratago joanda, soluzioek murrizketak dituztenean, permutazioetan kasu, gauzak konplikatu egiten dira.

Populazioa, permutazio multzo bat denean, posible da bazter-probabilitateak bektore kategorikoekin bezala estimatzea baina, ondoren, eredua lagintzen dugunean ez ditugu halabeharrez permutazioak lortuko, balio errepikatuak ager baitaitezke. Hona hemen adibide bat:



3.7 irudia UMDA algoritmoaren progresioa *graph coloring* problemaren instantzia batean aplikatuta. Marra jarraituak populazioko soluzioen batzueko *fitnessa* adierazten du; marra etenek, berriz, desbiderazio estandarra adierazten dute. Ikus daiteke populazioak konbergitzen duen heinean soluzioen *fitnessaren* aldakortasuna murrizten dela.

```
> n <- 5
> rndPop <- lapply(1:50,
+                 FUN=function(x) {
+                   rnd.perm <- as.numeric(randomPermutation(n))
+                   res <- factor(rnd.perm, levels=1:n)
+                   return(res)
+                 })
> perm.umd <- univariateMarginals(rndPop)
> simulate(perm.umd)

## [[1]]
## [1] 3 2 1 4 4
## Levels: 1 2 3 4 5
```

Arazo hau sahiesteko, soluzio berriak lagintzean, permutazioak dakarzten murrizketak aintzat hartu behar dira. Honela, laginketa prozesuan lehenengo elementua ausaz aukeratuko dugu, zuzenean bazter-probabilitatea erabiliz.

```
> marginals <- perm.umd@prob.table
> remaining <- 1:n
> probabilities <- marginals[,1]
> new.element <- sample(remaining, size=1, prob=probabilities)
> new.solution <- new.element
```

Ondoren, bigarren elementua lagindu aurretik, lehenengo posiziorako aukeratu dugun elementua kendu beharko dugu aukera posibleetatik eta bazter-probabilitateak honen arabera eguneratu—erabili dugun elementuaren probabilitatea kendu eta normalizatu, gelditzen diren elementuen probabilitateen batura 1 izan dadin—:

```

> id <- which(remaining %in% new.element)
> remaining <- remaining [-id]
> marginals <- marginals[-id, ]
> probabilities <- marginals[, 2]
> probabilities <- probabilities / sum(probabilities)
> new.element <- sample(remaining, size=1, prob=probabilities)
> new.solution <- c(new.solution, new.element)

```

Estrategia berbera aplikatzen dugu 3. eta 4. elementuak erauzteko.

```

> id <- which(remaining %in% new.element)
> remaining <- remaining [-id]
> marginals <- marginals[-id, ]
> probabilities <- marginals[, 3]
> probabilities <- probabilities / sum(probabilities)
> new.element <- sample(remaining, size=1, prob=probabilities)
> new.solution <- c(new.solution, new.element)
>
> id <- which(remaining %in% new.element)
> remaining <- remaining [-id]
> marginals <- marginals[-id, ]
> probabilities <- marginals[, 3]
> probabilities <- probabilities / sum(probabilities)
> new.element <- sample(remaining, size=1, prob=probabilities)
> new.solution <- c(new.solution, new.element)

```

Amaitzeko, permutazioaren azken elementua definitzeko, soberan geratzen den elementua aukeratuko dugu zuzenean.

```

> id <- which(remaining %in% new.element)
> remaining <- remaining [-id]
> new.solution <- c(new.solution, remaining)
> new.solution

```

```
## [1] 4 3 5 1 2
```

Prozesu honekin bazter-probabilitateak erabiliz permutazioen soluzioak betetzen dituzten soluzioak sortzen ditugu. Arazo bat dauka ordea, eredia lagintzen dugun bakoitzean probabilitateak eguneratu egiten ditugu eta, ondorioz, lagintzen duguna ez da zehazki estimatutako eredu probabilistikoak adierazten duena. Beste era batera esanda, populaziotik ateratako *esentzia* galdu dezakegu. Hau ez gertatzeko, permutazio espazioetan definitutako Mallows eredu bezelako probabilitate banaketak erabil ditzakegu. Mallows eredu, *metaheuR* paketeen dagoen *MallowsModel* objektuak inplementatzen du.

3.2 Swarm Intelligence

Eboluzioaren bidez natura indibiduen diseinua *optimizatzeko* gai da; alabaina, algoritmo genetikoez gain, naturan optimizazio estrategiak beste hainbat egoeratan ere ageri dira. Adibidez, animalia sozialen portaera eta jokabideak optimizazio algoritmoak sortzeko inspirazio iturri izan dira sarritan.

Zenbait espezieetako indibiduoak –intsektuak, batik bat– banan-banan hartuta, oso izaki sinpleak dira baina, taldeka lan egiten dutenean, ataza konplexuak era oso eraginkorrean burutzen dituzte. Esate baterako, inurriak eta erleak elikagai-iturri onenak aukeratzeko gai dira eta, hauen kapazitate eta egoeraren arabera, ingurunea esploratzen duten indibiduen kopurua egokitzen dute iturri berriak lortu ahal izateko; era berean, bizitzeko toki egokiak aukeratzeko gai dira.

Honelako bizidun multzoetan erabakiak ez dira era zentralizatuan hartzen –alegia, ez dago agintzen duen *nagusirik* –. Beraz, mekanismo sinple batzuk jarraituz eta, batez ere, beraien arteko komunikazioari esker, kolonia bateko indibiduoak elkar antolatzen gai dira, inolako koordinazio zentralizaturik gabe.

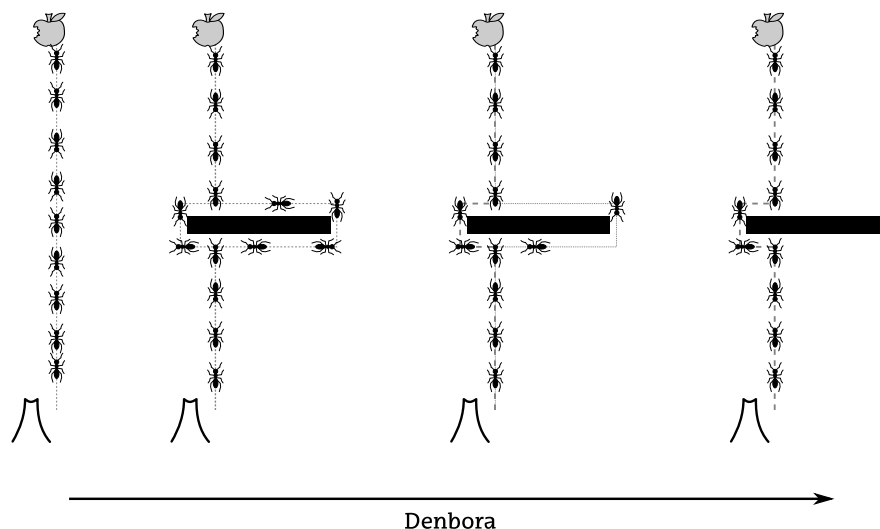
Mota honetako portaerak dira zehazki *swarm intelligence* deritzen arloaren inspirazio iturria. *Swarm intelligence* algoritmoak lehenengo aldiz 1988. urtean robotika arloan proposatu ziren [5], baina urte gutxi batzuetan optimizazio mundura hedatu ziren. Honela, 90. hamarkadan inurri kolonien optimizazioa –*Ant Colony Optimization*, ingelesez– proposatu zen [10, 11].

Hurrengo bi ataletan *swarm intelligence* arloan dauden bi algoritmo ezaugarrienak aztertuko ditugu, inurri kolonien optimizazioa eta *particle swarm optimization*.

3.2.1 Ant Colony Optimization

Inurriek, elikagai-iturri bat topatzen dutenean, inurritegitik bertara dagoen biderik motzena topatzeko gaitasuna dute. Inurri bakar batek ezin du horrelakorik gauzatu, taldeka ordea, komunikazio mekanismo sinpleei esker, ataza konplexu hau burutzeko gai dira. Erabiltzen duten komunikazio mota zeharkakoa da, inurriek jariatzen duten molekula mota berezi baten bidez gauzatzen dena: feromona.

Inurriak toki batetik bestera mugitzean, ibili diren bidean feromona-lorraz bat uzten dute. Inurriak, haien kolonia-kideak utzitako feromona lorrazak detektatzeko gai dira eta honetaz baliatzen dira haien ibilbideak aukeratzeko. Hala, geroz eta feromona gehiago egon bide batean, orduan eta probabilitate handiagoa dago bertatik igarotzen diren inurriak bide horretatik jarraitzeko. Bestalde, inurri batek elikagai-iturri bat topatzen duenean, bidetik uzten duen feromona kopurua iturriaren kalitatearen arabera egokitzen du; geroz



3.8 irudia Feromonaren erabilera. Hasierako egoeran biderik motzena feromona lorratzak zehazten du. Bidea mozten dugunean, inurriek, eskuinetik ala ezkerretik joatea erabaki beharko dute. Hasieran erabaki hau probabilitate berdinarekin hartuko dute, feromonarik ez baitago ez ezkerrean eta ez eskuinean ere. Alabaina, eskuineko bidea luzeagoa da eta, ezkerreko bidearekin alderatuta, inurri-fluxua txikiagoa izango da, inurriek denbora gehiago beharko baitute elikadura-iturrira joan eta etorria egiteko. Arrazoi honegatik, denbora igaro ahala, eskumako lorratza ahuldu egingo da eta ezkerrekoa, berriz, indartu. Guzti honek puntu honetara iristen diren inurrien erabakia baldintzatuko du, ezkerreko bidea aukeratzeko joera areagotuz eta bi bideen arteko diferentzia handituz. Denbora nahikoa igaro ezkerreko eskuineko lorratza guztiz desagertuko da eta inurriak bide motzena bakarrik aukeratzeko dute.

eta kalitate handiagoa, orduan eta feromona kopuru handiagoa jariatzen du. Azkenik, feromona lurrunkorra da, alegia, denborarekin baporatu egiten da.

Arau sinple hauek erabiliz inurriak elikagai-iturri onenak aukeratzeko gai dira; are gehiago, elikagai eta inurritegiaren arteko biderik motzena ere topatu dezakete. Mekanismo honen funtzionamendua hobeto ulertzeko 3.8 irudiari erreparatuko diogu. Hasieran, bide motzena feromona lorratzaren bidez markaturik dator. Bidea moztean, eskuineko eta ezkerreko bideetan ez dago feromonarik eta, hortaz, inurri batzuk eskuinetik eta beste batzuk ezkerretik joango dira, probabilitate berdinarekin. Ezkerreko bidea motzagoa denez, denbora berdinean inurri gehiago igaroko dira, ezkerreko bideako feromona-lorratza indartsuagoa bilakatuz. Denbora igaro ahala, datozen inurriak ezkerretik joateko joera handiagoa izango dute eta honek bide hau are gehiago indartuko du. Eskuineko bidean lorratza apurka-apurka baporatu egingo da erabat desagertu arte.

Laburbilduz, inurriek ez dituzte bi bideak konparatzen baina, hala eta guztiz ere, azkenean, bide motza soilik erabiltzea lortzen dute. *Ant Colony Optimization* (ACO) deritzon metaheuristikak inurrien portaera hau hartzen

du intuiziotzat eta inurri artifizialak erabiltzen ditu optimizazio problemaren soluzioak sortzeko. Soluzio hauek ez dira edonolakoak izango, izan ere, naturan bezalaxe, aurretik igarotako inurriek utzitako lorratzak jarraituz sortuko dira.

Lorratzak feromona ereduen bidez adierazten dira eta, eredu hauek optimizazio algoritmoaren pausu bakoitzean bi eratan eguneratzen dira. Alde batetik, inurriek sortutako soluzioen kalitatea –hots, helburu funtzioaren balioa– feromona kopurua areagotzeko erabiltzen da. Bestalde, iterazioz iterazio feromona kopurua murriztuko da, naturan ematen den baporazioa simulatuz. Feromona eredua zehazteko, pausu bakoitzean feromona areagotzea eta murrizketa nola egin erabaki behar dugu.

Beraz, bi gauza behar dira ACO algoritmo bat diseinatzeko: feromona eredu bat eta soluzioak sortzeko algoritmo bat. Soluzioak sortzeko era sinplea osagaietan oinarritzen den algoritmo eraikitzaile bat erabiltzea da. Ikus dezagun hau adibide bat.

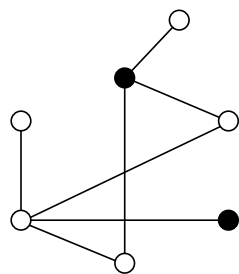
Demagun *Maximal Independent Set* (MIS) problema ebatzi nahi dugula. Problema honen soluzioak bektore bitarren bidez kodetzen ditugu eta, hortaz, bektoreen posizioak soluzioen osagaitzat har ditzakegu. Posizio bakoitzak bi balio posible har ditzake, 0 edo 1. Soluzio bat sortzeko, inurri artifizial bakoitzak, hasteko, soluzio bektorearen lehenengo posizioko balioa 0 edo 1 den aukeratu beharko du. Horretarako, uneko feromona kopurua hartuko du aintzat, probabilitate handiagoa esleituz feromona gehiago duen aukerari; behin lehenengo posizioko balioa finkaturik, bigarren posizioan jarriko du arreta da eta, lehenengo pausuan bezala, balio bat (0 edo 1) probabilitatikoki aukeratu du feromona kopuruan oinarrituz. Prozesu bera soluzio osoa sortu arte errepikatuko da.

Adibide honetan, feromona eredua matrize sinple baten bidez inplementa daiteke, zutabe bakoitzak soluzio bektorearen posizio bat adierazten duelarik. Bestalde, matrizeak bi errenkada izango ditu, posizio bakoitzean 0 eta 1 balioek duten feromona kopurua gordetzeko.

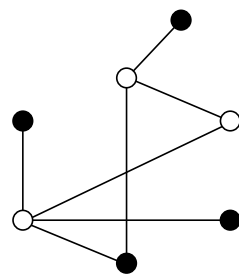
Feromona eredu honen erabilera argitzeko MIS problema erabili beharrean, antzerakoa den beste problema bat erabiliko dugu: *Minimum Dominating Set* (MDS). Laburki azalduz, grafo bat emanda, nodoen azpimultzo bat menderatze-multzoa da *dominating set*, ingelesez– baldin eta azpimultzoan ez dauden nodo guztiak, gutxienez, azpimultzoko nodo bati konektatuta badaude. Grafo bat emanik, MDS problema, kardinalitate minimoko menderatze-multzoa topatzean datza. 3.9 irudian problema honetarako hiru soluzio ikus daitezke.

Lehenik, ausazko grafo bat erakiko dugu MDS problemaren instantzia bat definitzeko.

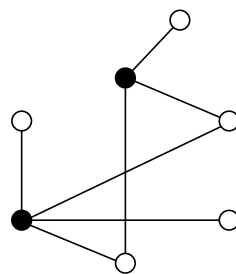
```
> n <- 10
> rnd.graph <- aging.ba.game (n, 0.5, 0, 2, directed=FALSE)
> mdsp <- mdsProblem(graph=rnd.graph)
```



(a) Soluzio hau bider-
aezina da, menderatze-
multzoa ez baita



(b) 4 tamainako
menderatze-multzoa



(c) 2 tamainako
menderatze-multzoa

3.9 irudia Irudiak MDS problemarako 3 soluzio jasotzen ditu –beltzez adierazita dauden nodoak–. Lehenengoa (ezkerrean dagoena), ez da bideragarria, soluziokoa ez den nodo bat ez baitago konektatuta soluzioko nodo batekin ere. Bigarren soluzioa bideragarria da, baina ez optimoa. Azken soluzioa optimoa da, ez baitago 1 tamainako soluzio bideragarririk.

Bigarren pausuan, feromona eredua eraikitzeke matrizea hasieratu behar dugu. Feromona eredu mota hau metaheuR paketeko `VectorPheromone` klasearen bidez dago inplementaturik. Ohikoena balio finko batekin hasieratzea da. Era honetan osagai guztiak balio berdina dute eta, beraz, aukera posible guztien probabilitatea berdina izango da. Gogoratu gure adibidean feromona ereduaren matrizeak bi errenkada dituela, soluzioak bektore bitarrak direlako.

```
> init.trail <- matrix (rep(1, 2*n), ncol=n)
> evaporation <- 0.1
> pheromones <- vectorPheromone(binary=TRUE,
+                               initial.trail=init.trail,
+                               evaporation.factor=evaporation)
> pheromones@trail

##      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10]
## [1,]    1    1    1    1    1    1    1    1    1    1
## [2,]    1    1    1    1    1    1    1    1    1    1
```

Aurreko kodean ikus daitekeen bezala, feromona eredua guztiz zehazteko, `evaporation.factor` parametroa finkatu behar da. Parametro hau feromonaren lurrunketarekin dago erlazionatuta eta matrizean dauden balioak pausu bakoitzean zenbat murriztuko diren adierazten du; balio hau kontutan izanik, baporazioa evaporate funtzioa erabiliz egiten da.

```
> evaporate(pheromones)
> pheromones@trail

##      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10]
## [1,] 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9
## [2,] 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9 0.9
```



```

> evaporate(pheromones)
> pheromones@trail

##      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10]
## [1,] 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81
## [2,] 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81 0.81

```

Esan dugun bezala, inurriek feromona ereduak soluzioak eraikitzeke erabiltzen dute. Soluzioak `buildSolution` funtzioaren bitartez egiten da.

```

> buildSolution(pheromones, 1)

## [[1]]
## [1] TRUE TRUE FALSE FALSE TRUE TRUE FALSE TRUE TRUE
FALSE

```

Inurriek ingurunetik ibiltzen diren heinean feromona uzten dute eta, era berean, inurri artifizialek soluzioak eraikitzen dutenean feromona kopurua handitzen dute; ereduaren eguneraketa hau `updateTrail` funtzioa erabiliz egiten da.

```

> solution <- buildSolution(pheromones, 1)[[1]]
> eval <- mdsP$evaluate(solution)
> eval

## [1] 4

> updateTrail(object=pheromones, solution=solution, value=eval)
> pheromones@trail

##      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10]
## [1,] 4.81 4.81 0.81 0.81 4.81 4.81 4.81 0.81 0.81 4.81
## [2,] 0.81 0.81 4.81 4.81 0.81 0.81 0.81 4.81 4.81 0.81

```

Ikus daitekeen bezala, zutabe bakoitzean errenkada bati (inurriak aukeratutako balioari dagokionari, hain zuzen) soluzioaren helburu funtzioaren balioa gehitu zaio, inurriek utzitako lorratza irudikatuz.

Elementu guzti hauekin, ACO sinple bat sor dezakegu. Baina lehenik eta behin, MDS-aren instantzia handi bat sortuko dugu.

```

> n <- 100
> rnd.graph <- aging.ba.game(n, 0.5, 0, 3, directed=FALSE)
> mdsp <- mdsProblem(graph=rnd.graph)
> init.trail <- matrix (rep(1, 2*n), ncol=n)
> pheromones <- vectorPheromone(binary=TRUE,
+                               initial.trail=init.trail,
+                               evaporation.factor=evaporation)

```

Orain, 500 inurri simulatuko ditugu; bakoitzak soluzio bat sortuko du eta egindako *bidean* feromona utziko du. Algoritmoaren pausu bakoitzean inurri bat simulatuko dugu eta haren ibilbidea amaitzean feromona *lurrundu* egingo dugu.

3.10 irudia ACO sinplearen eboluzioa MDS problema batean.

```
> num.ant <- 500
> sol.evaluations <- vector()
> for (ant in 1:num.ant) {
+   solution <- mdsp$correct(buildSolution(pheromones, 1)[[1]])
+   eval <- mdsp$evaluate(solution)
+   updateTrail(pheromones, solution, eval)
+   evaporate(pheromones)
+   sol.evaluations <- c(sol.evaluations, eval)
+ }
```

3.10 irudiak algoritmoaren eboluzioa erakusten du. Irudian, lehenengo inurriek sortutako soluzioen helburu funtzioaren balioak oso ezberdinak direla ikus daiteke. Alabaina, simulatutako inurri kopurua handitzen den heinean bariantza murriztu egiten da eta, amaieran, prozedurak soluzio bakar batera konbergitzen du. Edonola ere, soluzio hori ez da hasieran lortutakoak baino hobe.

Portaera hau sakonago aztertu ezker ondokoa ondorioztatzen da: nahiz eta naturan honela gertatu, optimizazioaren ikuspegitik, inurri guztiek feromona eredu eguneratzea ez da hurbilketarik onena. Hori dela eta, normalean beste estrategia bat erabili ohi da. Inurriak banan-banan simulatu orde, tamaina zehatz bateko inurri-kolonia bat sortzen da eta, iterazio bakoitzean, inurritegiko inurri guztiek sortutako soluzioetatik bakar bat erabiltzeko da feromona kopurua eguneratzeko. Soluzio bakar hau aukeratzeko bi estrategia ezberdin erabili daitezke:

- Iterazioko soluziorik onena aukeratu- Inurriek uneko iterazioan sortutako soluzioetatik onena aukeratzen da eta soluzio hori bakarrik erabiltzen da feromona kopurua eguneratzeko. Kasu honetan helburu funtzioaren arabera egitea ez da beharrezkoa, bakarrik soluziorik onena erabiltzen baita eguneraketan. Hori dela eta, ohikoa da balio finko bat erabiltzea.
- Bilaketa prozesu osoan topatutako soluziorik aukeratu- Hainbat kasutan, bilaketa soluzio on baten inguruan areagotzea interesatuko zaigu. Kasu horietan, feromona ereduaren eguneraketa bilake prozesu osoan zehar topatu den soluziorik onena erabiliz egin daiteke. Aurreko puntuan bezala,

Inurri-kolonien algoritmoa

```

1  input:      build_solution,      evaporate,      add_pheromone ,
      initialize_matrix eta stop_criterion operadoreak
2  input: k_size koloniaren tamaina
3  output: opt_solution
4  pheromone_matrix = initialize_matrix()
5  while !stop_criterion()
6    for i in 1:k_size
7      solution = build_solution(pheromone_matrix)
8      pheromone_matrix = add_pheromone(pheromone_matrix, solution)
9      if solution > opt_solution baino hobe da
10         opt_solution = solution
11    fi
12  done
13  pheromone_matrix = evaporate(pheromone_matrix)
14 done

```

Algoritmoa 3.2: Inurri-kolonien algoritmoaren sasikodea

eguneraketak ez du zertan helburu funtzioaren balioarekiko proportzionala izan.

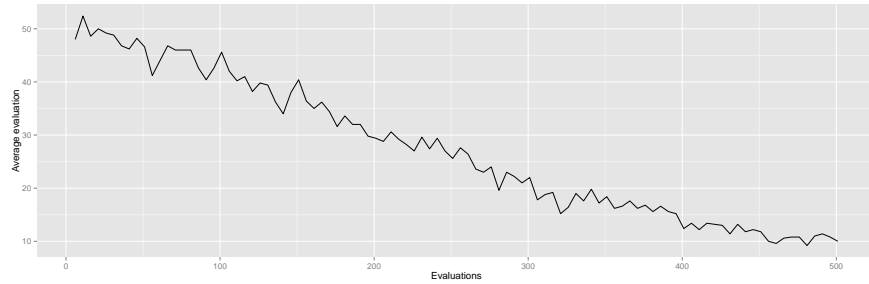
Aldaketa honekin oinarritzko ACO algoritmoaren sasikodea defini dezakegu (ikusi 3.2 algoritmoa). `basic.aco` funtzioak Oinarritzko ACO-a inplementatzen du eta, hortaz, lehen sortutako MDS problema ebazteko erabil dezakegu. Ohiko parametroez gain, `basic.aco` zehazteko, argumentu hauek definitu behar dira.

- `nants` - Kolonia zenbat inurri artifizialek osatuko duten.
- `pheromones` - Feromona eredua.
- `update.sol` - Nola eguneratuko dugun feromona eredua. Hiru aukera daude: `'best.it'`, iterazio bakoitzean sortutako soluziorik onena erabili; `'best.all'`, bilaketan zehar lortutako soluziorik onena erabili edo `'all'`, sortutako soluzio guztietaz baliatu.
- `update.value` - Balio bat finkatzen bada, eguneraketa guztietan feromona balio hori gehitzen zaio ereduari; NULL bada, helburu funtzioa erabiltzen da. Kontutan hartu problema batzuetan helburu funtzioak negatiboak direla eta feromona eredu batzuetan balio positiboak eta negatiboak ezin direla nahastu, arazoak egon daitezkeelako probabilitateak kalkulatzeko. Hori dela eta, helburu funtzioaren zeinua kontutan hartu behar da feromona eredua hasieratzerakoan.

```

> args <- list()
> args$evaluate <- mdsp$evaluate
> args$nants <- 5
>

```



3.11 irudia Oinarritzko ACO algoritmoaren eboluzioa MDS problema batean.

```
> init.value      <- 1
> initial.trail   <- matrix(rep(init.value, 2*n), nrow=2)
> evapor         <- 0.1
>
> pher <- vectorPheromone(binary=TRUE,
+                          initial.trail=initial.trail,
+                          evaporation.factor=evapor)
>
> args$pheromones <- pher
> args$update.sol  <- "best.it"
> args$update.value <- init.value / 10
> args$non.valid   <- "correct"
> args$valid       <- mdsp$is.valid
> args$correct     <- mdsp$correct
>
> args$resources   <- cResource(iterations=100)
> args$verbose     <- FALSE
>
> results.aco <- do.call(basicAco, args)
> plotProgress(results.aco) + labs(y="Average evaluation")
```

3.11 irudiak oinarritzko ACO algoritmoaren progresioa irudikatzen du. Algoritmo honek, lehen inplementatu dugun ACO sinpleak aztertzen duen soluzio kopuru berdina aztertzen du baina, aurrekoa ez bezala, iterazioz iterazio soluzioa hobetuz doa. Grafikoan batazbesteko *fitness*-ak aldakuntza handia duela ikus daiteke. Hau oso kolonia txikia erabili dugulako da –5 inurri bakarrik–. Balio hori handitzen badugu, progresioa leunagoa izango da –eta, ziurrenik, emaitzak hobeak izango dira–, baina ebaluazio gehiago beharko ditugu.

ACO algoritmoen mamiak soluzioen eraikuntzan datza eta, hortaz, soluzioen osagaien definizioa oso garrantzitsua da; osagaiak ez badute problemaren izaera kontutan hartzen, feromona ereduak ez du soluzioen informazioa behar bezala jasoko eta zentzua galduko du. Hau agerian gelditzen da jarraian dagoen adibidean.

Demagun LOP problema bat ebazteko ACO algoritmo bat erabili nahi dugula. Problema honetarako soluzioak permutazioen bidez kodetzen di-

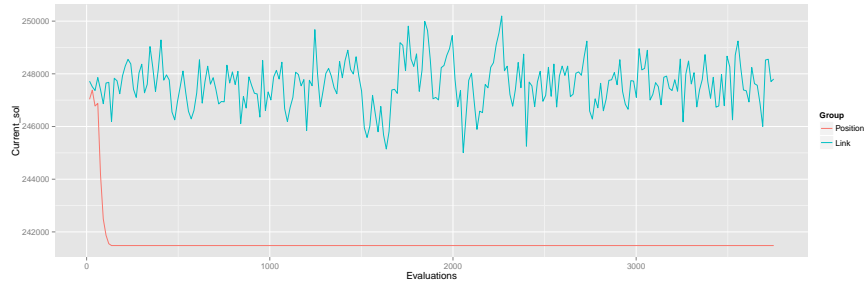
tugunez, kodeketa mota honentzat egokia den feromona eredu bat behar dugu. Lehen ideia bazela, bektoreekin erabilitako eredu bera erabil dezakegu, soluzioen eraikuntzan permutazioak sortzeko behar diren aldaketak egiten baditugu betiere. Hau da, feromona eredu matrize karratu batean gordeko dugu. Bertan, soluzioen posizio bakoitzeko (errenkadak) balio posible bakoitzari (zutabeak) dagokion feromona kopurua gordeko dugu. Gero, soluzioak osatzerakoan, urrats bakoitzean, aurretik aukeratu gabeko balioetatik bat aukertuko dugu, bakoitzaren feromona kopurua kontutan hartuz, noski. Eredu honek UMDA definitzeko erabili genuen matrizearen antzerako bat erabiltzen du.

Dena dela, hau ez da feromona eredu posible bakarra. TSP probleman ikusi genuen permutazioek grafo osoko ziklo Hamiltoniarrak adierazten dituztela. Hau da, n nodoko grafo oso bat izanik, edozein permutaziok n nodoak behin eta soilik behin bisitatzen dituen ibilbide bat adierazten du. Beraz, permutazioak osatzeko, nodoak lotzen dituzten ertzak erabil ditzakegu.

Idea hau erabiliz beste feromona eredu bat planteatu dezakegu. Eredu honek ere matrize karratu bat erabiliko du, baina matrizearen interpretazioa – eta, hortaz, soluzioen eraikuntza – ezberdina da. Kasu honetan, matrizeak grafoaren ertzak adierazten ditu. Alegia, matrizearen (i, j) posizioan i nodotik j nodorako bideari dagokion feromona kopurua gordeko dugu. Adibidez, 3421 permutazioari dagozkion matrizeko posizioak $(3, 4)$; $(4, 2)$ eta $(2, 1)$ dira – problemaren arabera, $(1, 3)$ posizioa ere erabiltzea interesgarria izan daiteke, baina guk ez dugu aintzat hartuko gure adibidean–.

Bi eredu hauek metaheuristikaren liburutegian daude inplementaturik, `PermuPosPheromone` eta `PermuLinkPheromone` objektuetan. Jarraian, bi eredu hauek LOP problema bat ebazteko erabiliko ditugu eta emaitzak alderatuko ditugu.

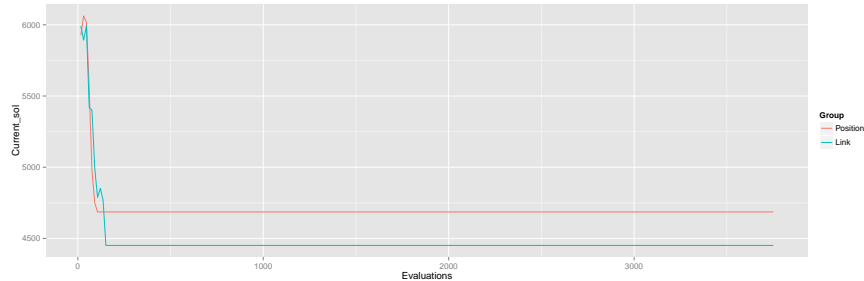
```
> n <- 100
> rnd.mat <- matrix(round(runif(n^2)*100), n)
> lop <- lopProblem(matrix=rnd.mat)
>
> args <- list()
> args$evaluate <- lop$evaluate
> args$nants <- 15
>
> init.value <- 1
> initial.trail <- matrix(rep(init.value, n^2), n)
> evapor <- 0.9
>
> pher <- permuLinkPheromone(initial.trail=initial.trail,
+                             evaporation.factor=evapor)
> args$pheromones <- pher
> args$update.sol <- "best.it"
> args$update.value <- init.value / 10
> args$resources <- cResource(iterations=250)
> args$verbose <- FALSE
>
> aco.links <- do.call(basicAco, args)
>
```



3.12 irudia Oinarrizko ACO algoritmoaren eboluzioa LOP problema batean.

```
> args$pheromones <- permuPosPheromone(initial.trail, evapor)
> aco.pos <- do.call(basicAco, args)
>
> plotProgress(list("Position"=aco.pos, "Link"=aco.links))
```

3.12 irudiak esperimentuaren emaitza erakusten du. Grafikan argi ikus daiteke noden arteko loturak soluzioen osagaitzat hartzen direnean, bilaketak ez duela aurrera egiten. Soluzioaren osagaiak posizioak direnean, berriz, iterazioz iterazio soluzioa hobetu egiten da. Honen arrazoia sinplea da: LOP problemetan, soluzioko osagaien posizio absolutuak dira aspektu garrantzitsuenak, eta ez osagaien arteko auzokidetasuna.



3.13 irudia Oinarrizko ACO algoritmoaren eboluzioa TSP problema batean.

TSP problemarako, ordea, ertzetan oinarritzen den eredua egokia da, izan ere, zein hiritik zein hirira joan behar dugun interesatzen zaigu. Jarraian hau frogatzeko esperimentu bat egingo dugu; emaitzak 3.13 irudian daude.

```
> url <- system.file("bays29.xml.zip", package="metaheuristic")
> cost.matrix <- tsplibParser(url)
> n <- ncol(cost.matrix)
> tsp <- tspProblem(cmatrix=cost.matrix)
>
```

```

> args <- list()
> args$evaluate <- tsp$evaluate
> args$nants <- 15
>
> init.value <- 1
> initial.trail <- matrix(rep(init.value, n^2 ), n)
> evapor <- 0.9
>
> pher <- permuLinkPheromone(initial.trail=initial.trail,
+                             evaporation.factor=evapor)
> args$pheromones <- pher
> args$update.sol <- "best.it"
> args$update.value <- init.value / 10
> args$resources <- cResource(iterations=250)
> args$verbose <- FALSE
>
> aco.links <- do.call(basicAco, args)
>
> args$pheromones <- permuPosPheromone(initial.trail, evapor)
> aco.pos <- do.call(basicAco, args)
>
> plotProgress (list("Position"=aco.pos, "Link"=aco.links))

```

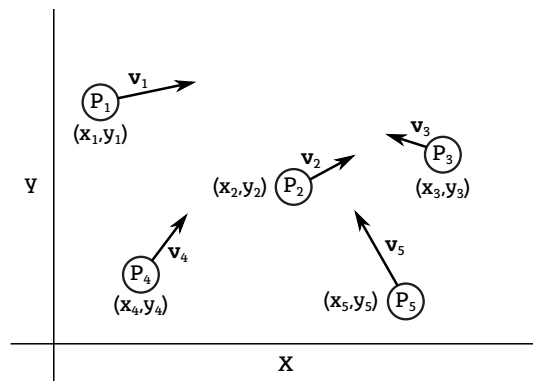
Ikus daitekeen bezala, TSP-aren kasuan bi ereduak problemaren informazioa ondo adierazteko gai dira eta, hortaz, bilaketak bi kasuetan aurrera egiten du.

Orain arte ikusi ditugun adibide guztietan feromonak bakarrik erabili ditugu soluzioak eraikitzeke. Oinarritzko algoritmoan horrela izan arren, problema zehatz bat ebatzi behar denean, informazio heuristikoa ere sartu ohi da, posible den kasuetan. Adibide gisa, TSPrako algoritmo eraikitzaile gutziatsu tipikoan, hurrengo hiria hautatzeko hirien arteko distantzia erabiltzen da. Beraz, goiko adibidean, soluzioak eraikitzean, hiri batetik bestera joateari dagokion feromona kopurua soilik erabili beharrean, hirien arteko distantzia ere kontutan har dezakegu osagai bakoitzaren probabilitatea definitzerakoan.

3.2.2 Particle Swarm Optimization

Intsektu sozialen portaera *swarm* adimenaren adibide tipikoa da, baina ez da bakarra; animalia handiagotan ere inspirazioa bilatu izan da inspirazioa sarrita. Esate baterako, txori-saldotan ehundaka indibiduo era sinkronizatuan mugitzen dira haien arteak talkarik egin gabe. Multzo horietan ez dago taldea kontrolatzen duen indibiduorik; txori bakoitzak bere inguruan dauden txorien portaera aztertzen du eta honen arabera berea egokitzen du. Era horretan, arau single batzuk² besterik ez dira behar sistema osoa antolatzeke.

² txori batetik gertuegi banago, urrundu egiten naiz, adibidez



3.14 irudia PSO algoritmoak erabiltzen dituen partikulen adibidea. Partikula bakoitzak bere kokapena (x_i, y_i) eta bere abiadura (v_i) du

Animali talde hauen portaera inspiratuz hartuta, 1995ean Kennedy eta Eberhartek *Particle Swarm Optimization* (PSO) algoritmoa proposatu zuten [23], optimizazio numerikoko problemak ebazteko³. Algoritmoaren ideia sinplea da oso; bilaketa espazioan barrena mugitzen den partikula multzo bat erabiltzen da bilaketa aurrera eramateko.

Uneoro partikula bakoitzak kokapen eta abiadura zehatz bat izango du, 3.14 irudian erakusten den bezala. Partikula bakoitzaren posizioak problemarako soluzio bat adieraziko du. Irudiko adibidean bilaketa espazioak bi aldagai besterik ez ditu (X eta Y), eta sisteman 5 partikula daude, P_1 , P_2 , P_3 , P_4 eta P_5 -era.

Bilaketa gauzatzeko, PSO algoritmoaren iterazio bakoitzean partikula guztien kokapena eguneratzen da, haien abiadurak erabiliz. Partikulen abiadurak finko mantendu ezker, denak infinitura joango lirateke. Hori ez gertatzeko, iterazio bakoitzean abiadura ere eguneratu behar da; azken eguneraketa hone-tan datza, hain zuzen, algoritmoaren gakoa.

Lehen aipatu bezala, algoritmoaren inspirazioa txori-saldoen portaera da. Txori bakoitzak nora mugitu behar den erabakitzeke, bere ingurunean dau-den txoriei erreparetzen die. Era berean, algoritmoan partikula baten abiadura eguneratzeko partikula horrek duen informazioa ez ezik, inguruneke partikulek dutena ere erabiltzen da. Hain zuzen ere, i . partikularen abiadura eguneratzeko ondoko ekuazioa aplikatzen da:

$$\mathbf{v}_i(t) = \mathbf{v}_i(t-1) + C_1 \rho_1 [\mathbf{p}_i - \mathbf{x}_i(t-1)] + C_2 \rho_2 [\mathbf{p}_g - \mathbf{x}_i(t-1)]$$

Ekuazio hau hiru osagaiz dago osatuta:

³ Hau da, atal honetan ikusiko dugun algoritmoak bektore errealekin dihardu. Edonola ere, problema konbinatorialak ebazteko PSO bertsioak ere aurki daitezke.

- $\mathbf{v}_i(t-1)$ - i . partikulak aurreko iterazioan zeukan abiadura; termino honek partikularen inertzia adierazten du.
- $C_1\rho_1[\mathbf{p}_i - \mathbf{x}_i(t-1)]$ - Termino honetan \mathbf{p}_i -k i . partikulak bilaketa prozesuan topatu duen soluziorik onena adierazten du –ingelesez *personal best* deritzona–. Termino honek eguneraketaren alderdi *kognitiboa* adierazten du, hots, partikulak berak jasotako informazioa. C_1 konstantea terminoaren eragina definitzeko erabiltzen da eta ρ_1 soluzioaren tamainako ausazko bektore bat da.
- $C_2\rho_2[\mathbf{p}_g - \mathbf{x}_i(t-1)]$ - Termino honetan \mathbf{p}_g -k i . partikularen inguruan dauden partikulek bilaketa prozesuan topatu duten soluziorik onena adierazten du –ingelesez *global best* deritzona–. Termino honek eguneraketaren alderdi *soziala* adierazten du, hots, beste partikulengandik jasotako informazioa. C_2 konstantea terminoaren eragina definitzeko erabiltzen da eta ρ_2 soluzioaren tamainako ausazko bektore bat da.

Ekuazioaren azken terminoak partikulen arteko elkarrekintza simulatzen du. Horretarako, partikulen ingurune-egitura definitu behar da. Kasu honetan, ingurune kontzeptua ez da bilaketa lokalean erabiltzen den berdina, partikula bakoitzaren ingurunea aurrez ezarritakoa baita; ez du partikularen kokapenarekin zerikusirik, alegia. Partikula bakoitzaren ingurunea grafo baten bidez adieraz daiteke, non bi partikula konektatuta dauden baldin eta soilik baldin bata bestearen ingurunean badaude.

Lehenengo hurbilketa, grafo osoa erabiltzea da, hots, edozein partikularen ingurunean beste gainontzeko partikula guztiak egongo dira; hurbilketa sofistikatuago batzuk, grafo osoa erabili beharrean, beste zenbait topologia erabiltzen dituzte (eraztunak, izarrak, toroideak, etab.).

Abiaduren eguneraketari dagokionez, aurreko ekuazioa zuzenean erabiltzen bada, abiadurak dibergitzeko joera izaten du, alegia, abiaduraren modulua gero eta handiagoa izango da. Arazo hau ekiditeko, kalkulaturako abiadurari muga bat ezartzea ohikoa izaten da.

Behin uneko iterazioaren abiadura kalkulaturik, abiadura, partikularen kokapena eguneratzeko erabiltzen da:

$$\mathbf{x}_i(t) = \mathbf{x}_i(t-1) + \mathbf{v}_i(t-1)$$

Iterazio bakoitzean lortutako soluzio –hots, posizio– berriak ebaluatu eta, behar izanez gero, partikulen *personal* (\mathbf{p}_i) eta *global best* (\mathbf{p}_g) balioak eguneratu behar dira. Urrats guzti hauek 3.2.2 algoritmoan biltzen dira.

Algoritmo hau `metaheuristic` paketeko `basicPso` funtzioan inplementaturik dago. Erabilera erakusteko, optimizazio numerikoan *benchmark* gisa erabiltzen den Rosenbrock funtzioa erabiliko dugu; problema sortzeko `rosenbrockProblem` funtzioa erabiliko dugu.

```
> n <- 10
> rsb.problem <- rosenbrockProblem(size=n)
```

PSO algoritmoa

```

1  input:      initialize_position,      initialize_velocity,
      update_velocity, evaluate eta stop_criterion operadoreak
2  input: num_particles partikula kopurua
3  output: opt_solution
4  gbest = p[1]
5  for each i in 1:num_particles do
6    p[i]=initialize_position(i)
7    v[i]=initialize_velocity(i)
8    pbest[i]=p[i]
9    if evaluate(p[i])<evaluate(gbest)
10     gbest = p[i]
11  fi
12 done
13 while !stop_criterion() do
14   for each i in particle_set
15   do
16     v[i] = update_velocity(i)
17     p[i] = p[i] + v[i]
18     if evaluate(p[i])<evaluate(pbest[i])
19      pbest[i]=p[i]
20   fi
21   if evaluate(p[i])<evaluate(gbest)
22    gbest=p[i]
23   fi
24   done
25 done
26 opt_solution = gbest

```

Algoritmoa 3.3: *Particle Swarm Optimization* algoritmoaren sasikodea

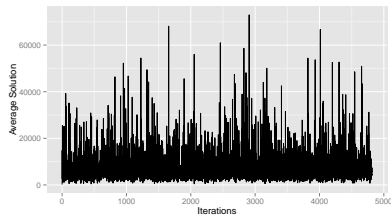
Algoritmoa aplikatu ahal izateko, partikula kopurua, hasierako kokapenak eta abiadurak, abiadura maximoa, *personal best* koefizientea eta *global best* koefizientea ezarri behar ditugu:

```

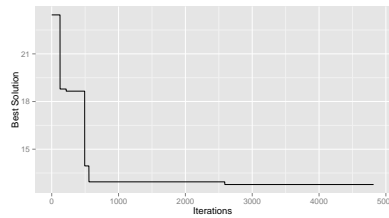
> nparticles <- 100
> ipos <- lapply(1:nparticles,
+               FUN=function (i) {
+                 return(runif(n))
+               })
> args <- list()
> args$initial.positions <- ipos
> args$initial.velocity <- 0
> args$max.velocity <- 5
> args$c.personal <- 2
> args$c.best <- 4

```

Horrez gain, helburu funtzioa eta baliabide konputazionalak ere finkatu behar ditugu.



(a) Batazbesteko soluzioaren progresioa



(b) Soluzio onenaren progresioa

3.15 irudia PSO algoritmoaren progresioa Rosenbrock probleman

```
> args$evaluate <- rsb.problem$evaluate
> args$resources <- cResource(time=10)
>
> res.pso <- do.call(basicPso, args)
>
> plotProgress(res.pso, x="iterations", y="best") +
+   labs(y="Best Solution")
> plotProgress(res.pso, x="iterations") +
+   labs(y="Average Solution")
```

3.15 irudiak bilaketaren progresioa erakusten du. Ezkerreko grafikoan partikulen batazbesteko ebaluazioa erakusten da, iterazioz iterazio; eskubikoan, berriz, bilaketan zehar topatutako soluziorik onenaren *fitness*-aren progresioa erakusten da. Beste algoritmoetan ez bezala, partikulen helburu funtzioen balioek ez dute konbergitzen; hala eta guztiz ere, bilaketak aurrera egiten du eta, azkenean, optimotik oso hurbil gelditzen da –Rosenbrock funtzioaren balio minimoa 0 da–.

Kapitulua 4

Algoritmoen konparaketa: Esperimentazioa

Aurreko kapituluetan problemak formalizatzen eta horiek optimizatzeko erabiltzen diren algoritmo heuristiko eta metaheuristiko esanguratsuenak implementatzen ikasi dugu. Problema erreal baten aurrean gaudenean, ordea, ezagutzen ditugun algoritmo guztietatik, zein da egokiena (eraginkorrena)? Nola egin behar dugu aukeraketa? Kapitulu honen xedea galdera horiei erantzutea izango da.

No free lunch teoremak [40] dio ez dagoela optimizazio problema guztiak ebazteko onena den algoritmorik. Beste era batera esanda, problema bakoitzean, algoritmo ezberdin bat izan daiteke egokiena. Horrez gain, algoritmoen parametroei esleitzen dizkiegun balioek ere eragin handia dute euren portaeran eta ondorioz emaitzetan.

Hori dela eta, algoritmo berriak proposatzen direnean ala problema berrien aurrean gaudenea, algoritmoen eraginkortasuna aztertu behar izaten da. Algoritmoen eraginkortasuna konparatzeko bide ohikoenetako bat esperimentazioa da. Ondorengo ataletan optimizazio arloan esperimentazio prozesu bat nola burutzen den azalduko dugu, eta kontuan izan beharreko ezinbesteko urratsak aztertuko ditugu:

- Problemaren instantzia ezberdin sorta bat bildu
- Konparaketaren baldintzak definitu
- Parametroen aukeraketa egin
- Algoritmoak exekutatu eta emaitzak aztertu
- Konparaketa grafikoa egin
- Analisi estatistikoa gauzatu

Esperimentazio prozesua errazago ulertzeko, jarraian azaltzen den adibidearekin ilustratuko ditugu urrats desberdinak.

Adibidea 4.1 *Demagun Saltzaile Bidaiariaren Problema (TSP) optimizatzeko algoritmorik eraginkorrena aukeratu nahi dugula. Zehazki, instantzia txikientzako (100 hiri baino gutxiagokoak) emaitzarik onena itzultzen digun algoritmoa aukeratu nahi dugu.*

Aditu batek, bilaketa lokala (LS), algoritmo genetikoak (GA) eta inurri-kolonien optimizazio algoritmoak (ACO) konparatzeko esan digu, TSPan oso eraginkorrak direla argudiatuz. Adituaren gomen-dioa aintzat hartuta, 3 algoritmo horietatik onena zein den erabakitzen lagunduko digun konparaketa esperimentalak burutuko dugu.

4.1 Problemaren instantzien aukeraketa

Esperimentazio prozesu batean, lehenik eta behin, algoritmoak konparatzeko erabiliko ditugun problemaren instantziak aukeratu behar ditugu. Sarreraren esan dugu, algoritmoen eraginkortasuna aldatu egiten dela problema mota batetik bestera, eta jakina da gauza bera gertatzen dela instantzia ezberdinak aztertzen baditugu. Algoritmo bat TSP problema bat ebazteko oso ona izan arren, aukera txarra izan daiteke QAP problema bat ebazteko. Era berean, 100 tamainako TSP simetrikoko bat ebazteko algoritmo onenak ez du zertan onena izan 1000 tamainako TSP asimetrikoko bat optimizatzeko. Hortaz, esperimentuak egin aurretik, zer nolako instantziak ebatzi nahi ditugun erabaki behar dugu, hau da, ezaugarri batzuk finkatu.

Behin haien ezaugarriak erabakita, ereduak den instantzia multzo bat bildu behar da, ebatzi nahi dugun instantzia motaren antzeko problema-aleak aukeratuz, ahal den neurrian. Problema testuinguru errealean ebatzi behar badira, testuinguru horretan sortutako benetako instantziak erabiltzea da egokiena. Instantzia errealeak lortzeko aukerarik eduki ezean, bi aukera daude:

1. **Instantziak simulatzea.** Aukeretako bat, instantzia errealean antzerakoak artifizialki sortzea da. Kasu honetan, benetakoen ahal bezain antzerakoak diren instantziak simulatu nahi ditugunez, problema sakonki aztertuko beharko da.
2. **Benchmarkak erabiltzea.** Bigarren aukera, publikoak diren instantzien bildumak edo *Benchmark*ak erabiltzea da. Aukera honek abantailak eta desabantailak dauzka. Alde batetik, *benchmark*ak asko erabiltzen dira eta, hortaz, bertan dauden instantzien oso soluzio onak (optimoak, kasu batzuetan) ezagunak dira. Hau, ikerketa arloan, algoritmo berri baten portaera aztertzeko testuinguru egokia da. Bestalde, bilduma horietan dauden instantziak problema klasikoak dira, eta hortaz, testuinguru errealean, askotan, ez dira erabilgarriak izango.

Adibidea 4.2 Gure adibidean, aukeratutako hiru algoritmoek - bilaketa lokala (LS), algoritmo genetikoak (GA) eta inurri-kolonia algoritmoek (ACO)- 100 tamaina edo gutxiagoko instantzietan duten portaera aztertu nahi dugu. Testuinguru teoriko batetara mugatuko gara, eta beraz, TSPrako instantziak biltzen dituen TSPLib benchmark- era joko dugu zuzenean ^a. Zehazki, ondorengo instantziak aukeratu ditugu:

gr24 bays29 att48
eil51 berlin52 brazil58
st70 eil76 rat99

^a <http://comopt.ifl.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95/>

Instantziak zuzenean repositoriotik kargatzeko **metaheuR** paketeko **tsplib** Parser funtzioa erabiliko dugu, aurreko kapituluetan bezala:

```
> instances <- c("gr24.xml.zip", "bayg29.xml.zip", "att48.xml.zip",
+               "eil51.xml.zip", "berlin52.xml.zip", "brazil58.xml.zip",
+               "st70.xml.zip", "eil76.xml.zip", "rat99.xml.zip")
>
> tsplib.problems <- lapply (instances,
+   FUN=function(x){mat <- tsplibParser(
+       paste("http://comopt.ifl.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95/XML-TSPLIB/instances/", x),
+       return(tsplibProblem(mat))
+   })
```

Honenbestez, TSP problemaren 9 instantzia horiek **tsplib.problems** izeneko zerrendan gorde ditugu, bakoitza posizio batean.

4.2 Konparaketaren baldintzak

Optimizazio algoritmo batzuk konparatzen hasi baina lehen, ezinbestekoa da zenbait baldintza ezartzea, alderaketa justua izan dadin.

Hasteko, esperimentazioaren helburua algoritmoak konparatu eta egokiena aukeratzeko laguntzea da, baina, zer esan nahi du algoritmo bat egokia izateak? Galdera horri erantzutea ez da berehalakoa, testuinguru bakoitzean beharrak ezberdinak izaten baitira. Diseinu problemetan esaterako, lortutako soluzioa (diseinua), behin eta berriz erabiliko da, beraz, merezi du denbora gehiago ematea optimotik ahalbait hurbilen dagoen soluzio bat lortzeko. Kontrol problemetan, aldiz, oso soluzio onak lortzea baino garrantzitsuagoa izaten da ahalik eta denbora laburrenean "nahiko onak" diren soluzioak lortzea.

Gainera, algoritmoen errendimendua modu bidezkoan neurtzeko, esperimentazioa diseinatzerako garaian, **algoritmo guztientzat gelditze irizpide bakarra eta berdina finkatu behar da**. Mundu errealeko aplikazioetan

denbora izan ohi da irizpide erabiliena. Kriterio hori, ordea, algoritmo baten exekuzio denbora, erabilitako programazio lengoaia, hardwarea eta inplementazioaren kalitatearen menpekoa da. Horregatik, ikerketa arloan, helburu funtzioaren ebaluazio kopuru maximo bat erabili ohi da gelditze irizpide gisa.

Azkenik, esperimentazioaren baldintzak guztiz definituta geratzeko, **algoritmoak zein metrikaren arabera konparatuko ditugun erabaki behar dugu**. Ohikoena, algoritmoek itzultzen dituzten azken emaitzak (*fitness*) konparatzea da. Batzuetan, ordea, soluzioaren *fitness*a gordinean erabili beharrean, beste erreferentziazko balio batekiko diferentzia erlatiboa kalkulatzeko da, adibidez erreferentzia algoritmo bat dugunean edo soluzio optimoa ezaguna denean.

Demagun algoritmo bat instantzia bati aplikatu diogula eta lortu duen *fitness* balioa 125 dela. Instantzia horretarako orainarte ezagutzen den soluziorik onena 130 bada, gure algoritmoaren performantzia $\frac{130-125}{130} = 0.038$ edo, portzentaje moduan jarrita %3.8, da. Metrika honen arabera gure algoritmoak ezagutzen den soluziorik onena %3.8an hobetu du.

Aurreko planteamendua zuzena izango da konparatzen ditugun algoritmoak deterministak baldin badira, hau da, nahi adina aldiz exekutatu ere, beti emaitza bera itzultzen badute. Baina zer gertatuko da algoritmoak estokastikoak badira? Algoritmo mota horiek, zorizko osagai bat dute eta, beraz, exekuzio bakoitzean, emaitza desberdin bat eman dezakete. Hori dela eta, algoritmo estokastikoak konparatzerakoan hainbat errepikapen egitea beharrezkoa da, jasotako emaitzak estatistiko desberdinen bitartez laburbilduz. **Algoritmo estokastikoak zenbat aldiz exekutatu behar diren ere, aurrez erabaki beharko dugu.**

Adibidea 4.3 Bai gelditze irizpidearen aukeraketari zein errepikapen kopuruari dagokionez, ez dago arau estandarrik. Gure adibidean, algoritmoak (LS, GA eta ACO) helburu funtzioaren 1000 ebaluazio ondoren geldituko ditugu, eta algoritmo-instantzia bikote bakoitza 10 aldiz exekutatu dugu. Ebaluazio metrika gisa *fitness* gordina erabiliko dugu, eta emaitza hauek aztertu ostean, baita emaitza onenak lortu dituen algoritmoarekiko *fitness* normalizatua ere.

4.3 Parametroen aukeraketa

Behin baino gehiagotan esan dugu, algoritmoen parametroentzako aukeratzeko ditugun balioak eragin handia dutela haien portaeran. Honebestez, parametro egokien aukeraketa, edo *tuninga* ingelesez, esperimentazioaren ezinbesteko urratsa da.

Estrategia sinpleena eta guk adibidean erabiliko duguna, parametro balio batzuk eskuz finkatzea da, aurretiko ezagutza edo aditu baten iritzia erabiliz.

Alabaina, zaila izaten da parametroen balio ezberdinen eragina alde zuzenetik jakitea eta gainera aukeraketa mota hau ez da guztiz justua, beraz, ez da erabiltzen normalean.

Izan ere, parametroen aukeraketa egiteko hainbat estrategia sofistikatu eta egokiagoak aurki ditzakegu literaturan [26, 7, 4]. Horien konplexutasuna dela eta, liburu honetan soilik pare bat adibide aipatuko ditugu laburki.

Estrategia ohikoena parametro konbinazio ezberdinak probatu eta alderatzea da. Kontuan hartuko diren parametro konbinazio posibleak aukeratzeko estrategia ezberdinak existitzen dira, ohikoena ingelesez *full factorial* deitzen dena izanik. Parametro bakoitzerako aukera posible zerrenda bat egin ostean, parametro guztien konbinazio guztiak aztertzen dira. Diseinu honekin parametroen espazioa ondo arakatzen dugu, baina behar diren proben kopurua esponentzialki hazten da. Bigarren adibide bezala, konturatu, izatez, parametroen egokitzapena optimizazio problema bat dela. Hau honela, badaude optimizazio prozedura bereziak parametro *tuninga* egiteko. Hori- etako bat **iRace** paketea dago inplementatuta.

Metodo sofistikuago hauek erabiltzen baditugu, parametroen aukeraketa, esperimentazio prozesu orokorraren azpi-esperimentazio bat bezala uler dezakegu eta, beraz, hau burutzeko instantziak behar ditugu. Alabaina, ezin ditugu esperimentazio orokorrean erabiliko ditugun instantzia berdinak erabili, honek emaitzetan alborapena ekar baitezake.¹ Beraz, instantzia ezberdinak erabili behar dira, baina ahal den neurian esperimentazio orokorrean erabiliko ditugun antzerakoak. Gehiago sakondu nahi duen irakurleak ondoko erreferentziako lanak begiratu ditzake: [26, 4].

Adibidea 4.4 *Gure adibidean aukeraketa mota simpleena egingo dugu, hau da, parametro batzuk eskuz finkatuko ditugu, inolako esperimentu gehigarriarik egin gabe. Hala ere, kontutan izan metodo honek ez dituela inolaz ere emaitzarik efizienteenak lortuko eta beraz, ikerketa testuinguru edo problema erreal bat optimizatu nahiko bagenu, beste edozein aukera egokiagoa izango zen. Egindako aukerak ondokoak dira:*

- **Local Search algoritmoa:**

- *Hasierako soluzioa: randomPermutation funtzioaren bidez sortutako ausazko permutazio bat izango da.*
- *Ingurunearen definizioa: ondoz-ondoko trukaketetan oinarritutako ingurunea erabili dugu (SwapNeighborhood).*
- *Inguruneako soluzio bat aukeratzeko prozedura: prozedura gutziatsu bat aplikatuko dugu, beti inguruneako soluziorik onena aukeratzen duena (greedySelector klasearen bidez).*

¹ Instantzia berdinak erabiliz gero, aukeratutako parametroak justu instantzia horientzat egokiak izango dira. Beraz, lortuko ditugun emaitzak beste edozein instantzia orokor batean izango liratekeenak baina hobeak izango dira ziurrenik, emaitzen orokortasuna murriztuz.

- **Algoritmo genetikoa:**

- *Hasierako populazioa: ausazko 100 permutaziok osatuko dute.*
- *Hautespen operadorea: aukeraketa elitista bat aplikatuko dugu.*
- *Mutazioa: soluzioak 0.01eko probabilitatearekin mutatu dira eta swapMutation klasea erabiliko da mutazioa burutzeko, permutazio bateko posizioen %20a trukatzuz.*
- *Gurutzaketa: populazioaren erdia aukeratuko da lehiaketa bidez eta hauek gurutzatuko dira permutazioentzat berezia den orderCrossover klasea erabiliz. Begiratu paketearen laguntza orriak gurutzaketa honen nondik norakoak ulertzeko.*

- **Ant Colony optimization:**

- *Inurri kopurua: 100 inurri.*
- *Feronomona eredua: VectorPheromone klasea erabiliko dugu, hasierako feronomona kopurua konstantea izanik eta 0.1eko lurrunketa maila ezarriz.*
- *Feronomona ereduaren eguneraketa: Iterazioko soluziorik onena aukeratuko da eta eguneraketa guztietan 0.1eko balio finkoa gehitzen zaio feronomona ereduari.*

Hiru kasuetan, baliagarriak ez diren soluzioak baztertuko ditugu non.valid parametroari "discard" balioa emanaz.

Orain, aurreko ataleko erabaki guztiak kontuan hartuz, aukeratutako hiru algoritmoak konparatzeko esperientazioa burutzeko kodea implementatuko dugu. Hasteko, bilaketa lokalaren esperientazioa kodetzen da:

```
> num.rep <- 10
> num.evaluations <- 1000
> resources <- cResource(evaluations=num.evaluations)
> runLS <- function (problem) {
+   # Arguments to run the local search with swap neigh.
+   args <- list()
+   args$evaluate <- problem$evaluate
+   args$selector <- greedySelector
+   args$non.valid <- "discard"
+   evaluations <- vector()
+   args$do.log <- FALSE
+   args$verbose <- FALSE
+   args$resources <- resources
+   evaluations <- vector()
+   for (i in 1:num.rep) {
+     init.sol <- randomPermutation(problem$size)
+     args$initial.solution <- init.sol
+     args$neighborhood <- swapNeighborhood(init.sol)
+     message("Running Swap LS, repetition #", i)
+     res <- do.call(basicLocalSearch, args)
+     evaluations <- c(evaluations, getEvaluation(res))
+   }
+ }
```

```

+   }
+   return(evaluations)
+ }

```

Era berean, antzerako kodeak erabiliko ditugu algoritmo genetiko eta inurri-kolonia algoritmoen kasuan:

```

> runGA <- function (problem) {
+ n <- problem$size
+ initial.population.size <- 100
+   # Arguments to run the genetic algorithm.
+   args <- list()
+   args$evaluate          <- problem$evaluate
+   args$selectSubpopulation <- elitistSelection
+   args$selectCross        <- 0.5
+   args$selection.ratio    <- 0.5
+   args$selectCross        <- tournamentSelection
+   args$mutate             <- swapMutation
+   args$ratio              <- 0.2
+   args$mutation.rate      <- 1 / length(initial.population.size)
+   args$cross              <- orderCrossover
+   args$non.valid          <- "discard"
+   args$do.log             <- FALSE
+   args$verbose            <- FALSE
+   args$resources          <- resources
+   evaluations             <- vector()

+   for (i in 1:num.rep) {
+     initial.pop          <- lapply(1:initial.population.size,
+                                     FUN=function(x) {
+                                       rnd.perm <- randomPermutation(n)
+                                       return(rnd.perm)
+                                     })
+     args$initial.population <- initial.pop
+     message("Running GA, repetition #", i)
+     res <- do.call(basicGeneticAlgorithm, args)
+     evaluations <- c(evaluations, getEvaluation(res))
+   }
+   return(evaluations)
+ }
>
>
> runACO <- function (problem) {
+ n <- problem$size
+   # Arguments to run the ant colony optimization.
+   args <- list()
+   args$evaluate          <- problem$evaluate
+   args$nants             <- 100
+   init.value             <- 1
+   initial.trail           <- matrix(rep(init.value, n*n), nrow=n)
+   evapor                 <- 0.1
+   pher                   <- permuPosPheromone(initial.trail=initial.trail,
+                                             evaporation.factor=evapor)
+   args$pheromones        <- pher

```

```

+   args$update.sol      <- "best.it"
+   args$update.value    <- init.value / 10
+   args$non.valid       <- "discard"
+   args$do.log          <- FALSE
+   args$verbose         <- FALSE
+   args$resources       <- resources
+   evaluations          <- vector()
+   for (i in 1:num.rep) {
+     message("Running ACO, repetition #", i)
+     res <- do.call(basicAco, args)
+     evaluations <- c(evaluations, getEvaluation(res))
+   }
+   return(evaluations)
+ }

```

4.4 Algoritmoak exekutatu eta emaitzak aztertu

Esperimentazioa burutzeko beharrezkoak diren aspektuak finkatu ditugunean eta algoritmo bakoitzaren kodea prest dugunean, exekuzioekin hasi gaitezke. Beraz, problema zerrendako instantzia bakoitzari aukeratutako algoritmo guztiak aplikatuko dizkiogu ondoko kodea erabiliz:

```

> res.ls <- lapply(tsplib.problems, FUN=runLS)
> res.ga <- lapply(tsplib.problems, FUN=runGA)

## Error in FUN(X[[i]], ...): object 'swapMutation' not found

> res.aco <- lapply(tsplib.problems, FUN=runACO)

```

Esperimentazio egoki bat eraman badugu, exekuzio kopurua oso handia izango da (algoritmoak \times instantziak \times errepikapenak). Honenbestez, lortutako emaitzetatik ondorioak atera ahal izateko, datu gordinak prozesatu eta laburbildu beharko ditugu. Horretarako, lehenik eta behin, emaitza guztiak (behar dugun informazio gehigarriarekin batera) *data frame* batean gordeko ditugu.

Hasteko, bilaketa lokalaren emaitzak bilduko ditugu, lerro bakoitzean instantzia eta errepikapen baten datuak gordeaz:

```

> instance.names <- c("gr24", "bays29", "att48", "eil51", "berlin52", "brazil58", "st80", "eil
>
> aux.ls <- lapply(1:length(res.ls),
+   FUN=function(i) {
+     r <- cbind(instance.names[i],
+               res.ls[[i]],
+               1:length(res.ls[[i]]))
+     return(r)
+   })
> res.ls <- do.call(rbind, aux.ls)

```

```
> head(res.ls)

##      [,1]  [,2]  [,3]
## [1,] "gr24" "2737" "1"
## [2,] "gr24" "2672" "2"
## [3,] "gr24" "2527" "3"
## [4,] "gr24" "2608" "4"
## [5,] "gr24" "2568" "5"
## [6,] "gr24" "2701" "6"
```

Ondoren antzeko prozesu bat jarraituko dugu beste bi algoritmoen emaitzak biltzeko:

```
> aux.ga <- lapply(1:length(res.ga),
+                 FUN=function(i){
+                   r <- cbind(instance.names[i],
+                               res.ga[[i]],
+                               1:length(res.ga[[i]]))
+                   return(r)
+                 })

## Error in lapply(1:length(res.ga), FUN = function(i) {: object 'res.ga'
## not found

> res.ga <- do.call(rbind, aux.ga)

## Error in do.call(rbind, aux.ga): object 'aux.ga' not found

> aux.aco <- lapply(1:length(res.aco),
+                 FUN=function(i){
+                   r <- cbind(instance.names[i],
+                               res.aco[[i]],
+                               1:length(res.aco[[i]]))
+                   return(r)
+                 })
> res.aco <- do.call(rbind, aux.aco)
```

Azkenik, hiru algoritmoentzat sortutako taulak `data.frame` bakar batean bilduko ditugu:

```
> results.df <- rbind(data.frame(res.ls,
+                               Algorithm="LS"),
+                     data.frame(res.ga,
+                               Algorithm="GA"),
+                     data.frame(res.aco,
+                               Algorithm="ACO"))

## Error in data.frame(res.ga, Algorithm = "GA"): object 'res.ga' not
## found

> names(results.df) <- c("Instance", "Fitness",
+                       "Repetition", "Algorithm")

## Error in names(results.df) <- c("Instance", "Fitness", "Repetition",
## "Algorithm"): object 'results.df' not found
```

```
> head(results.df)
## Error in head(results.df): object 'results.df' not found
```

Honekin emaitza guztiak egitura batean gorde ditugu eta horiek aztertzen hasi gaitezke. Halere, kontuan hartu behar dugu sortutako egituraren zutabe guztiak kategorikoak direla. Alabaina, guk, emaitzak aztertu ahal izateko, "Fitness" izeneko zutabea numeric motakoa izatea behar dugu:

```
> results.df$Fitness <- as.numeric(as.character(results.df$Fitness))
## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found
```

Esan bezala, datuak zuzenean interpretatzea ez da berehalako ataza izaten, batez ere hauen kopurua handia bada. Hau hala izanik, lehenengo urratsa datuak laburbiltzea izango da. Hasteko, algoritmo bakoitzaren emaitzak zutabe batean jarriko ditugu:

```
> id.LS <- results.df$Algorithm=="LS"
## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found
> data.test <- results.df[id.LS, c(1,2)]
## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found
> names(data.test)[2] <- "LS"
## Error in names(data.test)[2] <- "LS": object 'data.test' not found
> id.GA <- results.df$Algorithm=="GA"
## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found
> data.test$GA <- results.df[id.GA, 2]
## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found
> id.ACO <- results.df$Algorithm=="ACO"
## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found
> data.test$ACO <- results.df[id.ACO, 2]
## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found
> head(data.test)
## Error in head(data.test): object 'data.test' not found
```

Gainera, algoritmo eta instantzia bakoitzarentzat, 10 errepikapenetan lortutako helburu funtzioen mediana kalkulatu dugu, **scmamp** paketeko `summarizeData` funtzioa erabiliz:

```
> data.summarized <- summarizeData(data=data.test,
+                                 fun=median,
+                                 group.by="Instance")
## Error in is.data.frame(data): object 'data.test' not found
```

```
> data.summarized
## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'data.summarized' not found
```

Taula honetan errazago ikus dezakegu zein algoritmok lortzen dituen emaitzarik onenak instantzia bakoitzean. Adibidez, ikus dezakegu GA algoritmoak beste biek baino emaitza hobeak lortzen dituela instantzia guztietan eil51 izenekoan izan ezik.

4.5 Konparaketa grafikoa

Aurreko atalean emaitzak laburbiltzeko eta bistaratzeko tresna erabilgarri batzuk ezagutu ditugu: taulak. Hala ere, esperimentazioan erabilitako instantzia kopurua oso altua denean (100 edo 1000 adibidez), grafikoak egitea erabilgarriagoa izan daiteke. Grafikoek, informazioa laburbiltzeko magultasun handia eskeintzen dute eta askotan emaitzen arteko erlazio edota patroiak detektatzeko ezinbesteko tresnak dira.

Grafiko bat egin aurretik, argi izan behar dugu zer erakutsi nahi dugun, alegia, zein den grafikoaren helburua. Horren arabera, grafikoaren aspektu desberdinak finkatu beharko ditugu: zein datu erabiliko ditugu? zein motatako grafikoa izango da? grafiko bakarra edo grafiko multzo bat egingo dugu?

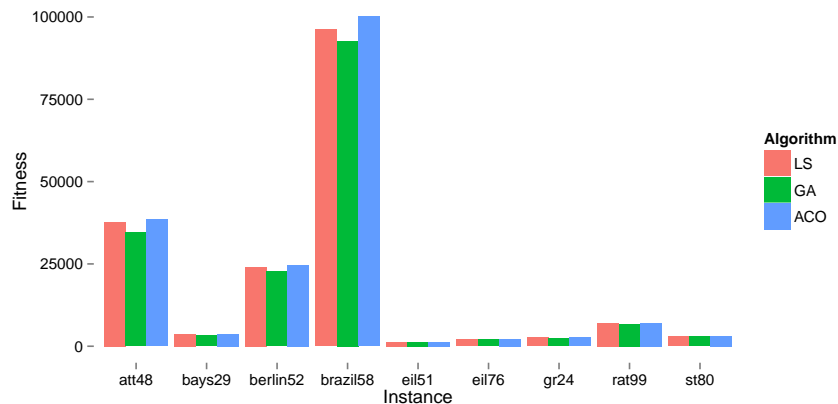
Atal honetan grafikoak **ggplot2** paketearen bidez egingo ditugu, beraz, galdera guzti hauei erantzun ostean, erakutsi nahi ditugun aldagaiak eta aukeratutako grafiko motak definituta dakartzan elementu estetikoak "konektatu" behar ditugu, aukeratutako aldagai bakoitzari elementu estetiko bat esleituz.

Adibidea 4.5 *Adibide gisa, lehen egin dugun esperimentazioaren emaitzak bistaratzeko, instantzia bakoitzeko hiru algoritmoen medianak erakusten dituen barra-grafiko bat egin dezakegu. Kasu honetan, barra bakoitzak hiru ezaugarri estetiko ditu: barraren kokapena OX ardatzean, haren kolorea eta altuera (zabalera ere erabil genezake, baina adibide honetan finko mantenduko dugu).*

Beraz, hiru aldagai ditugu (instanzia, algoritmoa eta lortutako emaitzen mediana) eta hiru elementu estetiko (kokapena, kolorea eta altuera) eta ondoko eran egingo dugu "konezioa":

*Algoritmoa-Kolorea
Instantzia-OX ardatzean kokapena
Emaitzen mediana-Altuera*

ggplot2 paketearen bitartez aldagaien eta ezaugarri estetikoaren esleipena modu esplizituan egin dezakegu ondoko eran:



4.1 irudia LS, GA eta ACO algoritmoek TSPko instantzia desberdinetan lortutako batzazbesteko emaitzak.

```
> map <- aes(x=Instance, y=Fitness, fill=Algorithm)
```

Behin hau eginda, grafikoa bera irudikatzeko ondoko kodea exekutatu beharko dugu:

```
> theme.bh <- theme(panel.background=element_blank(),
+                   axis.text=element_text(colour="black"),
+                   panel.grid=element_blank())
> ggplot(data=results.df, mapping=map) +
+   geom_bar(stat="summary", fun.y=median,
+   position="dodge") +
+   theme.bh

## Error in ggplot(data = results.df, mapping = map): object 'results.df'
not found
```

Sortutako grafikoa 4.1 irudian erakusten da. Ikus dezakegunez instantzia ezberdinetan lortutako emaitzak oso ezberdinak dira. Aukeratutako instantzien tamaina antzerakoa izan arren, datuak desberdinak dira eta, ondorioz, lortutako emaitzak eskala ezberdinetan daude eta ez dira zuzenean konparagarriak. Instantzia ezberdinetan lortutako balioak konparatu ahal izateko, emaitzak normalizatu egiten dira erreferentziazko balio batekiko. Kasu batzuetan (*benchmark* klasikoetan, adibidez), ezagutzen den soluziorik onena hartzen da erreferentziazat, batzuetan hau optimoa bera izanik. Horrelako erreferentziarik ez balego, beste algoritmo baten emaitzak (problema hori ebazteko ezagutzen den algoritmorik onena adibidez) erabili ohi dira.

Adibidea 4.6 *Aurreko grafikoaren eta aurreko ataletan ikusitako taulen arabera, GA algoritmoak dirudi eraginkorrena, eta beraz erreferentzia gisa instantzia bakoitzean GA algoritmoak 10 errepikapenetan lortutako emaitzarik onena hartuko dugu.*

Datuak erreferentzia honekiko normalizatzeko, **scmamp** paketeraren `summarizeData` funtzioaz baliatuko gara berriro:

```
> aux <-summarizeData(results.df[results.df$Algorithm=="GA", 1:2],
+                     fun=min, group.by=1)

## Error in is.data.frame(data): object 'results.df' not found

> best.results <- aux[,2]

## Error in aux[, 2]: incorrect number of dimensions

> names(best.results) <- aux[,1]

## Error in aux[, 1]: incorrect number of dimensions
```

Balioen atzipena errazteko, sortu dugun bektorearen elementuei izenak emango dizkiegu. Eta ondoren, emaitzak normalizatuko ditugu.

```
> results.df.norm <- results.df

## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found

> results.df.norm$Fitness <- results.df.norm$Fitness /
+   best.results[results.df.norm$Instance]

## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df.norm' not
found
```

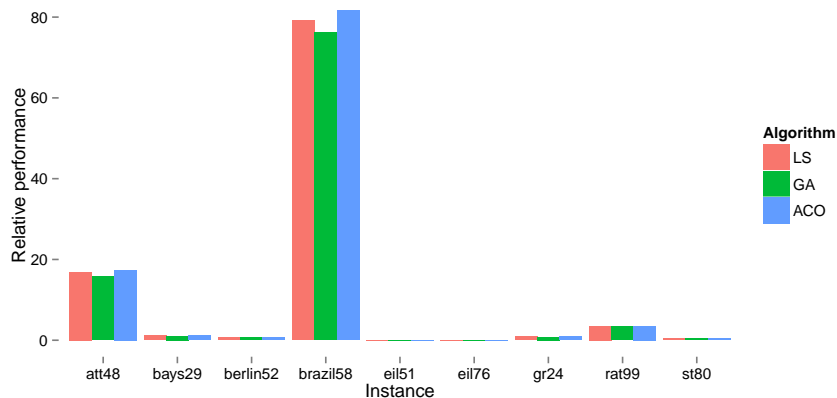
Eta grafikoa berriro sortuko dugu, oraingoan normalizatutako emaitzak erabiliz:

```
> map <- aes(x=Instance, y=Fitness, fill=Algorithm)
> ggplot(data=results.df.norm, mapping=map) +
+   geom_bar(stat="summary",
+           fun.y=mean,
+           position="dodge") +
+   labs(y="Relative performance") + theme.bh

## Error in ggplot(data = results.df.norm, mapping = map): object 'results.df.norm'
not found
```

Grafiko berria 4.2 irudian erakusten da. Orain instantzia ezberdinetan lortutako emaitzak konparagarriak dira². Argi ikusten da errorerik handiena `brazil58` instantzian lortzen dutela 3 algoritmoek. Bestalde, GA algoritmoak emaitzarik onenak lortzen ditu orohar.

² Emaitzak hobeto bistartzeko, y ardatza eskala logaritmikoan jarri dezakegu, grafikoa sortzen duen kodeari `scale_y_log10()` gehituz.



4.2 irudia LS, GA eta ACO algoritmoek TSPko instantzia desberdinetan lortutako batzbesteko emaitzak normalizatuta onenarekiko.

Orain arte, algoritmoen eraginkortasuna errepikapen ezberdinetan lortutako emaitzen medianaren bidez neurtu dugu. Baina batzuetan, joera zentraleko estatistikoez gain (mediana, moda, batezbestekoa), interesgarria izan ohi da errepikapen ezberdinetako emaitzen sakabanapena ere aztertzea. Horrelako kasuetan oso ohikoa da *boxplot* motako grafikoak erabiltzea. Grafiko hauek emaitzen inguruko informazio gehiago deskribatzeko ahalmena dute mediana, kuartilak eta outlierrak erakusten baitizkigute.

Adibidea 4.7 Gure datuen kutxa diagramak egiteko, berriro ere estetikoaren eta aldagaien arteko "konezioa" egin behar dugu.

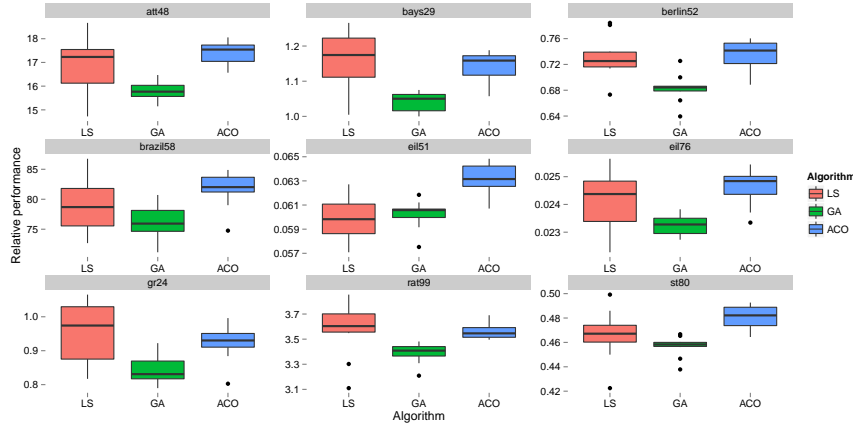
Algoritmoa—Kolorea eta OX ardatzean posizioa
Helburu funtzioaren balioen banaketa—OY aldagaian kutxaren itxura

Beraz, algoritmo bakoitzaren emaitzak alboz-albo agertuko diren kolore ezberdineko kutxa batez adieraziko dira. Gainera, kasu honetan grafiko bakar bat egin beharrean, instantzia bakoitzerako grafiko ezberdin bat egingo dugu.

Ondoko kodearekin aurreko adibideko irudia eraiki dezakegu:

```
> map <- aes(x=Algorithm, y=Fitness, fill=Algorithm)
> ggplot(data=results.df.norm, mapping=map) +
+   geom_boxplot(position="dodge") +
+   labs(y="Relative performance") +
+   facet_wrap(~Instance, scales = "free") + theme.bh

## Error in ggplot(data = results.df.norm, mapping = map): object 'results.df.norm'
not found
```



4.3 irudia LS, GA eta ACO algoritmoek TSPko instantzia desberdinetan lortutako batzbesteko emaitzak.

4.3 irudiak kodearen emaitza jasotzen du. Esan bezala, kutxa diagramak algoritmo bakoitzaren emaitzak instantzia ezberdinetan zenbateraino sakabanatuta dauden aztertzeko grafiko oso erabilgarriak dira. Irudiaren arabera, *GA* algoritmoak emaitza onenak izateaz gain, sakabanapen txikia erakusten du. Aldiz *LS* algoritmoaren kutxak nahiko handiak dira, emaitzak sakabanatuagoak daudela adieraziz.

Kapitulu honetan, barra eta *boxplot* motako grafikoetan zentratu gara bakarrik, baina grafiko mota asko existitzen dira. Gai honetan sakontzeko **ggplot2** paketearen liburua [39] gomendatzen dugu.

4.6 Test estatistikoak

Aurreko ataletan ikusi ditugun taula zein grafikoek algoritmoen eraginkortasuna ilustratzen dute eta horien inguruko ondorioak ateratzen laguntzen digute. Ildo beretik, badira arlo estatistikoan emaitzak aztertzen lagunduko dizkiguten beste tresna batzuk ere; aipagarrienak test estatistikoak dira.

Test estatistikoaren helburua, lagin edo datur sorta bat oinarritzat hartuta, hipotesi bat testatzea da, alegia, hipotesi hori ontzat hartuko dugun edo ez erabakitzea.

Definizioa 4.1 *Hipotesi konstrate bat bi hipotesik osatuko dute:*

H_0 : egiaztatu nahi dugun hipotesia da (hipotesi nulua).

H_1 : H_0 ren kontrako hipotesia da (hipotesi alternatiboa).

4.1 taula Test estatistiko baten bi errore motak.

	H_0 errefusatzea	H_0 ez errefusatzea
H_0 egia	I motako errorea (negatibo faltsua)	Erabaki egokia
H_0 ez da egia	Erabaki egokia	II motako errorea (positibo faltsua)

Bi hipotesi hauek kontuan hartuz, test estatistiko bat egitean bi errore mota egiteko arriskua dago (ikusi 4.1. taula) eta errore mota hauetatik abiatuz, ondoko kontzeptuak definitzen dira:

α = I motako errorearen probabilitatea

β = II motako errorearen probabilitatea

Teorian, hoberena α eta β txikienak jaulkitzen dituzten testak erabiltzea litzateke. Alabaina, I eta II motako erroreak kontrajarriak dira, beraz, normalean α finkatu ohi da eta ondoren, posible denean, β ahalik eta txikiena duen testa aukeratzen da. α -ri adierazgarritasun-maila deritzogu eta, H_0 okerki errefusatu edo baztertzeko, datuak zenbateraino arraroak edo extremoak izan behar duten adierazten digu nolabait. Aldiz, $1 - \beta$ balioari potentzia deitzen diogu eta, H_0 gezurra izanik, hau errefusatzeko probabilitatea neurtzen digu.

Hipotesi desberdinak egiaztatzeko test estatistiko mota ugari existitzen dira [33]. Beraz, datuak (emaitzak) aztertzerakoan, helburuaren arabera, egokia den test bat aukeratu beharko da. Gainera, test mota bakoitzak datuen gaineko hainbat suposizio egiten ditu. Hau honela, bi test familia bereizten dira bereziki: parametrikokoak eta ez-parametrikokoak. Lehenengoez datuak (emaitzak) banaketa probabilistikoa ezagun batetik datozela suposatzen dute, adibidez banaketa normala (Gaussiarra). Mota horretako testik ezagunenak *t-test* edo ANOVA testak dira. Bigarrenak, ordea, hipotesi malguagoak dituzte orokorrean eta ez dute datuen banaketaren inguruko baldintzarik ezartzen.

Gure kasuan, bi algoritmo edo gehiagoren emaitzak alderatzeko erabiliko ditugu testak. Orokorrean, optimizazioko esperimenduetan test parametrikokoak aplikatzeko beharrezko baldintzak nekez betetzen dira, eta horregatik test ez-parametrikokoak erabili ohi dira, datuen banaketaren inguruko suposiziorik egiten ez dutelako.

Zehazki, gure helbururako egokiak diren bi test ez-parametrikokoak ikusiko ditugu atal honetan: Wilcoxon-en testa [7], bi lagin (emaitza) konparatzeko, eta Friedman-en testa [7], bi lagin baino gehiago alderatzeko.

4.6.0.1 Bi emaitza bektore alderatzen

Instantzia multzo baten gainean bi algoritmo exekutatzen ditugunean, bakoitzeko, emaitza sorta bat lortzen dugu. Algoritmoen portaera berdina bada (antzerako emaitzak itzultzen badituzte, alegia), bi balio sorta horiek probabilitate-banaketa berdinetik datozela esan dezakegu. Hori da, hain zuzen, Wilcoxon-en testak aztertzen duena (H_0 =bi algoritmoek portaera berdina dute).

Egin nahi dugun konparaketaren arabera, emaitzak bi motatakoak izan daitezke, askeak edo binakakoak. Lehenengo kasuan, algoritmo baten emaitza bakoitzari beste algoritmoaren emaitza bat eta bakarra dagokio. Hau gertatzen da, adibidez, emaitzak problemaren instantzia desberdinen soluzioak direnean (hau da, instantzia bakoitzeko bi algoritmoen emaitzak ditugunean). Emaitzak instantzia bakar baterako bi algoritmoen ausazko errepikapenetatik lortutako balioak direnean, ordea, emaitza-lagin askeak ditugula esango dugu, bien artean ez baitago erlazorik edo parekatzeko aukerarik.

Bi egoera horiek Wilcoxon testarekin azter daitezke (datu ez-parekatuen kasuan, Mann-Whitney izenaz ezagutzen da batzuetan). R-n `wilcox.test` funtzioak bi test hauek aplikatzea ahalbidetzen digu. Ikus dezagun, adibide pare batekin, testa nola aplikatu. Lehenengo adibidean banaketa uniforme berdina jarraitzen duten bi ausazko lagin sortuko ditugu (beraz, testak diferentziak ez dagoela esan baharko liguke), eta bigarrenean, laginak banaketa desberdinetatik aterako ditugu: bat uniformea eta bestea normala. Bi kasuetan lagin askeak konparatzen ari gara, ez baitago haien arteko erlazorik edo parekatzeko aukerarik ³.

```
> sample.1 <- runif(30)
> sample.2 <- runif(30)
> wilcox.test(sample.1, sample.2)

##
## Wilcoxon rank sum test
##
## data: sample.1 and sample.2
## W = 421, p-value = 0.6757
## alternative hypothesis: true location shift is not equal
to 0

> sample.3 <- rnorm(30, 1, 1)
> wilcox.test(sample.1, sample.3)

##
## Wilcoxon rank sum test
##
## data: sample.1 and sample.3
## W = 226, p-value = 0.00073
## alternative hypothesis: true location shift is not equal
to 0
```

³ Binakako datuak izango bagenitu, `wilcox.test` funtzioari `paired=TRUE` aukera gehitu beharko genioke.

Test-ak diferentziarik atzeman duen ala ez jakiteko, p-balioari erreparatuko diogu. H_0 egiazkoa dela suposatuz, p-balioak, lortutako datuak edo hauek baino extremoagoak/arraroagoak ausaz lortzeko probabilitatea neurtzen digu. Beraz, lortutako p-balioa "txikia" izateak, H_0 egia izanik, honelako datuak lortzeko probabilitatea txikia dela adierazten digu eta honek H_0 errefusatu edo baztertzeraz eramaten gaitu. Aldiz, p-balio "handia" lortzen badugu, hipotesi nulua alderantziz ebidentzia handia dugu, beraz H_0 ezin errefusatu daitekeela esango dugu.

Baina, nola erabakiko dugu p-balioa "handia" ala "txikia" den? Lehen esan dugun moduan, esangura-maila (α edo H_0 egia izanik hiru baztertze probabilitatea), aldez aurretik finkatu behar izan dugu, eta beraz, hau erabiliko dugu muga balio bezala. Praktikan erabiltzen diren α ren balio ohikoenak 0.05 eta 0.01 tartean daude.

Adibidean, $\alpha = 0.05$ finkatzen badugu, ikus dezakegu lehenengo kasuan ezin dugula diferentziak daudenik esan (p-balioa 0.676 da); bigarrenetan, aldiz, diferentziak daudela esan dezakegu (p-balioa 0.00073 da).

Adibidea 4.8 *Test hau erabiliz gure esperimentazio txikian lortutako emaitzak azter ditzakegu. Adibidez, bi algoritmo aukeratuz ikus dezakegu ea, lehenengo instantzian lortutako emaitzen arabera, LS eta GA-ren emaitzak berdinak diren ala ez.*

Aurreko testa ondoko kodearen bitartez burutu dezakegu:

```
> id.LS <- results.df$Instance=="gr24" &
+       results.df$Algorithm=="LS"

## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found

> id.GA <- results.df$Instance=="gr24" &
+       results.df$Algorithm=="GA"

## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found

> sample.LS <- results.df$Fitness[id.LS]

## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found

> sample.GA <- results.df$Fitness[id.GA]

## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'results.df' not found

> wilcox.test(sample.LS, sample.GA)

## Error in wilcox.test(sample.LS, sample.GA): object 'sample.LS' not found
```

Goiko kodean lortutako p-balioa txikia dela ikusten dugu, beraz, $\alpha = 0.05$ hartuaz, bi algoritmoen portaera ezberdina dela esan dezakegu.

Adibidea 4.9 Ondorio hori 1. instantziari soilik dagokio, baina gauza bera egin dezakegu beste 8 instantzietarako. Are gehiago, GA algoritmoa erreferentzia gisa hartzen badugu, ACO algoritmoekin lortutako emaitzak ere aldera ditzakegu. Hortaz, 16 konparaketa egin ditzakegu eta, bakoitzeko, p-balio bat izango dugu.

Aurreko adibideko testak egiterako garaian, gogoratu, α -k I motako akats bat egiteko probabilitatea adierazten digula, baina probabilitate hori test bakar bati dagokio; 16 test independente egiten baditugu, ausaz, I motako akats 1 egitea espero dezakegu ($0.05 \cdot 16 = 0.8$ da eta).

Arazo hori sahiesteko, alegia, I motako akats bat egiteko probabilitatea kontrolpean mantentzeko, post-hoc izeneko zuzenketa batzuk aplikatu behar dira, bai esangura mailan edo p-balioen kalkuluan. Metodori sinpleena Bonferroni da, non p-balioak egindako test kopuruarekin biderkatzen diren. Metodo horren arazoa potentzia da, hots, oso zaila da H_0 errefusatzea eta beraz, diferentziak antzematea (p-balio oso handiak lortzen baitira). Hori dela eta, badira beste metodo sofistikatuago batzuk: Finner, Shaffer, Holm, etab.

Algoritmoen emaitzen analisi estatistikoa gauzatzeko **scmamp** paketea erabil dezakegu. Horretarako, lehenik eta behin emaitzak formatu egokian jarri behar ditugu, hau da, zutabe bakoitzeko algoritmo bat. Hori, aurretik egin dugu iada beste helburu batzuekin eta `data.test` objektuan dugu gordeta emaitza, beraz berrerabili egingo dugu:

```
> head(data.test)
```

```
## Error in head(data.test): object 'data.test' not found
```

Orain Wilcoxon testa aplikatuko dugu, instantziaz instantzia, LS eta ACO erreferentzia gisa hartu dugun GA-ren emaitzekin alderatzeko; p-balioak zuzentzeko Finner metodoa erabiliko dugu.

```
> a <- list()
```

```
> a$data <- data.test
```

```
## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'data.test' not found
```

```
> a$algorithms <- 2:4
```

```
> a$group.by <- 1
```

```
> a$test <- wilcox.test
```

```
> a$paired <- FALSE
```

```
> a$control <- "GA"
```

```
> a$correct <- "finner"
```

```
> test.results <- do.call(postHocTest, a)
```

```
## Error in (function (data, algorithms = NULL, group.by = NULL, test = "friedman", : argument "data" is missing, with no default
```

```
> test.results$raw.pval[, -3]
```

```
## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'test.results' not found
```

```
> test.results$corrected.pval[, -3]
## Error in eval(expr, envir, enclos): object 'test.results' not found
```

Goiko kodearen emaitzean lortutako p-balioak eta zuzendutako p-balioak ikus daitezke. Azken horietan erreparatu, ikus dezakegu *GA* algoritmoa *ACO* algoritmoarekin alderatzean p-balio guztiak 0.05 baino txikiagoak direla. Honek ziurtatzen digu bien artean ezberdintasun adierazgarriak daudela eta aurreko emaitzak kontuan hartuta, *GA*ren emaitzak hobeak direla ondorioztatuz dezakegu. Aldiz, *LS* algoritmoa eta *GA* alderatzean, lortutako p-balioak aurreko konparaketakoak baino handiagoak dira eta 3 kasutan (`att48`, `st80`, `eil76`) 0.05 baino altuagoak. Beraz, bi algoritmo hauen artean ezberdintasunak badaude, baina ez hain nabariak.

4.6.0.2 Bi lagin baino gehiago konparatzen

Atal honen sarreran esan bezala, badira hainbat optimizazio algoritmoren emaitzak aldi berean konparatzeko gai diren test estatistikoak. Test horiek bi fasetan garatzen dira: lehenengo omnibus motako test bat aplikatzen da. Horrek, algoritmoren batek besteekiko portaera desberdina duen edo ez atzemango du (H_0 =algoritmo guztien portaera berdina da). H_0 errefusatzeko nahiko ebidentzia badago, orduan binakako konparaketa guztiak egiten dira diferentziak zehazki zein algoritmoren artean dauden ikusteko, post-hoc deritzen testen bidez.

Gure kasuan, algoritmoen alderaketa egiterako garaian, normalean Friedmanen test ez-parametrikoa erabiltzen da. Test honek binakako datuen tratuak bi lagin baino gehiagotara hedatzen du eta parekatutako laginak (3 edo gehiago) alderatzeko balio digu.⁴

Adibidea 4.10 *Metodologia hori gure emaitzei aplikatuko diegu, baina kasu honetan instantzia ezberdinetan lortutako emaitzak batera aztertuko ditugu. Horretarako, errepikapen guztien medianak erabiliko ditugu^a. Hasteko, omnibus test bat egingo dugu, Friedmanen testa hain zuzen. Honek algoritmo guztien artean baten bat ezberdina den ikusteko balioko digu. Ondoren, post-hoc test bat egingo dugu (Shaffer-en testa) ezberdintasunak zehazki zeinen artean dauden ikusteko.*

^a Batzbestekoa ere erabil daiteke, baina estatistiko honek emaitzak unimodalak direnean du bakarrik zentzua. Askotan, optimizazio problemetan, emaitzek bi moda edo gehiago dituzte eta, hortaz, beste estatistiko batzuk (mediana, batik bat) erabili ohi dira.

⁴ Lagin askeak izango bagenitu Kruskal Wallis izeneko beste test bat egin genezake.

Konparaketa egiteko, `data.summarized` taula erabiliko dugu, non algoritmo eta instantzia bakoitzerako lorturako *fitness* balioen mediana daukagun gordeta:

```
> head(data.summarized)

## Error in head(data.summarized): object 'data.summarized' not found
```

Orain, hiru algoritmoetatik baten bat ezberdina den jakiteko Friedman testa erabiliko dugu.

```
> multipleComparisonTest(data=data.summarized,
+                         algorithms=2:4,
+                         test="friedman")

## Error in ncol(data): object 'data.summarized' not found
```

Test-aren arabera, algoritmoren baten emaitzak estatistikoki desberdinak dira (p -balioa=0.003096). Beraz, post-hoc test bat erabiliko dugu algoritmoen binakako konparaketa guztiak burutzeko, Shaffer-en testa hain zuzen ere.

```
> postHocTest(data=data.summarized,
+             algorithms=2:4,
+             test="friedman",
+             correct="shaffer")

## Error in postHocTest(data = data.summarized, algorithms = 2:4, test = "friedman", : object 'data.summarized' not found
```

Zuzendutako p -balioak aztertzen baditugu esan dezakegu, espero genuen bezala, *GA* eta beste bi algoritmoen arteko diferentziak estatistikoki esanguratsuak direla. Aurreko emaitzak ikusirik, ondorioztatu dezakegu *GA*-ren emaitzak beste bienak baino orohar hobeak direla. Aldiz, beste bi algoritmoen artean ez dago ezberdintasun adierazgarririk.

Eranskinak A

R: Oinarrizko kontzeptuak

Liburu honetan agertzen diren adibide guztiak **R** lengoaian inplementaturik daude. Ondorioz, ezinbestekoa ez izan arren, **R**ren sintaxia ezagutzea komenigarria da adibideak eta bestelako ariketak landu ahal izateko. Hau honela, kapitulu honetan **R** ren inguruko ezaugarri eta kontzeptu batzuk azalduko ditugu.

A.1 R eta RStudio instalatzen

R programazio lengoaia interpretatua da, hau da, terminal batean sartzen diren aginduak interpretatu eta segidan exekutatu egiten dira. Hori dela eta, **R**rekin diharduteko behar den gauza bakarra komando interpretea da, hots, **R** terminala. Edonola ere, gero ikusiko dugun moduan, lana errazteko, garapenerako ingurune integratuak (IDE-ak) ere erabil daitezke.

Rren instalazioa sistema eragilearen arabera da; informazio guztia web ofizialean aurki daiteke.¹ Windows eta MacOS sistemen kasuan, instalazio fitxategiak eta jarraibideak ondorengo helbide hauetan aurki daitezke:

- Windows: <http://cran.r-project.org/bin/windows/base/>.
- MacOS: <http://cran.r-project.org/bin/macosx/>.

Linux sistematan, berriz, **R** instalatzeko biderik errazena distribuzioko pakete kudeatzailea erabiltzea da. Ubuntuen kasuan, instalatu behar diren paketeak `r-base` eta `r-base-dev` dira. Edonola ere, Ubuntuen repositorioetan dagoen bertsioa zaharkitua egon daiteke –Ubuntu bera azken bertsiokoa ez bada, batik bat–. **R**ren azken bertsioa instalatzeko, pakete kudeatza-

¹ <http://cran.r-project.org>

ileari **R**ko repositorioa gehitzea komeni da. Hau egiteko, ondoko komando hauek exekutatu behar dira²:

```
sudo add-apt-repository 'http://cran.r-project.org/bin/linux/ubuntu utopic/'
sudo apt-key adv --keyserver keyserver.ubuntu.com --recv-keys E084DAB9
sudo apt-get update
sudo apt-get install r-base
sudo apt-get install r-base-dev
```

Jarraibide hauek **R**ren oinarritzko instalazioa burutzen dute, baina **R**ren ezaugarriarik interesgarriena hedagarritasuna da; edonork gara ditzake funtzionalitate berriak dakartzaten paketeak.

A.1.1 Paketeen instalazioa

Rn paketeak instalatzeko bide *ofiziala* CRAN biltegiaren bitartez da – *Comprehensive R Archive Network*–. Bertan milaka pakete daude gordeta.³

Biltegi horretan dauden paketeak `install.packages` aginduarekin instalatu daitezke. Esate baterako, grafikoak egiteko erabiliko dugun **ggplot2** paketea instalatzeko, ondokoa idatzi behar da **R** terminalean:

```
> install.packages("ggplot2")
```

CRAN biltegiaz gain, badago oso hedatua dagoen beste bat: Bioconductor `–http://bioconductor.org–`. Biltegi horretan, bioinformatika arloan garatutako paketeak aurki daitezke gehien bat. Hala ere, pakete orokorrak ere aurki ditzakegu. Bioconductor biltegiaren kasuan paketeen instalazioa pixka bat ezberdina da. **reshape2** paketea instalatzeko⁴ adibidez, ondoko kodea exekutatu behar da **R** terminalean.

```
> source("http://bioconductor.org/biocLite.R")
> biocLite("reshape2")
```

Pakete gehienak CRAN-en edo Bioconductor-en egon arren, badaude biltegi hauetara igo gabeko paketeak ere. Adibidez, garatze-prozesuan dauden paketeak; kasu horietan, **R** paketeak `tar.gz` luzapena duten fitxategietan gordetzen dira, eta `install.packages` funtzioaren bitartez instalatu behar dira. Adibide gisa, liburu honen eranskin gisa sortutako paketea⁵ deskargatu eta ondoko kodea erabiliz instalatu dezakegu.

² Kontutan izan **R**ko repositorio hau Ubuntu 14.04 sistemarentzat dela baliagarria; Ubunturen beste bertsio bat izanez gero `utopic/` sistemari dagokion izenarekin aldatu beharko genuke.

³ Zerrenda osoa <http://cran.r-project.org/web/packages/index.html> helbidean dago.

⁴ Datu egiturak maneiatzeko eta eraldatzeko erbiliko dugu pakete hau.

⁵ https://github.com/b0rxa/metaheuer/raw/master/metaheuer_0.1.tar.gz

```
> install.packages("metaheuR_0.1.tar.gz", repos=NULL)
```

R paketeen elaborazio prozesuan, Github, Bitbucket eta horrelako bertsio-kontrol zerbitzuak erabiltzea oso ohikoa da, eta **devtools** paketeak web haue-tatik paketeak zuzenean instalatzea ahalbidetzen du. Esate baterako, aurreko adibidean aipatutako **metaheuR** paketea, Github-etik zuzenean instalatu deza-kegu. Horretarako, lehenik **devtools** instalatu behar dugu:⁶

```
> install.packages("devtools")
```

Behin paketea instalatu dugularik, bere funtzionalitateak erabili ahal iza-teko **library** funtzioaren bitartez kargatu beharko dugu:

```
> library("devtools")
```

Amaitzeko, **install_github** funtzioa erabiliko dugu, **metaheuR** paketearen Github-eko 'kontua'-ren izena adieraziz:

```
> install_github("b0rxa/metaheuR")
```

A.1.2 Garapenerako ingurune integratuak

Ataza sinpleak burutzeko **R**ren terminala zuzenean erabil daiteke baina, ataza konplexuagoak burutzeko, ohikoena, *script*-ak erabiltzea da. *Script*-ekin jar-duteko testu lauak editatzeko programa bat eta **R**ren terminala besterik ez dira behar eta programatzailer askok bi elementu hauekin soilik egiten dute lan. Dena dela, badaude **R** lengoaiari programatzeko garapen ingurune inte-gratuak (IDE-ak). Gaur egun hedatuena RStudio da.⁷

RStudio-k bi IDE modalitate ditu: *desktop* eta *server*; lehena da, kasu gehienetan, instalatu beharko duguna. Honez gain, modalitate bakoitzer-ako, bi bertsio daude, bata dohakoa eta bestea *profesionala*. Programa in-stalatzeko, beraz, RStudioren webunean *Download RStudio* botoian sakatu, *desktop* mota aukeratu eta ondoren *Open Source Edition* aukera. Bertan pro-gramaren hainbat bertsio izango ditugu eta gure sistemari dagokiona auker-atu beharko dugu.

RStudio zabaltzen dugunean hiru zatitan banaturiko lehio bat agertuko zaigu. Ezkerreko aldean **R** terminala izango dugu. Eskuinean, goiko partean, kargatutako **R** objektuak eta komandoen historiala izango ditugu. Beheko

⁶ Pakete hau instalatzeko **RCurl** paketea behar da, zeinak sisteman zenbait liburutegi instalatuta egotea behar duen. **install.packages** funtzioak **R** ko dependentziak in-stalatzen ditu, baina ez sistemako liburutegiak. Hortaz, instalazioak errorea ematen badu pakete hauen webguneetan laguntza bilatu da

⁷ <http://www.rstudio.com/>

partean, berriz, aukera ezberdinak eskeintzen dituzten hainbat fitxa daude: fitxategiak, grafikoak, paketeak, laguntza eta bistaratzailea.

Goiko partean hainbat aukera izango ditugu, menu barran jasota. Fitxategi bat zabaltzen dugunean ezkerreko zatia (hasieran terminala soilik zena) bitan banatuko da, fitxategia `-goian-` eta terminala `-behean-` erakusteko.

Aspektu honetan sakontzea ez denez kapitulu honen helburua, interesatuta egon ezkerro, jarraian zerrendatzen diren webguneetan baliabide gehiago aurki ditzakezu:

- <http://www.rstudio.com/products/rstudio/features/>
- <http://rmarkdown.rstudio.com/>
- <http://shiny.rstudio.com/>

A.2 Oinarrizko datu-egiturak

R lengoaiaren oinarrizkoak diren zenbait objektu mota daude. Eranskin honen helburua sarrera labur bat eskaintzea denez, bakarrik lau objektu mota ohikoenak aztertuko ditugu, bektoreak, zerrendak, funtzioak eta objektu orokorrak. Atal honetan lehenengo bi objektu motak azalduko dira, beste biei atal bereziak eskeiniko dizkiegu eta. Informazio gehiago, [31] eskuliburuan topa dezakezu.

A.2.1 Bektoreak

R lengoaiaren oinarrizko datu egitura bektorea da. Adibidez:

```
> x <- 2.45
> name = "double number"
> x

## [1] 2.45

> name

## [1] "double number"
```

Konturatu, bai `x` bai `name` bektoreak direla, nahiz eta 1 tamainakoak izan. Gainera adibide hauetan aldagaiei balioak nola esleitzen zaizkien ere ikus daiteke. Lehenengo kasuan `<-` sinboloa erabiltzen da eta bigarrenean, berriz, `=` ikurra. Biak baliokideak dira eta kasu guztietan zeinahi erabil daiteke. Bata zein bestearen erabileraren inguruko irizpideak, estilo gidan aurki daitezke (B atala).

Bektoreak, mota ezberdinetakoak izan daitezke. `x`, adibidez, bektore numerikoa da, `numeric` motakoa, zenbaki osoak zein ez-osoak `-beste` hainbat

lengoaian `integer`, `int`, `double` edo `float` direnak biltzen dituzten bektore motakoa. Aldiz, `name` bektorea `character` motakoa da, hau da, beste lengoaietan `string` bezala ezagutu ohi den motakoa. Objektu baten mota jakiteko `mode` funtzioa erabil dezakegu:

```
> mode(x)
## [1] "numeric"

> mode(name)
## [1] "character"
```

Bektore mota gehiago daude. Esate baterako `logical` mota, bektore bitarrak adierazteko erabiltzen da. `logical` motako bektore batean bi objektu ezberdin bereizi ditzakegu, `TRUE` edo `T` eta `FALSE` edo `F`:

```
> binary.vector <- c(FALSE, F, TRUE, T)
> binary.vector
## [1] FALSE FALSE  TRUE  TRUE
```

Letra bakarreko eta hitz osoko adierazpideak baliokideak izan arren, liburu honetan erabiliko dugun estiloan beti aukera luzea erabiliko dugu, hau da, `TRUE` eta `FALSE`.

Goiko adibidean 4 tamainako bektore bat sortu dugu, `c` funtzioa erabiliz; funtzio honen laguntza bistaratzeko, terminalean `?c` exekuta daiteke⁸. Bestalde, bektore baten elementuak atzitzeko `[]` sintaxia erabiltzen da:

```
> binary.vector[1]
## [1] FALSE

> binary.vector[2]
## [1] FALSE

> binary.vector[3]
## [1] TRUE

> binary.vector[4]
## [1] TRUE
```

Adibidean ikus daitekeen bezala, indexazioa 1 zenbakian hasten da, beste hainbat lengoaiatan ez bezala. Gainera, `R`k 0 elementuko bektoreak definitzeko aukera itzultzen digu:

⁸ Era honetan edozein funtzioaren laguntza bistara daiteke. Adibidez, lehen erabili dugun `mode` funtzioaren laguntza lortzeko `?mode` exekutatu behar da.

```

> empty.vector <- vector()
> length(empty.vector)

## [1] 0

> length(binary.vector)

## [1] 4

> length(x)

## [1] 1

```

Ikus daitekeen bezala, `length` funtzioak bektoreen luzeera ematen digu. Gainera, `c` funtzioaz gain, bektoreak sortzeko `seq` funtzioa ere erabilgarria da oso:

```

> seq(from=0, to=1, by=0.1)

## [1] 0.0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1.0

> seq(from=1, to=10, length.out=4)

## [1] 1 4 7 10

```

Askotan erabiltzen den zenbaki osoen sekuentzia bat sortzeko `1:10` motako sintaxia ere erabil daiteke. Agindu hau `seq(1, 10, 1)` kodearen baliokidea da.

A.2.2 Zerrendak

Bektoreetan elementu guztiak mota berdinekoak izan behar dira. Alabaina, kasu askotan bektore heterogeneoak ere beharko ditugu; hauek `list` edo zerrenda motako objektuen bidez adierazten dira. Adibide gisa, zerrenda batean izena, e-posta eta telefono zenbakia gorde dezkegu:

```

> contact <- list("Izena", "izena@server.com", 555652332)
> contact

## [[1]]
## [1] "Izena"
##
## [[2]]
## [1] "izena@server.com"
##
## [[3]]
## [1] 555652332

```

Zerrenda egiturak erabilgarriak dira hainbat kasutan, baina batzuetan bektoreak egokiagoak izango dira. Hori dela eta, zerrenda batean dauden elementuak bektore batera erazteko `unlist` agindua erabil dezakegu:


```
> unlist(contact)

## [1] "Izena" "izena@server.com"
## [3] "555652332"
```

Adibidean ikusten den bezala, bektoreetan elementu guztiak mota berdinekoak izan behar direnez, telefono zenbakia `character` motara eraldatu da automatikoki. Mota batetik bestera *casting*-a egiteko `as.` aurrizkia duten funtzioak erabiltzen dira. Adibide gisa, telefono zenbakia `character` motara bihurtzeko `as.character` funtzioa erabil dezakegu.

Zerrenda bateko elementuak edozein objektu mota izan daitezke, baita funtzioak ere. Funtzio objektuak aurrerago gehiago sakonduko ditugun arren, zerrenden erabilera ilustratzeko xedearekin, hurrengo adibidean `mode` eta `length` funtzioez osaturiko zerrenda bat eraiki eta erabiliko dugu.

```
> fun.list <- list(mode, length)
> fun.list[[1]](binary.vector)

## [1] "logical"

> fun.list[[2]](binary.vector)

## [1] 4
```

Adibidean ikusten den moduan, zerrenda bateko elementuak atzitzeko kortexte bikoitza `-[[]]` erabiltzen da⁹.

A.2.3 Objektuen atributuak

R n objektuei atributuak gehitu ahal zaizkie. Adibidez, oso erabilgarria den atributua `names` da. Honek bektore edo zerrenda baten posizioen izenak jasotzeko balioko digu; atributu hori izen bereko funtzioaren bitartez atzi eta alda daiteke:

```
> names(fun.list)

## NULL

> names(fun.list) <- c("modeFunction", "lengthFunction")
> fun.list[["modeFunction"]](binary.vector)

## [1] "logical"

> fun.list$lengthFunction(binary.vector)

## [1] 4
```

⁹ Kortexte bakarra erabiltzen badugu, hasiera batean, emaitza berdina dela pentsa genezake, baina ezberdintasun handi bat dago: zerrendan dagoen elementu soila lortu beharrean 1 tamainako zerrenda bat lortuko dugu, atzitu nahi dugun elementua gordeko duena.

Adibidean, zerrendako posizio bakoitzari izen bat esleitu diogu, eta jarraian izen hori zerrendaren elementua atzitzeko erabili dugu. Ilustratu dugun bezala, atzipena bi eratan egin daiteke, izena kortxete bikoitzaren barruan sartuz edo \$ sinboloa erabiliz. Azken atzipen sistema hau oso erabilgarria da, batez ere **R** terminalak duen "auto-osaketa" funtzioarekin batera erabiltzen badugu `-fun.list$` idatzi eta tabuladorea sakatu-.

A.2.3.1 Matrizak eta *array*-ak

Matrizak 2 dimentsiotako egiturak dira eta `matrix` funtzioaren bitartez sortu ditzakegu. Gogoratu informazio gehiago lortzeko `?matrix` exekutatu dezakezula:

```
> m <- matrix(1:12, nrow=3, byrow=FALSE)
> m

##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,]    1    4    7   10
## [2,]    2    5    8   11
## [3,]    3    6    9   12
```

Bektoreetan eta zerrendetan bezala, errenkadei eta zutabeei izenak eman diezazkiekegu, `colnames` eta `rownames` funtzioak erabiliz:

```
> colnames(m) <- c("W", "X", "Y", "Z")
> rownames(m) <- c("A", "B", "C")
> m

##    W X Y Z
## A 1 4 7 10
## B 2 5 8 11
## C 3 6 9 12
```

Gainera, matrizeak sortzeko beste era bat atributuak erabiliz da. Izan ere, **R** lengoaian matrizeak `dim` atributua duten bektoreak dira. Atributu horiek matrizeen errenkada eta zutabe kopurua itzultzen digu eta, izen bereko funtzioak, datu horiek editatzeko aukera ematen digu:

```
> binary.vector

## [1] FALSE FALSE  TRUE  TRUE

> dim(binary.vector)

## NULL

> dim(binary.vector) <- c(2, 2)
> binary.vector

##      [,1] [,2]
## [1,] FALSE TRUE
## [2,] FALSE TRUE
```

Matrizeak 2 dimentsiotako egiturak dira, `dim` atributuak ordea, hainbat dimentsiotako egiturak sortzeko aukera ematen digu. Horrelako objektuak sortzeko `array` funtzioa erabil daiteke:

```
> a <- array(1:12, dim = c(2, 2, 3))
> a

## , , 1
##
##      [,1] [,2]
## [1,]     1     3
## [2,]     2     4
##
## , , 2
##
##      [,1] [,2]
## [1,]     5     7
## [2,]     6     8
##
## , , 3
##
##      [,1] [,2]
## [1,]     9    11
## [2,]    10    12
```

Matrizeen zein *array*-en elementuak atzitzeko kortxete sinpleak erabiltzen dira, dimentsio guztien indizeak –edo izenak– erabiliz. Hona hemen adibide batzuk:

```
> m[1, 1]

## [1] 1

> m["A", "Y"]

## [1] 7

> a[2, 1, 3]

## [1] 10
```

Indizeak zenbaki bakar bat ez ezik, bektoreak ere izan daitezke:

```
> m[c(1, 3), 2:3]

##      X Y
## A 4 7
## C 6 9
```

Elementuak atzitzeko beste bi sintaxi berezi ere existitzen dira. Indize jakin bat zehaztu ordez ordez, dimentsio bat hutsik utziz gero, dimentsio horren elementu guztiak atzitzeko dira. Bestalde, aukeratutako indizeen aurretik –zeinua jarritz gero, indizeei dagozkien elementuak ezik, beste guztiak atzitzeko dira:

```

> m[,-1]

##      X Y  Z
## A  4  7 10
## B  5  8 11
## C  6  9 12

> m[-(1:2) , ]

##      W X  Y  Z
##      3  6  9 12

```

Kontutan hartu sintaxi-arau hauek zerrendei ere aplika diezazkiegula, kortexte bikoitzak zein sinpleak erabiliz.

A.2.3.2 Faktoreak

Objektuen atributuek beste objektu mota berezi bat eraikitzea ahalbidetzen dute: faktoreak. Objektu mota hauek balio kategorikoak adierazteko erabili ohi dira. Adibidez, demagun hiru balio har ditzakeen aldagai bat dugula, "txikia", "ertaina" eta "handia". Horrelako aldagai bat `-edo`, era berean, bektore bat `-` adierazteko `factor` motako objektuak erabili behar ditugu.

```

> f <- factor("txikia", levels=c("txikia", "ertaina", "handia"))
> f

## [1] txikia
## Levels: txikia ertaina handia

> cv <- c("txikia", "txikia", "handia")
> cv

## [1] "txikia" "txikia" "handia"

> fv <- factor (cv, levels=c("txikia", "ertaina", "handia"))
> fv

## [1] txikia txikia handia
## Levels: txikia ertaina handia

```

Goiko adibidean ikus daitekeen bezala, faktore motako objektu batek zein balio har ditzakeen adierazteko `levels` parametroa erabiltzen da `-hori` da, zehazki, faktoreek duten atributu berezia-. Faktoreekin dihardutea ez da beti erraza, eta uneoro argi izan behar dugu gure bektorea zein motakoa den; adibideko `cv` eta `fv` bektoreak oso antzekoak dira, baina mota ezberdinekoak dira. Esate baterako, `as.numeric` funtzioa aplikatzen badiegu, emaitza zeharo ezberdinak lortuko ditugu:

```

> as.numeric(fv)

## [1] 1 1 3

```

```
> as.numeric(cv)

## Warning: NAs introduced by coercion

## [1] NA NA NA
```

`as.numeric` funtzioak, objektuak numeric motara pasatzen ditu. Objektua faktorea bada, balioak `levels` zerrendan dagozkien posizioekin trukutzen dira baina, `character` motakoa bada, konbertsio honek ez du zentzurik eta ondorioz, errorea ematen du. Hori dela eta, funtzioak NA bektore bat da itzultzen du.¹⁰

Matrizeen atributuekin bezala, faktoreen `levels` atributua editatzeko funtzio bat ere badago:

```
> levels(fv)

## [1] "txikia" "ertaina" "handia"

> levels(fv) <- c("small", "medium", "big")
> fv

## [1] small small big
## Levels: small medium big
```

A.2.3.3 *Data frame-ak*

Matrizeak datu egitura oso erabilgarriak dira, baina eragozpen bat dute: bertan gordetako lementu guztiak mota berekoak izan behar dute –gogoratu matrizeak, izatez, bektoreak direla–. Hau da, matrize batean ezin dugu zutabe numeriko bat eta, aldi berean, `character` motako zutabe bat izan. **R** lengoaiari horrelako egiturak `data.frame` objektu motaren bidez adierazi daitezke. `data.frame`-ak posizio bakoitzean tamaina berdineko bektore bat gordetzen duten zerrendak dira. Objektu mota hauek eraikitzeke `data.frame` funtzioa erabiltzen da:

```
> df <- data.frame("String" =c("A", "B", "C"),
+                  "Number" =10:12,
+                  "Logical"=c(TRUE, TRUE, FALSE))
> df

##   String Number Logical
## 1     A      10     TRUE
## 2     B      11     TRUE
## 3     C      12    FALSE
```

`data.frame`-ak, izatez, zerrendak direnez `names` atributua dute:

¹⁰ **R** lengoaiari, NA *balio galdua* adierazteko erabiltzen da; ez da nahastu behar NaN objektuarekin, *ez-zenbakia* (*not a number*) adierazten duena.

```

> names(df)

## [1] "String" "Number" "Logical"

> df$Number

## [1] 10 11 12

> # Data frame
> df[1]

##   String
## 1      A
## 2      B
## 3      C

> # Vector
> df[[1]]

## [1] A B C
## Levels: A B C

```

Egitura mota hauek manipulatzeko bi funtzio interesgarri `cbind` eta `rbind` dira. Lehenengoak data frame bati zutabeak gehitzeko balio du eta bigarrenak, ordea, errenkadak eransteko.

```

> cbind(df, "Factor"=factor(c("a", "b", "a"),
+                           levels=c("a", "b")))

##   String Number Logical Factor
## 1      A      10    TRUE      a
## 2      B      11    TRUE      b
## 3      C      12   FALSE      a

> rbind(df, c("A", 5, TRUE))

##   String Number Logical
## 1      A      10    TRUE
## 2      B      11    TRUE
## 3      C      12   FALSE
## 4      A       5    TRUE

```

Bi funtzio hauek matrizeekin ere erabil daitezke.

A.3 Inguruneak

R lengoaian aldagaien esparruak (*non* dauden erazagututa, alegia) datu egitura berezi baten bidez maneiatzen da: inguruneak (*environments*, ingelesez). Inguruneak zerrenda mota berezi moduan ikus daitezke; bertan, aldagai bakoitzeko bere izena eta esleituta duen balioa gordetzen da. Inguruneen erabilera ez da erraz ulertzen eta, hortaz, sarrera motz honen helburuetatik

at gelditzen da. Nolanahi ere, hurrengo ataleetan inguruneak aipatzen dira eta, adibideen bidez, heuren funtzionamendua erakusten da.

A.4 Funtzioak

Rko objektu garrantzitsuenetako batzuk funtzioak dira. Aurreko atalean aipatu bezala, funtzioak ere objektuak dira eta, hortaz, aldagaietan gordetzen dira. Funtzioak sortzeko `function` funtzioa erabiltzen da:

```
> avg <- function(x) {  
+   return(sum(x) / length(x))  
+ }  
> seq <- c(1, 1, 12, 1, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 3, 7)  
> avg(x=seq)  
  
## [1] 5.25
```

Adibidean bektore baten batezbestekoa kalkulatzeko funtzio bat sortu eta erabili dugu. Funtzioek, implementatzen duten azken aginduaren emaitza itzultzen dute. Edonola ere, `return` agindua erabili daiteke, funtzioaren emaitza esplizituki adierazteko.

Funtzioak sortzean bere parametroak erazagutu behar dira. Hauek izen bat izan behar dute eta balio lehenetsi bat ere izan dezakete. Adibidez, jarraian definituko dugun funtzioak batezbesteko trunkatua kalkulatzeko du:

```
> truncatedAverage <- function(x, remove=0.1) {  
+   sorted.x <- sort(x)  
+   # Compute the number of positions to remove at each extreme  
+   premove <- round(length(x) * remove / 2)  
+   # Truncate the vector  
+   truncated.x <- sorted.x[premove:(length(x) - premove)]  
+   return(avg(truncated.x))  
+ }  
>  
> truncatedAverage(x=seq)  
  
## [1] 4.636364  
  
> truncatedAverage(x=seq, remove=0.1)  
  
## [1] 4.636364  
  
> truncatedAverage(x=seq, remove=0.3)  
  
## [1] 4.555556
```

Balio lehenetsirik ez duten parametroei derrigorrez eman behar zaie balio bat funtzioa erabiltzean. Argumentu horiei balioa eman ezean, interpreteak errore bat jaurtzen du.

```
> truncatedAverage()
```

```
## Error in sort(x): argument "x" is missing, with no default
```

R ko funtzioak definitzean, parametro berezi bat ere gehitu daitezke, hiru puntuak *—three-dots* edo *dot-dot-dot* ingelesez—. Parametro hori gehitzen denean, funtzioak definitu gabe dituen argumentuak onar ditzake. Sintaxi hori, kodean dauden funtzioei parametro gehigarriak pasatzeko erabili ohi da. Adibidez:

```
> avg <- function(x, fun=mean, ...){  
+   return(fun(x, ...))  
+ }
```

Goian definituriko avg funtzioa *wrapper* bat da, alegia, beste funtzioak exekutatzeke balio duen funtzio bat. Funtzioak bi parametro ditu, bektore bat (x) eta funtzio bat (fun). Horrez gain, ... daukagu eta, hortaz, funtzioari argumentu gehiago pasa diezazkiokegu; argumentu horiek zuzenean fun funtzioari pasatuko dizkio definitutako wrapperrak. Hona hemen funtzio honen erabileraren adibide batzuk:

```
> avg(x=seq)
```

```
## [1] 5.25
```

```
> avg(x=seq, fun=median)
```

```
## [1] 5.5
```

```
> avg(x=seq, fun=truncatedAverage, remove=0.2)
```

```
## [1] 4.636364
```

Lehendabiziko adibidean, fun parametroari baliorik ematen ez diogunez, wrapper funtzioak balio lehenetsia erabiliko du *—hots, mean—*. Bigarren lerroan, berriz, median funtzioa erabiltzeko esaten diogu funtzioari eta, hortaz, batezbestekoa kalkulatu beharrean, mediana kalkulatzen du. Hirugarren lerroan lehen sortu dugun truncatedAverage funtzioa erabiltzen da; funtzio horrek remove parametroa du eta, ... argumentu bereziari esker, avg wrapper funtzioari parametro honen balioa pasa diezaikegu.

Liburuan zehar erabiliko ditugun zenbait funtziok parametro asko izango du. Horrelako kasuetan, `do.call` funtzioa oso lagungarria izan daiteke. Parametroak zerrenda batean definituz gero, ondoren, `do.call` funtzioa honela erabil dezakegu:

```
> avg(x=seq, fun=truncatedAverage, remove=0.2)
```

```
## [1] 4.636364
```

```
> args      <- list()
```

```
> args$x    <- seq
```



```

> args$fun      <- truncatedAverage
> args$remove   <- 0.2
> do.call(what=avg, args=args)

## [1] 4.636364

```

Exekuzioa berdina da, zuzenean edo `do.call` funtzioa erabiliz, baina hainbat kasutan azken hurbilketarekin kodea garbiagoa izango da. Gainera, parametroen zerrenda hau beste funtzio batekin ere berrerabili dezakegu. Adibidean zerrenda bati elementuak nola erantsi ere ikus dezakegu –ikus itzazu 2., 3. eta 4. lerroak–.

Atal honekin amaitzeko, liburuan sarritan erabiltzen dugun diseinu-patroi bat aztertuko dugu: funtzio-zerrendak itzultzen dituzten funtzioak. Dagoeneko, funtzioak beste edozein objektu moduan erabil daitezkeela ikusi dugu. Besteak beste, funtzioak zerrendetan sar daitezke eta funtzioek funtzio bat itzul dezakete.

Ikus dezagun hau adibide baten bidez. Jarraian dagoen kodea **metaheuR** paketearen `tspProblem` funtzioaren bertsio sinplifikatua da. Funtzio honek matrize bat jasotzen du parametro gisa. Gero, barruan, permutazioak ebaluatzeko funtzio bat sortzen eta itzultzen da; ebaluazio funtzio horrek pasatutako matrizea erabiltzen du.

```

> tsp <- function (cmatrix) {
+   evaluate <- function(solution) {
+     ids <- cbind(solution, c(solution[-1], solution[1]))
+     cost <- sum(cmatrix[ids])
+     return(cost)
+   }
+   return(list(evaluate = evaluate))
+ }

```

Hona hemen diseinu-patroiaren erabilera. Lehenik, ausazko matrize bat sortuko dugu, parametro moduan pasatzeko. Gero, funtzioak itzultzen duen funtzioa `eval` aldagaian gordeko dugu. Azkenik, ausazko permutazio bat sortu ondoren, sortutako funtzioaren bitartez ebaluatuko dugu.

```

> rnd.matrix <- matrix(runif(100), ncol=10)
> eval <- tsp(rnd.matrix)$evaluate
> solution <- sample(1:10)
> solution

## [1] 2 6 4 9 7 1 5 8 3 10

> eval(solution)

## [1] 4.659298

```

Funtzio objektuek, funtzioaren kodeaz gain, zein exekuzio ingurunetan sortu diren ere gordetzen dute. Exekuzio inguruneak garrantzitsuak dira, funtzioaren kodean definitu gabeko aldagairen bat atzitzen saiatzen gare-

nean, balioa funtzioaren ingurunean bilatzen baita. Ondoko adibide honek funtzioen ezaugarri hori ilustratzen du:

```
> f <- function() {  
+   cat(message)  
+ }  
> f()  
  
## Error in cat(list(...), file, sep, fill, labels, append): argument  
1 (type 'closure') cannot be handled by 'cat'  
  
> message <- "Now it is defined"  
> f()  
  
## Now it is defined
```

Goiko kodearen emaitza arraro xamarra da, baina ingurunearen kontzeptua aintzat hartzen badugu, oso azalpen erraza du. Lehenengo hiru lerroetan `f` funtzioa sortzen dugu exekuzio ingurune batean –kasu honetan, ingurune globala–. Ingurune horretan, beraz, aldagai bakarra izango dugu: `f`. Bestalde, `f` funtzioa sortzean ingurune berri bat sortzen dugu.

Funtzioari deitzen diogunean `cat(message)` agindua exekutatzen da. Agindu honek `message` aldagaian dagoena pantailaratu behar du eta, hortaz, aldagaia non existitzen den bilatuko du. Lehenik, `f` funtzioaren ingurunean bilatuko du. Bertan izen hori duen aldagairik ez dagoenez, aldagaia *goiko* ingurunean bilatuko da, alegia, `f` funtzioa definituta dagoen ingurunean (ingurune globala, edo, maila gorenean dagoen ingurunea). Bertan `message` aldagairik ez dagoenez (eta ingurune gehiagorik ez dagoenez), errore bat jasotzen dugu.

Bostgarren lerroan ingurune globalean `message` aldagaia definitzen dugu eta, hortaz, berriro `f` funtzioari deitzen diogunean ingurune globalean dagoen aldagaiaren edukia bistaratuko da.

Inguruneen erabilera korapilatsua izan daiteke, baina objektu aldakorrak era simple batean implementatzeko erabil daiteke. Hona hemen diseinu-patroi horren adibide klasiko bat, non funtzioen funtzioak eta inguruneen erabilera konbinatzen ditugun:

```
> iterator <- function() {  
+   id <- 1  
+   nextElement <- function() {  
+     cat(id)  
+     id <- id + 1  
+   }  
+   return(list("nextElement"=nextElement))  
+ }  
> it <- iterator()  
> it$nextElement()  
  
## 1  
  
> it$nextElement()
```

```
## 2
> it$nextElement()
## 3
```

Adibide honetan hiru ingurune ezberdin ditugu. Lehenik, `iterator` funtzioa ingurune globalean definiturik dago; ingurune honetan ez dago `id` aldagairik. Funtzioak berak ingurune bat definitzen du eta ingurune horretan `id` aldagaia erazagutzen da `—alegia`, `iterator` funtzioaren barruan—. Horrez gain, `nextElement` funtzioa ere definitzen da ingurune horretan; funtzio honek ere, noski, hirugarren ingurunea definitzen du.

`nextElement` funtzioaren barruan `id` aldagaia atzitzean funtzioaren ingurunean definiturik dagoenez aztertzen da. Bertan ez dagoenez, *goiko ingurunean* bilatzen da, hots, `iterator` funtzioaren ingurunean. Bertan `id` izeneko aldagai bat dagoenez, bere balioa hartzen da.

Adibidean ikus dezakegunez esleipena egiteko `<-` erabili beharrean, `<-` erabili dugu. Ikus dezakegun zer gertatzen den adibide berdinean `<-` erabiltzen badugu:

```
> iterator <- function(){
+   id <- 1
+   nextElement <- function(){
+     cat(id)
+     id <- id + 1
+   }
+   return(list("nextElement"=nextElement))
+ }
> it <- iterator()
> it$nextElement()

## 1

> it$nextElement()

## 1

> it$nextElement()

## 1
```

Goiko inguruneako objektu bati balio berri bat esleitzeko asmoarekin `<-` erabiltzen badugu, aldagaia bere jatorriko ingurunean aldatu beharrean, uneko ingurunean aldagaiaren kopia bat egiten da eta kopia hori aldatzen da. Hori dela eta, goiko ingurunean dagoen aldagaia (jatorrizkoa) ez da aldatzen eta, beraz, funtzioa exekutatzen dugun bakoitzean emaitza bera lortzen dugu. Honela, kopia bat egin beharrean, goiko ingurunean existitzen den aldagai bati balio bat esleitzeko, `<-` eragile berezia erabiltzen da, aurreko adibidean ikus dezakegun moduan.

Laburbilduz, `nextElement` funtzioa exekutatzen denean, honek `iterator` funtzioaren ingurunean dagoen `id` aldagaiaren balioari bat gehitzen dio eta

emaitza `iterator` funtzioaren inguruneko `id` aldagaian gordetzen da. Hori dela eta, funtzioa exekutatzen den bakoitzean `id` aldagaiaren balioa inkrementatu egiten da.

A.5 Objektuak: Oinarrizko motak hedatzen

R lengoian objektu mota ezberdinak eraiki eta erabil daitezke. Gehien erabiltzen direnak `S3` eta `S4` motakoak dira, baina atal honetan azken mota bakarrik deskribatuko dugu, hori baita liburutegian erabiltzen dena. Objektuen erabilera ondo ulertzeko [31] dokumentua kontsulta dezakezu.

A.5.1 *S4* Klaseen definizioa

Oinarrizko objektu motak erabiltzeaz gain, Rn objektu berriak ere definitu daitezke. Honetarako, lehenengo urratsa klase berri bat definitzea da. Klaseak zerrenda mota bereziak dira, `class` atributua eta `slot` deitzen diren eremuak dituztenak. `class` eremuak objektu mota adieraziko du eta `slot` eremuetan objektuak dituen osagai ezberdinak gordeko dira. Klaseak definitzeko `setClass` funtzioa erabiltzen da. Bertan, klase berriaren izenaz gain, `slot`-ak eta beraien motak definitzen dira.

```
> setClass(  
+   Class="Iterator",  
+   representation=representation(id="numeric", vector="numeric")  
+ )
```

Goiko kodea exekutatzen dugunean `Iterator` deritzon klase berri bat sortzen da. Ondoren, klase honetako objektuak edo instantziak sortzeko `new` funtzioa erabili dezakegu:

```
> iter <- new("Iterator", id=1, vector=1:10)  
> iter  
  
## An object of class "Iterator"  
## Slot "id":  
## [1] 1  
##  
## Slot "vector":  
## [1] 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
```

Erabiltzailearen ikuspegitik, klaseen inplementazioaren mamia ezkutatzea komenigarria da—objektuei bideratutako programazioan *enkapsulazioa* deitzen dena— hau zuzenean erabiltzea konplexua baita. Hori dela eta, klase bateko objektuak sortzeko funtzio eraikitzaile bat —edo gehiago— definitu ohi dira;

konbentzioz, klaseen izenak letra larriz hasi ohi dira eta eraikitzaileenak, berriz, letra xehez.

```
> iterator <- function(vector){
+   iter <- new("Iterator", id=1, vector=vector)
+   return(iter)
+ }
>
> iter <- iterator(1:10)
> iter

## An object of class "Iterator"
## Slot "id":
## [1] 1
##
## Slot "vector":
## [1] 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
```

Beste hainbat legoiaiatan objektu mota bakoitzak bere metodoak ditu. Rn, objektuen kontzeptua zertxobait ezberdina da, funtzio *orokorretan oinarritzen* baita (alegia, objektu mota ezberdinak onartzen dituen funtzioak). Hau da, funtzio orokorrak erazagutzen dira eta, gero, funtzioa objektu mota bakoitzeko implementatzen da. Kontzeptu horren adibide erraz bat print funtzioa da; ia edozein objektu motarekin exekutatu ahal da print funtzioa, baina bakoitza era ezberdinean pantailaratzen da.

Objektu klase berri bat sortzean, funtzio generikoak erabiltzeko bi pausu jarraitu behar dira. Lehenik, funtzioa existitzen ez bada, `setGeneric` agindua erabiliz funtzio orokorra erazagutzen da; ondoren, `setMethod` funtzioa erabiliz klase jakin horri dagokion kodea definitu behar da. Adibidez, sortu dugun `Iterator` klasearekin erabiltzeko `currentElement` funtzioa definituko dugu.

Lehenik, R n existitzen ez denez, funtzio orokor berria erazagutzen dugu:

```
> setGeneric(name="currentElement",
+            def=function(iterator)
+              standardGeneric("currentElement"))

## [1] "currentElement"
```

Orain, `Iterator` klaseko objektuekin erabiltzean funtzioak zein kode exekutatu behar duen definitu behar dugu.

```
> setMethod(
+   f      ="currentElement",
+   signature ="Iterator",
+   definition=function(iterator){
+     iterator@vector[iterator@id]
+   })

## [1] "currentElement"
```

Goiko kodean klase baten `slot`-ak nola atzitzen diren ere ikus daiteke `-alegia`, `@` ikurra erabiliz.

Sortu dugun funtzioa, beste edozein funtzio bezala exekuta dezakegu.

```
> currentElement(iter)
```

```
## [1] 1
```

Goiko adibidean funtzio orokor berri bat definitu dugu eta ondoren, gure klasera moldatu dugu. Hurrengo adibidean, berriz, `R` n iada existitzen den funtzio orokor bat gure klaserako egokituko dugu, *kortxete*-funtzioa¹¹.

```
> iter[4]
```

```
## Error in iter[4]: object of type 'S4' is not subsettable
```

```
> setMethod(  
+   f           = "[",  
+   signature = signature("Iterator"),  
+   definition=function(x, i, j, ..., drop) {  
+     x@vector[i]  
+   })
```

```
## [1] "["
```

```
> iter[4]
```

```
## [1] 4
```

Diseinuz, `R`ko `S4` objektuak aldaezinak dira. Aurreko adibide batean ikusi dugun bezala, objektu bat aldatzen saiatzen bagara, kopia bat sortzen da. Diseinu honek abantailak ditu, albo-efektuak ekiditen direlako. Hala eta guztiz ere, hainbat kasutan, objektuen egoera aldatzen duten funtzioak beharrezkoak izaten dira. Demagun, adibidez, `Iterator` klaserako `nextElement` funtzio bat nahi dugula; funtzio hau exekutatzen dugun bakoitzean bektorearen uneko elementua itzuli eta jarraian bere ondorengoarekin eguneratuko du objektuko `id` slot-a aldatuz.

```
> setGeneric(name="nextElement",  
+            def=function(iterator)  
+              standardGeneric("nextElement"))
```

```
## [1] "nextElement"
```

```
> setMethod(  
+   f           = "nextElement",  
+   signature   = "Iterator",  
+   definition = function(iterator) {  
+     elem <- iterator@vector[iterator@id]  
+     iterator@id <- iterator@id + 1
```

¹¹ Nahiz eta sintaxi berezia izan, kortxeteak eta beste hainbat eragile funtzioak dira. Izan ere, `v[1]` eta `"["(v, 3)` sintaxiak baliokideak dira.

```

+     return(elem)
+   })

## [1] "nextElement"

> nextElement(iter)

## [1] 1

> nextElement(iter)

## [1] 1

> nextElement(iter)

## [1] 1

```

Ikus daitekeen bezala, funtzioaren portaera ez da guk espero genuena. Akatsaren azalpena erraza da: funtzioa exekutatzen dugunean iterator aldagaiaren kopia bat egiten da eta, bertan, `id slot`-a aldatzen da, baina `iter` objektua ez da aldatzen. Aurreko adibide batean arazo hau ekiditeko «- eragilea erabili dugu, baina horretarako aldatu nahi dugun objektuaren izena kodea idazterakoan ezagutu behar dugu. Kasu honetan, informazio hau ez dugu eskuragarri funtzioa programatzerakoan, objektua zehatzaren izena (`iter` gure adibidean), erabiltzaileak definitzen baitu, hau edozein izan daitekeelarik.

Zorionez, badago era bat izen hori lortzeko, `substitute` eta `deparse` funtzioak erabiliz. Horrez gain, goiko ingurunean dagoen aldagai bati -edo, edozein ingurunean dagoen edozein aldagairi- balio bat eslei diezaiokegu, `assign` funtzioa erabiliz. Beraz, `nextElement` funtzioaren implementazio zuzena haxe izango litzateke.

```

> setGeneric(name="nextElement",
+           def=function(iterator)
+           standardGeneric("nextElement"))

## [1] "nextElement"

> setMethod(
+   f           ="nextElement",
+   signature   ="Iterator",
+   definition=function(iterator) {
+     elem <- iterator@vector[iterator@id]
+     # Get the object's name
+     object.name <- deparse(substitute(iterator))
+     # Modify the object
+     iterator@id <- iterator@id + 1
+     # Replace the original object
+     assign(object.name, iterator, envir=parent.frame())

+     return(elem)
+   })

```

```
## [1] "nextElement"
> nextElement(iter)
## [1] 1
> nextElement(iter)
## [1] 2
> nextElement(iter)
## [1] 3
```

Aginduen sekuentzia garrantzisua da oso. Lehenik, `iterator` objektua aldatu aurretik, goiko ingurunean duen izena berreskuratu behar dugu – kasu honetan `object.name` aldagaian gordetzen dugu –. Gero, izena dugunean, objektua nahi dugun moduan alda dezakegu eta, azkenik, kanpoko inguruneke aldagaiari esle diezaiokegu `assign` erabiliz; Goiko ingurunea lortzeko `parent.frame` funtzioa erabiliko dugu.

A.5.2 Kontrol-egiturak eta begiztak

Beste lengoai guztietan bezala, Rn kontrol-egitura eta begizta tipikoak erabil ditzaiegu. Jarraian, egitura horien sintaxia eta zenbait adibide jasotzen dira.

A.5.3 if agindua

Exekuzio baldintzatua ahalbidetzen duen egiturarik sinpleenak `if` eta `else if` aginduak dira. Funtzio hauek parametro bakarra dute –balio logiko bat itzultzen duen espresio bat, hain zuzen–. Hona hemen agindu hauen sintaxia.

```
> k <- 5
> if (k < 2){
+   message("k balioa 2 baino txikiagoa da")
+ }else if (k < 3){
+   message("k balioa 2 eta 3 balioen artean dago")
+ }else{
+   message("k balioa 3 edo handiagoa da")
+ }
## k balioa 3 edo handiagoa da
```


A.5.4 *switch* agindua

`if` agindua baldintza baten arabera bi kode blokeen artean aukeratzeko erabiltzen da; bi aukera baino gehiago egonez gero, `switch` agindua erabil dezakegu. Funtzio horren lehenengo parametroa zenbaki edo *string* bat itzultzen duen espresio bat da. Ondoren, definitutako espresioak itzuli dezakeen balio posible bakoitzari dagozkion kode blokeak datoz. Hona hemen sintaxiaren adibide pare bat.

```
> a <- 1
> b <- 2
> switch(a+b,
+       "A"={
+         message("Option A selected")
+       },
+       "B"={
+         message("Option B selected")
+       },
+       "C"={
+         message("Option C selected")
+       })

## Option C selected

> opt <- "B"
> switch(opt,
+       "A"={
+         message("Option A selected")
+       },
+       "B"={
+         message("Option B selected")
+       },
+       "C"={
+         message("Option C selected")
+       })

## Option B selected
```

Lehenengo adibidean espresioak zenbaki bat itzultzen du; kode blokeetatik zenbaki horri dagokiona exekutatzen da —emaitza i bada, i. blokea, alegia—. Bigarren adibidean, berriz, espresioaren emaitza *string* bat da eta beraz izen bereko blokea exekutatuko da. Azken aukera hau erabiltzeko, noski, kode blokeek izena izan behar dute. Berez, zilegi da izenik ez duen bloke bat uztea. Bloke honek kode lehenetsia definituko du: espresioak itzultzen duen *string*-a ez badago kode blokeen izenen artean, izenik gabeko kode blokea exekutatuko da.

A.5.5 for agindua

Iterazio kopuru ezaguna dituzten begiztak definitzeko `for` agindua erabili ohi da. Honetarako, `for` funtzioaren barruan, aldagaia in zerrenda motako espresio bat sortu beharko dugu; iterazio bakoitzean aldagaiak zerrendako balio bat hartuko du. Hona hemen adibide sinple pare bat.

```
> lst <- c("A", "B", "C", "D", "E")
> for (l in lst)
+   message("Uneko elementua:", l, "\n")

## Uneko elementua:A
## Uneko elementua:B
## Uneko elementua:C
## Uneko elementua:D
## Uneko elementua:E

> s <- 0
> for (i in 1:5) {
+   s <- s + i
+ }
> s

## [1] 15
```

A.5.6 while agindua

Kode bloke jakin bat baldintza bat bete arte behin eta berriro exekutatu behar denean `while` funtzioa erabiliko dugu. Funtzio horrek `logical` balio bat itzultzen duen espresio bat du parametro bakartzat. Hona hemen sintaxiaren adibide bat.

```
> i <- 1
> while(i < 5) {
+   message("i aldagaia txikiegia da (", i, ") ...\n")
+   i <- i + 1
+ }

## i aldagaia txikiegia da (1) ...
## i aldagaia txikiegia da (2) ...
## i aldagaia txikiegia da (3) ...
## i aldagaia txikiegia da (4) ...
```

A.5.7 Bestelako aginduak

Ikusi ditugun aginduez gain, badaude kodearen exekuzioa kontrolatzeko erabil daitezkeen beste hiru funtzio, `repeat`, `break` eta `next`. Informazio gehiago lortzeko, `?Control` exekuta dezakezu.

A.6 Begiztak eta paralelizazioa

R lengoaian dauden funtzio gehienak bektorialak dira eta, beraz, lengoia eragiketa bektorialak egiteko dago optimizaturik. Hau agerian gelditzen da jarraian dagoen adibidean.

```
> n <- 1000000
> x <- 1:n
> y <- n:1
>
> system.time({
+   x + y
+ })

##      user  system elapsed
##    0.004   0.000   0.003

> system.time({
+   for (i in 1:n){
+     x[i] + y[i]
+   }
+ })

##      user  system elapsed
##    0.740   0.000   0.741
```

Adibide honetan bi bektore sortu ditugu, 1etik n -rako balio osoak hartzen ditu batek eta n -tik 1erakoak besteak. **R**n bi bektore hauen osagaiak elementuz elementu batzeko $+$ eragilea erabil dezakegu zuzenean. Beraz, esan dezakegu, **R** n batuketa eragilea bektoriala dela. Are gehiago, eragiketa hau, bektoriala izateaz gain paralelizaturik dago. Beste hainbat legoaiatan bi bektore elementuz elementu batzeko begizta bat erabili beharko genuke, bigarren kode zatian egiten den bezala. Alabaina, **R**n hau ez da estrategiarik egokiena, $+$ eragilearen paralelizazioa apurtzen baitugu. Hau honela, adibideko bi kodeek berdina egiten dute baina lehenengoa askoz ere azkarragoa da.

Goiko adibide sinpletik ondorio garrantzitsu bat atera behar dugu: Oro har, **R**n programatzerako garaian begiztak saihesten saiatu behar gara. Are gehiago, **R**n funtzio asko daude definituta eta optimizatuta eta, beraz, ezer inplementatu aurretik, garatu nahi dugun kodea aurrera eramateko behar ditugun funtzioak iada ez direla existitzen egiaztatzea da egokiena.

Rren portaera bektoriala praktikoa izan arren, zenbait arazo sor ditzake. Adibidean, tamaina berdineko bi bektoreen batura oso eraginkorra dela ikusi dugu baina, zer gertatzen da bektoreak tamaina ezberdinekoak direnean?. Pentsa genezake aginduak errore bat jaurtiko lukeela, baina hori ez da gertatzen dena, jarraian dagoen adibidean ikus daitekeen bezala.

```
> x <- rep(5, 10)
> y <- 1:5
> x - y

## [1] 4 3 2 1 0 4 3 2 1 0

> z <- 1:3
> x * z

## Warning in x * z: longer object length is not a multiple of shorter
object length

## [1] 5 10 15 5 10 15 5 10 15 5
```

Lehenengo adibidean x bektoreak 10 elementu ditu, baina y bektoreak bakarrik 5. Kenketa egiten dugunean lortzen dugun bektoreak 10 elementu ditu, x bektorearen lehenengo 5 elementuei y kenduta eta, jarraian, x bektorearen azken 5 elementuei y berriz ere kenduta. Emaita hori R lengoaiaren bektoreak *birziklatu* egiten direlako lortzen da. Hau da, 10 tamainako bektore bat behar bada eta daukagun bektorearen tamaina soilik 5 bada, 10 tamainako bektore bat sortzen da 5 tamainakoa errepikatuz. Beste era batera esanda, lehenengo adibidean x bektoreari $1:5$ kendu beharrean $c(1:5, 1:5)$ kendu diogu.

Bigarren adibidean gauza bera gertatzen da, baina abisu bat jasotzen dugu, z -rekin x -ren tamainako bektorerik ezin delako sortu—izan ere, 10 ez da 3ren multiploa—. Birziklapena zenbait egoeratan oso praktikoa egingo zaigu—adibidez, x bektorearen elementu guztiei 1 gehitzeko $x + 1$ besterik ez dugu egin behar—. Programazio estilo honek ordea, programatzailearen alde tik lengoaiaren ezagutza handia eskatzen du.

Rren oinarritzko funtzio gehienak bektorialki funtzionatzeko daude optimizaturik. Zenbait kasutan ordea, guk sortutako funtzioaren bat bektorialki aplikatzeko beharra izango dugu; hau burutzeko `apply` motako funtzioak erabil ditzakegu. Existitzen diren guztietatik, ondorengo hiruak azalduko ditugu zehaztasun gehiagorekin: `sapply`, `lapply` eta `apply`.

A.6.1 *sapply* funtzioa

Zerrenda edo bektore baten elementu guztiei funtzio bat aplikatzeko `sapply` funtzioa erabiltzen da; Emaita, bektore bat edo matrize bat izango da, aukeraturako funtzioak itzultzen duen emaitza motaren arabera. Adibide moduan,

character bektore batek posizio bakoitzean daukan *string*-eko karaktere kopurua kalkulatu dugu.

```
> chr.vector <- c("Apply", "a", "Function", "over", "a",  
+               "List", "or", "Vector")  
> sapply(X=chr.vector, FUN=nchar)  
  
##      Apply      a Function      over      a  
##      5      1      8      4      1  
##      List      or      Vector  
##      4      2      6
```

A.6.2 *lapply* funtzioa

lapply funtzioak *sapply*-ek egiten duen gauza bera egiten du, baina emaitza zerrenda batean gordetzen da. Erabilera berdina da, bakarrik emaitza aldatzen da.

```
> lapply(X=chr.vector, FUN = nchar)  
  
## [[1]]  
## [1] 5  
##  
## [[2]]  
## [1] 1  
##  
## [[3]]  
## [1] 8  
##  
## [[4]]  
## [1] 4  
##  
## [[5]]  
## [1] 1  
##  
## [[6]]  
## [1] 4  
##  
## [[7]]  
## [1] 2  
##  
## [[8]]  
## [1] 6
```

Emaitza zerrenda izateak abantaila bat dakar: zerrendan dauden elementuak funtzio bati pasatu diezazkiokegu, `do.call` funtzioa erabiliz. Ikus dezagun adibide bat.

```

> aux <- lapply(1:4, FUN=function(x) {
+   data.frame("Name"=paste("X", x, sep=""), "Value"=x)
+ })
> aux

## [[1]]
##   Name Value
## 1   X1     1
##
## [[2]]
##   Name Value
## 1   X2     2
##
## [[3]]
##   Name Value
## 1   X3     3
##
## [[4]]
##   Name Value
## 1   X4     4

> do.call(rbind, aux)

##   Name Value
## 1   X1     1
## 2   X2     2
## 3   X3     3
## 4   X4     4

```

`lapply` funtzioaren emaitza 4 elementuko zerrenda bat da, elementu bakoitza `data.frame` bat izanik. Egitura hori ez denez oso praktikoa, `do.call` eta `rbind` funtzioak erabiliz 4 errenkadako `data.frame` bat sortu dezakegu, denak bilduz.

A.6.3 apply funtzioa

Ikusi ditugun funtzioek bektoreekin eta zerrendekin dihardute, dimentsio bakarreko egiturekin, alegia. Bi dimentsioko egitura bat badugu –matrize edo `data frame` bat–, `apply` funtzioa erabil dezakegu funtzioak bektorialki aplikatzeko. Funtzioaren erabilera antzerakoa da, baina oraingo honetan bi dimentsio ditugunez, beste parametro bat behar dugu, funtzioa ea errenkadaka, zutabeka edo elementuka aplikatu behar den adierazteko. Parametro hau `MARGIN` da, eta 1 balioa esleitzen badiogu, funtzioa errenkadaka aplikatuko da. Argumentuari 2 balioa esleitzen badiogu, berriz, funtzioa zutabeka aplikatuko da. Azkenik, funtzioa elementuz elementu aplikatu nahi badugu, argumentuari `c(1, 2)` bektorea esleitu beharko diogu.

```

> m <- matrix(1:200, ncol=20)
> apply(m, MARGIN=1, FUN=median)

## [1] 96 97 98 99 100 101 102 103 104 105

> apply(m, MARGIN=2, FUN=median)

## [1] 5.5 15.5 25.5 35.5 45.5 55.5 65.5
## [8] 75.5 85.5 95.5 105.5 115.5 125.5 135.5
## [15] 145.5 155.5 165.5 175.5 185.5 195.5

```

Goiko adibidean dauden bi deiek matrize baten mediana konputatzen dute, lehenengo kasuan errenkadaka eta bigarren kasuan zutabeka.

A.6.4 Noiz erabili *for* eta noiz ez

Oro har, begiztek kodearen eraginkortasunean eragin handia dute, baina eragin hori iterazio kopuruaren arabera da; begiztak iterazio gutxi baditu, eragina txikia izango da eta, hortaz, *for* egiturak erabil daitezke¹². Izan ere, kodearen ulergarritasuna dela eta, kasu horietan begiztak erabiltzea komenigarria da, *apply* motako funtzioak baino errazagoak baitira interpretatzeko.

Tamainaz gain, badago beste aspektu bat *apply* motako funtzioen eraginkortasuna baldintzatzen duena: sekuentzialtasuna. Kasu batzuetan, kodearen natura sekuentziala izango da, iterazio bakoitzean aurrekoan lortutako emaitza erabili behar dugulako, adibidez. Kasu horietan *apply* funtzioak lortzen duen paralelizazioa ez da erabilgarria, hortaz, ez dugu ezer irabazten. Hortaz, horrelako kasuetan *for* egiturak erabiltzea egokia da.

A.7 Ausazko zenbakiak

Liburuan zehar, hainbat kasutan ausazko zenbakiak sortu beharko ditugu; hau probabilitate-banaketak laginduz burutuko dugu. Izatez, **R** programazio lengoai estatistika arlorako sortu zenez, probabilitate-banaketak maneiatzeko funtzio ugari ditu. Edonola ere, atal honetan hiru funtzio besterik ez ditugu aztertuko.

Edozein funtzio exekutatzen dugunean, honen emaitza ausazkoa bada, sasi-ausazko zenbaki sortailea erabiltzen du nonbait. Honek, ausazko *hazia* finkaturik, zenbaki sekuentzia bat itzultzen du. Teorikoki sortzen diren zenbakiak ausazkoak izan arren, *hazia* berrabiaraziz sekuentzia errepika daiteke; ausazko *hazia* ezartzeko *set.seed* funtzioa erabili behar da, geroago adibidee-

¹² Are gehiago, kasu batzuetan begiztak eraginkorragoak izan daitezke

tan ikusiko dugun legez. Hau oso erabilgarria da adibide edo exekuzio errepikagarriak diseinatu nahi baditugu.

R lengoaian probabilitate-banaketak lagintzeko funtzio guztiek (oinarrizko instalazioan datozenak, bederen) egitura berbera dute; lehenengo letra `r` da eta, jarraian, banaketa identifikatzen duen izen bat dator. Adibide gisa, banaketa uniformea lagintzeko `runif` funtzioa erabil dezakegu¹³.

Laginketa egiteko funtzioetan, bi parametro mota egon ohi dira, laginketaren tamaina (`n`), eta probabilitate-banaketaren parametroak (hauek, funtzioaren arabera dira). Adibide moduan, ikusi dezagun nola sortu banaketa normala jarraitzen duten 10 balio (eta nola lor dezakegun, berriro, zerrenda berdina).

```
> rnorm(n=10, mean=0, sd=1)

## [1]  1.0722337 -1.6879507 -0.4492909 -0.2178185
## [5] -2.0501119 -0.7736897  1.2335281  0.6379436
## [9]  1.0274259 -0.2218026

> rnorm(n=10, mean=0, sd=1)

## [1]  1.1422597  0.2588999 -0.4975541  0.3721025
## [5] -1.1434922  0.6829612  0.7732031 -0.5252452
## [9] -1.1217019 -0.4995142

> set.seed(2)
> rnorm(n=10, mean=0, sd=1)

## [1] -0.89691455  0.18484918  1.58784533
## [4] -1.13037567 -0.08025176  0.13242028
## [7]  0.70795473 -0.23969802  1.98447394
## [10] -0.13878701

> set.seed(2)
> rnorm(n=10, mean=0, sd=1)

## [1] -0.89691455  0.18484918  1.58784533
## [4] -1.13037567 -0.08025176  0.13242028
## [7]  0.70795473 -0.23969802  1.98447394
## [10] -0.13878701
```

Ausazko bektore logikoak sortzeko konparaketak erabil ditzakegu. Esate baterako, demagun 10 tamainako bektore logiko bat sortu nahi dugula eta bektore horretan TRUE balioa topatzearen probabilitatea 0.25 izatea nahi dugula. Laginketa hau ondoko kodea erabiliz egin dezakegu:

```
> runif(10) < 0.25

## [1] FALSE FALSE FALSE  TRUE FALSE FALSE  TRUE
```

¹³ Egitura hau laginketa egiteko funtzioetan ez ezik, beste hainbat funtziotan ere errepikatzen da, baina lehenengo letra hori aldatuz. Zehazki, dentsitatea kalkulatzeko funtzioak, kuantilak eta probabilitate metatuak kalkulatzeko funtzioak `d`, `q` eta `p` letraz hasten dira, hurrenez hurren


```
## [8] FALSE FALSE TRUE
```

Gauza bera egin dezakegu `sample` funtzioa erabiliz.

```
> sample(x=c(TRUE, FALSE), size=10,
+        replace=TRUE, prob=c(0.25, 0.75))

## [1] FALSE FALSE TRUE TRUE FALSE FALSE TRUE
## [8] FALSE FALSE FALSE
```

Funtzio honek `x` argumentuaren bidez pasatako bektorearen ausazko lagin-keta egiten du, `prob` argumentuan zehaztutako probabilitateak erabiliz; elementuak errepikatu ahal diren zehaztea ere posible da, `replace` argumentuaren bidez. Funtzio honen argumentu bezala edozein bektore erabil dezakegu. Jarraian faktore-bektore baten adibidea dugu.

```
> levels <- paste("C", 1:10, sep="")
> levels

## [1] "C1" "C2" "C3" "C4" "C5" "C6" "C7"
## [8] "C8" "C9" "C10"

> f.vector <- factor(x=levels, levels=levels)
> sample(f.vector, 10, replace=TRUE)

## [1] C10 C3 C2 C2 C10 C8 C10 C4 C6 C9
## Levels: C1 C2 C3 C4 C5 C6 C7 C8 C9 C10
```

Goiko adibidean ez dugu `prob` argumentua erabili. Probabilitateak zehaztu ezean, bektorean dauden elementu guztiei probabilitate berdina ezartzen zaie. Errepikapenak dituzten laginketak burutzeko ez ezik, `sample` funtzioa bektoreetako elementuen ausazko permutazioak sortzeko ere erabil daiteke, `replace=FALSE` aukeratuz:

```
> sample(x=f.vector, size=length(f.vector), replace=FALSE)

## [1] C1 C10 C6 C7 C2 C5 C4 C3 C8 C9
## Levels: C1 C2 C3 C4 C5 C6 C7 C8 C9 C10
```

A.8 Grafikoak ggplot2 paketearekin

Grafikoak, datuak eta algoritmoen emaitzak aztertzeko oso tresna erabilgarriak dira. **R** lengoaiari badaude zenbait funtzio grafikoak egiteko —hala nola, `plot`, `hist`, etab.—. Funtzio hauek erabiliz grafiko mota asko egin daitezke, baina hainbat kasutan malgutasun gutxi daukate. Kasu horietan, oinarritzko funtzioak erabili beharrean, eskuragarri dauden beste pakete batzuk ere erabili ditzakegu, besteak beste, **ggplot2**. Sarrera honetan, grafikoak sortzeko

Rren oinarritzko funtzioak alde batera utzita, **ggplot2** paketearen erabilera ikusiko dugu.

Pakete horrekin hainbat ataza sinplifikatu egiten dira, baina hasieran bere sintaxia ulertzeko zaila izan daiteke. Atal honetan aspektu praktikoak aztertuko ditugu laburki. Paketeaaren filosofia orokorrean edo aspektu aurreratuetan interesa izan ezker, [39] liburuan azalpen guztiak topa ditzakezu.

Sintaxiarekin hasi aurretik, paketeak darabilen filosofiari buruz gauza pare bat aipatu behar dira. Zer edo zer bistaratu nahi dugunean, grafikoan hainbat *puntu* izango ditugu. Hemen erabiliko dugun puntu kontzeptua oso zabala da, hau da, ez dira zergatik izan behar, literalki, puntuak. Hori baino, puntuak taula batean ditugun lerroak dira, non zutabe bakoitzak puntu horren ezaugarri bat adierazten duen. Izan ere, eta puntu *fisikoetatik* ezberdintzeko, *datu elementuak* deituko diegu hemendik aurrera. Beraz, datu elementu bakoitza deskribatzeko zenbait aldagai izango ditugu. Adibidez, optimizazio algoritmo batzuen progresioa baldin badugu, datu elementu bakoitza algoritmoaren iterazio bat izan daiteke. Iterazio hori adierazteko uneko helburu funtzioaren balioa, igarotako denbora, artean erabilitako ebaluazio kopurua, aplikatutako algoritmoa edo erabilitako parametroak, etab. izan ditzakegu.

Beraz, grafiko bat egiten dugunean gure datuetan dauden datu elementuak irudikatzen ditugu eta, horretarako, datu elementuak adierazteko erabiltzen ditugun aldagaiak grafikoaren *elementu estetikoetan* mapeatzen ditugu. Elementu estetikoak (*aesthetics*, ingelesez), datu elementuen ezaugarri grafikoak dira (kokapena, kolorea, tamaina, etab.). Optimizazio algoritmoaren adibidearekin jarraituz, algoritmo ezberdinen portaera aztertzeko plot sinple bat egin dezakegu helburu funtzioaren balioa vs. denbora irudikatuz. Horrelakoetan, algoritmo bakoitza kolore batekin edota puntu mota batekin irudikatzea da ohikoena. Honetarako, ondoko mapeo hauek egingo ditugu:

- Igarotako denbora \rightarrow posizioa, X ardatzean
- Helburu funtzioaren balioa \rightarrow posizioa, Y ardatzean
- Algoritmoa \rightarrow kolorea (edo puntu-mota)

Rko liburutegi estandarrak erabiltzen ditugunean, horrelako mapeoak inplizituki egiten ditugu; **ggplot2** paketea, berriz, esplizituki egin behar dira. Hortaz, grafiko bat egiteko datu elementuen deskribapenak behar ditugu. Hauek `data.frame` egitura batean egon beharko dira gordeta: lerro bakoitzean datu elementu bat izan behar dugu eta zutabe bakoitzak ezaugarri edo aldagai bat jaso beharko du. Esate baterako, lehen aipatu dugun adibidean erabiliko genukeen `data.frame`-ak itxura hau izango luke:

##	Iteration	Algorithm	Time	Evaluation
## 1	1	VNS	0.0000000	171.75571
## 2	2	VNS	2.6550866	157.27851
## 3	3	VNS	3.7212390	51.49364
## 4	4	VNS	5.7285336	44.13919
## 5	5	VNS	9.0820779	15.44657
## 6	1	Tabu	0.0000000	247.97652

```
## 7          2      Tabu 0.6050458 192.46035
## 8          3      Tabu 1.9823934 179.40463
## 9          4      Tabu 2.6951691 124.42481
## 10         5      Tabu 2.8340258  96.02593
```

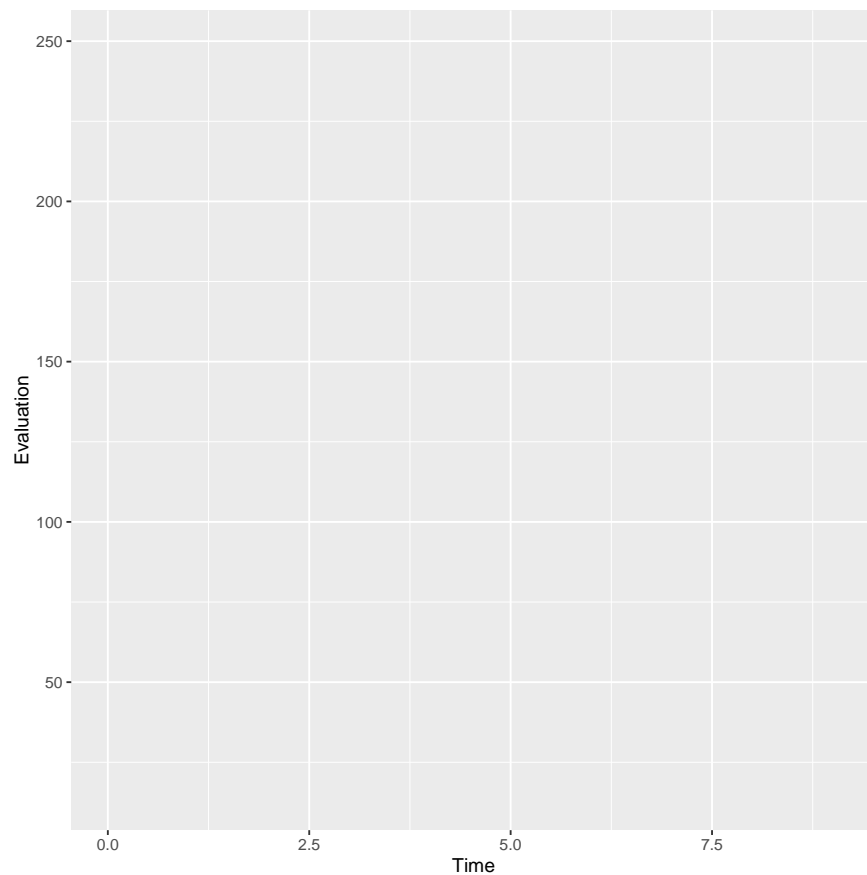
Behin gure datuak horrelako formatuan jarri ditugunean, bi pausu besterik ez ditugu eman behar `ggplot2`-rekin grafiko bat egiteko. Lehenik, mapeco estetikoak ezarri `aes` funtzioa erabiliz. Azkenik, grafikoan nahi ditugun *geruzak* sortu. Azken pausua `geom_` aurrizkia duten hainbat funtzioen bitartez egiten da.

Aurreko adibidearekin jarraituz, sortutako datuak nola irudikatu ikusiko dugu. Lehendabiziko pausua mapecoa ezartzea da:

```
> g <- ggplot(data=df, mapping=aes(x=Time, y=Evaluation,
+                                   col=Algorithm, shape=Algorithm))
```

Goiko kodeak `ggplot` motako objektu bat sortzen du. Objektu horrek datuak eta mapecoak soilik gordetzen ditu eta, hortaz, bistaratzen saiatzen bagara errore bat jasoko dugu:

```
> print(g)
```



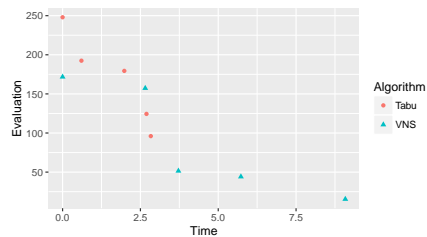
Bistaratu ahal izateko irudiari geruzaren bat gehitu behar diogu. Esate baterako, puntuen bidez irudikatu nahi badugu, `geom_point` funtzioa erabil dezakegu:

```
> g <- g + geom_point()  
> print(g)
```

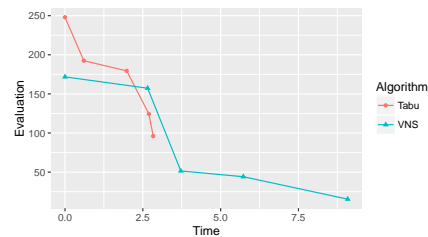
Ikus daitekeen bezala (A.1(a) Irudian), paketea hainbat gauzatzaz automatikoki arduratzen da —ardatzen mugak, legendak, koloreak, etab.—. Alabaina, gero ikusiko dugun bezala, elementu horiek eskuz ere alda daitezke.

`ggplot2` paketearekin grafikoak geruzaz geruza eraikitzen dira. Hortaz, sortu dugun grafikoari geruza berri bat gehitu diezaiokegu, datu elementuak marren bidez irudikatuz:

```
> g <- g + geom_line(size=0.5)  
> g
```



(a)



(b)

A.1 irudia ggplot2 paketearekin sortutako irudiak

Ikus dezakezunez (A.1(b) Irudian), marraz irudikatzeko `geom_line` funtzioa erabiltzen da. Funtzio horrek zenbait parametro ditu grafikoaren itxura aldatzeko erabil ditzakegunak.

Datu elementuak irudikatzeko funtzio ugari daude. Zerrenda osoa ikusteko paketearen `weg` gunean dagoen laguntza kontsulta dezakezu.¹⁴

Adibidean ikusi dugun moduan, elementu estetikoaren *eskalak* automatikoki doitzen dira. Edonola ere, balioak eskuz alda daitezke, `scale_` aurrizkia duten funtzioak erabiliz. Demagun, adibidez, erabiltzen diren koloreak aldatu nahi ditugula. Koloreak eskuz jartzeko `scale_color_manual` funtzioa erabili beharko dugu (emaitza A.2(a) Irudian ikus daiteke):

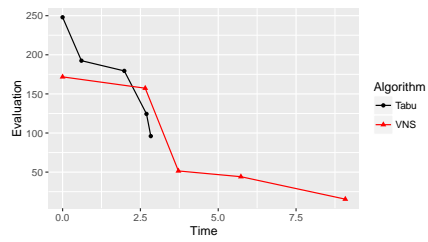
```
> g <- g + scale_color_manual(values=c("black", "red"))
> g
```

Elementu estetiko bakoitzeko `-posizioa`, `kolorea`, `tamaina`, `etab.` hainbat funtzio daude eskala egokitze. Funtzio hauen erabilera ere paketearen dokumentazioak topa dezakezu.

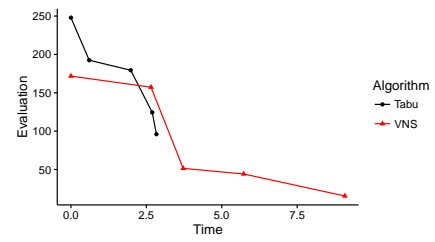
Amaitzeko, mapeoarekin zerikusirik ez duten zenbait elementu ere alda daitezke. Esate baterako, ezer esaten ez badiogu, paketeak ardatzetako etiketak grises margotzen ditu. Hori `-eta` beste hainbat gauza aldatzeko `theme` funtzioa erabil daiteke. Funtzio honek parametro asko ditu eta, hortaz, bere erabileran ez dugu sakonduko. Horren ordez, adibide moduan, `theme_classic` funtzioa erabiliko dugu, grafikoari itxura *klasikoa* emateko aldaketa tipiko batzuk egiten dituen (emaitza A.2(b) Irudian ikus daiteke).

```
> g + theme_classic()
```

¹⁴ <http://docs.ggplot2.org>



(a)



(b)

A.2 irudia Grafikoen itxura aldatzeko funtzioen adibidea

Eranskinak B

R Programazio Estilo-Gida

Liburuan zehar hainbat adibide daude metaheuristikoen erabilera eta implementazioa erakusteko; adibide hauek **R** lengoaian daude implementatuta. Lengoaia interpretatu bat aukeratzearen arrazoia ondorengoa da: Liburuko kodea oinarritzat hartuta, probak egitea erraza izan dadin. Alabaina, liburuko kodea ulergaitza balitz, nekez lortuko genuke gure helburua.

Kodearen ulergarritasuna hobetzearen programazioan estilo-gidak erabili ohi dira. Askotan, horrelako gidak lengoaia garatzen duen taldeak berak idazten ditu, baina **R**ren kasuan ez da horrela; Hare gehiago, ez dago ezta ere *de facto*-koa den estilorik. Dena dela, horrek ez du esan nahi **R** programazio estilo-gidarik ez dagoenik. Liburu honetan jarraituko ditugun irizpideak (gehienak, behintzat) hainbat gidetatik ateratakoak dira. Bereziki, azpian aipatzen ditugun gidetan oinarritu gara hemen proposatutako estiloa sortzeko:

- Google's **R** style guide. Googlek eragin handiko hainbat estilo-gida sortu ditu eta, arlo honetan, erreferente nagusienetariko bat da.
- Hadley Wickham's guide. H. Wickhamek **ggplot2** paketea garatu zuen eta gaur egun RStudio konpainian dihardu. Haren gida *Advanced R* liburuan aurki daiteke.
- Bioconductor's coding style. Aurreko eranskinean ikusi dugun bezala, Bioconductor **R** pakete-biltegi nagusienetariko bat da.

Goian apiatutako gidak ez ezik, beste hainbat dokumentu ere erabili ditugu gure estilo-gida definitzeko, hala nola, C. Guillespies's guide, Bernd Bischl's guide, G. William's style, Genolini's introduction to S4 [14], P.E. Johnson's analysis [21] and RÃath's paper on naming conventions [3].

B.1 Izenak

Estilo-giden artean, aldagaien eta funtzioen izenak sortzeko arauak dira, ziurrenik, heterogenidade handien dutenak. Gai honi buruz oso artikulu interesgarri bat aurki daiteke *The R Journal* aldizkarian [3]. Artikulu honek gehien erabiltzen diren estrategiak laburbiltzen ditu eta, ondoren, CRAN biltegian dauden paketeak aztertzen ditu, estrategia bakoitzaren erabilera erakusteko.

Googleko gidak dio, aldagaien izenei dagokienez, letra xeheak erabili behar direla eta hitzak puntu ikurra erabiliz banandu behar direla –adibidez, `aldagaiaren.izena`–. Gidak formatu hura lehenetsi arren, hitzak letra larritz banatzea ere onartzen dela dio –alegia, `aldagaiarenIzena`–.

Funtzioen kasuan, berriz, puntuak ez erabiltzeko dio gidak; Hitzak letra larriak erabiliz banatu behar dira, lehenengo letra, kasu honetan, larria izanik –esate baterako, `NireFuntzioa`–.

Wickham-ek aldagaien zein funtzioen kasuan hitzak azpimarra erabiliz banandu behar direla dio eta Bioconductor gidak, berriz, letra larritz banatzea gomendatzen du.

Izenen formatua ez da gustuaren kontu bat soilik, erabilera ere –hots, tradizioa– aintzat hartzekoa da. [3] artikuluan egiten den azterketak tradizio hori zein den islatzen du. Bertan, ikus daiteke aldagaien izenei dagokienez, Googleko gidaren gomendioak direla erabilienak. Funtzioen izenen kasuan aldiz, CRAN biltegitik ateratako datuen arabera, Bioconductor gidan proposatutako formatua da nagusi.

Gida gutxi jasotzen dute klaseei izenak emateko arauak. Horietako bat Bioconductor-enarena da, zeinek izenak letra larritz hastea eta hitzak letra larriak erabiliz banatzea proposatzen duen.

Hau dena kontutan hartuz, hone hemen arau batzuk izenak sortzeko.

R1: Aldagaien izenak. Letra xehez idatzi behar dira eta hitzak puntu ikurraren bitartez banandu behar dira.

<code>nire.aldagaia</code>	✓
<code>nire_aldagaia</code>	✗
<code>Nire.Aldagaia</code>	✗
<code>nireAldagaia</code>	✗
<code>NireAldagaia</code>	✗
<code>nirealdagaia</code>	✗

R2: Funtzioen izenak. Lehenengo letra xehea izan behar da eta hitzak letra larrien bitartez banandu behar dira.

<code>nireFuntzioa</code>	✓
<code>nire_funtzioa</code>	✗
<code>nire.funtzioa</code>	✗
<code>Nire.funtzioa</code>	✗
<code>NireFuntzioa</code>	✗
<code>nirefuntzioa</code>	✗

R3: Klaseen izenak. Lehenengo letra larria izan behar da eta hitzak letra larrien bitartez banandu behar dira.

NireKlasea	✓
nire_klasea	✗
nire.klasea	✗
nireKlasea	✗
Nire.Klasea	✗
nireklasea	✗

Fitxategien izenak jartzeko arauak ere gida gutxitan jasotzen dira, eta izena bera baino, hedapena zein izan behar den arautzen da. Edonola ere, fitxategien izenak erabakitzean sistema eragile ezberdinek dituzten berezitasunak ere aintzat hartu behar dira. Esate baterako, Unix sistematan fitxategien izenetan tarte erabiltzea ez da oso gomendagarria, arazoak sor ditzakeelako.

Hona hemen fitxategien izenak sortzeko poposaturiko arauak:

R4: Fitxategien izenak. *Script* fitxategien izenek letra xehez, zenbakiz eta arazorik ematen ez duten karaterez –hala nola, marratxoa edo azpirra– osatuko dira. Hitzak banatzeko, azpimarra erabili eta, beste sinboloentzat –dezimalak banatzeko sinboloa, esate baterako– berriz, marratxoa. **A7** Gomen-dioan arau honen salbuespen bat jasotzen da.

R5: Fitxategien hedapenak. *Script* fitxategien hedapena .R da, eta ez .r. Datu eta workspace-n kasuetan, berriz, fitxategien hedapena .RData izan behar da.

nire_fitxategia.R	✓
nire.fitxategia.R	✗
nireFitxategia.R	✗
NireFitxategia.R	✗
nirefitxategia.R	✗

B.2 Sintaxia

Kodea idaztean, ondoko arau hauek jarraitu behar dira.

R6: Lerroen luzeera. Lerroek 80 karaktereko luzeera izan behar dute, gehienez.

R7: Koskatzea. Kodea koskatzean –begiztetan, esate baterako– bi tarte erabili behar dira, eta inoiz ez tabuladorea.

R8: Esleipenak. Exekutatzeko den kodean, *beti* <- sintaxia erabili balioak esleitzean. Funtzioak definitzean eta deitzean, berriz, balioak esleitzeko = ikurra erabili.

Beste hainbat lengoaitan gertatzen den legez, Rlengoaian kode-blokeak giltza ikurra erabiliz mugatzen dira. Jarraian kode-blokeen inguruko arau batzuko jasotzen dira.

R9: Kode blokeak. Kode-bloke guztiak giltzen artean idatzi behar dira, lerro bakarrekoak ere.

R10: Hasierako giltza I. Ez idatzi hasierako giltza bera bakarrik lerro batean.

R11: Hasierako giltza II. Ez idatzi ezer hasierako giltzaren ostean, iruzkin bat ez bada.

R12: Hasierako giltza III. Ondo koskatu kode-bloke guztiak, kode-blokea erabiltzen duen aginduaren hasiera erreferentziatzat hartuz.

R13: Hasierako giltza IV. Hasierako giltzaren aurretik, tarte bat utzi.

R14: Amaierako giltza. Amaierako giltza bera bakarrik lerro batean idatzi behar da. Arau honek bi salbuespen ditu. Lehenegoa `else` hitz erreserbatua da, `if` egituraren lehenengo blokea ixten duen amaierako giltzaren ostean idatziko dena. Bigarren salbuespena funtzio barruan dauden kode-blokeak dira. Kasu honetan, amaierako giltza eta gero funtzioaren deia ixten duen `parantesia(k)` idatz daite(z)ke.

B.3 Tarteak

Tarte edo hutsuneen erabileraren inguruan konsensu handia egon arren, badaude giden artean zenbait ezberdintasun. Hauen artean = ikurra dago. Googleko gidaren (eta beste zenbait giden) arabera, ikurra horren bi aldeetan tarteak utzi behar dira. Bioconductorreko gidan, berriz, tarterik ez ustea da gomendioa. Guk, kode lerroak albait motzen egitearren, Bioconductorreko gidan proposatutakoari jarrituko diogu.

R15: Eragile bitarrak. Eragile bitar guztiak (hala nola, `+`, `==`, `/`, etab.) hutsunez inguratu behar dira. Salbuespenak `:`, `::` eta `:::` eragileak eta `=` eragilea funtzio-deietan.

R16: Parentesiak Funtzio-deietan izan ezik, hasierako parentesiaren aurretik tarte bat utzi.

R17: Komak Koma baten aurrean, tarterik ez; Koma baten ostean, beti tarte bat utzi.

R18: Lerrokatzeko tarteak Kodea lerrokatzeko (esleipenak, esate baterako), tarte gehiago sartzea badago. Izan ere, tarte hauen erabilera gomentatzen da, kodearen irakurgarritasuna hobetzen baitute.

R19: Iruzkina I. Iruzkinetan, beti tarte bat utzi `#` sinboloa eta gero.

R20: Iruzkinak II. Kodea eta gero idazen diren iruzkinetan, utzi bi tarte # sinboloa baino lehenago.

B.4 Dokumentazioa

R funtzioen dokumentazioa idazteko **.Rd* fitxategiak erabiltzen dira, baina sistema hori paketeetan dauden funtzioekin bakarrik erabil daiteke. Guk funtzio bat idazten dugunean, haren dokumentazioa idazteko bi aukera ditugu: **roxygen2** paketearen sintaxia erabili `[[?]]` edo, Googleko gidan gomentatzen den moduan, funtzioaren kodean bertan dokumentazioa txertatu, iruzkinak erabiliz.

R21: Funtzioen dokumentazioa. **roxygen2** paketea erabili ezean, gehitu, funtzioaren hasieran, dokumentazio-iruzkinak. Dokumentazioak, gutxienez, eremu hauek izan behar ditu: Azalpen motz bat (lerro batekoa), argumentuen deskripzioa, funtzioak itzultzen duenaren deskripzioa eta, beharrezkoa balitz, azalpen gehigarriak. Hona hemen egituraren adibide bat.

```
new.function <- function(arg1, arg2) {  
  # Description of what the function does  
  #  
  # Args:  
  #   arg1: Description  
  #   arg2: Description  
  #  
  # Returns:  
  #   Description of the result  
  #  
  # Details:  
  #   Any relevant information  
  #  
  ...  
}
```

B.5 Fitxategien egitura

Estilo-giden xedea kodea ulergarriagoa izatea da. Helburu hori lortzeko, sintaxia ez ezik, *script* fitxategien antolaketa ere garrantzitsua da. Estiloaren aspektu hau Googleko gidan jasota dago. Jarraian dagoen araua bertan dauden irizpideetan oinarrituta dago.

R22: Fitxategien egitura. *Script* fitxategiak egitura honen arabera antolatu behar dira (aukeratu behar diren puntuak kasu bakoitzaren arabera):

- *Copyright*-eko informazioa.
- Egile(ar)en informazioa. Fitxategia banatu behar bada, gehitu kontaktu-informazioa.
- Fitxategiaren deskripzioa.
- Data eta bertsioari buruzko informazioa.
- Behar diren `source` eta `library` agindu guztiak.
- Funtzioen definizioa.
- Konfigurazio-informazioa (bide-izenak, konstanteak, etab.).
- Exekutatu behar den kodea.

Fitxategien elementuak banatzeko, Wickham-ek iruzkin mota berezia erabiltzea gomendatzen du, kodea zatitzeko.

R23: Kodearen zatiketa. Kodea zatitzeko, `-` edo `=` sekuentzia batekin amaitzen duten iruzkinak erabili

B.6 Funtzioak

Atal honek funtzioak idazterakoan aintzat hartu behar diren arau pare bat jasotzen ditu.

R24: Argumentuak. Funtzio-definizioetan, balio lehenetsirik ez duten argumentuak hasieran idatzi behar dira; Balio lehenetsia dutenak argumentuen zerrendaren amaierara gehitu behar dira.

R25: `return` agindua. Funtzio batek zer edo zer itzultzen badu, `return` agindua erabili beti.

B.7 Beste arau batzuk

R26: Puntu eta koma. Ez erabili `;` ikurra; lerro bat, agindu bat.

R27: Konstante logikoak. Konstante logikoak adierazteko `TRUE` eta `FALSE` erabili beti, eta ez `T`, `F`, `1` edo `0`.

R28: Erabiltzaileari zuzendutako mezuak. Kodearen exekuzioan erabiltzaileari mezuak bidaltzeko `message` funtzioa erabili. Kodeak konpondu dituen arazoen berri emateko `warning` funtzioa erabili eta konpondu ez dituen akatsak, `error` funtzioaren bidez adierazi. `cat` eta `print` funtzioak objektuak bistaratzeko soilik erabili.

B.8 Beste gomendio batzuk

Atal honek beste hainbat gomendio jasotzen du. Gomendio hauek ez daude kodearekin zuzenean lotuta eta, hortaz, bere irakurgarritasunean eragin

handirik ez dute. Hori dela eta, gomendioak arau maila ez daukate baina, halere, hemen jasotzen direnak kodea idazteko praktika onak dira.

A1: Izenak. Izen motzak eta ezkerretik eskuinera irakurtzen direnak erabili. Ahal den neurrian, funtzioen izenerako aditzak erabili. Saiatu existitzen diren funtzioen izenak ez erabiltzen.

A2: Objektuak. Ez erabili objektuak beharrezkoak ez badira. Egin behar duzuna S3 objektuekin egin ahal bada, ez erabili S4 motako objektuak.

A3: Hizkuntza. Izenak eta iruzkinak idazteko ingelesa erabili beti.

A4: Kopiatu eta itsatsi. Ez kopiatu eta itsatsi kodea. Kode zati bat toki batean baino gehiagotan erabili behar baduzu, funtzio bat sortu.

A5: Paketeak. Askotan erabiliko duzun funtzio-sorta bat baduzu, pakete batean sartzea baloratu.

A6: Fitxategien egitura. *Script* fitxategi batek lerro asko baditu, kodea fitxategitan zatitu (esate baterako, banatu funtzioen definizioa eta exekutatzen den kodea).

A7: Fitxategien izenak. Fitxategi batean klase bakar baten definizioa badago, jarri fitxategiari klasearen izena. Kasu honetan, **R4** araua ez da aplikagarria.

A8: Kode-probak. Kodea probatzen duten funtzioak inplementatu. Helburu hau betetzeko diseinatuta dagoen paketeren bat erabiltzen ez baduzu, jarri proba-funtzioak beste fitxategi batean. Fitxategi hauei izena emateko jatorrizko fitxategien izenari `_test.R` atzizkia gehitu.

A9: Argumentuak. Funtzio-deietan, erabili beti `argumentu=balioa` sintaxia, ez bakarrik balioa.

Bibliografia

1. Aarts, E.H.L., Laarhoven, P.J.M. (eds.): Simulated Annealing: Theory and Applications. Kluwer Academic Publishers, Norwell, MA, USA (1987)
2. Altschul, S.F., Gish, W., Miller, W., Myers, E.W., Lipman, D.J.: Basic local alignment search tool. *Journal of Molecular Biology* **215**(3), 403–410 (1990)
3. Bååth, R.: The state of naming conventions in *r* **4**(2), 74–75 (2012)
4. Bartz-Beielstein, T., Lasarczyk, C., Preuss, M.: The sequential parameter optimization toolbox. In: T. Bartz-Beielstein, M. Chiarandini, L. Paquete, M. Preuss (eds.) *Experimental Methods for the Analysis of Optimization Algorithms*, pp. 337–360. Springer-Verlag, Berlin, Germany (2010)
5. Beni, G.: The concept of cellular robotic system. In: *Proceedings of the IEEE International Symposium on Intelligent Control*, pp. 57–62 (1988)
6. Blum, C., Merkle, D.: *Swarm Intelligence: Introduction and Applications*. Springer-Verlag (2008)
7. Bonnini, S., Corain, L., Marozzi, M., Salmaso, L.: *Nonparametric Hypothesis Testing: Rank and Permutation Methods with Applications in R*. Wiley (2014)
8. Burkard, R.E., Çela, E., Pardalos, P.M., Pitsoulis, L.S.: The quadratic assignment problem (1998)
9. Congram, R.K.: Polynomially searchable exponential neighborhoods for sequencing problems in combinatorial optimization
10. Dorigo, M.: *Optimization, learning and natural algorithms*. Ph.D. thesis, Politecnico di Milano (1992)
11. Dorigo, M., Maniezzo, V., Colorni, A.: Ant system: Optimization by a colony of cooperating agents. *Trans. Sys. Man Cyber. Part B* **26**(1), 29–41 (1996)
12. Dueck, G., Scheuer, T.: Threshold accepting—a general-purpose optimization algorithm appearing superior to simulated annealing. *Journal of Computational Physics* **90**, 161–175 (1990)
13. Feo, T.A., Resende, M.G.: A probabilistic heuristic for a computationally difficult set covering problem. *Operations Research Letters* **8**(2), 67 – 71 (1989)
14. Genolini, C.: A (Not so) Short Introduction to S4 (2009)
15. Glover, F.: Future paths for integer programming and links to artificial intelligence. *Computers & Operations Research* **13**(5), 533–549 (1986)
16. Goldberg, D.E., Lingle, R.: Alleles Loci and the Traveling Salesman Problem. In: *ICGA*, pp. 154–159 (1985)
17. Gupta, J.N., Stafford, E.F.: Flow shop scheduling research after five decades. *European Journal of Operational Research* (169), 699–711 (2006)

18. Gwiazda, T.: Genetic algorithms reference Volume I Crossover for single-objective numerical optimization problems. v. 1. Lightning Source (2006)
19. Holland, J.H.: *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. University of Michigan Press, Ann Arbor, MI, USA (1975)
20. Huang, M., F.Romeo, Sangiovanni-Vincentelli, A.: An efficient general cooling schedule for simulated annealing. In: *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer-Aided Design*, pp. 381–384 (1986)
21. Johnson, P.E.: *R Style. An Rcheological Commentary* (2015)
22. Kellerer, H., Pferschy, U., Pisinger, D.: *Knapsack problems*. Springer (2004)
23. Kennedy, J., Eberhart, R.C.: Particle swarm optimization. In: *Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks*, pp. 1942–1948 (1995)
24. Kirkpatrick, S., Gelatt, C.D., Vecchi, M.P.: Optimization by simulated annealing. *Science* **220**, 671–680 (1983)
25. Larrañaga, P., Lozano, J.A.: *Estimation of Distribution Algorithms: A New Tool for Evolutionary Computation*. Kluwer Academic Publishers (2002)
26. Lopez-Ibañez, M., Dubois-Lacoste, J., Stützle, T., Birattari, M.: The irace package: Iteratec racing for automatic algorithm configuration. Tech. Rep. TR/IRIDIA/2011-004, IRIDIA (2011)
27. Lozano, J.A., Larrañaga, P., Inza, I., Bengoetxea, E.: *Towards a New Evolutionary Computation: Advances on Estimation of Distribution Algorithms (Studies in Fuzziness and Soft Computing)*. Springer-Verlag New York, Inc. (2006)
28. Moscato, P., Fontanari, J.: Convergence and finite-time behavior of simulated annealing. *Advances in Applied Probability* **18**, 747–771 (1990)
29. Pepper, J.W., Golden, B., Wasil, E.: *Solving the traveling salesman problem with demon algorithms and variants*. Tech. rep., Smith School of Business, University of Maryland, College Park, Maryland (2000)
30. Pesch, E., Glover, F.: TSP ejection chains. *Discrete Applied Mathematics* **76**(1&A33), 165 – 181 (1997)
31. R Core Team: *R Language Definition*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria (2015). URL <http://cran.r-project.org/manuals.html>
32. Reinelt, G.: *TSPLIB - A t.s.p. library*. Tech. Rep. 250, Universität Augsburg, Institut für Mathematik, Augsburg (1990)
33. Sheskin, D.J.: *Handbook of Parametric and Nonparametric Statistical Procedures*. CRC Press (2003)
34. Shmoys, D.B., Tardos, É.: An approximation algorithm for the generalized assignment problem. *Mathematical Programming* **62**(1-3), 461–474 (1993)
35. Taillard, E.: Benchmarks for basic scheduling problems. *European Journal of Operational Research* **64**(2), 278–285 (1993)
36. Takagi, H.: Interactive evolutionary computation: fusion of the capabilities of ec optimization and human evaluation. *Proceedings of the IEEE* **89**(9), 1275–1296 (2001)
37. Talbi, E.G.: *Metaheuristics: From Design to Implementation*. Wiley Publishing (2009)
38. Černý, V.: Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: An efficient simulation algorithm. *Journal of Optimization Theory and Applications* **45**(1), 41–51 (1985)
39. Wickham, H.: *ggplot2: elegant graphics for data analysis*. Springer New York (2009)
40. Wolpert, D.H., Macready, W.G.: No free lunch theorems for optimization. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **1**(1), 67–82 (1997)