Formulación biobjetivo para el problema de minimización del número de cruces en K páginas

Nicolás R. Uribe[1][0000-0001-8984-7715], Alberto Herrán[1][0000-0003-0348-0313]*, Antonio J. Nebro[2][0000-0001-5580-0484], and J. Manuel Colmenar[1][0000-0001-7490-9450]

[1] Dept. Computer Sciences and Statistics, Universidad Rey Juan Carlos
{nicolas.rodriguez, alberto.herran, josemanuel.colmenar}@urjc.es
[2] Dept. de Lenguajes y Ciencias de la Computación, ITIS Software, Universidad de Málaga, ajnebro@uma.es

Abstract. El problema de minimización del número de cruces en K páginas (KPMP) tiene como objetivo reducir el número de cruces entre aristas de un grafo cuando este se incrusta en una estructura denominada *libro*, compuesta por un *lomo*, donde se colocan los vértices, y un conjunto de K *páginas*, a las que se asignan las aristas. En este trabajo, se propone una variante biobjetivo del KPMP que, además de minimizar los cruces entre aristas asignadas a una misma página, minimiza simultáneamente la longitud total de las aristas a lo largo del lomo. Para resolver esta variante, se proponen tres algoritmos evolutivos multiobjetivo (NSGA-II, MOEA/D y SMS-EMOA) que utilizan una codificación mixta de las soluciones que combina una permutación (orden de los vértices) con un vector entero (asignación de aristas a páginas). Tras realizar un ajuste automático de los parámetros de cada algoritmo, éstos se evalúan sobre un conjunto compuesto por 70 instancias en libros con $K \in \{2, 4, 6\}$ páginas. Los resultados muestran que SMS-EMOA alcanza el mejor rendimiento global para $K \geq 4$, mientras que NSGA-II domina para $K = 2$.

Keywords: Optimización multiobjetivo · Operadores de codificación mixta · Configuración de algoritmos · Análisis de convergencia

1 Introducción

Los problemas de disposición de grafos buscan mapear un grafo general en una estructura regular predefinida. Las estructuras típicas consideradas en la literatura incluyen líneas [12], ciclos [13], rejillas [10], árboles [2] y toros [8], entre otras. En este trabajo se considera una estructura particular denominada *libro*, compuesta por un *lomo* (donde se colocan los vértices) y *páginas* (donde se asignan las aristas) dando lugar al *K-page crossing number minimization problem* (KPMP). Específicamente, dado un grafo $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, una solución para el KPMP

* Corresponding author: Nicolás R. Uribe (nicolas.rodriguez@urjc.es)

consiste en una ordenación lineal de los vértices de $\mathcal{V}$ a lo largo del *lomo* del libro (representado como una línea), junto con una asignación de cada arista de $\mathcal{E}$ a una de las K *páginas* del libro (representadas como semiplanos). El objetivo es minimizar el número de cruces entre aristas asignadas a la misma página [4,14]. Este problema aparece en una gran variedad de contextos prácticos, desde aplicaciones clásicas en el diseño VLSI [4] hasta desarrollos más recientes en el análisis del plegamiento de ARN [16], así como en el dibujo y la visualización de grafos, donde reducir los cruces de aristas es esencial para mejorar la legibilidad de los diagramas resultantes [11].

Los conceptos de *incrustación en libro* (una solución sin cruces) y *grosor de libro* (menor número de páginas necesario para incrustar un grafo en un libro) fueron introducidos por Ollmann [15]. Posteriormente, Masuda et al. [14] demostraron que minimizar los cruces es *NP-hard* incluso para $K = 2$. Los enfoques heurísticos incluyen algoritmos genéticos [5], algoritmos meméticos [18], heurísticas voraces [9] y búsqueda de vecindad variable [6], todos ellos tratando la minimización de cruces como un problema con un único objetivo. Sin embargo, en aplicaciones prácticas surge una segunda medida natural de calidad: la *longitud total de las aristas a lo largo del lomo*. Esta medida no es un mero artificio matemático: en el diseño VLSI está estrechamente relacionada con el *cutwidth* de la incrustación, que Chung et al. [4] ya identifican como objetivo relevante junto al número de páginas en el diseño de arrays de procesadores tolerantes a fallos, puesto que longitudes de arista menores implican una menor congestión de cableado a lo largo del lomo. Asimismo, en el dibujo de grafos la uniformidad y brevedad de las aristas es, junto al propio número de cruces, uno de los criterios estéticos clásicos que determinan la legibilidad de un trazado [3]. Longitudes de arista menores suelen producir además disposiciones más compactas. No obstante, forzar que los extremos estén próximos tiende a aumentar el número de cruces, haciendo que ambos objetivos entren en conflicto. Aunque las métricas de calidad conflictivas en dibujo de grafos identificadas en la literatura motivan formulaciones multiobjetivo [17], no se ha encontrado ningún trabajo que haya abordado una variante biobjetivo del KPMP. Por tanto, en este trabajo se formula el KPMP como un problema biobjetivo que minimiza simultáneamente el número de cruces y la longitud total de las aristas a lo largo del lomo, y que se propone denominar como BO-KPMP.

2 Definición del problema

Sea $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ un grafo no dirigido con n vértices ($n = |\mathcal{V}|$) y m aristas ($m = |\mathcal{E}|$), y sea K un número fijo de páginas. Un dibujo en un libro se define mediante una función de ordenación de vértices $\varphi : \mathcal{V} \to \{1, 2, \ldots, n\}$, que especifica la posición de cada vértice en el lomo, y una función de asignación de aristas $\pi : \mathcal{E} \to \{1, \ldots, K\}$, que asigna cada arista a una de las páginas disponibles. Dadas dos aristas e_{uv} y e_{pq} cuyos extremos satisfacen (sin pérdida de generalidad) $\varphi(u) < \varphi(v)$ y $\varphi(p) < \varphi(q)$ respectivamente, y $\varphi(u) < \varphi(p)$, estas producen un

cruce ($e_{uv} \otimes e_{pq} = 1$) si y solo si

$$\varphi(u) < \varphi(p) < \varphi(v) < \varphi(q) \ \wedge \ \pi(e_{uv}) = \pi(e_{pq}).$$

Por otro lado, la longitud de una arista e_{uv} se define como la distancia entre los vértices u y v en la ordenación del lomo. Teniendo en cuenta estas definiciones, el BO-KPMP puede formularse matemáticamente de la siguiente manera:

$$\min \quad \mathcal{F}(\varphi, \pi) = \{f_1, f_2\} \tag{1a}$$

$$\text{s.t.} \quad f_1 = \tfrac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} \sum_{\substack{e,e' \in \pi^{-1}(k) \\ e \neq e'}} (e \otimes e') \tag{1b}$$

$$f_2 = \sum_{\{u,v\} \in \mathcal{E}} |\varphi(u) - \varphi(v)| \tag{1c}$$

La Fig. 1(a) muestra un ejemplo de un grafo general con $n = 5$ vértices y $m = 6$ aristas. Las figuras 1(b) y 1(c) representan dos incrustaciones diferentes en un libro de 2 páginas (página 1 en líneas continuas y página 2 en líneas discontinuas). La solución (b) presenta una incrustación sin cruces y con una longitud total de 14. En contraste, la solución (c) reduce la longitud total en una unidad a costa de introducir un cruce. Por tanto, ninguna solución domina a la otra.

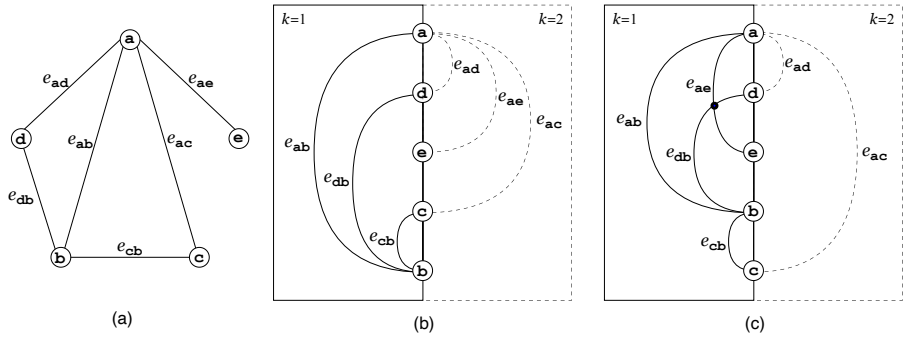


Fig. 1. Ejemplo de grafo (a), y dos incrustaciones diferentes en un libro de 2 páginas donde $\mathcal{F}(\varphi, \pi) = (0, 14)$ en (b), y $\mathcal{F}(\varphi, \pi) = (1, 13)$ en (c).

3 Codificación y propuesta algorítmica

Muchos problemas de optimización combinatoria involucran variables de decisión heterogéneas. Herrera et al. [7] proporcionaron un marco temprano para tratar

espacios de búsqueda mixtos continuos/discretos en algoritmos genéticos. El reto principal consiste en diseñar operadores que respeten la estructura de cada tipo de variable.

Las variables de decisión del BO-KPMP son heterogéneas. Una solución debe especificar tanto (i) una ordenación de los vértices a lo largo del lomo como (ii) una asignación de cada arista a una de las K páginas. Por tanto, se utiliza una codificación mixta $\mathbf{x} = (\varphi \mid \pi)$, donde $\varphi \in \mathfrak{S}_n$ es una permutación que representa el orden de los vértices, y $\pi \in \{1, \ldots, K\}^m$ es un vector entero cuyas entradas indican la página asignada a cada arista. Esta representación encaja de forma natural en el marco VAMOS (*Vectorized Architecture for Multiobjective Optimization Studies*), que aplica operadores de variación de manera independiente a cada componente: cruce y mutación basados en permutaciones para φ, y operadores específicos para enteros para π. De este modo, cada parte de la solución se modifica con operadores que preservan su estructura, lo que permite una búsqueda efectiva sobre el espacio combinado de soluciones.

Aunque VAMOS admite varios algoritmos evolutivos multiobjetivo (MOEAs) que cubren los tres paradigmas principales, en este trabajo se selecciona un MOEA representativo de cada familia. Específicamente, se implementa NSGA-II como algoritmo basado en dominancia, MOEA/D como enfoque basado en descomposición y SMS-EMOA como método basado en indicadores. Los detalles sobre los operadores específicos y los ajustes de parámetros de cada algoritmo se proporcionan en la Sección 4.

4 Estudio computacional

El estudio computacional se realiza sobre un conjunto de 70 instancias de referencia procedentes de cuatro familias de grafos comúnmente utilizadas en la literatura del KPMP [9,6]. Específicamente, este conjunto contiene 43 grafos circulares, 20 grafos aleatorios, 5 matrices bandeadas y 2 grafos estructurados adicionales, con tamaños $n \in [8, 187]$ y $m \in [16, 715]$. Estos grafos se incrustan en libros con $K \in \{2, 4, 6\}$ páginas.

Cada uno de los tres algoritmos se ajusta de forma independiente utilizando Optuna [1] con el muestreador TPE y poda por mediana (120 *trials* por algoritmo). Cada *trial* evalúa una configuración sobre 10 instancias representativas seleccionadas mediante agrupamiento k-medoids en un espacio de características PCA, utilizando 2 ejecuciones con un presupuesto de 5.000 evaluaciones por ejecución. El tamaño de población se fija en 100 para los tres algoritmos. Dado que BO-KPMP utiliza una codificación mixta, los operadores de variación se configuran de forma independiente para cada componente de la solución (permutación del lomo o asignación a páginas). La Tabla 1 muestra la mejor configuración encontrada para cada algoritmo. La configuración automática selecciona de forma unánime el cruce `position` y el cruce entero `uniform`, mientras que la mutación `insert` es preferida por dos de los tres algoritmos.

Las configuraciones con mejor rendimiento reportadas en la Tabla 1 se prueban sobre el conjunto completo de 70 instancias para libros con $K \in \{2, 4, 6\}$ pági-

Table 1. Mejor configuración encontrada para cada algoritmo. El símbolo "–" indica que un parámetro no es aplicable al algoritmo.

Parámetro	**NSGA-II**	**MOEA/D**	**SMS-EMOA**
offspringRatio	1.0	–	–
selection	`tournament`	–	–
selectionPressure	9	–	10
externalArchive	`unbounded`	–	–
neighborSize	–	38	–
delta	–	0.6914	–
replaceLimit	–	5	–
aggregation	–	`tchebycheff`	–
spineCrossover	`position`	`position`	`position`
spineCrossoverProb	0.9039	0.9377	0.8521
spineMutation	`swap`	`insert`	`insert`
spineMutationProb	0.3806	0.9515	0.4603
pageCrossover	`uniform`	`uniform`	`uniform`
pageCrossoverProb	0.2616	0.4196	0.7927
pageMutation	`reset`	`pm`	`pm`
pageMutationProb	0.0276	0.4158	0.8997
pageMutationEta	–	36.71	29.26

nas, utilizando un presupuesto de 5.000 evaluaciones. Además, cada instancia se ejecuta 10 veces y se calculan los resultados promediados. El rendimiento de cada algoritmo se mide utilizando el indicador de hipervolumen (HV) [19]. Para cada combinación instancia–K, todos los algoritmos se evalúan con el mismo punto de referencia, definido como $(1.1\, f_1^{\max} + 1,\ 1.1\, f_2^{\max} + 1)$, donde $f_1^{\max}$ y $f_2^{\max}$ son los mayores valores objetivo observados para esa combinación instancia–K. Además, los rankings se comparan mediante la prueba de Friedman y pruebas post-hoc de rangos con signo de Wilcoxon ($\alpha = 0.05$). La Tabla 2 resume para cada algoritmo y valor de K: (i) el hipervolumen *relativo* medio normalizado por el mejor algoritmo en cada instancia (HV (%)); y (ii) el recuento de victorias según la mediana del hipervolumen (Wins). Como se puede observar, NSGA-II obtiene los mejores resultados para $K = 2$, mientras que SMS-EMOA domina según ambos criterios para $K = 4$ y $K = 6$, lo que muestra que el enfoque de estado estacionario basado en indicadores escala mejor a medida que aumenta K. NSGA-II gana en 96 de las 210 combinaciones instancia–K según la mediana del hipervolumen (45.7%), seguido por SMS-EMOA (82, 39.0%) y MOEA/D (32, 15.2%).

La prueba de Friedman rechaza la igualdad de rangos medianos para cada valor de K ($p = 0.0015$ para $K = 2$; $p < 0.001$ para $K \geq 4$). Las pruebas post-hoc de rangos con signo de Wilcoxon revelan un patrón dependiente de K: para $K = 2$ ninguna diferencia por pares es significativa excepto SMS-EMOA frente a MOEA/D ($p = 0.003$); para $K \geq 4$, SMS-EMOA supera significativamente a

Table 2. Comparación de algoritmos para diferentes valores de K. Los mejores valores se muestran en negrita.

Algoritmo	K	**HV (%)**	**Wins**
NSGA-II	2	**96.0**	**42**
MOEA/D	2	91.1	8
SMS-EMOA	2	92.2	20
NSGA-II	4	94.9	29
MOEA/D	4	89.8	11
SMS-EMOA	4	**97.8**	**30**
NSGA-II	6	95.1	25
MOEA/D	6	93.7	13
SMS-EMOA	6	**98.2**	**32**

ambas alternativas ($p < 0.001$), mientras que NSGA-II y MOEA/D permanecen estadísticamente equivalentes. El ranking global para $K \geq 4$ es SMS-EMOA $>$ {NSGA-II $\approx$ MOEA/D}.

Finalmente, se evalúa la convergencia de cada variante de MOEA. La Fig. 2 muestra el HV medio frente al presupuesto de evaluaciones. Como se observa en la figura, SMS-EMOA converge de forma consistentemente más rápida, seguido por MOEA/D y NSGA-II. En resumen, con 1.000 evaluaciones solo se alcanza el 48% del HV final, mientras que aumenta hasta el 86% y el 95% para 3.000 y 4.000 evaluaciones, respectivamente, lo que indica una convergencia tardía. La convergencia de SMS-EMOA es la más rápida (60% con 1,000 evaluaciones frente al 35% de NSGA-II), probablemente porque su esquema de estado estacionario produce 4.900 iteraciones frente a solo 49 generaciones de NSGA-II con el mismo presupuesto. Con 5.000 evaluaciones, el 84% de las ejecuciones produce frentes de Pareto con múltiples puntos, confirmando que los dos objetivos son genuinamente conflictivos en la mayoría de las instancias.

5 Conclusiones

Se ha introducido una versión biobjetivo del problema de minimización del número de cruces en K páginas para grafos incrustados en una estructura tipo libro, BO-KPMP, que minimiza simultáneamente los cruces y la longitud total de las aristas inducida por la ordenación de los vértices en el lomo. En este estudio se comparan tres MOEAs sobre un conjunto de 70 instancias de referencia, tras configurar cada MOEA de forma independiente mediante un ajuste automático de sus parámetros. Aunque NSGA-II gana en 96 de las 210 combinaciones instancia–K según la mediana del hipervolumen (45.7%), para $K \geq 4$ el ranking es SMS-EMOA $>$ {NSGA-II $\approx$ MOEA/D}. El análisis de convergencia muestra que con 1.000 evaluaciones solo se alcanza el 48% del HV final, mientras que el umbral del 95% requiere 4.000 evaluaciones. El trabajo futuro incluye la evaluación con presupuestos mayores, la comparación con las soluciones propor-

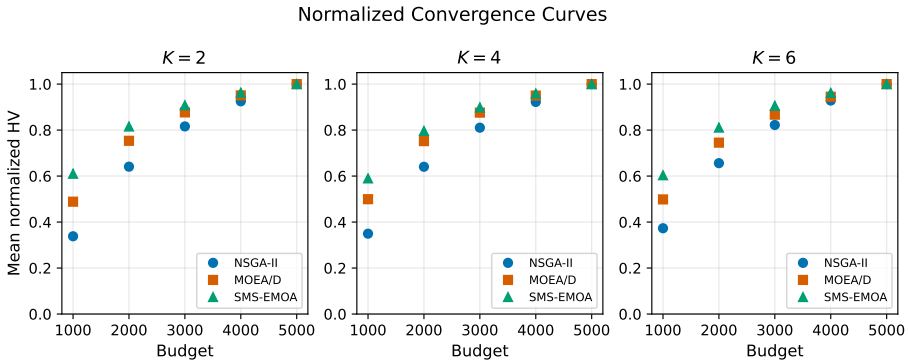


Fig. 2. Hipervolumen normalizado medio frente al presupuesto de evaluaciones para cada valor de K.

cionadas por un modelo exacto basado en una formulación MILP y la extensión a grafos reales de mayor tamaño.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España (MCIN/AEI/10.13039/501100011033) bajo las referencias de proyecto PID2024-156045NB-I00, TSI-100930-2023-3 PID2021-125709OA-C22 y PID2024-155363OB-C41, y por FEDER Una manera de hacer Europa; así como por la Comunidad Autónoma de Madrid con referencia de proyecto TEC-2024/COM-404 y por el proyecto DGP_PIDI_2024_01174, Junta de Andalucía.

References

1. Akiba, T., Sano, S., Yanase, T., Ohta, T., Koyama, M.: Optuna: A next-generation hyperparameter optimization framework. In: Proc. KDD. pp. 2623–2631 (2019)
2. Bienstock, D.: On embedding graphs in trees. Journal of Combinatorial Theory, Series B **49**(1), 103–136 (1990)
3. Buchheim, C., Ebner, D., Jünger, M., Klau, G.W., Mutzel, P., Weiskircher, R.: Exact crossing minimization. In: Healy, P., Nikolov, N.S. (eds.) Graph Drawing (GD 2005). Lecture Notes in Computer Science, vol. 3843, pp. 37–48. Springer, Berlin, Heidelberg (2006). `https://doi.org/10.1007/11618058_4`
4. Chung, F.R.K., Leighton, F.T., Rosenberg, A.L.: Embedding graphs in books: A layout problem with applications to VLSI design. SIAM Journal on Algebraic and Discrete Methods **8**(1), 33–58 (1987)
5. He, H., Sýkora, O., Mäkinen, E.: Genetic algorithms for the 2-page book drawing problem of graphs. Journal of Heuristics **13**(1), 77–93 (2007)
6. Herrán, A., Colmenar, J.M., Duarte, A.: An efficient metaheuristic for the K-page crossing number minimization problem. Knowledge-Based Systems **207**, 106352 (2020)

7. Herrera, F., Lozano, M., Verdegay, J.L.: Tackling real-coded genetic algorithms: Operators and tools for behavioural analysis. Artificial Intelligence Review **12**(4), 265–319 (1998)
8. Juvan, M., Marinček, J., Mohar, B.: Embedding a graph into the torus in linear time. Journal of Combinatorial Theory, Series B **62**(1), 1–24 (1994)
9. Klawitter, J., Mchedlidze, T., Nöllenburg, M.: Experimental evaluation of book drawing algorithms. In: International Symposium on Graph Drawing and Network Visualization. pp. 224–238. Springer (2017)
10. Lin, L., Lin, Y.: Square-root rule of two-dimensional bandwidth problem. RAIRO - Theoretical Informatics and Applications **45**(4), 399–411 (2011)
11. López-Rodríguez, D., Mérida-Casermeiro, E., Ortíz-de Lazcano-Lobato, J.M., Galán-Marín, G.: K-pages graph drawing with multivalued neural networks. In: International Conference on Artificial Neural Networks. pp. 816–825. Springer (2007)
12. Lozano, M., Duarte, A., Gortázar, F., Martí, R.: Variable neighborhood search with ejection chains for the antibandwidth problem. Journal of Heuristics **18**, 919–938 (2012)
13. Lozano, M., Duarte, A., Gortázar, F., Martí, R.: A hybrid metaheuristic for the cyclic antibandwidth problem. Knowledge-Based Systems **54**, 103–113 (2013)
14. Masuda, S., Nakajima, K., Kashiwabara, T., Fujisawa, T.: Crossing minimization in linear embeddings of graphs. IEEE Transactions on Computers **39**(1), 124–127 (1990)
15. Ollmann, L.T.: On the book thicknesses of various graphs. In: Proc. 4th Southeastern Conference on Combinatorics, Graph Theory and Computing. p. 459 (1973)
16. Pervouchine, D.D.: Circular exonic rnas: when rna structure meets topology. Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Gene Regulatory Mechanisms (2019)
17. Purchase, H.C.: Metrics for graph drawing aesthetics. Journal of Visual Languages & Computing **13**(5), 501–516 (2002)
18. Satsangi, D., Srivastava, K., Srivastava, G.: K-page crossing number minimization problem: An evaluation of heuristics and its solution using GESAKP. Memetic Comput. **5**(4), 255–274 (2013)
19. Zitzler, E., Thiele, L.: Multiobjective evolutionary algorithms: A comparative case study and the Strength Pareto approach. IEEE Trans. Evolutionary Computation **3**(4), 257–271 (1999)