AUTOMATYKA • 2005 • Tom 9 • Zeszyt 1–2

Wojciech Chmiel*, Piotr Kadłuczka*

Warunkowa wartość oczekiwana funkcji celu w konstrukcji algorytmów przybliżonych dla zagadnień permutacyjnych

1. Wprowadzenie

W większości algorytmów przybliżonych w celu ukierunkowania procesu przeszukiwania przestrzeni rozwiązań wykorzystuje się jedynie wartość funkcji celu uzyskiwanych rozwiązań. Jednak odpowiedź na pytanie, czy aktualnie dokonywana modyfikacja rozwiązania korzystna będzie w dalszej perspektywie przebiegu algorytmu, jest nader trudnym problemem. Próba precyzyjnej odpowiedzi szczególnie dla zagadnień permutacyjnych jest skazana na niepowodzenie, ze względu na liczność przestrzeni rozwiązań. Okazuje się, że wprowadzenie dodatkowego, nawet nie w pełni doskonałego kryterium oceny nowych rozwiązań może poprawić efektywność algorytmu przybliżonego. W przypadku rozważanych w artykule algorytmów ewolucyjnych (*AE*) w oparciu o to kryterium realizuje się przeciwstawne mechanizmy różnicowania i intensyfikacji, sterujące zbieżnością. Podstawowe koncepcje wykorzystania warunkowej wartości oczekiwanej w *AE* przedstawiono w następnym artykule. Alternatywnymi propozycjami dla innych metod przybliżonych są (opublikowane w [1, 2]) sposoby sterowania przebiegiem algorytmu za pomocą mechanizmu akceptacji rozwiązania w algorytmie symulowanego wyżarzania (*SA*) oraz mechanizmu zabronień w algorytmie poszukiwania z zabronieniami – *Tabu Search* (*TS*).

Pomysł zastosowania warunkowej wartości funkcji celu zapożyczono z metodyki derandomizacji algorytmów stochastycznych, których zastosowanie dla rozwiązania wielu trudnych problemów optymalizacyjnych daje często lepsze wyniki, niż w przypadku algorytmów deterministycznych. Ponadto są one łatwiejsze w implementacji oraz działają szybciej niż algorytmy deterministyczne, które natomiast pozwalają uzyskać rozwiązanie z zadaną dokładnością. Łącząc zalety obu, poszukuje się w oparciu o algorytm stochastyczny takiego algorytmu deterministycznego, dla którego nie będzie konieczne wydatne zwiększenie nakładów obliczeniowych oraz pamięciowych.

Ogólnie można wyróżnić dwie najpopularniejsze metody derandomizacji, służące przekształcaniu algorytmów stochastycznych do ich wersji deterministycznej:

1) metodę redukcji przestrzeni prawdopodobieństwa,
2) metodę prawdopodobieństw warunkowych.

* Katedra Automatyki, Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie

Jeśli chodzi o drugą metodę, to znajduje ona swoje zastosowanie zarówno w optymalizacji, jak i rozwiązywaniu problemów decyzyjnych. Można ją wykorzystać w sytuacji, w której mamy algorytm aproksymacyjny, dla którego istnieje zmienna losowa X będąca miarą jakości wyjściowych wyników algorytmu oraz znana jest też wartość oczekiwana zmiennej losowej X – $E[X]$. Aby stworzyć deterministyczny algorytm aproksymacyjny, konieczne jest znalezienie takiego ciągu losowego, który prowadzi do uzyskania wartości wyjściowej algorytmu, którego jakość jest co najmniej równa $E[X]$. Istnienie powyższego ciągu losowego jest uwarunkowane definicją wartości oczekiwanej dla danego problemu. Jeśli jest to możliwe, metoda prawdopodobieństw warunkowych stara się w sposób deterministyczny określić taką sekwencję losową.

2. Warunkowa wartość oczekiwana funkcji celu dla zagadnienia *QAP*

Opis modelu matematycznego kwadratowego zagadnienia przydziału (*QAP*) [3], będącego przykładem zagadnienia permutacyjnego, zamieszczono w artykule [11]. W celu określenia wzorów na prawdopodobieństwo warunkowe funkcji celu dla problemu *QAP* konieczne są pewne definicje oraz twierdzenia z teorii grup i grup permutacji, które zebrano w pracy [4]: definicja grupy, podgrupy, warstwy lewostronnej i prawostronnej grupy, twierdzenia o niepustym podzbiorze skończonej grupy, o rozłącznej sumie warstw lewostronnych (Lagrange'a), grupie permutacji oraz definicje grupy symetrycznej, 2-przechodniej, ściśle 2-przechodniej, lemat o rzędzie grupy ściśle 2-przechodniej (Zassenhausa), definicja odległości permutacji, a także twierdzenie o sumie wartości oczekiwanej.

Jeśli macierze $A = (a_{ij})_{n\times n}$ oraz $B = (b_{ij})_{n\times n}$ są odpowiednio macierzami odległości oraz przepływów dla problemu kwadratowego przydziału, to zachodzi twierdzenie 1.

Twierdzenie 1. Średnia wartość funkcji celu dla zagadnienia *QAP*

Niech $f\colon S_n \to \mathbb{R}$ będzie zdefiniowana następująco

$$f(\pi) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{\pi(i)\pi(j)},$$

gdzie $A = (a_{ij})_{n\times n}$ oraz $B = (b_{ij})_{n\times n}$ będą pewnymi macierzami.

Wtedy

$$\overline{f} = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{1\le i\ne j\le n} a_{ij} \sum_{1\le k\ne l\le n} b_{kl} + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} a_{ii} \sum_{j=1}^{j} b_{ii} \tag{1}$$

Dowód powyższego twierdzenia opiera się na uwzględnieniu wszystkich możliwych przydziałów n obiektów do n pozycji. Wtedy średnia wartość funkcji celu wynosi

$$\overline{f} = \frac{1}{n!}\sum_{\pi\in S_n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{\pi(i)\pi(j)} \tag{2}$$

Uwzględniając, że każda uporządkowana para obiektów (k, l), gdzie $k \neq l$ oraz $k, l \in \{1, ..., n\}$, występuje $(n-2)!$-krotnie na ustalonych pozycjach (i, j) oraz sumując po wszystkich uporządkowanych parach pozycji (i, j), gdzie $i \neq j$ oraz $i, j \in \{1, ..., n\}$, otrzymujemy

$$(n-2)! \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} a_{ij} \sum_{1 \leq k \neq l \leq n} b_{kl} \tag{3}$$

Obliczmy sumę wynikającą z kosztów przydziału obiektu $j \in \{1, ..., n\}$ do pozycji i. Takich przypisań jest $(n-1)!$ oraz biorąc pod uwagę wszystkie pozycje $i \in \{1, ..., n\}$, otrzymujemy

$$(n-1)! \sum_{i=1}^{n} a_{ii} \sum_{j=1}^{n} b_{jj} \tag{4}$$

Biorąc pod uwagę sumę wzorów (3) oraz (4), po ich przekształceniu otrzymujemy równanie zawarte w twierdzeniu.

Bardziej istotnym dla konstrukcji algorytmów jest przedstawiony poniżej wzór na warunkową wartość oczekiwaną funkcji celu dla problemu *QAP*.

Niech:

$m, k \in$ N, $m \geq k$, gdzie N oznacza zbiór liczb naturalnych;
$[k, m]$ – zbiór wszystkich liczb naturalnych z zakresu od k do m:
$[k, m] = \{k, k+1, ..., m\}$;
D – podzbiór zbioru $[1, m]^n = \{(x_1, x_2, ..., x_n): x_i \in [1, m], i = 1, ..., n\}$;
f – pewna funkcja $f: [1, m]^n \to \mathbb{R}$.

Rozważmy następujący problem optymalizacji

$$\min \{ f(x_1, x_2, ..., x_n): (x_1, x_2, ..., x_n) \in \mathrm{D}\} \tag{5}$$

dla $x_{i_1}^0, ..., x_{i_k}^0 \in [1, ..., m]$, gdzie $1 \leq i_s \neq i_t \leq n$, $1 \leq s < t \leq k$.

Wtedy $D(x_{i_1}^0, ..., x_{i_k}^0) = \left\{(x_1, ..., x_n) \in D : x_{i_i} = x_{i_1}^0, ..., x_{i_k} = x_{i_k}^0\right\}$.

Zakładając, że dla $k = 0$: $D\left(x_{i_1}^0, ..., x_{i_k}^0\right) = D$, możemy rozważać D jako przestrzeń prawdopodobieństwa, poprzez przypisanie każdemu elementowi tej przestrzeni $x^0 = \left(x_1^0, ..., x_n^0\right)$ nieujemnej wartości – prawdopodobieństwa – $P(x^0)$ takiego, że $\sum_{x^0 \in D} P(x^0) = 1$.

Przy takiej interpretacji f jest zmienną losową, dzięki czemu możemy posługiwać się wartością oczekiwaną Ef funkcji f, a także prawdopodobieństwem warunkowym.

Zagadnienie *QAP* może być sformułowane jako problem typu (5) następująco:

znajdź *min* $\{ f(\pi(1), ..., \pi(n)): \pi \in S_n\}$, gdzie S_n określa grupę symetryczną permutacji.

Jeśli założymy, że $P(\pi \in S_n) = 1/n!$ oraz, że warunkowa wartość funkcji celu jest w postaci $E(f\,|\pi(s_1) = c(s_1),..., \pi(s_i) = c(s_i), ..., \pi(s_k) = c(s_k))$ [5, 6], to ogólną formułę dla częściowo ustalonego rozwiązania problemu kwadratowego przydziału wyraża twierdzenie 2.

Twierdzenie 2. Warunkowa wartość oczekiwana funkcji celu dla zagadnienia *QAP*

Niech $f\colon S_n \to \mathbb{R}$ będzie zdefiniowana następująco

$$f(\pi) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{\pi(i)\pi(j)},$$

gdzie $A = (a_{ij})_{n\times n}$ oraz $B = (b_{ij})_{n\times n}$ będą macierzami opisującymi odpowiednio odległości między pozycjami oraz liczbę połączeń pomiędzy obiektami.

Określmy zbiór liczb naturalnych zakresu od 1 do n jako $L = [1, ..., n]$ oraz $M = [1, ..., n]\backslash\{c(s_1), ..., c(s_i), ..., c(s_k)\}$, gdzie $c(s_1), ..., c(s_i), ..., c(s_k)$ są różnymi wartościami ze zbioru L (przypisanymi obiektami) oraz $H = \{s_1, ..., s_i, ..., s_k\}$, gdzie $0 \le s_1, ..., s_i, ..., s_k \le n$ są ustalonymi pozycjami.

Warunkowa wartość oczekiwana częściowo ustalonego rozwiązania zagadnienia QAP, przy k dowolnie ustalonych pozycjach:

$$\begin{aligned} &E(f \mid \pi(s_1) = c(s_1),...,\pi(s_i) = c(s_i),...,\pi(s_k) = c(s_k)) = \sum_{i\in H}\sum_{j\in H} a_{ij} b_{c(i)c(j)} + \\ &+\frac{1}{n-k}\sum_{i\in H}\sum_{j\in L\backslash H} a_{ij}\sum_{m\in M} b_{c(i)m} + \frac{1}{n-k}\sum_{i\in L\backslash H}\sum_{j\in H} a_{ij}\sum_{m\in M} b_{mc(j)} + \\ &+\frac{1}{n-k}\sum_{i\in L\backslash H} a_{ii}\sum_{m\in M} b_{mm} + \frac{1}{n-k}\frac{1}{n-k-1}\sum_{\substack{j\neq i\\ j,i\in L\backslash H}} a_{ij}\sum_{\substack{o\neq l\\ o,l\in M}} b_{ol} \end{aligned} \tag{6}$$

Niech $R^n_k(H)$ będzie podgrupą grupy symetrycznej S_n, gdzie $H = \{s_1, ..., s_i, ..., s_k\}$ jest zbiorem zawierającym k ($k \le n$) ustalonych pozycji. Liczność tego zbioru jest równa liczności grupy symetrycznej $|R^n_k(H)| = |S_{(n-k)}|$.

Wtedy warunkowa oczekiwana wartość funkcji celu może zostać zapisana w postaci

$$\begin{aligned} &E(f \mid \pi(s_1) = c(s_1),...,\pi(s_i) = c(s_i),...,\pi(s_k) = c(s_k)) = \\ &= \frac{1}{\left|S_{(n-k)}\right|}\sum_{\pi\in R^n_k(H)}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{\pi(i)\pi(j)} \end{aligned} \tag{7}$$

Inaczej mówiąc, $R^n_k(H)$ jest zbiorem wszystkich permutacji n-elementowych, w których jest k ustalonych pozycji (przypisań obiektu do pozycji) – odpowiednio do pierwszej ustalonej pozycji $\pi(s_1)$ jest przypisany obiekt $c(s_1)$, do drugiej ustalonej pozycji $\pi(s_2)$ jest przypisany obiekt $c(s_2)$, ..., do k-tej ustalonej pozycji $\pi(s_k)$ jest przypisany obiekt $c(s_k)$.

Na wartość $\frac{1}{\left|S_{(n-k)}\right|} \sum_{\pi \in R_k^n(H)} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{\pi(i)\pi(j)}$ składają się trzy podstawowe składniki:

1) wynikający z wartości połączeń pomiędzy obiektami przypisanymi już do określonych pozycji;
2) wynikający ze średniej wartości połączeń pomiędzy obiektami przypisanymi już do ustalonych pozycji, z obiektami o nieustalonych pozycjach, (które mogą być przypisane do dowolnej wolnej pozycji);
3) wynikający ze średniej wartości połączeń pomiędzy obiektami o nieustalonych pozycjach, które mogą zostać przypisane do dowolnej wolnej pozycji.

Rozważając sumę kolejnych przypadków, otrzymujemy wyrażenie określające warunkową wartość oczekiwana funkcji celu dla problemu kwadratowego przydziału. Powyższa formuła może zostać obliczona w czasie $O(n^2)$.

Kolejne twierdzenie, w którego dowodzie wykorzystano cechy grup *ściśle 2-przechodnich* zostało opublikowane przez Gutina i Yeo w [7].

Twierdzenie 3

Niech:

– *$E(f)$ będzie wartością oczekiwaną funkcji celu problemu QAP (jej wartością średnią),*
– *n będzie potęgą liczby pierwszej oraz niech permutacja $\pi \in S_n$, taką, że $f(\pi) \le E(f)$.*

Wtedy
$|\{\pi | f(\pi) \ge E(f)\}| \ge (n-2)!$

Baker oraz Harman udowodnili następujący lemat, którego dowód można znaleźć w [8].

Lemat 1

Niech p_1, p_2, ... będą rosnącym ciągiem wszystkich liczb pierwszych.
Wtedy

$$p_{k+1} - p_k = k\alpha^{+O(1)} \text{ dla każdej } k = 2 \text{ gdzie } \alpha = 0.535.$$

W oparciu o powyższy lemat można dowieść poniższe twierdzenie (Gutin, Yeo w [9]).

Twierdzenie 4

Dla dowolnego $\beta > 1$ oraz dla odpowiednio dużego n istnieje, co najmniej $n!/\beta^n$ permutacji ω, takich że $f(\omega) = E(f)$.

Znajomość wartości oczekiwanej dla całego problemu *QAP* pozwala na ocenę jakości otrzymanych rozwiązań w stosunku do innych rozwiązań w przestrzeni rozwiązań, ponieważ, zgodnie z przedstawionymi twierdzeniami dla odpowiednio dużego n istnieje, co najmniej $n!/\beta^n$ permutacji π takich, że $f(\pi) = E(f)$.

3. Wykorzystanie warunkowej wartości oczekiwanej funkcji celu

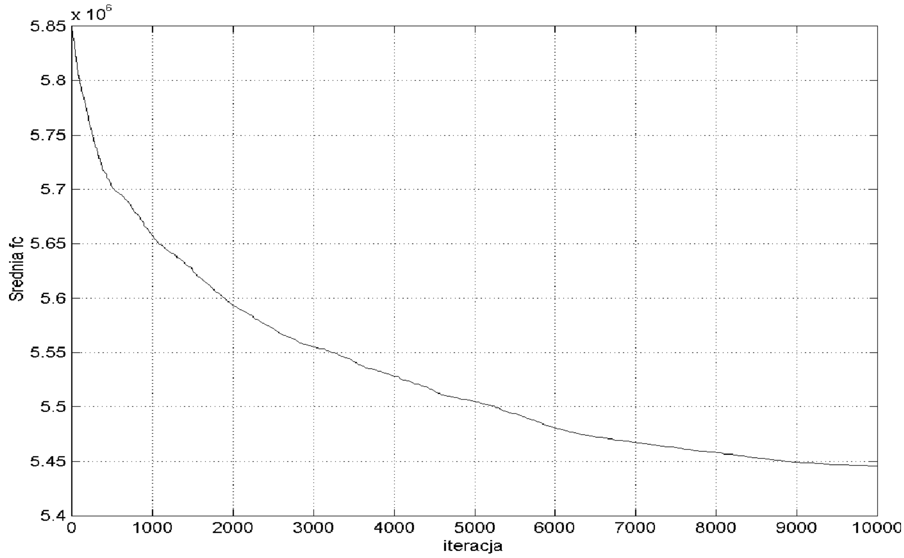
Użycie warunkowej wartości oczekiwanej funkcji celu dla rozwiązań częściowo ustalonych w konstrukcji algorytmów przybliżonych opiera się na założeniu, że parametr ten niesie w sobie informację na temat perspektywiczności dokonywanych zmian w rozwiązaniach. W klasycznych konstrukcjach algorytmów przybliżonych wartość funkcji celu jest podstawowym, a często jedynym kryterium akceptowania zmian, jakie dokonują się w rozwiązaniu. Ocena rozwiązania, a także sterowanie algorytmem jedynie w oparciu o funkcję celu, zawęża możliwości tworzenia bardziej wyrafinowanych konstrukcji algorytmów. Wprowadzenie dodatkowego parametru ma na celu zwiększenie efektywności algorytmów. Czy warunkowa wartość oczekiwana funkcji celu rozwiązań zagadnienia *QAP* daje tą możliwość? – staramy się odpowiedzieć przez serię przeprowadzonych eksperymentów.

Po pierwsze należy sobie zdać sprawę, że złożoność obliczeniowa (czasowa) wyznaczenia wartości funkcji celu i warunkowej wartości oczekiwanej dla rozwiązań zagadnienia *QAP* jest tego samego rzędu $O(n^2)$. Powoduje to, że z tytułu zastąpienia funkcji celu wyznaczeniem wartości oczekiwanej w algorytmie nie zmniejszona zostanie jego złożoność obliczeniowa. Celowe więc będzie wprowadzenie tej drugiej jedynie w przypadku, gdy osiągniemy istotną poprawę efektywności algorytmu.

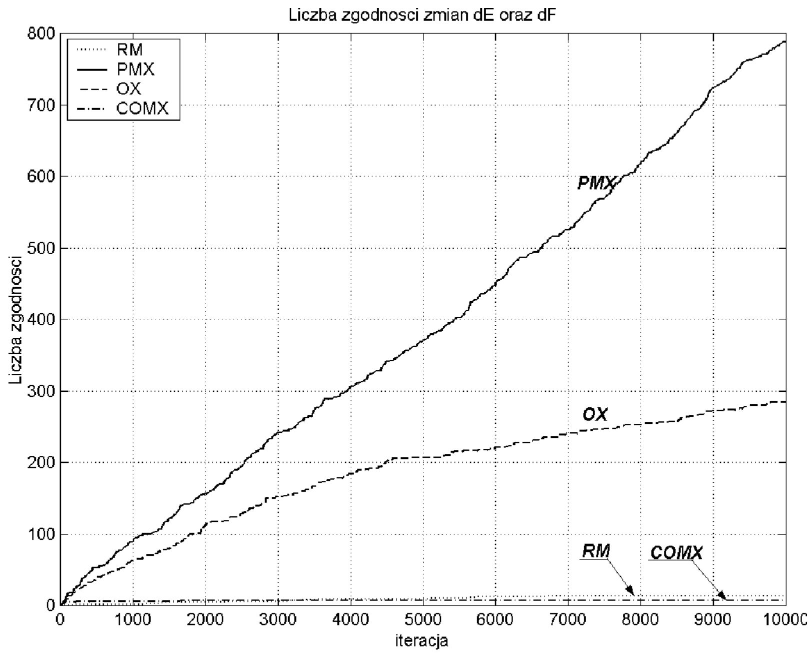
Po drugie warunkowa wartość oczekiwana rozwiązania częściowo ustalonego jest średnią wartością funkcji celu pewnej podklasy przestrzeni wszystkich rozwiązań. Powoduje to, że mając rozwiązanie dobrej jakości na ogół wartość funkcji celu będzie lepsza od wartości oczekiwanej. Znaczenie będzie tu także miała liczba ustalonych pozycji rozwiązania.

4. Wyniki badań komputerowych

Przeprowadzając eksperymenty komputerowe, dla reprezentatywnego zestawu zadań testowych zaczerpniętych z biblioteki *QAPLIB-A* [10], badaliśmy ogólne własności warunkowej wartości oczekiwanej funkcji celu. Ze względu na brak miejsca przedstawiono tylko wykresy ilustrujące przebieg eksperymentów dla wybranej instancji testowej, formułując jednak wnioski ogólniejsze. Celem pierwszego eksperymentu było ustalenie zależności pomiędzy warunkową wartością oczekiwaną a funkcją celu. W trakcie przebiegu algorytmu określano zależność pomiędzy kierunkiem zmian wartości funkcji celu oraz wartości oczekiwanej, dla pary rozwiązań rodzic – potomek. W każdej z iteracji rejestrowano fakt wystąpienia zgodności poprawy tych parametrów z podziałem na rodzaje używanych operatorów genetycznych (*PMX, OX, COMX, RM*). Zaobserwowano brak korelacji pomiędzy poprawą wartości funkcji celu oraz poprawą warunkowej wartości oczekiwanej (obliczona średnia kowariancja dla wszystkich zagadnień testowych wyniosła dla operatora *PMX, OX, COMX, RM* odpowiednio: 0,0159, 0,0057, 0,0045 i -0,0009). Przebieg algorytmu zilustrowano na rysunku 1, a wyniki eksperymentu przedstawia rysunek 2.



Rys. 1. Wykres średniej wartości funkcji celu populacji w zależności od liczby wykonanych iteracji przez algorytm ewolucyjny (zagadnienie: *Bur26A*)

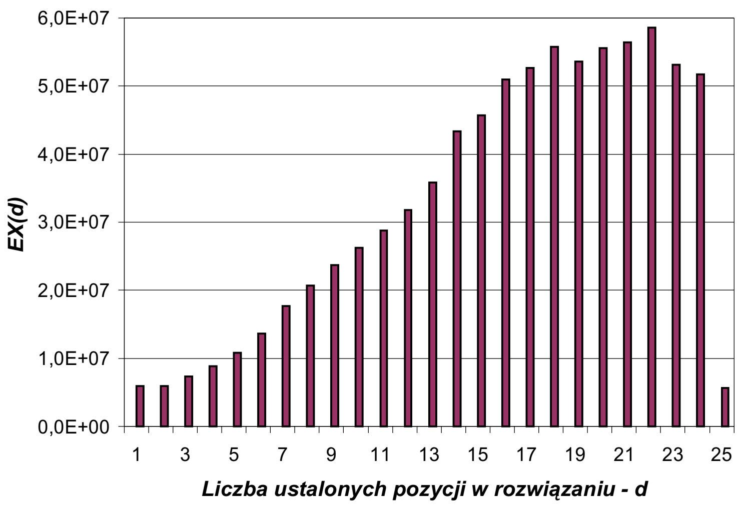


Rys. 2. Zmiana liczby zgodności poprawy wartości funkcji celu z poprawą warunkowej wartości oczekiwanej w zależności od liczby wykonanych iteracji przez algorytm ewolucyjny (zagadnienie: *Bur26A*)

Wykresy (rys. 1, 2) świadczą, że:

– dla operatora *PMX* występuje słaba korelacja niezależnie od jakości rozwiązań w populacji,
– dla operatora *OX* występuje b. słaba korelacja malejąca ze wzrostem jakości rozwiązań w populacji – w kolejnych iteracjach,
– operatory *RM* i *COMX* są operatorami różnicującymi.

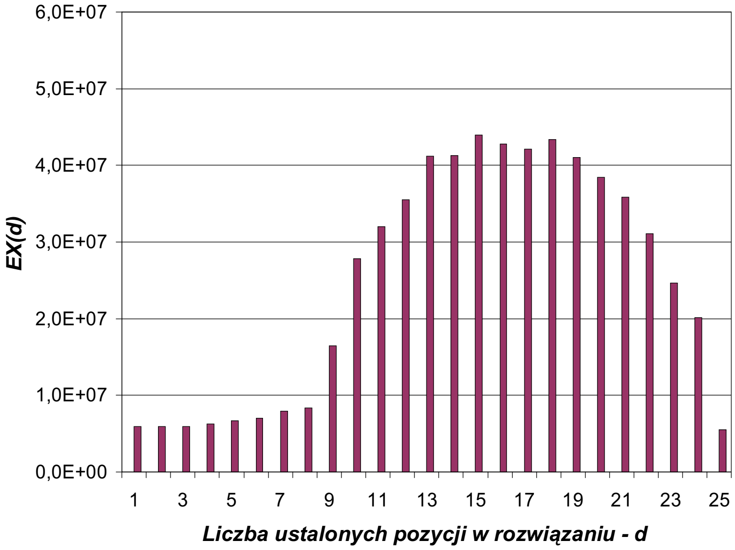
Uzyskane wyniki pozwalają przyjąć, że warunkowa wartość oczekiwana może być parametrem różnicującym działanie algorytmu w stosunku do funkcji celu. Ten mechanizm różnicowania ma tą cechę, że nie jest „ślepy", ale prowadzi proces optymalizacji w kierunku obszarów o niższej wartości oczekiwanej.



Rys. 3. Wykres warunkowej wartości oczekiwanej od liczby pozycji ustalonych rozwiązania o wartości funkcji celu $f(\pi)$ = 5 943 090 (*Bur26A*)

Badając własności warunkowej wartości oczekiwanej, zmieniano liczbę pozycji ustalonych w permutacji będącej rozwiązaniem zagadnienia *Bur26A* w zakresie: 1 – 26. Przeprowadzono eksperyment dla dwóch rozwiązań o zróżnicowanej jakości: pierwsze o wartości bliskiej średniej wartości funkcji celu dla całej przestrzeni rozwiązań $f(\pi)$ = 5943090 (rys. 3) oraz drugie – bliskie optymalnemu $f(\pi)$ = 5 457 510 (rys. 4).

Porównując oba wykresy (rys. 3 i 4), dla rozwiązań o lepszej jakości, przy małej liczbie pozycji ustalonych, wartość oczekiwana przyrasta wolniej, osiągając maksimum o dużo niższej wartości. Wynika to z faktu, że ustalone pozycje rozwiązania zawierają w miarę dobre przydziały. Rysunki 3 i 4 są jedynie ilustracją problemu, gdyż uzyskiwane wyniki zależne są także od numerów ustalonych pozycji i własności przestrzeni rozwiązań konkretnych zadań testowych.



Rys. 4. Wykres warunkowej wartości oczekiwanej od liczby pozycji ustalonych rozwiązania o wartości funkcji celu $f(\pi) = 5\,457\,510$ (*Bur26A*)

5. Podsumowanie

Przedstawione w artykule eksperymenty obliczeniowe potwierdzają zasadność wprowadzenia warunkowej wartości oczekiwanej jako dodatkowego parametru sterującego algorytmem przybliżonym. Sposobom implementacji operatorów genetycznych i sterowania algorytmem ewolucyjnym w oparciu o tak zdefiniowany parametr poświecono następny artykuł.

Literatura

[1] Chmiel W., Kadłuczka P.: *Zastosowanie warunkowej wartości oczekiwanej funkcji celu w konstrukcji algorytmów przybliżonych.* Automatyzacja Procesów Dyskretnych, Optymalizacja Dyskretna, WNT, 2004, 17

[2] Chmiel W.: *Parametry charakteryzujące własności przestrzeni rozwiązań dla problemu QAP.* Półrocznik AGH Automatyka, 2003, 7, 637

[3] Filipowicz B., Wala K.: *Algorytmy optymalizacji kwadratowego zagadnienia przydziału.* Kwart. AGH Elektrotechnika, 1992, 1

[4] Chmiel W.: *Algorytmy ewolucyjne w optymalizacji przydziału zadań z kwadratową funkcją celu.* Kraków, AGH 2004 (Praca doktorska)

[5] Raghavan P.: *Probabilistic construction of deterministic algorithms: approximating packing integer programs.* J. Computer and System, 1988, 37, 130

[6] Alon, N., Edros P., Spencer J.: *The probabilistic method*. New York, Willey 1992

[7] Gutin G., Yeo A.: *Polynomial Algorithms for the TSP and the QAP with a Factorial Domination Number*. Discrete Applied Mathematics, June 2002, 119, 107

[8] Bach E., Shallit J.: *Algorithmic number theory.* Cambridge, MIT Press, MA 1996, 1
[9] Gutin G., Yeo A.: *TSP heuristics with large domination number*. Technical Report, No. 12/98, Dept. Maths and Stats., Brunel University, 1998
[10] Burkard R.E., Karisch S.E., Rendl F.: *QAPLIB-A Quadratic Assignment Problem Library.* European Journal of Operational Resarch, 1991, 55, 115
[11] Kadłuczka P., Chmiel W.: *Efektywność algorytmu ewolucyjnego wykorzystującego warunkową wartość funkcji celu*. Półrocznik AGH Automatyka, t. 9, z. 1–2, 2005,