

# ЛОКАЛЬНЫЙ ПОИСК В КОМБИНАТОРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ. НУЖНА ЛИ ПРОИЗВОДНАЯ? <sup>1</sup>

Ю.А.Кочетов, А.В.Плясунов

*Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирск  
e-mail: jkochet@math.nsc.ru, apljas@math.nsc.ru*

**Аннотация.** Показано, что локальные оптимумы в задачах комбинаторной оптимизации тесно связаны со стационарными точками в соответствующих задачах с непрерывными переменными. Методы локального поиска неявно используют необходимые условия Каруша–Куна–Таккера, стремясь выбрать среди стационарных точек наилучшую. Такой взгляд позволяет лучше понять причину высокой эффективности этих методов и дает направление дальнейших исследований.

**Ключевые слова:** NP-трудные задачи, локальный поиск, условия Каруша–Куна–Таккера, волновое уравнение, ландшафты.

## Введение

Методы локального поиска являются одним из наиболее наглядных и естественных подходов к решению задач комбинаторной оптимизации. Высокая эффективность при решении NP-трудных задач и гибкость в адаптации к сложным математическим моделям открыли для них широкую дорогу к практическому использованию. Несмотря на различие концепций, эти методы часто используют процедуру поиска локальных оптимумов. Попытка сконцентрировать внимание на локальных оптимумах близка в идейном смысле к выделению стационарных точек и понятию вариации. Тем не менее необходимые условия Каруша–Куна–Таккера (ККТ), подразумевающие взятие производных, в методах комбинаторной оптимизации не используются. Создается впечатление, что классические методы непрерывной оптимизации слишком далеки от комбинаторных. Тем не менее в ряде случаев условие локальной оптимальности дискретного решения эквивалентно условиям ККТ для непрерывной задачи, полученной релаксацией требования целочисленности переменных. Для NP-трудных задач проблема часто состоит не в том, чтобы найти локальные оптимумы, а в том, что таких точек оказывается слишком много. Найти среди них точку глобального оптимума представляется серьезной проблемой, что, по-видимому, и делает исходную задачу NP-трудной. Понятие глобального оптимума не является конструктивным. Даже получив его, доказать оптимальность очень трудно. Аналогичные проблемы возникают и в непрерывной оптимизации. Там необходимые условия носят локальный характер. Они опираются на понятие вариации. В комбинаторной оптимизации реализуется та же идея, и понятие окрестности играет здесь центральную роль.

Другим важным аспектом является трудоемкость получения локального оптимума. На практике стандартный алгоритм локального спуска сходится очень быстро, за линейное или квадратичное число итераций [13]. Вместе с тем известен широкий класс задач локального поиска, класс *PLS*, в котором по аналогии с NP-полными задачами удалось выделить класс наиболее трудных задач. Они названы *PLS*-полными [16]. Существование полиномиального алгоритма нахождения локального оптимума для любой из них, влечет

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 03-01-00455)

существование полиномиального алгоритма для всех задач из класса  $PLS$ . Возвращаясь к условиям ККТ, это означает, что разработка алгоритмов поиска целочисленных стационарных точек является важным направлением в дискретной оптимизации.

Интересным является также вопрос об уклонении локальных оптимумов. Известно, что в худшем случае относительная погрешность локального оптимума может оказаться сколь угодно большой. Однако, если рассматривать среднее значение целевой функции на множестве всех допустимых решений, то во многих задачах любой локальный оптимум оказывается не хуже этого среднего значения. Более того, стандартный алгоритм локального спуска достигает среднее значение за полиномиальное число итераций. Достаточным условием для выполнения этого свойства является справедливость разностного уравнения, форма записи которого для стоимостной функции  $\psi$  аналогична волновому уравнению математической физики [7]

$$\nabla^2\psi + \frac{K\psi}{n} = 0, \quad K > 0, \quad n - \text{размерность задачи.}$$

Оператор  $\nabla^2$  задает среднюю разность между соседними решениями для заданной окрестности. Если каждое допустимое решение имеет  $m$  соседей и  $i$ -й сосед отличается по целевой функции на  $\delta_i$  от заданного решения, то  $\nabla^2\psi = (\sum_{i=1}^m \delta_i)/m$ . Данное определение эквивалентно определению оператора Лапласа в непрерывном случае, что позволяет использовать тот же символ для дискретных задач. Справедливость уравнения указывает на глубинные связи дискретной оптимизации с другими разделами математики, влечет ряд важных свойств локального поиска, дает толчок для исследования ландшафтов [4] и использования методов спектральной теории графов [3].

## 1. Локальные оптимумы и условия ККТ

Рассмотрим задачу минимизации псевдобулева полинома

$$P(z) = \sum_{j \in J} a_j \prod_{i \in \alpha_j} z_i$$

от переменных  $z_i \in \{0, 1\}, i \in I = \{1, \dots, n\}, \alpha_j \subset I, j \in J = \{1, \dots, m\}$ . Для любой точки  $z = (z_1, \dots, z_n)$  булева куба  $B^n$  под окрестностью  $Flip(z)$  будем понимать множество точек, отличающихся от  $z$  только в одной координате. Точка  $z$  называется локальным минимумом, если в ее окрестности нет точек с меньшим значением целевой функции. Задача минимизации псевдобулевых полиномов на множестве  $E^n \setminus \{0, \dots, 0\}$  тесно связана с дискретными задачами размещения, задачей о выполнимости, о разбиении графа и др.

Заменим условие булевости переменных на их принадлежность отрезку  $[0, 1]$ . Тогда функция Лагранжа с множителями  $\mu_i, \sigma_i, i \in I$  и непрерывными переменными  $0 \leq z_i \leq 1, i \in I$  имеет вид:

$$L(z, \mu, \sigma) = P(z) + \sum_{i \in I} \sigma_i(z_i - 1) + \sum_{i \in I} \mu_i z_i.$$

Условия ККТ записываются следующим образом:

$$\frac{\partial L}{\partial z_i} = 0, \quad z_i \mu_i = 0, \quad (1 - z_i) \sigma_i = 0, \quad i \in I,$$

$$\sigma_i \geq 0, \quad \mu_i \geq 0, \quad 0 \leq z_i \leq 1, \quad i \in I.$$

**Теорема 1.** Булев вектор  $z = (z_1, \dots, z_n)$  удовлетворяет условиям ККТ если и только если  $z$  является локальным минимумом функции  $P(z)$  для окрестности  $Flip$ .

Аналогичным свойством обладают локальные минимумы в задаче о раскраске графов [14], в задаче о  $p$ -медиане и др. Заметим, что если некоторая окрестность включает в себя окрестность  $Flip$  в качестве подмножества, то для ее локальных оптимумов тоже будут выполняться условия ККТ. Отсюда следует, что если, например, в генетических алгоритмах [9] применяется процедура локального спуска к каждому элементу популяции, то в процессе эволюции участвуют только стационарные точки. Таким образом, алгоритм неявно использует необходимые условия экстремума, а расширение окрестности приводит к дополнительному отсею среди стационарных точек.

Заметим, что сведение, например, простейшей задачи размещения [1] к задаче минимизации псевдобулевого полинома приводит к появлению новых свойств, которых не было в исходной постановке. Легко проверить, что среди оптимальных решений задачи минимизации полинома с непрерывными переменными  $0 \leq z_i \leq 1, i \in I$  всегда найдется целочисленное оптимальное решение. Другими словами, разрыв двойственности (целочисленности) всегда равен нулю, что неверно для исходной задачи размещения. Таким образом, полиномиальное сведение одной задачи к другой, эквивалентное с точки зрения поиска оптимального решения, может существенно менять свойства оптимизационной задачи. В частности, в работе [2] приводится сведение квадратичной задачи о назначениях к задаче максимизации выпуклой функции на выпуклом многограннике. В итоге каждая целочисленная допустимая точка исходной задачи оказывается стационарной точкой для непрерывной релаксации.

## 2. Локальная структура NP-трудных задач

Задача о разбиении графа формулируется следующим образом. Задан взвешенный граф  $G = (V, E)$  с четным числом вершин,  $|V| = n$ . Каждому ребру  $e \in E$  приписан вес  $w_e$ . Требуется разбить множество  $V$  на две равные части  $V_1 \cup V_2 = V$  так, чтобы суммарный вес ребер, соединяющих  $V_1$  и  $V_2$ , был бы минимальным.

Для допустимого решения  $(V_1, V_2)$  определим окрестность  $Swap$  как множество всех разбиений множества  $V$  на две равные части, которые получаются из разбиения  $(V_1, V_2)$  заменой одной вершины из  $V_1$  на одну вершину из  $V_2$ . Мощность такой окрестности равна  $n^2/4$ . Среднее значение целевой функции  $C_{AV}$  на всем множестве допустимых решений равно  $C_{AV} = \frac{n}{4(n-1)} \sum_{e \in E} w_e$ . Наряду с исходной целевой функцией  $C(V_1, V_2)$  рассмотрим нормированную целевую функцию  $\bar{C}(V_1, V_2) = C(V_1, V_2) - C_{AV}$ .

**Теорема 2** [5]. Для нормированной целевой функции  $\bar{C}(V_1, V_2)$  задачи о разбиении графа справедливо равенство

$$\nabla^2 \bar{C} = -\frac{8(n-1)}{n^2} \bar{C}.$$

Так как  $\nabla^2 C = \nabla^2 \bar{C}$ , то в окрестности любого допустимого решения среднее изменение целевой функции  $C(V_1, V_2)$  равно  $-8(n-1)\bar{C}/n^2$ , то есть зависит только от разбиения  $(V_1, V_2)$  и не зависит от элементов окрестности. Наличие такого свойства кажется экзотикой. По сути это волновое уравнение математической физики и его справедливость для дискретных задач на графах кажется невероятным! Тем не менее аналогичные

утверждения справедливы и для ряда других NP-трудных задач, в частности, для задачи коммивояжера, раскраски графов и некоторых других [7]. Из уравнения непосредственно вытекает следующие утверждения.

**Следствие 1.** *Если разбиение  $(V_1, V_2)$  является локальным минимумом, то  $C(V_1, V_2) \leq C_{AV}$ .*

**Следствие 2.** *Алгоритм локального спуска достигает значение  $C_{AV}$  с произвольного разбиения  $(V_1, V_2)$  за  $O(nr)$  итераций, если  $\max_{(V_1, V_2)} C(V_1, V_2) \leq 2^r C_{AV}$ .*

Другими словами, если величина  $r$  полиномиально ограничена, то алгоритм локального спуска достигает среднего значения за полиномиальное число шагов и при достижении локального оптимума нельзя получить слишком плохое значение функционала. Конечно, отсюда еще не следует, что и локальный оптимум может быть получен за полиномиальное число шагов, хотя в среднем, как и для симплекс-метода, который по сути также является алгоритмом локального спуска, удается получать такие оценки при необременительных ограничениях на исходные данные [13].

Задача о коммивояжере является одной из наиболее изученных задач комбинаторной оптимизации [9]. Дано  $n$  городов и матрица расстояний  $(r_{ij})$  между ними. Требуется найти замкнутый путь минимальной длины, проходящий через каждый город ровно один раз. Если такой путь представить в виде последовательности городов, то окрестность  $2 - exchange$  определяется как множество всех последовательностей, получающихся из данной перестановкой двух городов. Такая окрестность содержит  $n(n - 1)/2$  элементов. Пусть матрица  $(r_{ij})$  является симметричной. Тогда среднее значение  $R_{AB}$  целевой функции  $R$  на всем множестве допустимых решений определяется равенством  $R_{AB} = \sum_{i \neq j} r_{ij}/(n - 1)$ .

**Теорема 3** [5]. *Для нормированной целевой функции  $\bar{R} = R - R_{AB}$  задачи коммивояжера с симметричной матрицей расстояний справедливо равенство*

$$\nabla^2 \bar{R} = -\frac{4}{n} \bar{R}.$$

Как и прежде, оператор Лапласа задает среднее значение разности между допустимым решением и его соседями. Это значение зависит от самого решения и размерности задачи и не зависит от соседних решений.

Приведем еще один пример оптимизационной задачи, для которой выполняется волновое уравнение. Она называется задачей о разбиении. Дано  $n$  предметов. У каждого предмета свой вес  $w_i, i = 1, \dots, n$ . Можно ли разбить множество предметов на два подмножества так, чтобы суммарные веса подмножеств совпадали?

Введем переменные  $x_i \in \{-1, 1\}, i = 1, \dots, n$ , знак которых указывает на принадлежность предмета к одному из подмножеств. Тогда величина  $\sum_{i=1}^n w_i x_i$  определяет разность весов двух подмножеств. Если она равна нулю, то требуемое разбиение найдено. Для произвольного разбиения окрестностью будем называть все разбиения, получающиеся из данного переносом одного предмета в другое подмножество. Для переменных  $x_i, i = 1, \dots, n$  это означает изменение знака ровно в одной координате. Рассмотрим целевую функцию  $U = (\sum_{i=1}^n w_i x_i)^2$ . Ее среднее значение  $U_{AB}$  на множестве всех разбиений определяется равенством  $U_{AB} = \sum_{i=1}^n w_i^2$ .

**Теорема 4** [5]. Для нормированной целевой функции  $\bar{U} = U - U_{AB}$  справедливо равенство

$$\nabla^2 \bar{U} = -\frac{4}{n} \bar{U}.$$

Следствия 1 и 2 могут быть переформулированы для задач коммивояжера и разбиения. Они вытекают из волнового уравнения, которое оказывается тесно связанным с понятием ландшафта.

### 3. Ландшафты и их свойства

Рассмотрим задачу минимизации целевой функции  $C$  определенной на конечном множестве допустимых решений  $\mathfrak{S}$ . Для любого  $x \in \mathfrak{S}$  через  $N(x) \subseteq \mathfrak{S}$  обозначим окрестность решения  $x$  в  $\mathfrak{S}$ . Графом соседства для пары  $(\mathfrak{S}, N)$  назовем ориентированный граф  $G = (V, E)$  с множеством вершин  $V = \mathfrak{S}$  и множеством дуг вида  $(x, y)$ , где  $y \in N(x)$ . Если окрестность является симметричной, т. е.  $y \in N(x) \Leftrightarrow x \in N(y)$ , то вместо дуг используются ребра и граф  $G$  из ориентированного становится неориентированным. В этом разделе будут рассматриваться только симметричные окрестности, мощность которых не зависит от  $x$ .

Граф  $G$ , каждой вершине  $x$  которого приписан вес  $C(x)$ , будем называть ландшафтом для задачи локального поиска  $(\mathfrak{S}, C, N)$ . Понятие ландшафта удобно для описания работы алгоритмов локального поиска. Каждому шагу соответствует ребро в графе. Если граф связный, то из любого решения можно добраться до оптимального, двигаясь только в соседние решения. Это свойство является важным для методов локального поиска. Другим важным свойством ландшафтов является его *пересеченность* или *изрезанность* (ruggedness). Сильно изрезанные ландшафты имеют много локальных оптимумов и представляют серьезную трудность для методов локального поиска. Для измерения изрезанности ландшафтов используют функцию автокорреляции  $\rho(d)$ , где  $d$  - расстояние по числу ребер в графе  $G$  между вершинами. По определению [4]

$$\rho(d) = 1 - \frac{\langle (C(x) - C(y))^2 \rangle_{d(x,y)=d}}{\langle (C(x) - C(y))^2 \rangle},$$

где  $\langle (C(x) - C(y))^2 \rangle$  обозначает среднее значение величины  $(C(x) - C(y))^2$  по всем парам  $(x, y)$  из  $\mathfrak{S}$ , а  $\langle (C(x) - C(y))^2 \rangle_{d(x,y)=d}$  есть среднее значение для пар  $(x, y)$ , находящихся в  $G$  на расстоянии  $d$ . Величина  $\rho(d)$  показывает уровень корреляции между решениями, находящимися на расстоянии  $d$  друг от друга. Наиболее важным случаем является  $d = 1$ , так как он соответствует корреляции для соседних решений. Если  $\rho(1)$  близко к 1, то соседние решения мало отличаются друг от друга по целевой функции. Это мало изрезанные ландшафты, удобные для локального поиска. Если же  $\rho(1)$  близко к 0, то корреляции между соседними решениями почти нет, ландшафт сильно изрезан и, эффективность методов локального поиска скорее всего будет низкой.

Для вычисления  $\rho(1)$  иногда удобно использовать другую функцию  $r(s)$ ,  $s \geq 1$ , целое. Рассмотрим последовательность значений  $C(x_i)$  для случайного блуждания  $\{x_i\}$  по вершинам графа  $G$ . На шаге  $i$  с равной вероятностью переходим из вершины  $x_i$  в одну из смежных вершин  $x_{i+1}$ . По определению

$$r(s) = 1 - \frac{\langle (C(x_i) - C(x_{i+s}))^2 \rangle}{2(\langle C^2 \rangle - \langle C \rangle^2)}, \quad \langle C \rangle = C_{AV}.$$

При  $s = 1$  получаем  $r(1) = \rho(1)$ . Для вычисления  $r(s)$  получена формула, использующая разложение функции  $C(x)$  через собственные вектора  $\phi_i, i = 0, 1, \dots, |V| - 1$  матрицы Лапласа  $L = D - A$ , где  $D$  - диагональная матрица размера  $|V| \times |V|$  со степенями вершин по диагонали,  $A$  - матрица смежности.

**Теорема 5** [11]. *Пусть  $C(x) = \sum_{i=0}^{|V|-1} a_i \phi_i(x)$  – разложение функции  $C(x)$ ,  $\lambda_i$  – собственные числа для  $\phi_i(x)$  и  $|N|$  – мощность окрестности. Тогда*

$$r(s) = \sum_{i>0} \frac{a_i^2}{\sum_{j>0} a_j^2} \left(1 - \frac{\lambda_i}{|N|}\right)^s.$$

Ландшафт называют элементарным [11], если  $\lambda_i = \lambda$  для всех  $i > 0$ . Если для некоторой задачи локального поиска справедливо волновое уравнение, то соответствующий ландшафт является элементарным [11]. В таблице 1 приводятся характеристики ландшафтов для следующих задач: задача коммивояжера (TSP), квадратичная задача о назначениях (QAP), задача о вершинном покрытии (NC), задача о разбиении графа (GBP), задача о максимальном разрезе (MC), задача о раскраске вершин графа в  $c$  цветов, задача о независимом множестве (WIS) со штрафной функцией  $C(x) = \sum_i x_i w_i - (\alpha/2) \sum_{ij} x_i x_j a_{ij}$ ,  $A = \{a_{ij}\}$  – матрица смежности. Для задачи коммивояжера с симметричной матрицей рассто-

Задача	$N$	$ N $	$ \mathfrak{S} $	$\xi = 1/(1 - \rho(1))$	Элементарный
TSP	2-opt	$n(n-3)/2$	$(n-1)!/2$	$n/2$	да
QAP	2-exchange	$n(n-1)/2$	$n!$	$\geq n/4$	нет
TSP	2-exchange	$n(n-1)/2$	$(n-1)!/2$	$n/4$	да
TSP	2,3-exchange	$n^3 - n$	$(n-1)!/2$	$(n+1)/6$	да
GC( $c$ )	c-Flip	$n(c-1)$	$c^n$	$(c-1)n/2c$	да
WIS	$\alpha$ -Flip	$n$	$2^n$	$\geq n/4$	нет
NC	$\alpha$ -Flip	$n$	$2^n$	$\geq n/4$	нет
GBP	$\alpha$ -Flip	$n$	$C_n^{n/2}$	$n/4$	да
MC	Flip	$n$	$2^n$	$n/4$	да
GBP	Swap	$n^2/4$	$C_n^{n/2}$	$n/8$	да

Таблица 1: Характеристики ландшафтов [4]

яний окрестность  $2 - opt$  содержит  $n(n-3)/2$  тур. Каждый из них получается удалением из данного тура двух несмежных ребер и добавлением двух других так, чтобы снова получился тур. Для определения окрестности  $2 - exchange$  тур представляется в виде последовательности вершин графа. Соседние решения порождаются перестановкой двух вершин в этой последовательности. Аналогично определяется окрестность  $3 - exchange$ . Из таблицы 1 следует, что коэффициент автокорреляции  $\xi = n/2$  для окрестности  $2 - opt$  и  $\xi = n/4$  для окрестности  $2 - exchange$ , т.е. окрестность  $2 - opt$  порождает менее изрезанный ландшафт и должна приводить к лучшим результатам, что подтверждается экспериментальными исследованиями [8].

Для задачи о разбиении графа окрестность  $Swap$  сохраняет равенство  $|V_1| = |V_2|$ . Поиск ведется только в допустимой области,  $\xi = n/8$ . Окрестность  $\alpha - Flip$  разрешает нарушать баланс, но за нарушение вводится штраф в целевую функцию:  $C(x) = \sum_{ij} w_{ij} x_i (1 - x_j) + \alpha (\sum_i 2x_i - n)^2$ ,  $w_{ij} \in R$  – вес ребра  $(ij)$ . Область поиска

расширяется, коэффициент автокорреляции возрастает,  $\xi = n/4$ . Расширение области приводит к более пологим ландшафтам, что должно положительно сказываться на результатах локального поиска. Экспериментальные исследования подтверждают это предположение [10].

#### 4. Теория элементарных ландшафтов

Основываясь на алгебраических инвариантах графа соседства, удается получать характеристики локальных экстремумов оптимизационной задачи и поведения алгоритмов локального улучшения. В этом разделе предлагается новое определение Лапласиана графа [5], которое позволяет обобщить понятие элементарных ландшафтов на несимметричные и нерегулярные графы соседства. Обозначим через  $\tilde{L}$  нормированную матрицу Лапласа

$$\tilde{L} = D^{-1}L = D^{-1}(D - A) = I - D^{-1}A.$$

Для любой целевой функции  $C$  имеет место равенство

$$D^{-1}AC(x) = \frac{\sum_{y \in N(x)} C(y)}{|N(x)|},$$

т.е. величина  $\tilde{C}(x) = D^{-1}AC(x)$  является средним значением функции  $C$  на множестве соседних решений  $N(x)$ .

Ландшафт назовем элементарным, если для подходящей константы  $\alpha$  функция  $C_\alpha = C - \alpha$  является собственным вектором матрицы  $\tilde{L}$ , т.е.  $\tilde{L}C_\alpha = \lambda C_\alpha$  для некоторого собственного числа  $\lambda$ . Здесь и далее будем отождествлять целевую функцию с вектором ее значений.

Из определения нормированной матрицы Лапласа и разностного оператора Гровера следует, что

$$\tilde{L}C_\alpha(x) = -\frac{\sum_{y \in N(x)} (C_\alpha(y) - C_\alpha(x))}{|N(x)|} = -\nabla^2 C_\alpha(x),$$

т.е.  $\tilde{L} = -\nabla^2$ . Таким образом ландшафт является элементарным тогда и только тогда, когда для некоторого  $\alpha$  функция  $C_\alpha$  удовлетворяет волновому уравнению Гровера

$$\nabla^2 C_\alpha + \lambda C_\alpha = 0.$$

Из уравнения следует, что  $\tilde{C}_\alpha(x) = (1 - \lambda)C_\alpha(x)$ . Если собственное значение  $\lambda$  является положительным и  $x^*$  – локальный минимум, то  $C_\alpha(x^*) \leq \tilde{C}_\alpha(x^*) = (1 - \lambda)C_\alpha(x^*)$  и, следовательно,  $C(x^*) \leq \alpha$ . Аналогично для локальных максимумов получим  $C(x^*) \geq \alpha$ .

Для ландшафтов с регулярными и симметричными графиками соседства величина сдвига  $\alpha$  совпадает со средним значением  $C_{AV}$  целевой функции на множестве всех решений  $\mathfrak{S}$  [7]. Это утверждение можно расширить на более широкий класс ландшафтов.

**Теорема 6** [6] *Если ландшафт является элементарным и матрица  $D^{-1}A$  является дважды стохастической, то величина сдвига  $\alpha$  совпадает со значением  $C_{AV}$ .*

Для многих задач локального поиска граф соседства совпадает с гиперкубом, например, для окрестности *Flip* в задачах размещения, всех вариантах задачи о выполнимости,

задачах поиска оптимального разреза и других [16]. Поэтому для выявления элементарных ландшафтов необходима информация о спектре гиперкуба.

Обозначим через  $B^n$  множество всех булевых векторов длины  $n$ . Весом булева вектора  $x$  называется число его ненулевых координат. Под гиперкубом будем понимать граф с множеством вершин  $B^n$ . Две вершины  $x, y$  соединены ребром тогда и только тогда, когда расстояние Хэмминга между ними равно единице. Из определения следует, что гиперкуб является связным двудольным  $n$ -регулярным графом диаметра  $n$  и порядка  $2^n$ .

Каждому  $z \in B^n$  сопоставим функцию Уолша  $W_z : B^n \rightarrow \{-1, 1\}$ , которая вычисляется по формуле

$$W_z(x) = (-1)^{\sum_{i=1}^n x_i z_i}, x \in B^n.$$

Под весом функции  $W_z$  будем понимать вес вектора  $z$ . Нормированные функции Уолша  $\{\frac{1}{2^{n/2}} W_z : z \in B^n\}$  образуют ортонормированный базис пространства  $R^{2^n}$  [12]. Пусть  $L$  — матрица Лапласа гиперкуба.

**Теорема 7** [15]. *Спектр матрицы  $L$  состоит из  $n + 1$  числа  $\lambda_k = 2k, k = 0, \dots, n$ . Кратность собственного числа  $\lambda_k$  равна числу сочетаний из  $n$  по  $k$ . Функции Уолша веса  $k$  образуют ортонормированный базис собственного пространства для числа  $\lambda_k$ .*

Учитывая, что собственные числа  $\lambda_L$  и  $\lambda_{\tilde{L}}$  матриц  $L$  и  $\tilde{L}$  для гиперкуба связаны соотношением  $\lambda_{\tilde{L}} = \lambda_L/n$  в дальнейшем можно ограничиться исследованием спектра матрицы Лапласа  $L$ . Так как гиперкуб — регулярный и симметричный граф, то для любой целевой функции  $C$ , для которой ландшафт является элементарным, параметр нормализации  $\alpha$  совпадает со средним значением  $C_{AV}$  целевой функции на множестве всех решений [7].

В задаче о разбиении, сформулированной в разделе 2, граф соседства совпадает с гиперкубом. Из теорем 4 и 7 следует, что нормированная целевая функция задачи принадлежит собственному пространству натянутому на функции Уолша веса 2. Аналогичный результат имеет место и для следующего варианта задачи о 3-выполнимости (NAE-3SAT) [7]. Задано  $n$  булевых переменных. Литералом назовем переменную, либо ее отрицание. Вход задачи задается конечным набором дизъюнкций, каждая из которых состоит ровно из трех литералов. Дизъюнкция считается истинной, если в ней найдется по крайней мере один истинный и один ложный литерал. Значение целевой функции для любого набора истинностных значений переменных равно числу выполненных дизъюнкций. Окрестность произвольного решения состоит из всех булевых векторов, находящихся от него на расстоянии 1.

**Теорема 8** *Нормированная целевая функция задачи NAE-3SAT принадлежит собственному пространству натянутому на функции Уолша веса 2.*

## 5. Заключение

Основным критерием при отборе представленных результатов был вопрос насколько они полезны при анализе возможностей локального поиска в задачах комбинаторной оптимизации. Мы опустили упоминание о таких хорошо известных методах как метод эллипсоидов и метод внутренних точек, которые доказали свою высокую эффективность, но не относятся к методам локального поиска. В той же мере это касается полуопределенного программирования и некоторых других подходов, которые связывают непрерывную

и комбинаторную оптимизацию. Конечно, с этой точки зрения полученные связи с условиями ККТ недостаточно конструктивны. Они пока не дали каких-то здравых прорывов в анализе возможностей локального поиска. Они говорят о глубокой внутренней связи дискретной оптимизации с непрерывной оптимизацией, когда-то отталкинувшись от идеи вариации и приведшей к созданию мощного арсенала для анализа экстремальных задач. Что же касается спектрального подхода, то в последние годы идет активное развитие спектральной теории ландшафтов комбинаторных задач. Во всяком случае уже трудно себе представить изучение методов локального поиска без этих исследований [4, 5, 6, 11, 12, 15], начатых пионерской работой Гровера [7].

Исследование ландшафтов является важным направлением дальнейших исследований. Было бы интересно получить значение коэффициента автокорреляции для дискретных задач размещения, задачи о покрытии, задачи о  $p$ -медиане с различными по мощности окрестностями и др. Исследование спектральных свойств графов соседства поможет лучше понять возможности локальных методов и предсказать их поведение при решении практических задач.

## Список литературы

- [1] Береснев В.Л., Гимади Э.Х., Дементьев В.Т. Экстремальные задачи стандартизации. – Новосибирск: Наука, 1978.
- [2] Васильев И.Л. *Об опыте решения задачи о назначениях*. - Оптимизация, Управление, Интелект, 1999. N 3, с. 133-151.
- [3] Цветкович Д., Дуб М., Захс Х. *Спектры графов. Теория и применение*. - Киев: Наукова думка, 1984.
- [4] Angel E., Zissimopoulos V. *On the classification of NP-complete problems in terms of their correlation coefficient*. - Discrete Applied Mathematics, 2000, v. 99, p. 261–277.
- [5] Barnes J.W., Dimova B., Dokov S.P., Solomon A. *The theory of elementary landscapes*. - Applied Mathematics Letters, 2003, v. 16, p. 261–277.
- [6] Barnes J.W., Dokov S.P., Solomon A. *Extending Elementary Landscape Characterizations for COPs to Arbitrary Neighborhood Definitions*. Air Force Office of Scientific Research Principal Investigators Meeting on Optimization and Discrete Mathematics at the Minnowbrook Conference Center, Blue Mountain Lake, New York, November 11-13, 2001.
- [7] Grover L. K. *Local search and the local structure of NP-complete problems*. - Operations Research Letters, 1992, v.12, N4, p. 235–244.
- [8] Johnson D. S. *Local optimization and the traveling salesman problem*. - ICALP 90 Automata, Languages and Programming, 1990, p. 446–461.
- [9] Johnson D. S., McGeoch L. A. *The traveling salesman problem: a case study*. in: E. Aarts and J. K. Lenstra (eds.) Local Search in Combinatorial Optimization, Chichester: John Wiley & Sons, 1997, p. 215–310.

- [10] Johnson D. S., Aragon C. R., McGeoch L. A., Schevon C. *Optimization by Simulated Annealing: An experimental evaluation. Part 1, Graph Partitioning.* - Operations Research, 1989, v.37, N6, p. 865–892.
- [11] Stadler P. F. *Landscape and their correlation functions.* Technical report 95-07-067, Santa Fe Institute, Santa Fe, NM, 1995.
- [12] Stadler P. F. *Fitness landscapes.* in: Lassig M. and Valleriani A. (eds.) Biological Evolution and Statistical Physics. Berlin: Springer-Verlag, 2002, p. 187–207.
- [13] Tovey C. *Local improvement on discrete structures.* in: E. Aarts and J. K. Lenstra (eds.) Local Search in Combinatorial Optimization, Chichester: John Wiley & Sons, 1997, p. 57–90.
- [14] Vredeveld T., Lenstra J. K. *On local search for the generalized graph coloring problem.* Operations Research Letters, 2003, v. 31, p. 28–34.
- [15] Weinberger E.D. *Fourier and Taylor series on fitness landscapes.* Biological cybernetics, 1991, v. 65, p. 321–330.
- [16] Yannakakis M. *Computational Complexity.* in: E. Aarts and J. K. Lenstra (eds.) Local Search in Combinatorial Optimization. Chichester: John Wiley & Sons, 1997, p. 19–56.

# LOCAL SEARCH IN COMBINATORIAL OPTIMIZATION. WHAT ABOUT THE DERIVATIVE?

Yu. Kochetov, A. Pljasunov

*Sobolev Institute of Mathematics, Novosibirsk*  
*e-mail: jkochet@math.nsc.ru, apljas@math.nsc.ru*

**Abstract.** For combinatorial optimization problems it is shown that local optima are closely related with the stationary solutions for continued optimization problems. Local search methods implicitly use the Karush-Kuhn-Tucker conditions and try to select the best stationary solution. This point of view allows us to understand why the local search methods are so powerful and shows directions for further research.

**Key words:** NP-hard problems, local search, Karush-Kuhn-Tucker conditions, wave equation, fitness landscapes.