КІБЕРНЕТИКА
та КОМП'ЮТЕРНІ
ТЕХНОЛОГІЇ

УДК 519.854 DOI:10.34229/2707-451X.24.3.3

І.В. СЕРГІЄНКО, В.П. ШИЛО, В.О. РОЩИН, П.В. ШИЛО,
Д.О. БОЯРЧУК, В.К. МОРОЗ

ПОРТФЕЛІ АЛГОРИТМІВ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ КВАДРАТИЧНОЇ ЗАДАЧІ ПРО ПРИЗНАЧЕННЯ

Досліджено застосування портфелів модифікацій повторюваного ітерованого алгоритму табу для розв'язання квадратичної задачі про призначення. Проведено обширні обчислювальні експерименти для встановлення ефективності розглянутих портфелів. Для складної тестової задачі tai100a знайдено новий рекорд.

***Ключові слова**: квадратична задача про призначення, портфелі алгоритмів, експериментальні дослідження, ефективність портфелів алгоритмів.*

Вступ. Квадратична задача про призначення (quadratic assignment problem, QAP) – добре відома класична задача комбінаторної оптимізації. Вона має широкий спектр наукових та практичних застосувань в економіці, археології, статистичному аналізі, хімії тощо. Кількість реальних задач, які формулюються у термінах QAP, постійно зростає, як і різноманітність галузей, де вони виникають. Крім того, ряд відомих задач комбінаторної оптимізації можуть бути сформульовані як QAP. Типовими прикладами є задача комівояжера, оптимізаційні задачі на графах: пошуку максимальної кліки, про розбиття графу та ін.

QAP – універсальна (*NP*-важка) задача, з обчислювальної точки зору дуже складна. Збільшення кількості прикладних проблем, що описуються математичними моделями QAP, і бурхливий розвиток обчислювальної техніки, який розширює можливості розв'язання задач, привели до зростання інтересу дослідників до вказаних задач. Розробка та вдосконалення методів розв'язання QAP триває до цього часу (наприклад, [1–8]), зокрема з реалізацією на багатопроцесорних обчислювальних комплексах. Проте без ефективних паралельних методів, орієнтованих на забезпечення високої продуктивності обчислень, не можна використовувати ці обчислювальні ресурси. У зв'язку з цим важливу роль відіграють об'єднання (портфелі і команди) алгоритмів [9–11] для розпаралелювання процесу розв'язання задач дискретної оптимізації та його прискорення. Можливість швидкого оброблення великих масивів даних дає змогу розв'язувати реальні задачі з різних галузей.

У цій роботі представлено деякі результати проведених авторським колективом досліджень, пов'язаних із застосуванням портфелів алгоритмів для розв'язання квадратичної задачі про призначення.

Постановка задачі. Змістовна постановка QAP така. Нехай дано n об'єктів, які треба розмістити в n різних локаціях (місцях призначення). Відомі величини a_{ij} потоків ресурсів між об'єктами i та j, $i, j = 1,\dots, n$, і відстані b_{rs} між локаціями r і s, $r, s = 1,\dots, n$. Потрібно знайти такий розподіл об'єктів по локаціях, щоб сума відстаней, помножених на відповідні потоки, була мінімальною.

Математичну постановку квадратичної задачі про призначення можна сформулювати так: знайти

$$\min_{\pi \in \Pi_n} \left\{ f(\pi) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{\pi_i \pi_j} \right\},$$

де $A = \left[a_{ij} \right]$ і $B = \left[b_{ij} \right]$ – квадратні матриці порядку n з невід'ємними елементами a_{ij}, b_{ij}, $i, j = 1, \ldots, n$, Π_n – множина всіх перестановок, $\pi = (\pi_1, \ldots, \pi_n) \in \Pi_n$ – перестановка з n елементів над множиною $\{1,..., n\}$, така, що π_i – номер локації i-го об'єкта.

Математична модель квадратичної задачі про призначення може бути описана також у термінах булевого квадратичного програмування.

Як уже зазначалося, QAP – складна задача в обчислювальному відношенні. Це зумовлено великим обсягом обчислень, необхідних для отримання значення цільової функції (порядку $O(n^2)$) і дослідження околу поточного розв'язку. При $n \geq 100$ виконання хоча б n^2 ітерацій локального пошуку вже – важка обчислювальна задача.

Алгоритми та їхня ефективність. У роботі [6] запропоновано дві модифікації повторюваного ітерованого алгоритму табу RITS [3] розв'язання QAP: RITSR та RITSK. Вони відрізняються збуренням на етапі диверсифікації найкращого знайденого розв'язку. В алгоритмі RITSR використовується випадкове збурення, яке полягає у перестановці певної кількості елементів, що знаходяться на випадково вибраних позиціях. У алгоритмі RITSK збурення здійснюється за технологією виділення ядра [12]. Згідно з цією технологією визначаються ті елементи перестановки, для яких збурення найбільш імовірно має перспективу знаходження кращих розв'язків.

Для дослідження ефективності алгоритмів необхідно мати представницьку множину тестових задач, на основі результатів розв'язання яких проводити порівняльний аналіз алгоритмів. Як тестові нами вибрано задачі taiXXa [13], де XX – їхня розмірність, які є найбільш важкими щодо обсягу обчислень. Особливістю цих задач є наявність великої кількості локальних мінімумів різної якості. У переважній більшості якість таких розв'язків не задовільна. На рис. 1 схематично показано наближене розміщення розв'язків тестових задач tai100a. Надзвичайно висока щільність розташування локальних мінімумів різної якості на всій множині перестановок робить задачі цього типу дуже складними щодо отримання хороших розв'язків за прийнятний час.

Складні тестові задачі, які використовуються для оцінки ефективності алгоритмів, можуть мати відомий глобальний оптимум, або цей факт ще перебуває у процесі уточнення. Найкраще значення цільової функції (рекорд) представляє значний інтерес для дослідників, і час від часу вони роблять спроби отримати кращий результат.

Так, для задачі tai100a, яка, як і багато років тому, залишається серйозним викликом для дослідників усього світу, в 2017р. В.П. Шило отримав новий рекорд (21044752) за допомогою модифікації повторюваного ітерованого алгоритму табу RITSK. При цьому кожна із 35 спроб розв'язання задачі тривала 20 годин на суперкомп'ютері СКІТ-4 Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України [14] для 128 процесорів. У 2019 р. А. Місевічюс покращив цей рекорд (21043560) [4] за допомогою оновленої версії алгоритму ітерованого пошуку табу ITS з ретельно підібраними параметрами. Це досягнення зайняло декілька місяців обчислювальних затрат з використанням більш ніж десяти високопродуктивних процесорів, тобто алгоритм працював у режимі довготривалого пошуку.

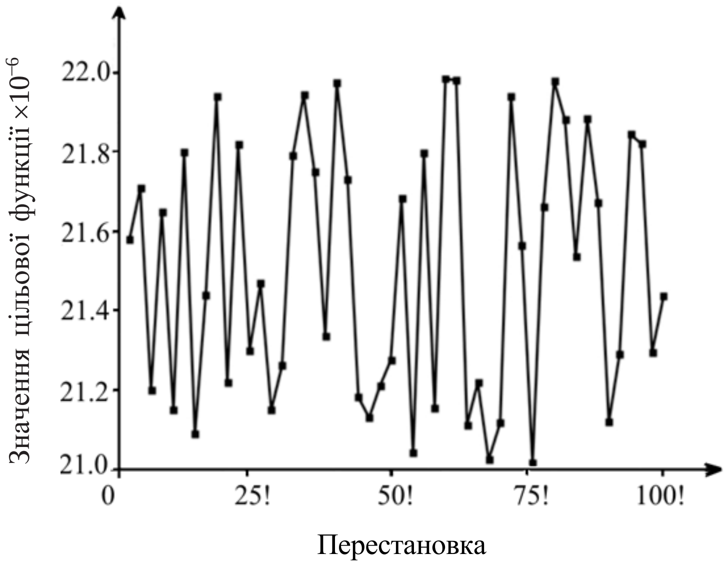

РИС. 1. Схематичне розміщення розв'язків задач типу tai100a

За останні 15 років (станом на 2019 р. [4]) кращими дослідниками в галузі оптимізації було отримано лише 6 разів нові рекорди для задачі tai100a. З наведених у світовій літературі результатів можна зробити висновок, що для задач tai80a, tai100a під час проведення обчислювальних експериментів майже неможливо повторити відомі рекорди. Тому стандартною практикою стало наводити відхилення (у відсотках) середнього значення цільової функції задачі від відомого рекорду, що вказує на якість алгоритму. Крім того, до характеристик, які дають уявлення про якість відповідного алгоритму, варто віднести: мінімальний та середній час розв'язання задачі (отримання відомого рекорду) для всіх спроб розв'язання, а також число success знайдених алгоритмом розв'язків зі значенням цільової функції, не гіршим рекорду.

Алгоритми RITSR і RITSK реалізовано на мові C++, середовище Microsoft Visual Studio 2022. Для встановлення ефективності цих алгоритмів додатково до результатів [6] проведено експериментальні дослідження з розв'язання складної задачі tai100a. Під час їхнього проведення було змінено параметри алгоритму RITSR порівняно з [6]. Обома алгоритмами виконано 40 спроб розв'язання цієї задачі. Обмеження за часом становили 2 год. для алгоритму RITSR і 20 год. для алгоритму RITSK. Зазначимо, що розрахунки для алгоритму RITSK виконувались на суперкомп'ютері СКІТ-4.

У таблиці для алгоритмів RITSR і RITSK наведено відхилення (у відсотках) середнього f^c та найкращого $f^н$ значень цільової функції від рекорду BKS, отриманого А. Місевічюсом [4].

ТАБЛИЦЯ. Відхилення середнього та найкращого значень цільової функції від відомого рекорду

Алгоритм / Задача	BKS	RITSR		RITSK	
		f^c	$f^н$	f^c	$f^н$
tai100a	21043560	0.274	**0.138**	**0.247**	0.160

Проведені експериментальні розрахунки показали конкурентоздатність алгоритмів RITSR і RITSK.

Портфелі алгоритмів. Об'єднанням алгоритмів назвемо деяку підмножину множини A алгоритмів, які працюють паралельно над розв'язанням однієї задачі.

Об'єднання алгоритмів, які не обмінюються інформацією і працюють незалежно один від одного, називають портфелем алгоритмів. Хоча алгоритми портфеля працюють незалежно один від одного, для зручного оброблення отримані ними результати варто зберігати в одному загальнодоступному місці. Після завершення роботи всіх алгоритмів множини A портфеля вибирають найкращий з отриманих розв'язків задачі.

Ефективність застосування портфелів у значній мірі залежить від задачі, зокрема від структури її оптимумів, та алгоритмів портфеля – будівельного блоку об'єднання. Використання портфелів алгоритмів зумовлене простим протоколом їхньої роботи, що не вимагає синхронізації у процесі обчислень. З ними зручно порівнювати команди алгоритмів та інші об'єднання складної структури.

Об'єднання алгоритмів успішно було застосовано для розв'язання задачі про максимальний зважений розріз графу (WMAXCUT) методом глобального рівноважного пошуку (ГРП) [9–11]. Згідно з отриманими результатами портфелі алгоритмів ГРП наближаються до лінійного коефіцієнта прискорення, а командний підхід забезпечує надлінійне прискорення пошуку високоякісних розв'язків задачі WMAXCUT.

Нами проведено дослідження однорідних портфелів алгоритмів RITSR та RITSK для квадратичної задачі про призначення, започатковані в роботі [15]. Однорідний портфель дає змогу паралельно запускати декілька копій одного імовірнісного алгоритму [16] для розв'язання конкретної задачі. Копією називається екземпляр рандомізованого алгоритму, випадкова поведінка якого визначається датчиком псевдовипадкових чисел, отриманий при одному початковому значенні цього датчика. Очевидно, що при різних початкових значеннях датчика будуть створюватися різні копії вихідного алгоритму. Вони дають змогу здійснювати пошук відмінних між собою розв'язків.

Розглянуто різні конфігурації однорідних портфелів port, які включали $N = 8,16,32,64,128$ алгоритмів, та виконано 6800 їхніх запусків тривалістю 2 год. кожен для алгоритму RITSR та 4480 запусків тривалістю 20 год. кожен для алгоритму RITSK. У результаті було отримано статистичні дані для оцінки ефективності конфігурацій портфелів.

За допомогою послідовності пар $H_r = \{(f_i, t_i)\}$, $r = 1,\ldots,N$, де f_i – значення цільової функції, t_i – час знаходження f_i алгоритмом перший раз, записувалась історія запусків для кожного запуску r. Для оцінки середнього часу знаходження f_t за допомогою портфеля з N алгоритмів було вибрано N історій запусків $H_1,\ldots,H_N$ і обчислено час роботи портфеля

$$t_N(f_t) = \min_{r=1,\ldots,N} \left[\min\{t_i \mid (f_i, t_i) \in H_r, f_i \le f_t\}\right].$$

Для врахування випадковості оцінювався середній час знаходження заданого значення цільової функції $E[t_N(f_t)]$ через пробні вибірки з усіх незалежних історій запуску. Використовувалося 500000 пробних вибірок для всіх оцінок.

Результати обчислювального експерименту показано на рис. 2 і 3. На них показана залежність коефіцієнтів паралельного прискорення роботи портфелів алгоритмів RITSK та RITSR, розрахованих відносно одного алгоритму, від кількості їхніх алгоритмів.

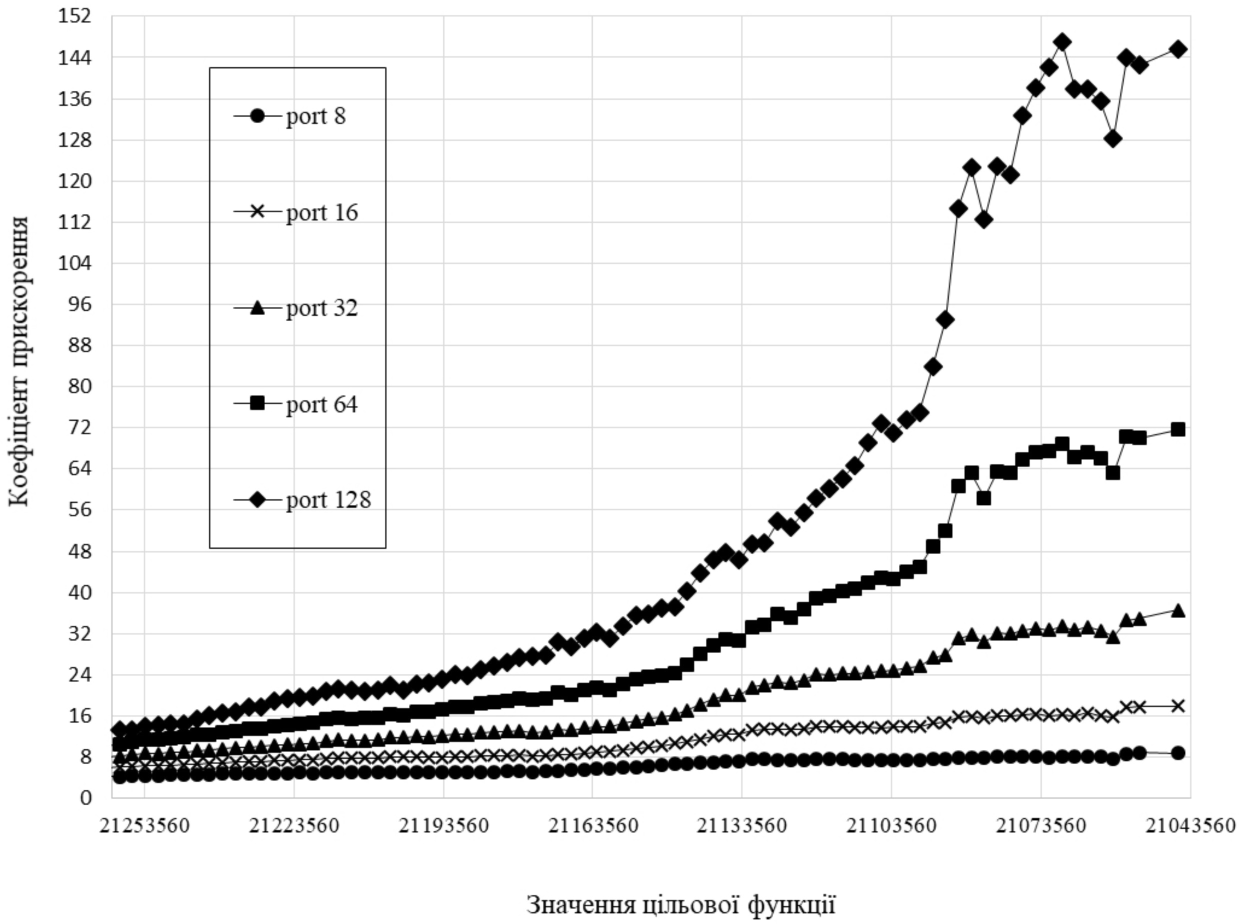

РИС. 2. Прискорення процесу розв'язання задачі tai100a портфелями алгоритмів RITSK

Так, для дуже складної задачі tai100a портфель із 32 алгоритмів RITSR у 36 рази швидше, ніж один алгоритм, знаходить розв'язок задачі з таким самим значенням цільової функції, а за допомогою портфеля із 128 алгоритмів знаходиться такий самий розв'язок у 146 разів швидше.

Портфель із 32 алгоритмів RITSK знаходить розв'язок задачі tai100a з таким самим значенням цільової функції у 34 рази швидше, ніж один алгоритм, а за допомогою портфеля із 128 алгоритмів знаходиться такий самий розв'язок у 138 разів швидше. Як видно з рис. 2, 3, максимальний коефіцієнт прискорення досягається для розв'язків високої якості.

Аналіз отриманих результатів експериментальних розрахунків свідчить про те, що коефіцієнти прискорення портфелів алгоритмів RITSR і RITSK наближаються до лінійного коефіцієнта прискорення.

Зазначимо, що на графіку рис. 2 помітні деякі коливання коефіцієнтів прискорення. Це, очевидно, залежить від часу (20 год.), виділеного на одну спробу розв'язання задачі, коли алгоритм має більше можливостей для знаходження кращих розв'язків. При цьому на їхній пошук витрачається більше часу і відповідно коефіцієнт прискорення зменшується.

За допомогою портфеля із 16 алгоритмів RITSR для складної задачі tai100a знайдено новий рекордний розв'язок π_{best} = (68 26 57 49 88 67 13 33 41 38 40 65 70 16 32 43 96 1 58 11

77 72 47 18 14 19 22 59 2 86 8 66 60 27 74 98 50 44 54 4 6 7 34 62 9 52 82 21 79 89 28 56 15 97 35 23 25 53 61 39 92 17 30 78 46 76 84 12 83 29 51 37 75 73 95 90 36 5 64 55 94 69 100 91 10 93 20 81 24 85 3 31 71 80 63 87 99 48 42 45) з відповідним рекордом f_{best} = 21040996. При цьому кожна із 425 спроб розв'язання задачі тривала 2 год.

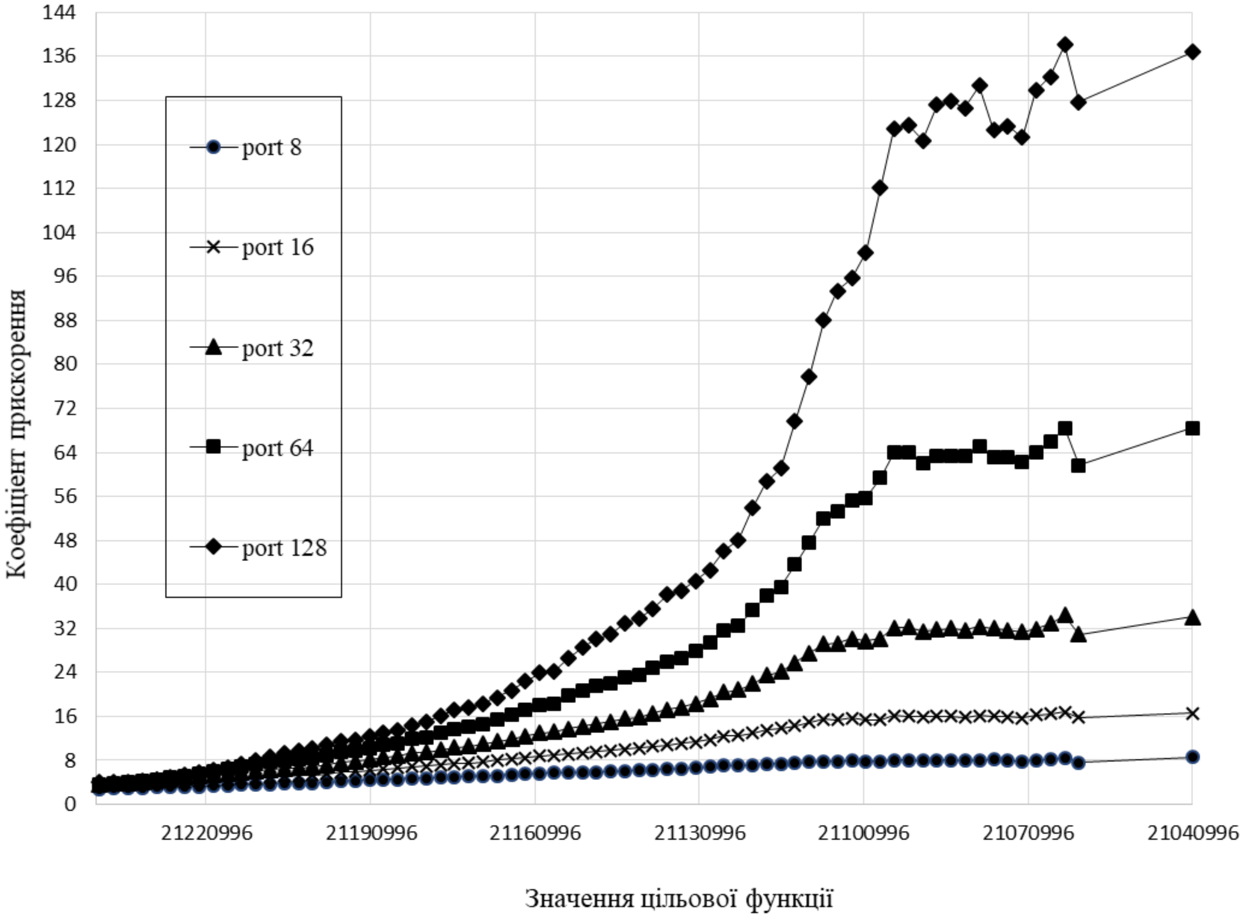

РИС. 3. Прискорення процесу розв'язання задачі tai100a портфелями алгоритмів RITSR

Висновки. З використанням портфелів модифікацій повторюваного ітерованого алгоритму табу досліджено паралельні алгоритми розв'язання квадратичної задачі про призначення. Вони дають змогу пришвидшити оптимізаційний процес (в залежності від розмірності задачі, кількості використаних процесорів) та розв'язувати за рахунок цього задачі великої розмірності. Так, для складної тестової задачі tai100a знайдено за допомогою портфеля із 16 алгоритмів новий рекорд.

Авторські внески.

Сергієнко І.В.: дослідження, концептуалізація, методологія, формальний аналіз, написання – оригінальна чернетка. Шило В.П.: дослідження, концептуалізація, методологія, формальний аналіз, ресурси, написання – оригінальна чернетка. Рощин В.О.: концептуалізація, методологія, формальний аналіз, ресурси, узагальнення, написання – рецензування та редагування. Шило П.В.: ресурси, формальний аналіз, узагальнення, програмне забезпечення, візуалізація. Боярчук Д.О.: програмне забезпечення, візуалізація. Мороз В.К.: програмне забезпечення, візуалізація.

Список літератури

1. Misevicius A. An implementation of the iterated tabu search algorithm for the quadratic assignment problem. *OR Spectrum*. 2012. Vol. **34**, N. 3. P. 665–690. https://doi.org/10.1007/s00291-011-0274-z
2. Benlic U., Hao J.K. Memetic search for the quadratic assignment problem. *Expert Systems with Applications*. 2015. Vol. **42**, N. 1. P. 584–595. https://doi.org/10.1016/j.eswa.2014.08.011
3. Shylo P.V. Solving the Quadratic Assignment Problem by the Repeated Iterated Tabu Search Method. *Cybern. Syst. Analysis*. 2017. Vol. **53**. P. 308–311. https://doi.org/10.1007/s10559-017-9930-x
4. Misevičius A. New best known solution for the most difficult QAP instance "tai100a". *Memetic Computing*. 2019. Vol. **11**, N. 3. P. 331–332. https://doi.org/10.1007/s12293-019-00289-y
5. Yangming Z., Hao J.K., Duval B. Frequent Pattern Based Search: A Case Study on the Quadratic Assignment Problem. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics: Systems*. 2020. Vol. **52**. P. 1503–1515. http://dx.doi.org/10.1109/TSMC.2020.3027860
6. Sergienko I.V., Shylo V.P., Chupov S.V., Shylo P.V. Solving the Quadratic Assignment Problem. *Cybern. Syst. Analysis*. 2020. Vol. **56**. P. 53–57. https://doi.org/10.1007/s10559-020-00219-8
7. Misevičius A., Verenė D. A hybrid genetic-hierarchical algorithm for the quadratic assignment problem. *Entropy*. 2021.Vol. **23**, N. 1. P 108. https://doi.org/10.3390/e23010108
8. Wang H., Alidaee B. A New Hybrid-heuristic for Large-scale Combinatorial Optimization: A Case of Quadratic Assignment Problem. *Computers & Industrial Engineering*. 2023. Vol. **179**. https://doi.org/10.1016/j.cie.2023.109220
9. Shylo V.P., Glover F., Sergienko I.V. Teams of global equilibrium search algorithms for solving the weighted maximum cut problem in parallel. *Cybern. Syst. Analysis*. 2015. Vol. **51**. P. 16–24. https://doi.org/10.1007/s10559-015-9692-2
10. Сергієнко І.В., Шило В.П., Рощин В.О. Дискретна оптимізація. Алгоритми та їхнє ефективне використання. Київ: Наукова думка, 2020. 144 с.
11. Sergienko I.V., Shylo V.P., Roshchyn V.O. Algorithm Unions for Solving Discrete Optimization Problems. *Cybern Syst. Analysis*. 2023. Vol. **59**. P. 753–762. https://doi.org/10.1007/s10559-023-00611-0
12. Sergienko I.V., Shylo V.P. Kernel technology to solve discrete optimization problems. *Cybern. Syst. Analysis*. 2017. Vol. **53**. P. 884–892. https://doi.org/10.1007/s10559-017-9990-y
13. Taillard E. Robust taboo search for the quadratic assignment problem. *Parallel Computing*. 1991. Vol. **17**, Iss. 4–5. P. 443–455. https://doi.org/10.1016/S0167-8191(05)80147-4
14. Головинський А.Л., Маленко А.Л., Сергієнко І.В., Тульчинський В.Г. Енергоефективний суперкомп'ютер СКІТ-4. *Вісник НАН України*. 2013. № 2. С. 50–59. https://doi.org/10.15407/visn2013.02.050
15. Шило. В.П., Чупов С.В. Паралельні наближені алгоритми розв'язання квадратичної задачі про призначення. *Міжнародний науковий симпозіум «Інтелектуальні рішення». Теорія прийняття рішень*: праця міжнар. школи-семінару (15–20 квітня 2019 р., Ужгород). Ужгород: Інвазор. 2019. С. 131,132.
16. Сергиенко И.В., Шило В.П. Задачи дискретной оптимизации: проблемы, методы решения, исследования. Киев: Наукова думка, 2003. 264 с.

Одержано 23.04.2024

Сергієнко Іван Васильович,
доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України,
директор Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ,
https://orcid.org/0000-0002-1118-7451

Шило Володимир Петрович,
доктор фізико-математичних наук, професор, провідний науковий співробітник
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ,
v.shylo@gmail.com

Рощин Валентина Олексіївна,
кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ,

Шило Петро Володимирович,
кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ,
petershylo@gmail.com

Боярчук Дмитро Олексійович,
науковий співробітник
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ,

Мороз Валерій Костянтинович,
головний інженер-програміст
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ.

УДК 519.854

І.В. Сергієнко, В.П. Шило, В.О. Рощин, П.В. Шило [*], Д.О. Боярчук, В.К. Мороз

Портфелі алгоритмів для розв’язання квадратичної задачі про призначення

Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ
Листування: petershylo@gmail.com

Вступ. Квадратична задача про призначення – класична, *NP*-важка задача комбінаторної оптимізації, яка має широкий спектр застосувань в економіці, археології, хімії тощо. Розробка та вдосконалення методів її розв’язання триває до цього часу, зокрема з реалізацією на багатопроцесорних обчислювальних комплексах. Проте без ефективних паралельних методів не можна використовувати ці обчислювальні ресурси. У зв’язку з цим важливу роль відіграють об’єднання (портфелі і команди) алгоритмів для розпаралелювання процесу розв’язання таких задач.

Мета роботи – для розв’язання квадратичної задачі про призначення застосувати портфелі модифікацій повторюваного ітерованого алгоритму табу. Дослідити ефективність розглянутих портфелів на основі експериментальних розрахунків.

Результати. Розглянуто застосування портфелів модифікацій повторюваного ітерованого алгоритму табу для розв’язання квадратичної задачі про призначення. Для найбільш важких щодо обсягу обчислень тестових задач додатково до відомих результатів авторів проведено на суперкомп’ютері СКІТ-4 експериментальні дослідження, які підтвердили конкурентоздатність цих алгоритмів. З використанням портфелів розглянутих алгоритмів досліджено також ефективність паралельних алгоритмів розв’язання квадратичної задачі про призначення. Вони дають змогу пришвидшити оптимізаційний процес (в залежності від розмірності задачі, кількості використаних процесорів) та розв’язувати за рахунок цього задачі великої розмірності.

Висновки. Проведені дослідження свідчать про те, що використання портфелів алгоритмів дає змогу пришвидшити процес розв’язання квадратичної задачі про призначення. З аналізу їхніх результатів випливає, що коефіцієнт прискорення портфеля алгоритмів наближається до лінійного коефіцієнта прискорення. Для складної тестової задачі tai100a знайдено за допомогою портфеля із 16 алгоритмів новий рекорд 21040996.

Ключові слова: квадратична задача про призначення, портфелі алгоритмів, експериментальні дослідження, ефективність портфелів алгоритмів.

UDC 519.854

Ivan Sergienko, Volodymyr Shylo, Valentyna Roshchyn, Petro Shylo [*], Dmytro Boyarchuk, Valerii Moroz

Algorithm Portfolios for Solving the Quadratic Assignment Problem

V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS of Ukraine, Kyiv
[*] *Correspondence:* petershylo@gmail.com

Introduction. The quadratic assignment problem is a well-established NP-hard problem in combinatorial optimization with applications in diverse fields like economics, archaeology, and chemistry. Due to its complexity, research on efficient solution methods remains active, including efforts for parallelization on multiprocessor computing systems. However, effective parallel algorithms are crucial to fully leverage these computational resources. In this context, algorithm unions (portfolios and teams) play a significant role in achieving parallel execution for solving such problems.

Research objectives. This work investigates the application of portfolios constructed from modifications of the repeated iterated tabu search algorithm to the quadratic assignment problem. The effectiveness of these portfolios was evaluated through experimental computations.

Results. The portfolios, derived from modifications of the repeated iterated tabu search algorithm, were applied to the quadratic assignment problem. For the most demanding test instances, the proposed algorithms were evaluated on the SCIT-4 supercomputer, alongside previously published results from the authors, confirming their competitive performance. Additionally, we assessed the parallel efficiency of these portfolios in solving instances of the quadratic assignment problem. The results demonstrate their ability to accelerate the optimization process (with speedup dependent on problem size and utilized processors), enabling the solution of large-scale problems.

Conclusions. The conducted studies demonstrate that employing algorithm portfolios significantly accelerates the solution process for the quadratic assignment problem. Analysis of the results reveals a near-linear speedup factor achieved by the portfolio. For the challenging test instance tai100a, a new best solution value of 21040996 was obtained using a portfolio of 16 algorithms.

Keywords: quadratic assignment problem, algorithm portfolios, experimental research, algorithm portfolios efficiency.