Ein Weltrekord als Geburtstagsgeschenk

von Volker Kaibel

Unter der Überschrift „Verdrahtet“ berichtete die Frankfurter Allgemeine Sonntagszeitung am 14. Oktober in ihrem Wissenschaftsteil, dass Kurt M. Anstreicher von der University of Iowa ein 40 Jahre altes „mathematisches Problem [...] mit einem Algorithmus, einem 800 Mhz-PC und 18 Tagen Rechenzeit“ gelöst habe. Was hat es damit auf sich?

Im Herbst 2000 hatte Martin Grötschel vom Konrad-Zuse-Informationszentrum Berlin (ZIB) eine Reihe von Mathematikern für Oktober 2001 zu einem Festkolloquium anlässlich des 60. Geburtstag von Manfred Padberg an das ZIB eingeladen. Unter den Eingeladenen befand sich auch Kurt M. Anstreicher, der in den vergangenen beiden Jahren gemeinsam mit seinem Doktoranden Nathan W. Brixius aufsehenerregende Erfolge bei der Lösung von quadratischen Zuordnungsproblemen (einem Klassiker der Kombinatorischen Optimierung) erzielt hatte. Für diesen Anlass nahm Anstreicher sich vor, eine 1961 von Leon Steinberg publizierte Instanz des Problems zu lösen, die das besondere Interesse Manfred Padbergs geweckt hatte [9]. Nach monatelanger Arbeit, in der sie verschiedene algorithmische Ansätze auf ihre Eignung für diese spezielle Probleminstanz testeten, schafften Anstreicher und Brixius es wenige Tage vor dem Festkolloquium tatsächlich, die Instanz optimal zu lösen. Ihre Arbeit hatte ihnen mit der Lösung der bislang größten (relevanten) Instanz dieses Optimierungsproblems nicht nur ein einzigartiges Geburtstagsgeschenk für Manfred Padberg, sondern auch interessante empirische Einsichten gebracht, über die im Folgenden berichtet werden soll.

Das Problem

Das *Quadratische Zuordnungsproblem* (*Quadratic Assignment Problem*, *QAP*) ist eines der bekanntesten kombinatorischen Optimierungsprobleme (einen Überblick gibt z. B. [3]). Die Aufgabe ist, eine gegebene quadratische Zielfunktion $\sum_{i,j,k,l} d_{(i,j),(k,l)} x_{ij} x_{kl}$ über der Menge Π_n der Permutationsmatrizen

$$\{X = (x_{ij}) \in \{0,1\}^{[n]\times[n]} \mid X\mathbf{e} = \mathbf{e},\, \mathbf{e}^T X = \mathbf{e}^T\}$$

(mit $\mathbf{e} := (1,\dots,1)^T \in \mathbb{R}^n$, $[n] := \{1,\dots,n\}$) zu minimieren. Während das Problem, eine lineare Zielfunktion über Π_n zu minimieren (das *lineare Zuordnungsproblem*), seit den 50er Jahren als effizient lösbar bekannt ist [7], gehört das QAP zu den $\mathcal{NP}$-schweren Optimierungsproblemen (ein effizienter Algorithmus für *alle* Instanzen des QAP würde folglich das Problem "$\mathcal{P} = \mathcal{NP}$?" aus der Liste der Milleniums-Probleme der Clay Foundation positiv lösen).

Im Jahr 1961 beschrieb Leon Steinberg [10] das Problem, auf der in Abbildung 1 dargestellten Platine mit 36 potentiellen Einbaupunkten 34 elektronische Bauteile, die paarweise mit einer gegebenen Anzahl von Drähten zu verbinden sind, so unterzubringen, dass die Gesamtlänge benötigten Drahts minimiert wird. Die Drähte sollen sämtlich achsenparallel verlaufen, so dass die Länge eines Drahtes, der ein Bauteil im Einbaupunkt P_j mit einem Bauteil im Einbaupunkt P_l verbindet, der l_1-Abstand b_{jl} zwischen P_j und P_l ist. Ist a_{ik} die Anzahl der Drähte, die zwischen den Bauteilen T_i und T_k gezogen werden sollen, und führt man zwei zusätzliche isolierte Bauteile ein, so lässt sich das Steinberg-Problem (mit verdoppelter Zielfunktion) als ein QAP beschreiben, bei dem die quadratische Zielfunktion durch Koeffizienten $d_{(i,j),(k,l)} := a_{ik} b_{jl}$ gegeben sind.

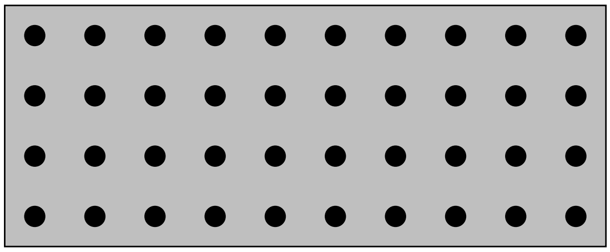

Abbildung 1. Schematische Darstellung der Platine.

Branch & Bound

Wie bei vielen anderen $\mathcal{NP}$-schweren Optimierungsproblemen auch, ist der beste bekannte Ansatz zum Finden optimaler Lösungen für das QAP ein enumerativer, wobei man hofft, für eine gegebene Instanz (wie das Steinberg-Problem) große Teile des Suchraums während des Ablaufs des Algorithmus vor der Betrachtung ausschließen zu können. Der grundlegende Schritt ist dabei der folgende. Gegeben eine QAP-Instanz der Größe n, wählt man einen Zeilenindex $i \in [n]$ aus, und betrachtet dann für jedes $j = 1,\dots,n$ das Teilproblem, in dem nur die $X \in \Pi_n$ mit $x_{ij} = 1$ als Lösungen zugelassen sind. Damit hat man die Lösung eines QAPs der Größe n auf die Lösung von n QAPs der Größe $n-1$ zurückgeführt (*Branch*).

Der entscheidende Schritt, welcher nun im Einzelfall die inpraktikable Enumeration aller $n!$ Lösungen verhindern soll, ist die Berechnung einer unteren Schranke für den Optimalwert jedes der n konstruierten Teilprobleme (*Bound*). Sollte diese untere Schranke für ein Teilproblem wenigstens so groß sein wie der Wert einer schon bekannten Lösung des Gesamtproblems, so können alle Lösungen dieses Teilproblems (ohne explizite Betrachtung) verworfen werden. Wichtig ist es also zum einen, zu Anfang des Algorithmus möglichst gute Lösungen zu generieren (wofür im Fall des QAP eine Vielzahl von Heuristiken zur Verfügung stehen), welche dann im Laufe des enumerativen Algorithmus verbessert werden. Zum anderen ist es von großer Bedeutung, gute Prozeduren zur Berechnung von unteren Schranken für die Optimalwerte zu haben.

Untere Schranken

Die am häufigsten verwendete Schranke für das QAP ist beinahe 40 Jahre alt und stammt von Gilmore [4] und Lawler [8]. Für jedes Paar $i,j \in [n]$ berechnet man zunächst

$$l_{ij} := \min\left\{ \sum_{k:k\neq i} \sum_{l:l\neq j} d_{(i,j),(k,l)} x_{kl} \;\middle|\; X \in \Pi_n \right\} \;.$$

Man löst also n^2 lineare Zuordnungsprobleme der Größe $n-1$. Für Instanzen vom Koopmans-Beckmann Typ (d. h. die Zielfunktionskoeffizienten haben eine Produktstruktur $d_{(i,j),(k,l)} = a_{ik}b_{jl}$ wie beim Steinberg-Problem) gilt

$$l_{ij} = \langle a_{i\bullet}, b_{j\bullet}\rangle_- \;,$$

wobei $a_{i\bullet}$ und $b_{j\bullet}$ die i-te und j-te Zeile der Matrizen $A := (a_{ik})$ bzw. $B := (b_{jl})$ sind, und $\langle v,w\rangle_-$ das Standard-Skalarprodukt der Vektoren ist, die aus v durch aufsteigendes und aus w durch absteigendes Sortieren der Komponenten hervorgehen. Sämtliche l_{ij} $(i,j = 1,\ldots,n)$ kann man also in diesem Fall in $\text{const}\cdot n^3$ Schritten berechnen. Da

$$\min\left\{ \sum_{i,j,k,l} d_{(i,j),(k,l)} x_{ij} x_{kl} \;\middle|\; X \in \Pi_n \right\} \geq \min\left\{ \sum_{i,j} l_{ij} x_{ij} \;\middle|\; X \in \Pi_n \right\}$$

gilt, erhält man durch Lösung eines weiteren linearen Zuordnungsproblems (was ebenfalls in $\text{const}\cdot n^3$ Schritten möglich ist) eine untere Schranke für das quadratische Zuordnungsproblem, die *Gilmore-Lawler Schranke.*

Diese Schranke ist sehr effizient zu berechnen, allerdings ist sie oft recht schwach. In der Folgezeit wurde daher eine Vielzahl an anderen Prozeduren zur Schrankenberechnung für das QAP entwickelt, wobei viele auf Linearisierungen des Problems basieren und als Verallgemeinerungen der Gilmore-Lawler Schranke angesehen werden können.

Für QAPs vom Koopmans-Beckmann Typ, bei denen die Matrizen A und B symmetrisch sind (wie beim Steinberg-Problem), gibt es zusätzlich einen ganz anderen Ansatz zur Berechnung von unteren Schranken. In diesem Fall lässt sich sich das QAP sehr kompakt umschreiben als

$$\min\{\text{Spur}\left(AXBX^T\right) \mid X \in \Pi_n\} \;.$$

Da alle Permutationsmatrizen orthogonal sind, ist also

$$\min\{\text{Spur}\left(AXBX^T\right) \mid X \in \mathcal{O}_n\}$$

(mit $\mathcal{O}_n := \{X \in \mathbb{R}^{[n]\times[n]} \mid XX^T = \mathbf{I}_n\}$) eine untere Schranke. Sind $\lambda(A) \in \mathbb{R}^n$ und $\lambda(B) \in \mathbb{R}^n$ Vektoren, die aus den (sämtlich reellen) Eigenwerten der Matrizen A bzw. B (mit Vielfachheiten) gebildet sind, so ist die Eigenwertschranke gleich $\langle\lambda(A),\lambda(B)\rangle_-$, und somit effizient zu berechnen.

Diese Schranke ist allerdings noch recht schwach. Hadley, Rendl und Wolkowicz [6] zeigten jedoch, wie man sogar die *projizierte Eigenwertschranke*

$$\min\left\{\text{Spur}\left(AXBX^T\right) \middle| X \in \mathcal{O}_n, X\mathbf{e} = \mathbf{e}, \mathbf{e}^T X = \mathbf{e}^T\right\}$$

in ähnlicher Weise über die Bestimmung von Eigenwerten berechnen kann. Diese Schranke erwies sich als deutlich besser.

Eine weitere Verschärfung der projizierten Eigenwertschranke gelang Anstreicher und Brixius vor etwa zwei Jahren [1] mit ihrer *quadratischen Programmierungsschranke*, von der sie nachwiesen, dass sie nie schwächer ist als die projizierte Eigenwertschranke. Der wesentliche Schritt in der Berechnung ihrer Schranke ist das Lösen eines (kontinuierlichen) konvexen quadratischen Optimierungsproblems in n^2 Variablen.

Anstreicher und Brixius verwendeten ihre neue Schranke in einem Branch & Bound Algorithmus, mit dem es ihnen im Jahr 2000 u. a. gelang, die damals größte (und prominenteste) Instanz `nug30` aus der QAPLIB [2] (der Standardbibliothek von Testinstanzen für das QAP) optimal zu lösen.

Die Lösung der Steinberg-Instanz

Natürlich versuchten sie zunächst, das Steinberg-Problem (`ste36a` in der QAPLIB) mit dem bei `nug30` erfolgreichen Algorithmus zu lösen. Das erwies sich allerdings schon nach kurzer Zeit als aussichtslos. Die quadratische Programmierungsschranke für die gesamte Instanz ergab -10294, was angesichts der offensichtlichen unteren Schranke 0 ein deutliches Zeichen ist, dass diese Art der Schrankenberechnung hier wenig verspricht.

Die Gilmore-Lawler Schranke hingegen ergab einen Wert von 7124, so dass sich die beiden Autoren entschieden, einen Branch & Bound Algorithmus auf Basis dieser altbekannten Schranke zu implementieren, mit dem sie schließlich das Steinberg-Problem optimal lösen konnten (Abb. 2). Der Optimalwert beträgt 9526 (heuristisch gefundene Lösungen von diesem Wert waren bereits vorher bekannt). Der Branch & Bound Algorithmus betrachtete insgesamt 775 000 000 Teilprobleme. Die Rechenzeit (auf einem 800 Mhz PC) betrug 186 Stunden (in einem zweiten Lauf, den Anstreicher und Brixius kurz nach der FASZ-Meldung mit einem verbesserten Algorithmus durchführten).

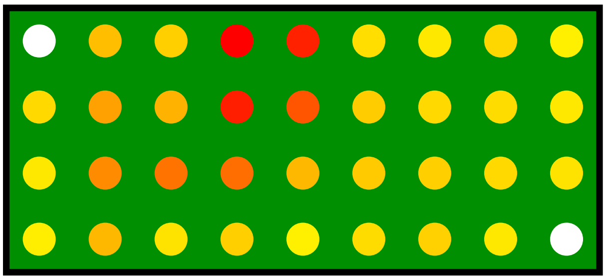

Abbildung 2. Einfärbung der Bauteile in der von Anstreicher und Brixius gefundenen Optimallösung gemäß ihres Verdrahtungsgrades (zwischen 33 (hellgrau) und 549 (dunkelgrau)).

Der vielleicht interessanteste Aspekt an dieser Studie ist, dass es schwierig zu sein scheint, Instanzen wie **nug30** mit dem Gilmore-Lawler basierten Algorithmus zu lösen, während umgekehrt das Gleiche für das Steinberg-Problem und die quadratische Programmierungsschranke zu gelten scheint. Aus ihrer reichen praktischen Erfahrung ziehen Anstreicher und Brixius den Schluss, dass für Instanzen, bei denen die Matrix A relativ dünn besetzt ist und ihre Einträge einen recht hohen *Variationskoeffizienten* (der Quotient aus Standardabweichung und Durchschnitt) besitzen, die quadratische Programmierungsschranke ungeeignet ist.

Interessant sind allerdings auch einige algorithmische Feinheiten, mit denen Anstreicher und Brixius es erst schafften, schließlich ein Programm zu erstellen, welches das Steinberg-Problem in der bis zum Geburtstagskolloquium noch verbleibenden Zeit löste. Diese und mehr Details findet man in ihrem Aufsatz in der Festschrift [5] zu Manfred Padbergs 60. Geburtstag.

Adresse des Autors
Dr. Volker Kaibel
Institut für Mathematik, MA 6–2
Technische Universität Berlin
10623 Berlin
`kaibel@math.tu-berlin.de`

Literatur

[1] Kurt M. Anstreicher and Nathan W. Brixius. A new bound for the quadratic assignment problem based on convex quadratic programming. *Math. Program.*, 89(3):341–357, 2001.

[2] Rainer E. Burkard, Eranda S. Çela, Stefan E. Karisch, and Franz Rendl. QAPLIB – A Quadratic Assignment Problem Library. `http://www.opt.math.tu-graz.ac.at/qaplib/`.

[3] Rainer E. Burkard, Eranda S. Çela, Panos M. Pardalos, and Leonidas S. Pitsoulis. The quadratic assignment problem. In D.-Z. Du and Panos M. Pardalos, editors, *Handbook of Combinatorial Oprimization*, volume 3, pages 241–337. Kluwer Academic Publishers, 1998.

[4] Paul C. Gilmore. Optimal and suboptimal algorithms for the quadratic assignment problem. *J. Soc. Ind. Appl. Math.*, 10:305–313, 1962.

[5] Martin Grötschel, editor. *The Sharpest Cut. Festschrift on the occasion of a workshop in honor of Manfred Padberg's 60th birthday.* MPS/SIAM book series on optimization. SIAM, 2002, to appear.

[6] S.W. Hadley, Franz Rendl, and Henry Wolkowicz. A new lower bound via projection for the quadratic assignment problem. *Math. Oper. Res.*, 17(3):727–739, 1992.

[7] Harold W. Kuhn. The hungarian method for the assignment problem. *Nav. Res. Logist.*, 2:83–97, 1955.

[8] Eugen L. Lawler. The quadratic assignment problem. *Manage. Sci.*, 9:586–599, 1963.

[9] Manfred Padberg and Minendra P. Rijal. *Location, Scheduling, Design and Integer Programming.* Kluwer Academic Publishers, 1996.

[10] Leon Steinberg. The backboard wiring problem: A placement algorithm. *SIAM Review*, 3:37–50, 1961.